Recherche Coopérative sur Programme n° 25

Charles-Edouard Pfister

Problèmes de surface en mécanique statistique

Les rencontres physiciens-mathématiciens de Strasbourg - RCP25, 1983, tome 31
« Conférences de : B. Malgrange, B. Souillard, M. Duneau, C.-E. Pfister », , exp. n° 4, p. 68-94

<http://www.numdam.org/item?id=RCP25_1983__31__68_0>

© Université Louis Pasteur (Strasbourg), 1983, tous droits réservés.

L'accès aux archives de la série « Recherche Coopérative sur Programme n° 25 » implique l'accord avec les conditions générales d'utilisation (http://www.numdam.org/conditions). Toute utilisation commerciale ou impression systématique est constitutive d'une infraction pénale. Toute copie ou impression de ce fichier doit contenir la présente mention de copyright.

Numdam
Article numérisé dans le cadre du programme
Numérisation de documents anciens mathématiques
http://www.numdam.org/

PROBLEMES DE SURFACE EN MECANIQUE STATISTIQUE *

par

Charles-Edouard Pfister
Département de Mathématiques
Ecole Polytechnique Fédérale
CH-1015 Lausanne-Suisse

---

1. Introduction

Le thème de cet exposé est le suivant :

Quelle est la nature de l'interface séparant deux phases d'un système physique ?

Ce problème est manifestement intéressant du point de vue de la physique ou de la chimie physique.

Il est aussi intéressant du point de vue de la physique mathématique. C'est ce dernier aspect qui est envisagé ici. Les points principaux, qui seront développés par la suite, sont : structure microscopique de l'interface dans le

* Exposé présenté à la 35e rencontre entre physiciens, théoriciens et mathématiciens. Strasbourg novembre 1982.

modèle d'Ising, propriétés statistiques d'un modèle mathématique de l'interface, qui est aussi utilisé pour décrire la croissance des cristaux, et le problème de l'existence d'états d'équilibre non invariants par translation, question qui est naturellement liée à la coexistence de deux phases.

Pour motiver quelques questions abordées ensuite du point de vue de la physique mathématique, il est peut être utile de consider brièvement le cas de l'interface entre la phase liquide et la phase gazeuse d'un fluide simple (p.ex. Argon). Van der Waals[1] a proposé une théorie de l'interface pour de tels systèmes. Cette théorie a eu et a toujours beaucoup de succès. Fisk et Widow [2] l'ont modifiée afin de tenir compte des lois d'échelles. Cependant cette théorie pose certains problèmes conceptuels, qui n'ont pas encore été résolus de façon entièrement satisfaisante.

Dans une telle situation les résultats rigoureux, obtenus pour des modèles très simplifiés de la réalité, peuvent être les bienvenus.

Pour décrire l'interface van der Waals utilise un profil de densité $g(z)$ (z étant la direction verticale). L'énergie libre associée à l'inhomogénéité décrite par $g(z)$ est une fonctionnelle $\tau(g)$ du profil. Le profil d'équilibre est donné par le profil g minimisant la fonctionnelle $\tau(g)$, sous les conditions

$$\lim_{z\to+\infty} g(z) = g_{gaz}$$

$$\lim_{z\to-\infty} g(z) = g_{liquide}$$

La valeur de τ pour ce profil donne la tension superficielle associée à l'interface. Van der Waals a proposé une forme simple pour la fonctionnelle $\tau(g)$. On trouve alors un profil d'équilibre tel que la transition entre les valeurs $g_{liquide}$ et g_{gaz} a lieu sur un intervalle de longueur approximativement égale à la longueur de corrélation des phases pures. Ces résultats sont indépendants de la taille du récipient dans lequel se trouve le fluide et restent vrais lorsque l'intensité du champ de gravitation, qui agit essentiellement pour séparer les phases, tend vers zéro. Par conséquent on pourra définir de façon intrinsèque l'épaisseur de l'interface qui est de l'ordre de la

longueur de corrélation. Remarquons encore que si l'interface a une épaisseur finie, la tension superficielle sera non-nulle. (Cette remarque sera utilisée dans la section 4 pour expliquer l'absence d'interface dans le modèle de Villain).

Buff, Lovett et Stillinger [3] ont proposé une autre approche. Ils décrivent l'interface comme une membrane. De ce fait, il perdent la possibilité de décrire la structure moléculaire de l'interface. Par contre, dans ce modèle, on peut décrire les fluctuations de grandes longueurs d'onde de l'interface. Soit W^2 l'écart quadratique moyen de l'amplitude du déplacement vertical de l'interface, pour un système confiné dans un volume de dimension linéaire L. Le modèle prédit

$$\begin{aligned} W^2 &\sim \frac{kT}{\tau} L^{3-d} && \text{si} \quad 1<d<3 \\ &\sim \frac{kT}{\tau} \log L && \text{si} \quad d = 3 \qquad (1.1) \\ &\text{indépendant de } L && \text{si} \quad d > 3 \end{aligned}$$

Ces résultats sont valables en l'absence d'un champ extérieur tel que le champ de gravitation. Si maintenant on considère la limite thermodynamique $L \to \infty$ le modèle indique que le profil d'équilibre $g(z)$ devient constant à cause des fluctuations de l'interface, contrairement à ce qui est prédit par la théorie de

van der Waals. Il est généralement admis que l'interface a une épaisseur finie dont la structure moléculaire est décrite de façon qualitativement correcte par la théorie de van der Waals, mais que celle-ci ne tient pas compte des grandes fluctuations de l'interface, qui sont qualitativement décrites par la théorie de Buff, Lovett et Stillinger. Cependant on ne sait pas, à partir des principes fondamentaux de la mécanique statistique, expliquer de façon précise pourquoi la théorie de van der Waals donne un profil "local" et non "global".

Pour étudier de telles questions on peut aussi considérer des modèles extrêmement simplifiés de la réalité physique et essayer d'obtenir des résultats rigoureux pour ces modèles. Cette méthode a connu de très grands succès. Le modèle le plus célèbre à cet égard en mécanique statistique est le modèle d'Ising qui peut être interprété comme un modèle d'un fluide, mais également comme un modèle de ferro-aimant. C'est cette interprétation qui sera utilisée. Sous cette forme, il est bien connu que ce modèle a deux phases à basse température et en l'absence d'un champ magnétique extérieur.

Dans la section suivante, j'expose les résultats rigoureux principaux obtenus sur l'interface de ce modèle. Dans la section 4 j'indique le rôle de la symétrie interne du système en considérant par contraste le modèle de Villain, où cette fois la symétrie interne est décrite par un groupe continu.

La bibliographie mentionnée ici est relativement sommaire. On peut trouver d'autres renseignements à ce sujet, ainsi que sur les résultats de la section 3 dans [14]. Voir aussi [15].

2. Le modèle d'Ising

Le modèle est défini sur le réseau Z^d. Les spins sont décrits par des variables aléatoires $\sigma(x)$, $x \in Z^d$, prenant les valeurs ± 1. Les configurations du système infini sont donc des fonctions $\underline{\sigma} : Z^d \to \{-1, +1\}$. La restriction de $\underline{\sigma}$ à un sous-ensemble Λ de Z^d est notée $\underline{\sigma}_\Lambda$. Dans la suite $\Lambda^c = Z^d \setminus \Lambda$.
Supposons que Λ est un sous-ensemble fini. L'énergie de la configuration $\underline{\sigma}_\Lambda$ dans Λ, si la configuration à l'extérieur de Λ est $\underline{\sigma}_{\Lambda^c}$, est donnée par l'expression

$$H(\underline{\sigma}_\Lambda \mid \underline{\sigma}_{\Lambda^c}) = -\sum_{\langle xy\rangle \cap \Lambda \neq \emptyset} \sigma(x)\, \sigma(y) \qquad (2.1)$$

où $\langle xy\rangle$ est une paire de points de Z^d tels que $\|x - y\| = 1$. On note Ω l'ensemble des configurations du système infini.

On peut alors introduire l'état de Gibbs correspondant à (2.1) qui est la mesure suivante sur $\Omega(\Lambda) = \{\underline{\sigma}'_\Lambda : \Lambda \to \{-1,+1\}\}$:

$$\mu_\Lambda^{\underline{\sigma}_{\Lambda^c}}(\underline{\sigma}'_\Lambda) = \frac{\exp\left(-\beta\, H(\underline{\sigma}'_\Lambda \mid \underline{\sigma}_{\Lambda^c})\right)}{\sum_{\underline{\sigma}'_\Lambda} \exp\left(-\beta\, H(\underline{\sigma}'_\Lambda \mid \underline{\sigma}_{\Lambda^c})\right)}$$

Cette mesure dépend de la configuration $\underline{\sigma}_{\Lambda^c}$ choisie à l'extérieur de Λ . Une telle mesure peut être considérée de façon naturelle comme une mesure sur Ω en posant pour l'espérance d'une observable f

$$< f >_{\Lambda}^{\underline{\sigma}_{\Lambda^c}} = \sum_{\underline{\sigma}'_{\Lambda}} \mu_{\Lambda}^{\underline{\sigma}_{\Lambda^c}}(\underline{\sigma}'_{\Lambda})\, f\,(\underline{\sigma}'_{\Lambda}, \underline{\sigma}_{\Lambda^c}) \qquad (2.3)$$

Tous les états d'équilibre à la limite thermodynamique peuvent être obtenus à partir des mesures de probabilités qui sont définies comme limites faibles de mesures du type (2.3) lorsque $\Lambda \uparrow Z^d$. Rappelons que l'ensemble de ces états d'équilibre est un ensemble convexe (même un simplexe de Choquet) et que les éléments extrémaux de cet ensemble, qui sont invariants par translation, décrivent les phases pures du système physique.

Considérons d'abord le système dans une boîte

$$\Lambda(L, T) = \{x \in Z^d : |x^i| \leq L,\ |x^1| \leq T,\ i \geq 2\}$$

et choisissons la condition au bord + qui est donnée par

$$\underline{\sigma}_{\Lambda^c}(x) = +1 \ , \ \forall\ x \in \Lambda^c$$

L'état de Gibbs correspondant est noté $< \cdot >^{+}_{L,T}$ (cf (2.3)).
On peut montrer les résultats suivants $(d \geqslant 2)$:

$$\lim_{L,\, T\to\infty} < \cdot >^{+}_{L,T} = < \cdot >^{+} \text{ existe}$$

$< \cdot >^{+}$ est un état de Gibbs extrémal

$< \cdot >^{+}$ est invariant par translation

Si $< \sigma(x) >^{+} = 0$ alors il y a unicité de l'état d'équilibre et vice-versa.

On peut donc mettre en évidence la transition de phase du modèle à l'aide du paramètre d'ordre $\sigma(x)$.
Si $\beta > \beta_c$, on a

$$m^{*}(\beta) \equiv < \sigma(x) >^{+} > 0$$

et il existe deux états extrémaux invariants par translation : $< \cdot >^{+}$ et $< \cdot >^{-}$, obtenu par la transformation $\underline{\sigma} \to \underline{S\sigma}$: $(\underline{S\sigma})(x) = -\underline{\sigma}(x)$. Il est instructif de rappeler l'argument de Peierls montrant l'existence de l'aimantation spontanée m^{*}. Chaque configuration dans la boîte $\Lambda(L, T)$ peut être décrite

géométriquement de la façon suivante : on spécifie toutes les paires $\langle x \; y \rangle$ telles que $\sigma(x)\,\sigma(y) = -1$; en d'autres termes on spécifie tous les liens qui sont <u>frustrés</u>. Comme on a la condition au bord $+$, cela détermine uniquement la configuration. A chaque lien frustré on associe sa <u>cellule duale</u> : le réseau dual est

$$(Z^d)^* = \{x : x^i + \tfrac{1}{2} \in Z,\ i = 1, \ldots, d\}$$

Chaque lien $\langle xy \rangle$ de Z^d traverse exactement une cellule unité de dimension $d-1$ de $(Z^d)^*$. C'est la cellule duale du lien. L'ensemble de ces cellules est décomposée en composantes connexes appelées habituellement <u>contours de Peierls</u>. Il n'est pas difficile de voir que chacune de ces composantes connexes est une surface fermée. De plus l'énergie de la configuration est égale (à une constante près) à deux fois l'aire totale de ces surfaces fermées. Ces surfaces fermées décrivent les <u>défauts</u> du système. La probabilité d'avoir une surface fermée γ est inférieure à

$$\exp\,(-\,\beta 2|\gamma|)$$

Si $\sigma(0) = -1$, il y a nécessairement une surface fermée γ contenant 0. Par conséquent

$$\langle\sigma(o)\rangle^{+}_{L,T} = 1 - 2 \text{ Prob } \{ \sigma (o) = - 1\}$$

$$\geqslant 1 - 2 \text{ Prob } \{ \exists \gamma \ni o\}$$

Mais $\# \{\gamma \ni o, |\gamma| = n\} \leqslant C^n$

Par conséquent

$$\text{Prob } \{\exists \gamma \ni o\} \leqslant$$

$$\sum_{n \geqslant 2d} c^n e^{-2\beta n} \to 0, \quad \text{si } \beta \to \infty$$

Ceci implique l'existence de l'aimantation spontanée.

Pour étudier l'interface entre les deux phases du modèle il faut construire un état décrivant la coexistence des deux phases. Ceci est obtenu en modifiant la condition au bord de la façon suivante : si $x \notin \Lambda$ alors

$$\sigma(x) = + 1 \quad \text{si} \quad x^1 \geqslant 0$$

$$\sigma(x) = - 1 \quad \text{si} \quad x^1 < 0$$

Cela définit la condition au bord $\pm$.

De plus on prend la limite $T \to \infty$

De ce fait on obtient un état $\langle \cdot \rangle_L^{\pm}$ du système dans le cylindre infini

$$\Lambda(L) = \{ x : |x^i| \leq L, \quad i \geq 2 \}$$

Cet état décrit en effet la coexistence des deux phases :

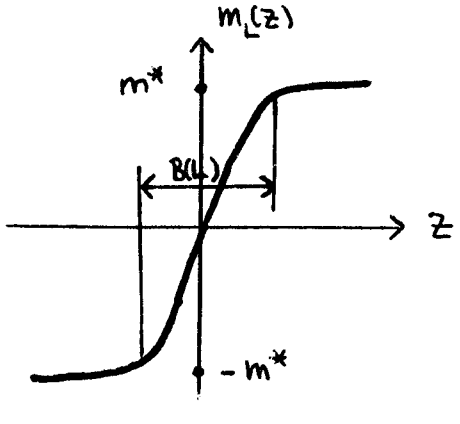
Soit $m_L(z) = \langle \sigma(z, 0, \dots 0) \rangle_L^{\pm}$

On peut montrer que $m_L(z)$ est une fonction monotone croissante telle que

$$\lim_{z \to \infty} m_L(z) \geq m^*(\beta) \tag{2.4}$$

$$\lim_{z \to -\infty} m_L(z) \leq -m^*(\beta) \tag{2.5}$$

Les inégalités dans (2.4) et (2.5) proviennent du fait que le cylindre a une section finie et par conséquent l'effet de la condition au bord est plus marqué. Le profil de l'aimantation est qualitativement comme ci-dessous



Le profil a une <u>largeur finie</u> $B(L)$ (van Beijeren [4]). Il n'est cependant pas correct d'interpréter $B(L)$ comme l'épaisseur intrinsèque de l'interface, puisque $B(L)$ dépend de L.

Une des caractéristiques du profil est que l'on atteint la valeur $\lim_{z\to\infty} m_L(z)$ à une vitesse exponentielle.

Du point de vue microscopique, la condition au bord $\pm$ a l'effet suivant : elle force le système à produire un défaut traversant transversalement le cylindre $\Lambda(L)$. En particulier si $\beta = \infty$ l'état fondamental est la configuration qui a comme unique défaut le contour de Peierls situé dans le plan $x^1 = -\frac{1}{2}$. Si β est grand, mais non infini, ce défaut est déformé et il apparait au-dessus, ou au-dessous, d'autres défauts qui sont tous décrits par des surfaces fermées, comme dans les phases pures.

L'énergie libre due à la présence de l'interface est la tension superficielle et peut être définie par

$$\tau_L = -\frac{1}{\beta}\ \frac{1}{(2L)^{d-1}}\ \lim_{T\to\infty}\ \log\ \frac{Z^{\pm}_{L,T}}{Z^{+}_{L,T}} \qquad (2.6)$$

où $Z^{+}_{L,T}$, resp. $Z^{+}_{L,T}$ sont les fonctions de partition pour les conditions au bord $+$, resp. $\pm$ (constante de normalisation dans (2.2)).

Que se passe-t-il lorsque $L \to \infty$?
La réponse va dépendre de façon essentielle de la dimension d du réseau.

<u>$d = 2$</u> (Gallavotti [5]) : Lorsque $L \to \infty$, $B(L) \to \infty$ et par conséquent on obtient pour tout z

$$\lim_{L\to\infty} m_L(z) = 0 \tag{2.7}$$

L'état est invariant par translation et

$$\lim_{L\to\infty} \langle\cdot\rangle^{+}_{L} = \tfrac{1}{2} \langle\cdot\rangle^{+} + \tfrac{1}{2} \langle\cdot\rangle^{-} \tag{2.8}$$

Nous pouvons exprimer (2.7) ainsi

$$\lim_{z\to\infty} \lim_{L\to\infty} m_L(z) \neq \lim_{L\to\infty} \lim_{z\to\infty} m_L(z)$$

Cependant la tension superficielle est non nulle tant que $\beta > \beta_c$:

$$\beta \lim_{L\to\infty} \tau_L(\beta) = 2(\beta - \beta^{*})$$

où β^{*} est donnée par

$$\exp(-2\beta^{*}) = \tanh(\beta)$$

Ce résultat fameux est dû à Onsager. Ceci indique que l'interface a une épaisseur intrinsèque finie jusqu'à β_c.

<u>d = 3</u> (Dobrushin [6]) :

Si $\beta >> 1$ alors $\lim_{L\to\infty} B(L) = B < \infty$. Si l'on définit $m(z) = \lim_{L\to\infty} m_{\bar{L}}(z)$, alors $m(z)$ tend vers m^* à une vitesse exponentielle lorsque z tend vers l'infini. L'interface est rigide et l'on peut interpréter B comme l'épaisseur intrinsèque de cette interface. De plus

$$\lim_{z\to\infty} \lim_{L\to\infty} m_L(z) = \lim_{L\to\infty} \lim_{z\to\infty} m_L(z)$$

et l'on a

$$|\langle\sigma(x)\ \sigma(y)\rangle^{\pm} - \langle\sigma(x)\rangle^{\pm} \langle\sigma(y)\rangle^{\pm}| \leq C\exp(-\alpha\ \|x-y\|)$$

En conclusion, $\langle\cdot\rangle^{\pm}$ est un état non invariant par translation. On peut montrer que c'est un état extrémal. La meilleure borne inférieure connue des β, pour lesquels $\langle\cdot\rangle^{\pm}$ est non-invariant par translation, est $\beta_c(2)$, l'inverse de la température critique du modèle à deux dimensions (van Beijeren [4]). Pour un $\beta < \beta_R$, où β_R est un peu inférieur à $\beta_c(2)$, on s'attend à ce que l'état $\langle\cdot\rangle^{\pm}$ devienne invariant par translation, i.e

$$\langle\cdot\rangle^{\pm} = \tfrac{1}{2}\langle\cdot\rangle^{+} + \tfrac{1}{2}\langle\cdot\rangle^{-}$$

comme dans le modèle d'Ising à deux dimensions. C'est ce que l'on appelle la <u>transition rugueuse</u>. Cependant on sait que la tension superficielle reste non nulle jusqu'à la température critique : en effet on a les bornes supérieure et inférieure suivantes :(Bricmont, Lebowitz, Pfister [7], [8])

$$\tau(\beta) \leq 2(m^*(\beta))^2$$

et

$$\tau(\beta) \geq \frac{2}{\beta}\int_0^\beta (m^*(\beta'))^2 d\beta'$$

Ces résultats indiquent que l'épaisseur intrinsèque de l'interface reste finie, même pour $\beta < \beta_R$.

Pour mieux comprendre ce qui se passe lorsque l'on prend la limite L tendant vers l'infini on peut introduire un <u>modèle</u> simplifié de l'interface. C'est le modèle SOS utilisé aussi pour décrire la croissance des cristaux. On obtient ce modèle ainsi dans le cas $d = 3$: on va négliger tous les défauts qui sont décrits par des contours fermés, et remplacer la valeur des spins, au-dessus du défaut imposé par la

condition au bord, par la valeur de l'aimantation $m^*(\beta)$. Pour les spins situés au-dessous de ce défaut on remplace leurs valeurs par $-m^*(\beta)$. De plus on va considérer seulement les configurations pour lesquelles le défaut, imposé par la condition au bord, peut être décrit comme le graphe d'une fonction. Soit λ un tel défaut. Si ce défaut contient la cellule du réseau dual centrée en $(x^1-\frac{1}{2}, x^2, x^3)$, la valeur de la fonction associée à λ, notée aussi λ, est $\lambda(x^2, x^3) = x^1$. On obtient donc un modèle de surfaces aléatoires λ, avec prob $(\lambda) \sim \exp(-2\beta|\lambda|)$ où $|\lambda|$ est l'aire de λ. Comme l'aire de λ est aussi égale à $(2L+1)^2 + \|\lambda\|$, où $(2L+1)^2$ est le nombre de cellules horizontales de λ et $\|\lambda\|$ le nombre de cellules verticales de λ, prob $(\lambda) \sim \exp(-2\beta\|\lambda\|)$. Il est facile maintenant de comprendre pourquoi $\langle \cdot \rangle^{\pm}$ est non-invariant par translation si $\beta \gg 1$, en remarquant que le défaut imposé par la condition au bord est <u>rigide</u> (dans l'approximation SOS). Le contenu essentiel du travail de Dobrushin est de montrer que ceci reste vrai pour le modèle d'Ising.

Soit λ une surface décrivant le défaut. Comme λ est le graphe d'une fonction, on peut écrire $\lambda = \sum_{i=1}^{n} d_i$ où d_i est la restriction de λ à la $i^{\text{ème}}$ composante connexe de son support. On a

$$\| \lambda \| = \sum_{i=1}^{n} \| d_i \|$$

La fonction d_i décrit la déformation locale de λ par rapport à la situation en $\beta = \infty$. Donc on peut estimer la probabilité d'une déformation d_i et l'on a immédiatement

$$\text{Prob} \{ d_i \} \leqslant \exp(-2\beta \| d_i \|)$$

Le nombre des déformations d_i telles que $\| d_i \| = n$ et $\text{supp } d_i \ni 0$ est borné supérieurement par c^n. Par conséquent la probabilité que le défaut, imposé par la condition au bord $\pm$, soit déformé en 0 est inférieure à

$$\sum_{n \geqslant 4} c^n e^{-2\beta n} \to 0, \quad \beta \to \infty$$

Si maintenant β n'est pas très grand, cette description du défaut n'est pas utile. On peut cependant montrer rigoureusement que l'on a une transition rugueuse dans le modèle SOS (Fröhlich Spencer [9]):

$\exists\, C_1(\beta)$ et $C_2(\beta)$ t.q. $\forall\, L$ on a

$$C_1(\beta) \log \|x\| \leq \langle(\lambda(o,o) - \lambda(x^2, x^3))^2\rangle_L \leq C_2(\beta) \log |x|$$

où $\langle\cdot\rangle_L$ désigne la valeur moyenne pour le modèle SOS. Donc pour ces β le défaut perd sa rigidité. On a des fluctuations du même type que celles prédites par le modèle de Buff, Lovett et Stillinger pour $d = 3$ (cf(1.1)). Ce modèle peut être considéré comme la version continue du modèle SOS.

Dans le cas $d = 2$ on peut également faire une description simplifiée du défaut produit par la condition au bord. On procède comme ci-dessus et l'on ne retient que les défauts décrits par le graphe d'une fonction. On aura donc $\lambda(x_2) = 0$ si $|x^2| > L$. Cette ligne est décrite par des variables <u>locales</u> $d(x^2)$, indexées par x^2,

$$d(x^2) = \lambda(x^2) - \lambda(x^2 - 1)$$

Par conséquent la hauteur de λ au-dessus de $x^2 = 0$ est donnée par

$$\lambda(0) = \sum_{x^2 \leq 0} d(x^2)$$

Dans le cas $d = 2$ le modèle SOS est extrêmement simple puisque

$$\text{prob}\ (\lambda) \sim \exp(-2\beta \sum_{x^2} |d(x^2)|)$$

et que cela signifie que les variables aléatoires $d(x^2)$ sont (essentiellement) indépendantes. Par conséquent on aura

$$\Pr(\lambda(0) < \frac{x}{\sqrt{2}} \sqrt{L}) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}\gamma_{SOS}} \int_{-\infty}^{x} \exp(-\frac{u^2}{2\gamma_{SOS}^2})\, du + O(\frac{1}{\sqrt{L}}) \quad (2.9)$$

avec $\gamma_{SOS} = (\sqrt{2}\,\mathrm{sh}\beta)^{-1}$. L'essentiel du travail de Gallavotti est de montrer que ceci reste vrai pour le défaut du modèle d'Ising. En utilisant les résultats de Gallavotti on peut aussi montrer que l'épaisseur intrinsèque de l'interface est finie si $\beta >> 1$ (Bricmont, Lebowitz , Pfister [10]).

On a donc un état invariant par translation puisque l'interface a des fluctuations d'ordre $\sqrt{L}$.
Pour étudier ces fluctuations <u>globales</u> on peut calculer le profil de l'aimantation en faisant un changement d'échelle :

$$\begin{aligned} M(x) &= \lim_{L\to\infty} \langle \sigma(\frac{x}{\sqrt{2}} \sqrt{L}, 0) \rangle_L^{\pm} \\ &= 2m^*(2\pi\gamma^2)^{-\frac{1}{2}} \int_0^x \exp(-\frac{u^2}{2\gamma^2})\, du \end{aligned} \quad (2.10)$$

Ce résultat est immédiat en utilisant l'analogue de(2.9) pour le modèle d'Ising. Il se trouve que $M(x)$ peut être calculé <u>explicitement</u> (Abraham et Reed [11]) : le résultat est (2.1o), avec

$$\gamma^2(\beta) = \mathrm{sh}(\beta\ \tau(\beta)\ )^{-1}$$

où $\tau(\beta)$ est la tension superficielle. On connait donc explicitement (2.9) pour le modèle d'Ising. On notera que près de la température critique, l'écart quadratique moyen de l'amplitude de l'interface est donnée par

$$\gamma^2\ L \sim \frac{kT}{\tau(\beta)}\ L$$

comme dans le modèle de Buff, Lovett et Stillinger (cf(1.1)).

3. Modèle de Villain

Il est intéressant de comparer les résultats ci-dessus, obtenus pour un modèle avec une symétrie discrète, avec ceux d'un modèle avec une symétrie continue. On peut prendre le modèle XY par exemple. D'un point de vue technique le modèle de Villain, qui est très semblable, est plus simple. Les résultats ci-dessous ont été obtenus par Fröhlich et Pfister [12].

Dans le modèle de Villain les spins sont des variables aléatoires $\theta(x)$ prenant leurs valeurs dans S^1. Considérons le modèle dans la boîte $\Lambda(L,T)$ avec condition au bord $\theta(x) = \phi(x)$ si $x \notin \Lambda$. La mesure de Gibbs sera déterminée par le facteur de Boltzmann qui s'écrit

$$\prod_{\langle xy\rangle \cap \Lambda \neq \emptyset} g_\beta \; (\theta(x) - \theta(y)) \tag{3.1}$$

où

$$g_\beta \; (\theta) = \sum_{n \in Z} \exp(-\frac{\beta}{2} \; (\theta + 2\pi n)^2) \tag{3.2}$$

On a naturellement imposé la condition au bord ϕ dans (3.1). Si l'on avait choisi le modèle XY, on aurait pour (3.1) l'expression

$$\prod_{\langle xy\rangle \cap \Lambda \neq \emptyset} \exp(\beta \cos(\theta(x) - \theta(y))) \qquad (3.3)$$

On peut montrer que l'on a une transition de phase avec brisure de la symétrie si et seulement si $\langle \cos \theta(x) \rangle^{o} \neq 0$ où $\langle \cdot \rangle^{o}$ désigne l'état d'équilibre obtenu avec la condition au bord $\phi(x) \equiv 0$. Cet état $\langle \cdot \rangle^{o}$ joue dans ce modèle le rôle de l'état $\langle \cdot \rangle^{+}$ dans le modèle d'Ising et possède des propriétés analogues. Si $\langle \cos \theta(x) \rangle^{o} > 0$, toutes les phases pures sont données par les conditions au bord $\phi(x) \equiv \alpha$, avec $0 \leq \alpha \leq 2\pi$ Pour étudier la coexistence de deux phases, par ex. celles qui sont données par les conditions au bord $\alpha = 0$ et $\alpha = \pi$, on procède comme pour le modèle d'Ising. On introduit la condition au bord $(0,\pi)$: si $x \notin \Lambda(L,T)$, $\phi(x) = 0$ pour $x^1 \geq 0$ et $\phi(x) = \pi$ pour $x^1 < 0$. Dans le cylindre infini $\Lambda(L)$, on obtient un état décrivant la coexistence des deux phases. (On suppose $d \geq 3$ et $\beta >> 1$). La tension superficielle associée à l'interface ou paroi de Bloch est (cf (2.6))

$$\tau_L(\beta) = -\frac{1}{\beta} \frac{1}{(2L)^{d-1}} \lim_{T\to\infty} \log \frac{Z^{o,\pi}_{L,T}}{Z^{o}_{L,T}} \qquad (3.4)$$

La physique est ici très différente. En effet on peut

montrer que pour $T > L$ on a

$$\log \frac{Z^{o,\pi}_{L,T}}{Z^{o}_{L,T}} = O\,(L^{d-2} \log L) \qquad (3.5)$$

et par conséquent $\lim_{L\to\infty} \tau_L(\beta) = 0$

quelle que soit la valeur de d, dimension du réseau. Ce résultat indique que l'épaisseur de la paroi de Bloch <u>diverge</u> pour tout β lorsque L tend vers l'infini. On s'attend donc à ce que l'état $\lim_{L\to\infty} \langle \cdot \rangle^{o,\pi}_{L}$ soit invariant par translation pour toute dimension. Ceci peut être effectivement démontré. Dans le modèle d'Ising à deux dimensions l'état $\langle \cdot \rangle^{\pm}$ est invariant par translation à cause des fluctuations globales de la paroi de Bloch. Ici c'est la paroi de Bloch qui disparait dans le sens que son épaisseur devient infinie. Cependant ce résultat n'est pas surprenant. C'est un effet de la symétrie continue du modèle. Les spins ont tendance à tourner très lentement de la valeur π à la valeur 0. En d'autres termes la paroi de Bloch n'est pas un défaut stable du modèle. Ce phénomème est bien connu en dimension deux [13].

Pour essayer de construire des états non invariants par translation il faut considérer les <u>défauts stables</u> qui sont les vortex. Ces défauts ont la dimension $d-2$. On peut trouver des conditions au bord imposant un défaut traversant le système si $d \geqslant 3$. Par exemple si $d = 3$ on aura une ligne de vortex et si $d = 4$ on pourra imposer une surface bidimensionnelle de vortex. Ce défaut produit par la condition au bord joue le même rôle que le défaut produit par la condition $\pm$ dans le modèle d'Ising. A trois dimensions cette ligne de vortex va fluctuer et l'état que l'on obtient à la limite thermodynamique est invariant par translation. A quatre dimensions un argument, du même type que celui utilisé pour montrer la rigidité de la paroi de Bloch dans le modèle d'Ising à trois dimensions, indique que le défaut de vortex produit par la condition au bord est stable. On peut donc conjecturer que le modèle de Villain ainsi que le modèle XY, possèdent des états non invariants par translation si $d \geqslant 4$ [12].

Une discussion plus précise de cette conjecture dans le cas du modèle de Villain est relativement compliquée et sera omise ici. Le point essentiel à retenir est le rôle des défauts (topologiquement) stables du système.

Références

(1) Van der Waals J.D. The thermodynamic theory of capillarity under the hypothesis of a continuous variation of density. English translation J. Stat. Phys. 2o, 197-244 (1979).

(2) Fisk S, Widom B. Structure and free energy of the interface between fluid phases in equilibrium near the critical point J. Chem. Phys. 5o, 3219-3227 (1969).

(3) Buff F.P., Lovett R.A., Stillinger F.H. Interfacial density profile for fluids in the critical region Phys. Rev. Lett. 15, 621-623 (1965).

(4) Van Beijeren H. Interface sharpness in the Ising model Commun. math. Phys. 4o, 1-6 (1975).

(5) Gallavotti G. The phase separation line in the two-dimensional Ising model. Commun. math. Phys. 27, 1o3-136 (1972).

(6) Dobrushin R.L. Gibbs state describing coexistence of phases for a three-dimensional Ising model Theory Probab. Appl. 17, 582-6oo (1972) et Investigation of Gibbsian states for three-dimensional lattice systems Theory Probab. Applic. 18, 253-271 (1973).

(7) Bricmont J. Lebowitz J.L., Pfister C.E.: On the surface tension of lattice systems Annals of the New York Academy of Sciences 337, 214-223 (198o).

(8) Lebowitz J.L., Pfister C.E. : Surface tension and phase coexistence Phys. Rev. Lett. 46. 1o31-1o33 (1981).

(9) Fröhlich J., Spencer T. The Kosterlitz-Thouless transition in two-dimensional abelian spin systems and the Coulomb gas. Commun math. Phys. 81, 527-6o2 (1981).

(1o) Bricmont J. Lebowitz J.L., Pfister C.E. On the local structure of the phase separation line in the two-dimensional Ising system J. Stat. Phys. 26, 313-332 (1981)

(11) Abraham D.B., Reed P. Interface profile of the Ising ferromagnet in two dimensions Commun. math. Phys. 49 35.46 (1976).

(12) Fröhlich J., Pfister C.E. (à paraitre)

(13) Mermin N.D. Absence of ordering in certain classical systems J. Math. Phys. 8 1061-1064 (1967) et Some applications of Bogoliubov's inequality in equilibrium statistical mechanics J. Phys. Soc. 26 Suppl. 203-207(1969)

Dobrushin R.L., Shlosman S.B. Absence of breakdown of continuous symmetry in two-dimensional models of statistical physics Commun math. Phys. 42,31-40 (1975).

Pfister C.E. On the symmetry of the Gibbs states in two-dimensional lattice systems. Commun. math. Phys. 79 181-188 (1981).

Fröhlich J., Pfister C.E. On the absence of spontaneous symmetry breaking and of crystalline ordering in two-dimensional systems. Commun. math. Phys. 81, 277-298 (1981).

(14) Pfister C.E. Interface and surface tension in Ising model, publié dans Scaling and Self-similarity in physics ed. Fröhlich J. Birkhäuser.

(15) Fröhlich J., Pfister C.E., Spencer T. On the statistical Mechanics of Surfaces R.C.P. 25 vol. 30.

Université de Strasbourg Département de Mathématiques Bibliothèque