

# Chapitre 3

## Brisure spontanée de symétrie

Nous avons vu qu'une symétrie peut être présente dans un système physique et brisée par la modification de son environnement –branchement d'un champ extérieur, déformation du système, etc. Une tout autre façon de briser une symétrie est par le mécanisme de brisure spontanée, auquel ce chapitre est consacré. Ce mécanisme apparaît dans de très nombreuses situations physiques. Nous l'illustrerons plus particulièrement par l'étude de la transition ferromagnétique–paramagnétique.

### 3.1 Brisure spontanée de symétrie discrète

#### 3.1.1 Un modèle mécanique

Considérons d'abord un système mécanique très simple, celui d'un point matériel à une dimension soumis à un potentiel pair  $V(x) = V(-x)$ , par exemple

$$V(x) = \alpha x^4 + \beta x^2 \quad (3.1)$$

avec des coefficients  $\alpha$  et  $\beta$  constants,  $\alpha > 0$  et  $\beta$  pour le moment quelconque. L'équation du mouvement est  $\ddot{x} = -V'(x)$ , soit ici

$$\ddot{x} + (4\alpha x^2 + 2\beta)x = 0 \quad (3.2)$$

et le système est clairement invariant pas la réflexion  $x \mapsto -x$ , on parlera de symétrie  $\mathbb{Z}_2$ . Cette réflexion doit s'appliquer aussi aux conditions initiales, et l'assertion correcte et complète

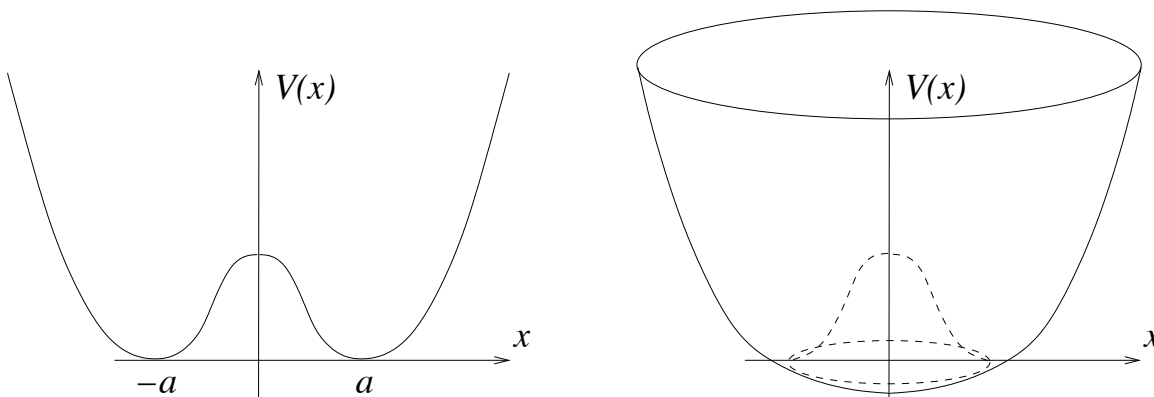


FIGURE 3.1 – Double puits de potentiel. Le potentiel en “chapeau mexicain”

consiste donc à dire :

L'unique solution  $x(t)$  de l'équation du mouvement satisfaisant des conditions initiales  $x(0) = x_0$ ,  $\dot{x}(0) = v_0$  admet une image par réflexion,  $\tilde{x}(t) = -x(t)$ , elle aussi solution de l'équation du mouvement et satisfaisant aux conditions initiales  $\tilde{x}(0) = -x_0$ ,  $\dot{\tilde{x}}(0) = -v_0$ .

La symétrie  $\mathbb{Z}_2$  est brisée *explicitement* si on ajoute un terme par exemple linéaire au potentiel  $V_\gamma(x) = V(x) + \gamma x$ ; le potentiel  $V_\gamma$  n'est plus pair, et la propriété qu'on vient d'énoncer n'est plus vraie.

Revenons au cas symétrique, avec le potentiel pair (3.1). Les positions d'équilibre possibles sont à chercher parmi les extrema du potentiel, et donc parmi les solutions de  $V'(x_c) = (4\alpha x_c^2 + 2\beta)x_c = 0$ . Si  $\beta > 0$  (et  $\alpha > 0$  comme précédemment),  $x_c = 0$  est la seule solution. Par contre si  $\beta < 0$ , on a trois extrema, soit  $x_c = 0$  ou  $\pm a$ , avec  $a^2 = -\beta/2\alpha$ , mais une analyse de stabilité nous dit –et notre intuition nous le confirme–, le point  $x_c = 0$  n'est pas stable<sup>1</sup>. Si on choisit  $x(0) = x_0 = 0$ ,  $v_0 = 0$  comme condition initiale, la perturbation la plus infime va précipiter le point soit vers la gauche soit vers la droite, dans un mouvement oscillant dans un des deux puits de potentiel. On parle alors de symétrie  $\mathbb{Z}_2$  “brisée spontanément”, le mot *spontané* se référant au fait qu'il suffit d'une perturbation infinitésimale pour la déclencher, soit par le choix d'une condition initiale  $x_0 \neq 0$  arbitrairement petite, soit par l'addition d'un terme  $\gamma x$  dans le potentiel, brisant la symétrie, si petit qu'il soit. Elle se distingue ainsi d'une brisure explicite de la symétrie, telle celle mentionnée plus haut par un terme  $\gamma x$  fini.

Ce cas très simple de brisure spontanée d'une symétrie, ici  $\mathbb{Z}_2$  à une dimension, est juste l'illustration d'un phénomène qui gouverne de très nombreux phénomènes physiques, depuis les transitions de phase de la matière condensée ou des systèmes ferromagnétiques aux théories modernes de physique des particules et de cosmologie.

### 3.1.2 Ferromagnétisme

Rappelons l'observation de base. Au dessus d'une température  $T_c$  (“c” pour critique ou pour Curie), un système ferromagnétique est dans une *phase paramagnétique*, avec une aimantation nulle en champ extérieur nul. En dessous de cette température, il présente une aimantation “spontanée”  $M_{sp}$  non nulle même en champ nul, il est dans une *phase ferromagnétique*. Plus précisément, à  $T < T_c$  fixée, si on part d'une situation où le matériau est soumis à un champ magnétique  $\vec{H}$  suffisamment fort, les moments magnétiques des atomes constitutants ont tendance à s'aligner avec  $\vec{H}$  et il en résulte une aimantation  $\vec{M}$  parallèle à  $\vec{H}$ . Si on fait décroître puis changer de signe  $\vec{H}$ , l'aimantation décroît mais on constate qu'à  $\vec{H} = 0$ , l'aimantation ne s'est pas encore annulée mais prend la valeur  $M_{sp}$  et qu'il faut aller à des valeurs de  $\vec{H}$  opposées à la direction initiale et suffisamment fortes pour la voir s'annuler puis s'aligner à nouveau avec  $\vec{H}$  : c'est le phénomène d'hystérésis, cf Fig.3.2(a).

L'aimantation spontanée décroît avec la température et s'annule à  $T_c$ , Fig. 3.2(b). Il y a donc une transition de phase en  $T = T_c$  entre une phase ordonnée, d'aimantation non nulle, et une phase non ordonnée, symétrique (aimantation nulle). La transition est une transition continue (“du deuxième ordre”), l'aimantation  $M_{sp}$  s'annulant à  $T = T_c$ . L'apparition d'une direction privilégiée dans laquelle pointe l'aimantation et la non-analyticité de l'aimantation en  $T = T_c$  (non nulle en deçà, identiquement nulle au delà), sont des phénomènes très remarquables qui exigent une explication de la part du physicien... Une analyse plus poussée des

1. Rappelons qu'une *linéarisation* de la solution au voisinage de l'une de ces solutions,  $x = x_c + \xi$ , avec un développement de l'équation (3.2) au premier ordre en  $\xi$  supposé petit, mène à une équation d'oscillateur harmonique  $\ddot{\xi} + \omega^2 \xi = 0$ , avec une fréquence carrée négative pour  $x_c = 0$  et positive pour  $x_c = \pm a$  : on a donc des petites oscillations dans ce dernier cas, et un  $\xi$  croissant dans le premier cas, ce qui signale l'instabilité de la solution  $x_c = 0$ .

propriétés du système révèle que d'autres grandeurs physiques ont également un comportement non analytique, voir plus bas. On parle de *phénomène critique* pour décrire le comportement du système au voisinage d'une telle transition.

Le phénomène de ferromagnétisme peut aussi se décrire comme la brisure spontanée d'une symétrie d'orientation (isotropie) : le matériau, un système de moments magnétiques, ne présente pas a priori de direction privilégiée en champ nul. Néanmoins à basse température et en champ nul, l'aimantation spontanée semble choisir une telle direction. Voir plus bas (§3.1.4) une discussion de l'apparente contradiction avec le principe de Curie.

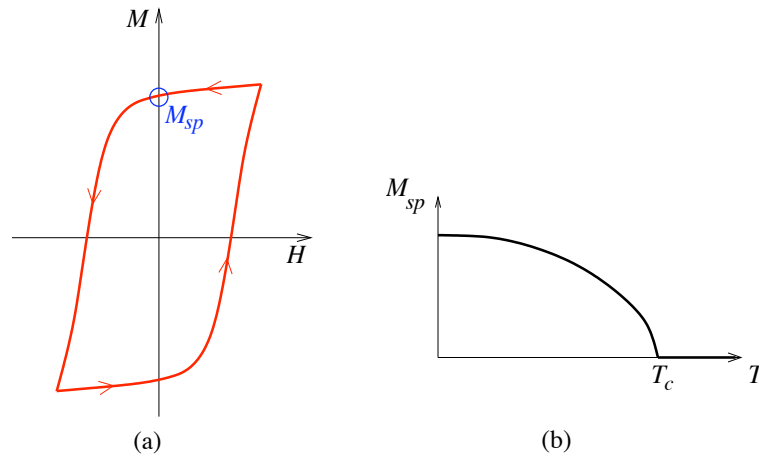


FIGURE 3.2 – (a) Cycle d'hystérésis d'un système ferromagnétique ; (b) Aimantation "spontanée" en champ nul

### 3.1.3 Modèle d'Ising

Il s'agit d'un modèle très simplifié de ferromagnétisme. Les moments magnétiques, ou par abus de langage les "spins", sont classiques et ne prennent que deux valeurs  $\pm 1$ . Le modèle est défini sur un réseau à  $d$  dimensions. Le cas  $d = 1$  constitue un exercice classique de mécanique statistique mais ne nous intéressera pas ici, ne présentant pas de phénomène de brisure spontanée de symétrie. Examinons plutôt le cas  $d = 2$  : on considère un réseau carré en chaque site  $i$  duquel on attache un spin  $\sigma_i = \pm 1$ . L'énergie d'une configuration de spins sur le réseau est donnée par

$$E(\{\sigma\}) = -J \sum_{(i,j)} \sigma_i \cdot \sigma_j \quad (3.3)$$

où on somme sur toutes les paires  $(i, j)$  de sites voisins sur le réseau. Le paramètre  $J$  est appelé énergie d'échange, car il mesure (à un facteur 2 près) la différence entre les énergies de paires de spins alignés et antialignés. Le poids de Boltzmann attaché à une telle configuration est donc

$$w(\{\sigma\}) = \exp -\beta E(\{\sigma\}) ,$$

$\beta = \frac{1}{kT}$ , et on est supposé calculer la fonction de partition  $Z = \sum_{\{\sigma\}} w(\{\sigma\})$  et les valeurs moyennes des grandeurs thermodynamiques  $A(\{\sigma\})$  fonctions des spins  $\sigma$ , soit  $\langle A \rangle = Z^{-1} \sum_{\{\sigma\}} A(\{\sigma\}) w(\{\sigma\})$ , etc. Par exemple, l'aimantation moyenne doit se calculer par  $M = \lim_{N \rightarrow \infty} \langle \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \sigma_i \rangle$  si on se restreint à un nombre  $N$  fini mais très grand de spins, ou encore, en invoquant un argument d'homogénéité,  $M = \langle \sigma \rangle$  pour un spin unique du réseau infini. Il convient de bien comprendre que le phénomène de transition de phase avec la non-analyticité qui lui est attachée ne peut se produire qu'à la limite  $N \rightarrow \infty$ . Pour tout  $N$  grand mais fini, la

fonction de partition et les valeurs moyennes sont des sommes de fonctions analytiques en  $\beta$ , donc ne manifestent pas de non-analyticité.

Si  $J > 0$ , le système est ferromagnétique : à basse température  $\beta \gg 1$ , le poids de Boltzmann favorise les paires de spins voisins alignés, c'est-à-dire ici dans le modèle d'Ising, valant tous deux  $+1$  ou  $-1$ . Mais cela ne suffit pas pour conclure que le modèle a une aimantation spontanée non nulle : il faut en effet examiner le poids (entropie - énergie) des autres configurations, par exemple des îlots de spins retournés.

À l'évidence, le modèle présente une symétrie  $\mathbb{Z}_2$  : le changement de *tous* les spins  $\sigma_i \mapsto -\sigma_i$  ne change pas l'énergie  $E(\{\sigma\})$  (3.3) mais change  $M \mapsto -M$ . On pourrait donc s'attendre à ce que l'aimantation s'annule identiquement (à toute température). Mais cette conclusion est elle aussi incorrecte : des calculs a priori de comparaison énergie-entropie de configurations (Peierls)<sup>2</sup> d'une part, un calcul explicite rendu possible par le caractère exactement soluble de ce modèle de l'autre, permettent d'affirmer qu'il présente le phénomène de brisure spontanée de symétrie en dimension  $d \geq 2$  : à basse température,  $T < T_c$  (ou  $\beta > \beta_c$ ), la symétrie est brisée, l'aimantation  $M \neq 0$  et le système présente une *phase ordonnée*, où les spins pointent majoritairement dans la direction de  $M$ . (Par contre à  $d = 1$ , les fluctuations thermiques annulent l'aimantation à toute température  $T > 0$  et le système est toujours dans sa phase symétrique désordonnée, voir TD.) L'aimantation est appelée "paramètre d'ordre". En fait, deux phases d'aimantation de signes opposés sont possibles à  $T < T_c$  et ce sont les conditions initiales (par exemple un champ magnétique infinitésimal  $H$ ) qui déterminent quelle phase le système choisit. Cela est apparent sur la figure 3.3 où dans le plan  $(T, H)$ , les deux phases sont séparées par une ligne de transition à  $H = 0$ . À haute température,  $T \geq T_c$ , à l'inverse, l'aimantation est nulle, la symétrie est restaurée, et le système est dans une phase désordonnée. À  $T = T_c$  le modèle subit une transition de phase du deuxième ordre.

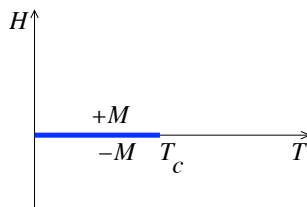


FIGURE 3.3 – Les deux phases de basse température du modèle d'Ising

Le calcul exact de l'aimantation spontanée est possible dans le modèle d'Ising bidimensionnel [Onsager et Yang<sup>3</sup>]. On trouve

$$M = \begin{cases} \left(1 - (\sinh(2J\beta))^{-\frac{1}{4}}\right)^{\frac{1}{8}} & \text{si } T \leq T_c \\ 0 & \text{si } T \geq T_c \end{cases} \quad (3.4)$$

qui s'annule à la température critique définie par  $\sinh(2J\beta_c) = 1$  et qui y présente une non-analyticité,  $M \sim (T_c - T)^{\frac{1}{8}}$ .

Plus généralement, l'étude du comportement singulier des différentes grandeurs thermodynamiques dans des systèmes critiques quelconques, énergie libre, aimantation, etc, a été l'objet de beaucoup de travail et de progrès au cours des 40 dernières années (K. Wilson, prix Nobel 1982). On cherche en particulier à déterminer les exposants critiques qui décrivent l'annulation ou le caractère singulier des quantités thermodynamiques au

2. R. Peierls, *Proc. Cambridge Phil. Soc.* **32** 477 (1936); Robert B. Griffiths, *Phys. Rev.* **136**, A437A439 (1964)

3. Lars Onsager, (1903–1976), physico-chimiste norvégien, prix Nobel de chimie 1968, auteur de travaux remarquables en chimie et en physique.

Chen Ning Yang, (1922–), physicien sino-américain, prix Nobel de physique 1957 avec T.D. Lee pour leur découverte de la violation de la parité, voir chap. 6; auteur de travaux fondamentaux en physique statistique, physique des particules et théorie des champs.

voisinage de  $T = T_c$ . Ainsi la chaleur spécifique, l'aimantation ou la susceptibilité magnétique  $\chi = \partial M / \partial H|_{H=0}$  ont des comportements critiques obéissant à des lois de puissance

$$c \sim |T - T_c|^{-\alpha} \quad M \sim (T_c - T)^\beta, \quad T \geq T_c \quad \chi \sim |T - T_c|^{-\gamma}, \quad \text{etc} \quad (3.5)$$

avec des exposants critiques  $\alpha, \beta, \gamma, \dots$  (notations traditionnelles) qu'il s'agit de déterminer. Pour le modèle d'Ising à deux dimensions,  $\alpha = 0$  (singularité logarithmique),  $\beta = \frac{1}{8}$ ,  $\gamma = \frac{7}{4}$ .

De façon remarquable, la clé du problème se trouve dans l'existence d'une nouvelle symétrie qui apparaît au point critique, une *invariance par dilatation* des échelles. Cette invariance provient du fait qu'à  $T = T_c$ , une longueur fondamentale du système, sa longueur de corrélation  $\xi$ , qui mesure la distance sur laquelle les spins s'influencent, diverge :  $\xi \sim |T - T_c|^{-\nu}$  avec  $\nu > 0$ . L'outil théorique pour traiter cette invariance de dilatation s'appelle le groupe de renormalisation, il est maintenant d'usage très général en physique théorique, depuis l'étude du comportement critique en physique statistique ou physique de l'état condensé, à l'étude du comportement asymptotique à très haute énergie en physique des particules, ou à celle du comportement turbulent de flots hydrodynamiques.

### 3.1.4 Un paradoxe ?

Ce phénomène de brisure spontanée de symétrie semble à première vue contredire le principe de Curie du paragraphe précédent. La symétrie des causes (interaction entre les spins d'Ising symétrique par l'action du groupe  $\mathbb{Z}_2$ ) ne se retrouve pas dans celle des effets (aimantation non nulle brisant cette symétrie  $\mathbb{Z}_2$ ). Ou à l'inverse, l'apparition d'une aimantation spontanée implique une brisure de l'isotropie de l'espace qui n'est pas présente dans les causes (la physique des moments magnétiques microscopiques). Il faut y regarder de plus près, et bien comprendre le rôle crucial des conditions initiales dans le déclenchement de la brisure spontanée. Or puisque ces conditions initiales brisent la symétrie –explicitement même si ce n'est qu'infiniment–, nous sortons des conditions d'application du principe de Curie. L'orientation de l'aimantation spontanée dépend en fait de l'histoire passée du matériau, typiquement du champ magnétique auquel il a été soumis. Ceci est l'analogie des conditions initiales différant de façon infinitésimale de 0, ou du terme de brisure  $\gamma x$  infinitésimal, dans l'exemple mécanique examiné au paragraphe 3.1.1.

## 3.2 Brisure spontanée de symétrie continue

Considérons maintenant le cas d'une symétrie continue, tout d'abord avec le problème mécanique du § précédent, cf fig. 3.1(b), où le système vit maintenant à deux dimensions, avec un potentiel invariant par les rotations du groupe  $O(2)$ . Le même mécanisme est à l'œuvre, avec la même conséquence : dans les circonstances illustrées sur la figure, le “vrai” état stable de la théorie (en mécanique quantique, nous dirions le vrai “fondamental”) n'est pas à  $x = 0$ , mais quelque part dans le cercle de gorge du minimum du potentiel, et c'est le choix d'une condition initiale, infinitésimale mais non symétrique, qui va le déterminer.

On conçoit aussi au vu de la figure qu'il soit très aisé –cela ne coûtera pas d'énergie potentielle– de passer d'un tel état fondamental à un état voisin, lui aussi au fond de la gorge. Quand le même phénomène se produit dans un contexte de physique statistique ou quantique, cela se manifeste par l'existence d'excitations d'énergie nulle dans la théorie. On a donné le nom de *bosons de Goldstone* aux excitations ou particules correspondantes. Ce résultat présenté ici de façon très heuristique peut être justifié par des arguments précis et cela nous permet donc d'affirmer : la brisure spontanée d'une symétrie continue s'accompagne de l'apparition de bosons de Goldstone ayant un spectre d'énergie allant jusqu'à 0.

Donnons un exemple, tiré une fois encore de la physique du ferromagnétisme. Plutôt que le modèle d'Ising précédent, intéressons nous au modèle dit de Heisenberg classique, un autre

modèle de mécanique statistique classique. Pour rester simple, considérons-le à deux dimensions : il est défini sur un réseau carré, et les variables dynamiques sont des vecteurs unitaires à  $n$  dimensions  $\vec{S}_i \in \mathbb{R}^n$ ,  $|\vec{S}_i| = 1$ , attachés à chaque site  $i$  du réseau. L'énergie d'une configuration de tels "spins classiques" est

$$E = -J \sum_{i:j} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (3.6)$$

avec les mêmes notations que dans (3.3). À nouveau, le cas ferromagnétique correspond à  $J > 0$ , et on s'intéresse à calculer fonction de partition et énergie libre, aimantation, etc. Par exemple, l'aimantation doit se calculer par  $\vec{M} = \langle \vec{S} \rangle$ .

Ce modèle présente une symétrie de rotation  $O(n)$  : l'expression (3.6) de l'énergie est évidemment invariante par l'action d'un même élément  $O \in O(n)$  sur *tous* les  $\vec{S}_i$ ,  $\vec{S}_i \mapsto O\vec{S}_i$ . Noter qu'il s'agit là d'une *symétrie interne*, agissant dans l'espace des vecteurs spins, distinct a priori de l'espace physique (ici à  $d = 2$  dimensions).

Noter encore que le cas  $n = 1$ , donc de vecteurs unitaires à une dimension,  $S_i = \pm 1$ , se réduit au modèle d'Ising. Mais alors que le modèle d'Ising présente une symétrie discrète par le groupe  $\mathbb{Z}_2$ , la symétrie du modèle de Heisenberg, pour  $n \geq 2$ , est continue.

Cette différence est importante en ce qui concerne l'existence d'une transition de phase avec symétrie brisée spontanément. On démontre qu'au contraire du modèle d'Ising, le modèle de Heisenberg (pour  $n \geq 2$ ) ne présente pas de transition en dimension  $d = 2$  (cf TD). Par contre le même modèle à  $d = 3$  dimensions, (défini sur un réseau cubique, disons), présente une transition, avec brisure spontanée de la symétrie continue  $O(n)$  et apparition d'un paramètre d'ordre, l'aimantation, dans la phase de basse température. Et selon l'argument heuristique donné ci-dessus, il existe dans cette phase ordonnée de basse température des excitations de basse énergie, appelées dans ce contexte "ondes de spins" ou "magnons".

### 3.3 Autres exemples de symétries brisées spontanément

Les applications du mécanisme de brisure spontanée ne se limitent pas aux systèmes ferromagnétiques. En fait, dans de très nombreux phénomènes, on y fait appel :

- Landau a suggéré que la cristallisation pouvait s'interpréter comme brisure spontanée des symétries de translation et de rotation.
- Dans les transitions de phase des cristaux liquides, Pierre-Gilles de Gennes a montré que la transition de phase liquide isotrope-nématique est associée à un paramètre d'ordre : l'orientation moyenne des molécules, voir ci-dessous.
- La théorie moderne de physique des particules appelée "Modèle Standard" est fondée sur deux idées-clés : une symétrie de jauge (voir chapitre suivant), qui est brisée spontanément. Il en résulte non pas l'apparition de particules de masse nulle comme expliqué plus haut, mais au contraire dans ce cas, l'acquisition d'une masse par des particules *a priori* de masse nulle ! C'est le mécanisme de Higgs, dont l'accélérateur LHC du CERN qui vient d'entrer en fonction va peut-être confirmer prochainement la validité dans ce contexte.
- Un mécanisme du même genre est à l'œuvre dans la transition conducteur-superconducteur ou dans la transition superfluide-fluide normal de l'hélium : dans la phase de basse température, un condensat (d'électrons dans un cas, d'atomes d'He<sup>4</sup> dans l'autre) se forme, et la "pseudo-fonction" d'onde  $\psi$  de ce condensat, qui satisfait une généralisation non-linéaire de l'équation de Schrödinger, sert de paramètre d'ordre, avec  $\langle \psi \rangle \neq 0$  signalant la brisure de l'invariance  $\psi \rightarrow e^{i\alpha}\psi$ .
- Le mécanisme de brisure spontanée est aussi évoqué en cosmologie, pour expliquer la phase inflationnaire de l'Univers et l'apparition de défauts topologiques entre les différents "vides" de la théorie...

#### Approximation de Ginzburg-Landau. Cristaux liquides nématiques

L'approximation de Ginzburg-Landau est une méthode très puissante et universelle. Elle consiste à identifier une grandeur macroscopique  $\Phi(x)$ , le paramètre d'ordre, variant lentement et décrivant les degrés de liberté les plus importants d'un système proche d'une transition de phase. Dans un ferromagnétique, ce sera l'aimantation locale, dans un cristal liquide nématique, une orientation etc. On écrit alors une énergie libre "effective", qui

est une fonctionnelle de ce champ  $\Phi$ , qu'on limite à un nombre fini de termes de degré bas en  $\Phi$  et ses dérivées  $\nabla\Phi$ . Par exemple pour un ferromagnétique de type Ising

$$\mathcal{F}[\Phi] = \int d^d x \left( \frac{1}{2} (\nabla\Phi)^2 + \frac{r}{2} \Phi^2 + g\Phi^4 \right)$$

où on a supposé que pour des raisons de symétrie par  $\Phi \leftrightarrow -\Phi$ , seuls des termes de degré pair apparaissent. On discute alors les extrema de cette énergie libre effective, supposés uniformes :  $\Phi$  indépendant de  $x$ , et la discussion est très semblable à ce qu'on a fait au §3.1 ou dans l'approximation du champ moyen, avec des situations très différentes selon le signe du paramètre  $r$  qui joue le rôle d'écart à la température critique. Comme on l'a mentionné plus haut, le même genre d'approximation peut s'appliquer à d'autres systèmes, tels qu'un supraconducteur ou un superfluide, ou la cristallisation (Landau 1937), ou encore la transition de phase des cristaux liquides nématiques. Rappelons qu'une phase nématique est faite de molécules essentiellement parallèles, manifestant donc un ordre orientationnel, cf §1.5.4. On pourrait penser décrire l'orientation des molécules par un vecteur unitaire  $\hat{n}$ , mais l'identification des directions de  $\hat{n}$  et  $-\hat{n}$  conduit à utiliser un tenseur de rang 2 : la modélisation par de Gennes<sup>4</sup> consiste à introduire un paramètre d'ordre  $Q$  qui est un tenseur  $3 \times 3$  symétrique

et de trace nulle. En le diagonalisant dans une base orthogonale,  $Q = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}(q + \eta) & 0 & 0 \\ 0 & -\frac{1}{2}(q - \eta) & 0 \\ 0 & 0 & q \end{pmatrix}$ . Le cas

$\eta = 0$  correspond au cas "uniaxe" où on a symétrie de rotation autour d'un axe. On écrit alors une fonctionnelle de Ginzburg–Landau de la forme

$$\mathcal{F}[Q] = \int dx \left( \frac{1}{2} \text{tr} (\nabla Q)^2 + \frac{a}{2} (T - T_*) \text{tr} Q^2 + \frac{b}{3} \text{tr} Q^3 + \frac{c}{4} (\text{tr} Q^2)^2 \right).$$

On cherche les configurations uniformes minimisant  $\mathcal{F}[Q]$ , donc minimisant le potentiel  $\frac{a}{2} (T - T_*) \text{tr} Q^2 + \frac{b}{3} \text{tr} Q^3 + \frac{c}{4} (\text{tr} Q^2)^2 + \dots$ . Dans le cas uniaxe, ( $\eta = 0$ ), ce potentiel s'écrit

$$V(q) = \frac{3a}{4} (T - T_*) q^2 + \frac{b}{4} q^3 + \frac{9c}{32} q^4$$

et la figure 3.4 montre la forme typique de cette fonction pour différentes valeurs de  $T$ . Si  $b < 0$ , il existe une valeur  $T_c$  telle que pour  $T > T_c$ , le minimum de  $V$  est en  $q = 0$ , tandis que pour  $T = T_c$ , un nouveau minimum apparaît pour  $q \neq 0$ . Il y a donc en  $T = T_c$  une *transition du premier ordre*, avec discontinuité du paramètre d'ordre  $q$ , entre la phase ordonnée nématique et la phase désordonnée isotrope.

Pour en savoir plus, voir P. G. de Gennes et J. Prost, *The Physics of Liquid Crystals*, Oxford U.P.

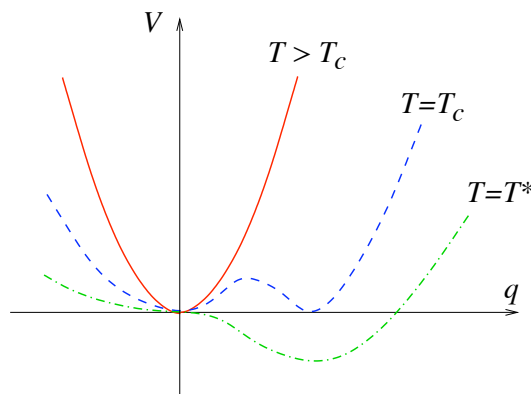


FIGURE 3.4 – Potentiel de Landau-Ginzburg-de Gennes pour des cristaux liquides nématiques

4. Pierre Gilles de Gennes, (1932-2007) a reçu le prix Nobel de physique 1991 pour ses travaux sur les cristaux liquides et les polymères.

### 3.4 Exercice : Champ moyen

L'approximation du champ moyen peut s'obtenir de multiples façons. Illustrons le sur le cas du modèle d'Ising sur un réseau hypercubique en dimension  $d$  fait de  $N$  sites (avec  $N \rightarrow \infty$ )

$$Z_{Ising} = \sum_{\{\sigma=\pm 1\}} \exp(\beta J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - \beta h \sum_i \sigma_i)$$

1. Rappeler l'approximation *auto-cohérente* du champ moyen (cf. cours de Mécanique Statistique). On écrit

$$Z_{Ising} = \sum_{\{\sigma=\pm 1\}} \exp(\beta J \underbrace{\sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j}_{S(\{\sigma\})} - \beta h \sum_i \sigma_i)$$

L'approximation consiste à remplacer les corrélations entre spins par leur interaction avec un champ effectif local  $H_i$ ,  $S(\{\sigma\}) \approx \beta \sum_i \sigma_i H_i$ , tel que  $\beta H_i := \frac{\partial S}{\partial \sigma_i} = \beta(J \sum_{j:i} \sigma_j - h) \approx 2d\beta M - \beta h$  et  $M := \langle \sigma_i \rangle = \tanh H$ , en approximant  $H_i$  et  $\langle \sigma_i \rangle$  par des valeurs uniformes  $H$  et  $M$ . En déduire l'équation du champ moyen

$$2\beta J d \tanh \beta H = \beta(H + h). \quad (3.7)$$

En champ extérieur nul,  $h = 0$ , on a à résoudre l'équation

$$\tanh \beta H = \frac{H}{2Jd}.$$

Discuter ses solutions en fonction de la valeur de  $2\beta J d$  par rapport à 1. Comparer avec l'équation  $V'(x_c) = 0$  du §3.1.1. Conclure sur l'apparition ou non d'une aimantation non nulle, c'est-à-dire d'une éventuelle brisure spontanée de symétrie.

2. On va montrer que l'approximation du champ moyen fournit une borne inférieure à  $\ln Z$ .

i) Rappeler pourquoi la propriété de convexité de la fonction exponentielle se traduit par l'inégalité

$$\langle e^X \rangle \geq e^{\langle X \rangle}, \quad (3.8)$$

pour toute moyenne  $\langle \cdot \rangle$  à poids positifs.

ii) Montrer qu'on peut récrire  $Z_{Ising}$  comme

$$Z_{Ising} = \sum_{\{\sigma=\pm 1\}} e^{\beta H \sum_i \sigma_i} \exp(\beta J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - \beta(H + h) \sum_i \sigma_i) \quad (3.9)$$

$$= \langle \exp(\beta J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - \beta(H + h) \sum_i \sigma_i) \rangle_H Z_H \quad (3.10)$$

où  $H$  est un champ arbitraire,  $Z_H = \sum_{\{\sigma=\pm 1\}} \prod_i e^{\beta H \sum_i \sigma_i} = (2 \cosh \beta H)^N$  et  $\langle X \rangle_H$  désigne la moyenne sur les  $\sigma_i = \pm 1$  avec le poids factorisé  $\prod_i e^{\beta H \sum_i \sigma_i}$  :  $\langle X \rangle_H = \frac{1}{Z_H} \sum_{\{\sigma=\pm 1\}} \prod_i e^{\beta H \sum_i \sigma_i} X$ .

(iii) Montrer que  $M := \langle \sigma \rangle_H = \tanh \beta H$ .

(iv) Appliquer alors (3.8) pour obtenir

$$Z_{Ising} \geq \exp\langle (\beta J \sum_{(i,j)} \sigma_i \sigma_j - \beta(H + h) \sum_i \sigma_i) \rangle_H Z_H = \exp\{N(\beta J d M^2 - \beta(H + h)M)\} (2 \cosh \beta H)^N$$

soit  $\frac{1}{N} \log Z_{Ising} \geq (\beta J d M^2 - \beta(H + h)M) + \log(2 \cosh \beta H)$ , et cela pour tout  $H$ .

(v) Montrer que le maximum du membre de droite de cette inégalité est atteint pour  $H$  satisfaisant (3.7), l'équation familière du champ moyen obtenue plus haut. Le champ moyen fournit



donc une borne inférieure à l'énergie libre (au signe près, selon les conventions)  $\log Z_{\text{Ising}}$ .

3. Voici une troisième méthode qui permet le calcul systématique de corrections au champ moyen. On remplace d'abord la somme sur les variables discrètes  $\sigma = \pm 1$  par une intégrale continue, qu'on traitera par la méthode du col, à justifier a posteriori.

i) Montrer qu'on peut écrire pour toute fonction  $f(\cdot)$  d'un spin

$$\sum_{\sigma=\pm 1} f(\sigma) = \int_{-\infty}^{\infty} du \int_{-\infty}^{i\infty} \frac{d\alpha}{2\pi i} \sum_{\sigma=\pm 1} e^{(\sigma-u)\alpha} f(u) = \int_{-\infty}^{\infty} du \int_{-\infty}^{i\infty} \frac{d\alpha}{2\pi i} e^{\omega(\alpha)-u\alpha} f(u)$$

où  $\omega(\alpha) := \log \sum_{\sigma=\pm 1} e^{\sigma\alpha} = \log(2 \cosh \alpha)$ .

Appliquer cela à la fonction de partition du modèle d'Ising sur un réseau hypercubique à  $d$  dimensions (en champ  $h$  nul)

$$Z_{\text{Ising}} = \prod_i \int_{-\infty}^{\infty} du_i \int_{-\infty}^{i\infty} \frac{d\alpha_i}{2\pi i} e^{\sum_i \omega(\alpha_i) - u_i \alpha_i + \beta J \sum_{\langle i,j \rangle} u_i u_j} .$$

(ii) Écrire l'équation de stationnarité de l'argument de l'exponentielle (méthode du col), soit

$$u_i = \tanh \alpha_i, \quad \beta J \sum_{j:i} u_j = \alpha_i$$

dont on cherche des solutions uniformes, indépendantes du site  $i$ . Montrer qu'on retrouve bien les équations de la méthode précédente. La méthode du col utilisée est justifiée pour  $d \rightarrow \infty$ , (et  $\alpha$  d'ordre  $d$ ), puisqu'alors les trois termes de l'exponentielle sont grands et d'ordre  $d$ . L'avantage de cette approche est qu'on a maintenant une manière systématique de calculer des corrections, en développant au voisinage du col et en intégrant en présence du terme gaussien. Les corrections successives forment un développement en puissances inverses de  $d$ .

Retenons que la méthode du champ moyen est justifiée pour  $d$  grand. En fait, on démontre dans l'approche du groupe de renormalisation que les exposants critiques calculés dans l'approximation du champ moyen sont exacts pour  $d > 4$  (pour le modèle d'Ising). La dimension 4 est appelée *dimension critique supérieure*.

