

COMMENT DÉFINIT-ON LA NOTION DE TRANSITION DE PHASE ?

Flora Koukiou

Un des buts de la physique statistique est d'expliquer le comportement macroscopique de la matière à partir de sa structure microscopique. Les transitions de phase (glace-eau, liquide-vapeur, ferromagnétisme-paramagnétisme, etc.) sont des phénomènes qui ont attiré l'intérêt des physiciens, et plus récemment des mathématiciens, depuis plus d'un siècle. Leur définition et leur étude à partir des modèles mathématiques simples constituent l'objet principal de la physique statistique de l'équilibre. La formulation mathématique de la transition de phase a été initié par Dobrushin, Lanford et Ruelle grâce au concept des mesures de Gibbs. L'idée maîtresse est que l'état d'équilibre d'un système peut être défini par la loi conjointe d'une famille infinie de variables aléatoires, correspondant à la description statistique d'un système macroscopique - supposé infini pour simplifier - compatible avec certaines probabilités conditionnelles à volume fini. Cette spécification en termes de probabilités conditionnelles à volume fini est réminiscente du théorème d'extension d'une mesure de probabilité de Kolmogorov à partir des marginales à volume fini ; contrairement à la construction de Kolmogorov qui est assez rigide et garantit l'unicité de la mesure étendue à l'espace infini, la spécification de probabilités conditionnelles fini-dimensionnelles est plus souple : il peut ne pas exister de mesure limite ou bien il peut y avoir une unique mesure limite ou une infinité de mesures limites. L'étude de l'ensemble de mesures limites et sa structure est l'objet des recherches actuelles.

Dans la suite, nous allons définir la transition de phase partir d'un modèle simple. Un système physique est constitué d'un grand nombre (1 cm^3 d'eau contient environ 10^{23} molécules d'eau) de composantes qui interagissent entre elles. On va alors le modéliser par un ensemble discret $S \subset \mathbb{Z}^d$ où $d \leq 1$, supposé fini au début. A la fin de l'étude cet ensemble S envahira tout le réseau \mathbb{Z}^d . Chaque élément $i \in S$ correspond à une composante (si le système est un morceau de fer par exemple, chaque élément désignera un atome). Un autre ensemble E décrira les états possibles de chaque composante. Si on caractérise chaque atome par l'orientation de son spin, E contiendra toutes les orientations possibles. Pour simplifier on choisira $E = \{-1, +1\}$ qui correspond aux orientations d'un spin vers le "bas" (-1) ou vers le "haut" (+1). On appellera *configuration* $\omega = (\omega_i)_{i \in S}$ un élément de l'espace produit $\Omega = E^S$, *l'espace des configurations*. Pour tenir compte des interactions entre les composantes du système, on associera à chaque configuration ω une fonction réelle $H : \Omega \rightarrow \mathbb{R}$, *l'hamiltonien*. Un exemple typique est

$$H(\omega) = - \sum_{\{i,j\} \in S} J_{ij} \omega_i \omega_j - h \sum_{i \in S} \omega_i$$

Le premier terme $-J_{ij} \omega_i \omega_j$ représente l'interaction entre les spins ω_i et ω_j . Si $J_{ij} = J_{ji} > 0$, cette interaction atteint son minimum si $\omega_i = \omega_j$. Le paramètre $h \in \mathbb{R}$ représente l'action d'une force externe agissant sur le système. Ainsi défini, H représente une interaction ferromagnétique. L'état d'équilibre du système sera décrit par une mesure de probabilité sur Ω . On introduit une probabilité μ sur Ω , appelée *mesure de Gibbs* à volume fini, par $\mu(d\omega) = Z^{-1} \exp(-\beta H(\omega)) d\omega$ où $d\omega$ est une mesure a priori sur Ω et $Z > 0$ une constante de normalisation. Le coefficient β est relié à la température T et à la constante de Boltzmann k par l'équation $\beta = \frac{1}{kT}$. Dans la pratique, et pour étudier les propriétés macroscopiques qui sont intrinsèques aux matériaux et indépendantes de la forme géométrique de l'échantillon utilisé, on étudie un système idéalisé où le nombre de composantes est infini. On parle alors de la *limite thermodynamique*. Evidemment, ce passage à la limite de volume infini pose certains problèmes de définition des objets mathématiques. Ainsi, S sera remplacé par le réseau \mathbb{Z}^d en dimension $d (d \geq 1)$. Dans ce cas, la définition de l'état d'équilibre donnée plus haut doit admettre une extension au cas où $\Omega = E^d$. Ceci peut être fait à l'aide des probabilités conditionnelles. Pour chaque sous-système fini $\Lambda \subset S$, on va fixer la configuration sur Λ^c . Si $\omega \in E^\Lambda$ et $\psi \in E^{\Lambda^c}$ on notera $\omega\psi$ la configuration sur S qui coïncide avec ω sur Λ et avec ψ sur Λ^c . La probabilité que la configuration dans Λ soit ω , étant donné qu'elle est ψ à l'extérieur, sera donnée par la probabilité conditionnelle

$$\mu(\omega|\psi) = Z_\Lambda(\psi)^{-1} \exp(-\beta H_\Lambda(\omega\psi))$$

où $H_\Lambda(\omega\psi) = \sum_{\{i,j\} \subset \Lambda} J_{ij} \omega_i \omega_j - \sum_{i \in \Lambda} \omega_i (h + \sum_{j \in S \setminus \Lambda} J_{ij} \psi_j)$, tient compte de l'interaction de Λ avec son environnement. La famille de ces probabilités conditionnelles constitue ce que l'on appelle une *spécification gibbsienne*. Une mesure de Gibbs (ou un champ aléatoire gibbsien), est une mesure de probabilité sur $\Omega = E^{\mathbb{Z}^d}$ dont les probabilités conditionnelles sont gibbsiennes.

Le phénomène de transition de phase est défini par la non-unicité de la mesure de Gibbs pour une spécification donnée. Une autre définition de transition de phase qui n'est pas exprimée par la non-unicité de la mesure de Gibbs est la transition Kosterlitz-Thouless qui est caractérisée par un changement de la décroissance de corrélations.

Références

- [1] Georgii H-O : *Gibbs measures and phase transitions*, de Gruyter, Berlin 1988
- [2] Preston Ch. : *Random fields*, Lecture Notes in Mathematics 534, Springer-Verlag, Berlin 1976

- [3] Ruelle D. : *Thermodynamic formalism*, Encyclopedia of Mathematics and its Applications, vol. 5, Addison-Wesley, London 1978.
- [4] Simon B. : *The statistical mechanics of lattice gases*, Princeton University Press, Princeton 1994.

Flora Koukiou

Département de Physique Université de Cergy-Pontoise F-95806 Cergy-Pontoise
koukiou@u-Cergy.fr
CPHT, Ecole Polytechnique, 91128 Palaiseau