

Table des matières

Introduction	3
1 Rappels théoriques sur les interfaces	7
1.1 Statistical field theory	10
1.2 Théorie de champ moyen	15
1.3 Taille finie et effet Casimir critique	19
1.4 Modèles d'interface	20
1.4.1 Paramètre d'ordre non conservé	21
1.4.2 Paramètre d'ordre conservé	23
1.5 Cisaillement d'une interface	24
2 Modèle Solid-On-Solid	27
2.1 Hamiltonien	27
2.2 Matrice de Transfert	29
2.3 Stabilité de l'interface	30
2.4 Ensemble canonique	32
2.5 Indiscernabilité des particules : Particle-Over-Particle	33
3 Simulations	35
3.1 Algorithme de Metropolis	35
3.1.1 Ensemble grand-canonique : algorithme de Glauber	37
3.1.2 Ensemble canonique : algorithme de Kasawaki	38
3.1.3 Dynamique hors-équilibre	39
3.1.4 Modèle POP	40
4 Résultats pour le modèle SOS	41
4.1 Différences Glauber/Kawasaki	41
4.2 Effet du cisaillement	41

4.2.1	Différences avec le modèle d'Ising	43
4.3	Cisaillement avec deux types de particules	43
4.3.1	Discussion about the Gaussian model	46
4.4	Interpretation	46
5	Champ magnétique h_i	49
5.1	Modèle gaussien	49
5.2	Distribution de l'interface	50
5.3	Fonction de corrélation	54
5.4	Conclusion	56
6	Modèle Particle-Over-Particle	59
6.1	Particules indiscernables	59
6.2	Avec le SOS	59
6.2.1	Modifications de l'algorithme Metropolis	60
6.3	Résultats modèle A	60
6.4	Résultats modèle B	60
6.5	Résultats modèle A+B	60
7	A+B POP model : la totale	61
7.1	Le modèle C=A+B	61
7.2	Effective interface dynamics	64
7.3	A model of active interfaces	69
7.4	Conclusions	71
7.5	Acknowledgements	72
.1	Evaluating Fourier integrals	73
	Conclusion et perspectives	75

Introduction

Chaque système statistique est décrit par un paramètre d'ordre, que ce soit la magnétisation moyenne d'un milieu aimanté ou de l'orientation moyenne des polymères par exemple. Dans ces systèmes, on appelle phase un milieu homogène selon le paramètre d'ordre. Les transitions de phase d'un système, où une phase homogène se sépare en plusieurs phases différentes, possèdent des propriétés exceptionnelles. Lors d'une transition de phase continue, la largeur de l'interface entre deux phases diverge jusqu'à atteindre une taille macroscopique. Ce confinement de l'interface mène à des effets de taille finie, notamment l'effet Casimir critique.

L'étude des propriétés statistiques des interfaces peut se faire via différentes approches, toutes complémentaires. Les modèles sur réseau, et plus précisément le modèle d'Ising, sont particulièrement adaptés aux simulations numériques, mais plus difficiles à traiter analytiquement à cause du trop grand nombre d'interactions présentes dans le système. Une manière de diminuer les interactions est de réduire la dimensionnalité du système à une dimension, ce qui nous permet d'utiliser le formalisme des matrices de transfert. À cet effet, le modèle Solid-On-Solid a été énormément étudié dans les années 80-90 pour sa simplicité. L'interface peut également être assimilée à un marcheur brownien qui, au lieu de bouger dans le temps, se meut dans l'espace. Ainsi, les équations de Schrödinger et les équations du mouvement de Langevin permettent de décrire les fluctuations d'une interface grâce au formalisme quantique ou stochastique. Cette méthode s'appelle la théorie des ondes capillaires et permet la résolution d'un système très analogue aux modèles SOS, en utilisant un formalisme très similaire aux matrices de transfert. La dernière méthode que nous aborderons dans cette thèse est celle du champ moyen, c'est-à-dire l'étude des propriétés de deux phases grâce aux équations de Landau-Ginzburg. Cette méthode a l'avantage d'offrir des calculs analytiques relativement faciles et permet d'obtenir la forme des fonctions de corrélation à plusieurs points ainsi que les longueurs de corrélation. Néanmoins, la vérification des résultats via les simulations numériques, qui nous permettrait de mettre des grandeurs mésoscopiques

comme la tension superficielle ou la longueur capillaire en relation avec les grandeurs microscopiques du modèle d'Ising, est assez difficile, et nous éviterons dans la présente thèse le rapprochement.

L'étude de l'effet Casimir critique - qui est un effet de taille finie - revient au final à étudier les propriétés statistiques d'une interface, et à voir comment elles sont modifiées lorsqu'il existe des conditions aux bords. Cependant, les propriétés d'une interface varient également lorsqu'elle est mise hors-équilibre, par exemple via une force du style cisaillement, qui représente beaucoup de cas expérimentaux classiques. Nous nous intéressons ici particulièrement à la différence entre les états d'équilibre et hors-équilibre, pour lesquels les formalismes sont différents mais dont les simulations numériques sont similaires. La présence d'un système hors-équilibre pose également plein de questions sur la nature de l'ensemble thermodynamique que l'on se place, et nous éclaire sur les différences entre l'ensemble canonique et grand-canonique, et également entre des particules discernables et indiscernables.

Le manuscrit se décompose de la manière suivante :

- Le premier chapitre introduit les différentes approches historiques sur l'étude des interfaces, en s'attardant sur les principaux résultats obtenus dans la littérature pour des interfaces à l'équilibre, puis hors-équilibre
- Le second chapitre introduit le modèle Solid-On-Solid, qui est une approximation 1D à très basse température du modèle d'Ising en 2D. Nous y parlerons du formalisme des matrices de transfert, des principaux résultats obtenus dans ce modèle et de quelques précisions fondamentales sur les différents ensembles thermodynamiques dans lesquels on peut étudier nos systèmes
- Nous présentons dans le troisième chapitre l'algorithme de Monte Carlo-Metropolis, un outil puissant pour explorer l'espace des phases et calculer numériquement la fonction de partition de nos systèmes
- Dans le quatrième chapitre, l'étude d'un système SOS - analogue à la croissance d'un cristal - via une méthode d'intégration sur les potentiels chimiques nous permet d'obtenir l'énergie libre, et ainsi l'effet Casimir. Cette étude se termine par l'ajout du cisaillement.
- Dans le cinquième chapitre, nous étudions un modèle avec un champ magnétique caractéristique des expériences dans lesquelles on force une phase d'un fluide binaire dans une autre grâce à une pression de radiation exercée par un laser
- Un nouveau modèle découlant des considérations du second chapitre peut être créé de la même manière que le modèle SOS, en prenant en compte l'entropie. Ce nouveau modèle, baptisé Particles-Over-Particle, fait l'objet du sixième chapitre

- Le septième chapitre reprend les calculs d’une publication récente de notre équipe sur un modèle de champ moyen où l’on mélange deux types de particules appartenant à des ensembles thermodynamiques différents, sous l’effet d’un cisaillement uniforme

La présente thèse a été rendue possible grâce à l’ANR FISICS, le Laboratoire Onde Matière d’Aquitaine de l’Université de Bordeaux, le Laboratoire de Physique de l’ENS Lyon et le Mésocentre de Calcul Intensif d’Aquitaine sur lesquelles ont été faites les simulations numériques. Je remercie particulièrement Josiane Parzych (LOMA) et Laurence Mauduit (ENS LYON) pour le suivi administratif, ainsi que Nguyen Ky Nguyen (MCIA) pour l’aide technique.

Chapitre 1

Rappels théoriques sur les interfaces

Dans ce chapitre nous analysons la dynamique des systèmes statistiques. L'analyse nous permettra de comprendre comment les transitions de phase, notamment certains systèmes subissant une séparation de phase à la transition. L'exemple le plus connu est le modèle d'Ising en absence de champ magnétique, ayant la magnétisation comme paramètre d'ordre de la transition. Dans la phase haute température le système est homogène et sa magnétisation est nulle, tandis qu'en dessous de la température critique, dans le cas où le paramètre d'ordre est conservé (par exemple une dynamique de Kawasaki ou modèle B), le système va localement se séparer en deux phases de magnétisation moyenne opposée séparées par une interface minimisant l'énergie de surface entre les deux phases. Dans le cas où le paramètre d'ordre n'est pas conservé (par exemple une dynamique de Glauber ou modèle A), une rupture spontanée de symétrie fera qu'une des deux phases englobe l'autre, au point de recouvrir tout le système (voir Fig 1.1). Dans une transition de phase continue où le point critique est atteint depuis l'état désordonné vers l'état ordonné, les domaines de phase égales ont pour taille la longueur de corrélation du système. Dans les transitions de phase telles que celles du modèle d'Ising, la longueur de corrélation diverge lorsque l'on s'approche de la température critique T_C . En présence d'un système infini, la longueur de corrélation devient infinie, ce qui implique un que le système prend un temps infini pour atteindre l'équilibre thermodynamique. Ce processus de croissance des domaines depuis s'appelle le *coarsening* et la théorie de la cinétique d'ordre des phases est la théorie qui a été développée pour comprendre le coarsening. La thèse s'appuie sur les travaux de cette théorie pour déterminer les propriétés statistiques (telles que la position moyenne et sa tension superficielle) des interfaces entre

deux phases coexistantes.

Tandis que l'Hamiltonien d'un système permet d'explorer toutes les configurations d'équilibre possibles, la dynamique du coarsening ne peut être étudiée qu'en construisant un modèle qui explique l'évolution de l'état du système en fonction du temps. Nous verrons tout au long de cette thèse comment la conservation ou non du paramètre d'ordre influe énormément sur la dynamique. Pour de plus complètes informations, se référer à [1, 2, 3, 4].

Une connaissance parfaite de la fonction de partition nécessite de connaître en tout temps la position de toutes la particules. Les appareils de mesure possèdent tous une résolution spatiale et temporelle, c'est-à-dire qu'ils mesurent l'état moyen de toutes les particules dans un volume et dans un laps de temps donné. Plus la résolution des appareils est bonne, et plus la mesure de la fonction de partition est précise. Concrètement, l'appareil de mesure nous donne un champ - par exemple de densité - $\phi(\mathbf{x}, t)$ de notre système, qui correspond à l'intégration sur un petit volume autour de \mathbf{x} et une petite durée de temps autour de x de t .

Considérons un système dans l'ensemble canonique d'Hamiltonien $H(\mathbf{q})$ où les \mathbf{q}_i ($i \in [0, N]$) représentent un nombre fini de degrés de liberté. La fonction de partition est donnée par

$$Z = \int d\mathbf{q} e^{-\beta H(\mathbf{q})} \quad (1.1)$$

avec la probabilité que le système se retrouve dans l'état \mathbf{q} égale à

$$P_{eq}(\mathbf{q}) = \frac{e^{-\beta H(\mathbf{q})}}{Z} \quad (1.2)$$

À cause du trop grand nombre de degrés de libertés, la fonction de partition est rarement calculable analytiquement. Dans la limite $\beta \rightarrow \infty$ - c'est-à-dire la limite où la probabilité de trouver la configuration du système minimisant le plus l'énergie - l'intégrale peut s'approcher par la méthode de Laplace pour l'évaluation des intégrales

$$Z_{MF} = e^{-\beta H(\mathbf{q}^*)} \quad (1.3)$$

Le champ \mathbf{q}^* est le champ qui minimise H dont les degrés de liberté sont déterminés par

$$\left. \frac{\partial H}{\partial q_i} \right|_{\mathbf{q}=\mathbf{q}^*} = 0. \quad (1.4)$$

Ce champ \mathbf{q}^* est le **champ moyen**, puisqu'il est le champ le plus probable. Dans cette

approximation de champ moyen, toute observable est donnée par

$$\langle f(\mathbf{q}) \rangle = f(\mathbf{q}^*) \quad (1.5)$$

We now consider how one can model dynamics of such systems. We will look for a Langevin equation which is chosen to give the correct equilibrium Gibbs-Boltzmann distribution. We write

$$\frac{dq_i}{dt} = -L_{ij} \frac{\partial H(\mathbf{q})}{\partial q_j} + \eta_i(t), \quad (1.6)$$

where L_{ij} is a matrix which discuss later and $\eta_i(t)$ is zero mean Gaussian white noise with correlation function

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = \Gamma_{ij} \delta(t - t'), \quad (1.7)$$

The Gaussian white noise represents the effects of thermal fluctuations on the system we assume that the correlation time of these fluctuations is extremely short with respect to the dynamics of the degrees of freedom q_i (in fact in critical systems the dynamics becomes very slow, critical slowing down, and this approximation becomes better and better as one approaches the critical point). As Eq. (1.7) is for a correlation function the matrix Γ_{ij} must be symmetric and cannot have any negative eigenvalues.

In the absence of noise or thermal fluctuations, so at zero temperature, the system will simply minimise its energy. Therefore if

$$\frac{\partial H(\mathbf{q})}{\partial q_j} = 0, \quad (1.8)$$

with no noise we have $\frac{dq_i}{dt} = 0$, that is to say it is the term $\frac{\partial H(\mathbf{q})}{\partial q_j}$ that drives the dynamics if there is no noise. As long as the matrix L_{ij}^{-1} exists the zero temperature dynamics will take the system to the local minimum of H and to the absolute minimum if there are no metastable configurations.

Under these assumptions, the Fokker-Planck equation for the probability density function of the degrees of freedom is

$$\frac{\partial p(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial q_i} \left[\frac{1}{2} \Gamma_{ij} \frac{\partial p(\mathbf{q}, t)}{\partial q_j} + p(\mathbf{q}, t) L_{ij} \frac{\partial H(\mathbf{q})}{\partial q_j} \right]. \quad (1.9)$$

This can be written as

$$\frac{\partial p(\mathbf{q}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q_i} J_i(\mathbf{q}, t) = 0, \quad (1.10)$$

where the $\mathbf{J}(\mathbf{q}, t)$ is the probability current. We now insist that the system is in equilibrium with zero current when $p(\mathbf{q}, t) = P_{eq}(\mathbf{q})$ as given by Eq. (1.2), this gives

$$\left[-\frac{\beta}{2} \Gamma_{ij} + L_{ij} \right] \frac{\partial H(\mathbf{q})}{\partial q_j}, \quad (1.11)$$

and this holds for any choice of H is we chose.

$$\Gamma_{ij} = 2T L_{ij} \quad (1.12)$$

where we have taken units where Boltzmann's constant $k_B = 1$.

1.1 Statistical field theory

We now consider a system with Hamiltonian $H[\phi]$ which depends on a continuous field $\phi(\mathbf{x})$. The partition function is given by a functional integral

$$Z = \int d[\phi] \exp(-\beta H[\phi]), \quad (1.13)$$

the functional integral over all possible fields ϕ can be taken as a limit where ϕ is defined at a finite number of points on a lattice and then the lattice spacing is taken to zero.

The mean field approximation to partition function is then given by

$$Z_{MF} = \exp(-\beta H[\phi_{MF}]), \quad (1.14)$$

where ϕ_{MF} is the mean field solution which minimises H . The definition of a functional derivative of a functional

$$F[\phi + \delta\phi] - F[\phi] = \int d\mathbf{x} \frac{\delta F}{\delta\phi(\mathbf{x})} \delta\phi(\mathbf{x}). \quad (1.15)$$

Therefore if a field ϕ maximises H we must have

$$\frac{\delta H}{\delta\phi(\mathbf{x})} = 0. \quad (1.16)$$

We now consider the standard Landau-Ginzburg Hamiltonian describing Ising like systems where

$$H[\phi] = \int d\mathbf{x} \frac{\kappa}{2} [\nabla \phi]^2 + V(\phi). \quad (1.17)$$

The first term represents an energetic cost of varying the field ϕ while the second potential term has two minima at $\phi = \pm\phi_c$, and without loss of generality we can chose $V(\phi_c) = V(-\phi_c)$, in the low temperature or phase separated phase and a single minimum at $\phi = 0$ in the high temperature phase. The standard, so called, ϕ^4 form is

$$V(\phi) = \frac{1}{2}m^2\phi^2 + \frac{\lambda}{4!}\phi^4, \quad (1.18)$$

where

$$m^2 = T - T_c. \quad (1.19)$$

It is easy to see that

$$\frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} = -\kappa \nabla^2 \phi(\mathbf{x}) + V'(\phi). \quad (1.20)$$

If there is non constraint on the system if can simply chose $\phi(\mathbf{x}) = \phi_c$ or $\phi(\mathbf{x}) = -\phi_c$ everywhere which corresponds to a free energy $F = H[\phi_c] = 0$. However in a system with a conserved order parameter

$$\int d\mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) = 0, \quad (1.21)$$

then the solutions $\phi = \pm\phi_c$ cannot hold. In this case the system will separate into a two phases where $\phi(\mathbf{x}) = \pm\phi_c$. We therefore choose an interface at $z = 0$ where and take $\phi(\mathbf{x}) = \phi_K(z)$ (K standing for kink as it is known as the kink solution in the literature) where $\lim_{z \rightarrow \infty} \phi_K = -\phi_c$ and $\lim_{z \rightarrow -\infty} \phi_K = \phi_c$. We therefore find from Eq. (1.20) that

$$-\kappa \frac{d^2}{dz^2} \phi_K(z) + V'(\phi_K) = 0 \quad (1.22)$$

This equation can be solved for the potential in Eq. (1.18) (*you should do it and fill in the details*) but even without knowing the explicit solution we can write

$$H[\phi_K] = A \int dz \frac{\kappa}{2} \left(\frac{d\phi_K(z)}{dz} \right)^2 + V(\phi_K(z)), \quad (1.23)$$

where A is the surface area of the system in the plane perpendicular to the direction z . However if we multiply Eq. (1.22) by $d\phi/dz$ and integrate we find

$$-\frac{\kappa}{2}\left(\frac{d\phi_K}{dz}\right)^2 + V(\phi) = C, \quad (1.24)$$

where C is a constant. However as $\phi_K(z) \rightarrow \pm\phi_c$ as $z \rightarrow \pm\infty$ and $V(\pm\phi_c) = 0$ we find that $C = 0$. Using this we obtain

$$H[\phi_K] = A \int dz \kappa \left(\frac{d\phi_K(z)}{dz} \right)^2. \quad (1.25)$$

If the interface has a free energy per unit area of σ then we have the Cahn-Hillard estimate of the surface tension

$$\sigma = \int dz \kappa \left(\frac{d\phi_K(z)}{dz} \right)^2. \quad (1.26)$$

Now we return to dynamics. If we compare with systems with a discrete number of variables we should have a Langevin equation of the form

$$\frac{\partial\phi(\mathbf{x})}{\partial t} = -L \frac{\delta H}{\delta\phi(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (1.27)$$

The white noise correlator should have the form

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t) \rangle = \delta(t - t') \Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{x}'), \quad (1.28)$$

where here $\Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{x}')$ is an operator (before it was a matrix) defined by its action on functions f as

$$\Gamma f(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x}' \Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{x}') f(\mathbf{x}'), \quad (1.29)$$

and L is also an operator with

$$L f(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x}' L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') f(\mathbf{x}'), \quad (1.30)$$

Following the same arguments for systems with a finite number of degrees of freedom we thus have the relation

$$\Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 2TL(\mathbf{x}, \mathbf{x}'). \quad (1.31)$$

The simplest form of dynamics is given by $L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ which gives the model A dynamics

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = -\alpha \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (1.32)$$

with the noise correlator

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t) \rangle = 2T\alpha \delta(t - t') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (1.33)$$

The average value of ϕ

$$\bar{\phi}(t) = \frac{1}{V} \int d\mathbf{x} \phi(\mathbf{x}, t), \quad (1.34)$$

is clearly not generally conserved by this dynamics.

Model B dynamics amounts to choosing

$$L(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -D \nabla^2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'), \quad (1.35)$$

here the fact that L is a positive semi-definite operator can be seen by taking its Fourier transform. The evolution equation here is

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = D \nabla^2 \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{x}, t), \quad (1.36)$$

and where

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t) \rangle = -2TD \delta(t - t') \nabla^2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (1.37)$$

We notice that if we introduce the vectorial white noise with components $\eta_i(\mathbf{x}, t)$ such that

$$\langle \eta_i(\mathbf{x}, t) \eta_j(\mathbf{x}', t') \rangle = \delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \quad (1.38)$$

where $\delta_{ij} = 1$ for $i = j$ and is zero otherwise, we can write

$$\eta(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t), \quad (1.39)$$

as one can verify the two noises have the same correlation function. In this way Eq.

(1.36) becomes

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = \nabla \cdot [D \nabla \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t)]. \quad (1.40)$$

From this it is easy to see that the order parameter is conserved - thus model B describes conserved phase ordering dynamics.

The above argument is rather phenomenological and a microscopic derivation of conserved order parameter dynamics gives the so called Dean-Kawasaki equation. Model B is a simplified form of this exact equation - you could say more.

Prenons un système composé de deux types de particules A et B qui se repoussent mutuellement, comme un ensemble liquide/gaz ou un fluide binaire du genre vinaigrette. À chaque point de l'espace x on peut associer la présence de la particule la plus proche par la fonction $n(x, t) = A$ ou B . Ici, les particules sont supposées indiscernables entre elles. Dans le cas où les particules seraient discernables, ce qui n'est jamais le cas dans les expériences mais l'est dans les simulations numériques, il est plus correct d'invertir la fonction par $n_i(t) = x$, où i est le label de chaque particule, qu'elle soit de type A ou B. Il est plus convenable que la fonction $n(x, t)$ donne un nombre plutôt qu'un type de particules. Nous supposons que les deux types de particules A et B se comportent comme des pôles électriques de signe opposés, puisque qu'elles s'attirent entre particules du même type mais se repoussent si elles ne le sont pas. Le module de la force d'interaction entre particules peut toujours être factorisée en dehors de la fonction de partition, si bien que l'on peut poser que

$$n(x, t) = \begin{cases} -1 & \text{si particule A} \\ 1 & \text{si particule B} \end{cases} \quad (1.41)$$

Une fois définie cette fonction, un paramètre d'ordre convenable est la magnétisation totale du système

$$m(t) = \langle n(x, t) \rangle_x = \frac{1}{V} \int d^d x n(x, t) \quad (1.42)$$

Les particules ont la possibilité de réagir par la réaction chimique $A \leftrightarrow B$ dans un système chimique, par inversion de spin dans un système ferromagnétique, ou par échange avec un réservoir si l'échelle de temps de l'échange est bien inférieure à l'échelle de temps du système. Dans tous ces cas, le paramètre d'ordre $m(t)$ n'est pas conservé et, si nous sommes à l'équilibre thermodynamique, fluctue autour d'une valeur moyenne m . Dans

la classification de Hohenberg et Halperin[1], ces systèmes appartiennent au **modèle A**, qui décrit les systèmes dans l'ensemble grand-canonique.

Les particules peuvent également diffuser par échange de place entre deux particules voisines, et aucune particule ne peut être créée ou détruite. Le paramètre d'ordre est maintenant conservé dans le temps. Il est possible d'imposer, via les conditions initiales, un paramètre d'ordre à l'équilibre thermodynamique canonique différent de celui que l'on aurait dans l'ensemble grand-canonique. Ces systèmes sont décrits par le **modèle B**.

Dans ce chapitre, nous introduisons les principaux résultats de la physique des interfaces dans chaque ensemble thermodynamique, ainsi que les principales méthodes d'analyse.

1.2 Théorie de champ moyen

Une connaissance parfaite de la fonction de partition nécessite de connaître en tout temps la position de toutes la particules. Les appareils de mesure possèdent tous une résolution spatiale et temporelle, c'est-à-dire qu'ils mesurent l'état moyen de toutes les particules dans un volume et dans un laps de temps donné. Plus la résolution des appareils est bonne, et plus la mesure de la fonction de partition est précise. Concrètement, l'appareil de mesure nous donne un champ moyen $\phi(x, t)$ de notre système, qui correspond à l'intégration sur un petit volume autour de x et une petite durée de temps autour de t de $n(x, t)$. Puisque ce champ moyen représente une densité, de particules A et B de valeur -1 et $+1$ respectivement, la fonction ϕ a pour valeurs dans $[-1, 1]$. Par exemple, on peut dire que si à un endroit et à un temps donné, il n'y que des particules de type A , $\phi(x, t) = -1$, tandis que $\phi(r, t) = +1$ pour les particules B . Le paramètre d'ordre est maintenant donné par

$$m(t) = \langle \phi(x, t) \rangle_x = \int d^d x \phi(x, t) \quad (1.43)$$

À température non nulle, les fluctuations thermiques vont créer un système non-uniforme possédant des clusters possédant une longueur de corrélation ξ . L'énergie d'interaction de ces clusters est donné par l'Hamiltonien de Ginzburg-Landau[5, § 45]

$$H_0 = \int d^d x \frac{\kappa}{2} (\nabla \phi)^2 + V(\phi) = \int d^d x \frac{\sigma}{2} (\nabla \phi)^2 + \frac{\lambda}{2} (\phi^2 - 1)^2 \quad (1.44)$$

où le premier terme correspond à la tension superficielle cherchant à diminuer les va-

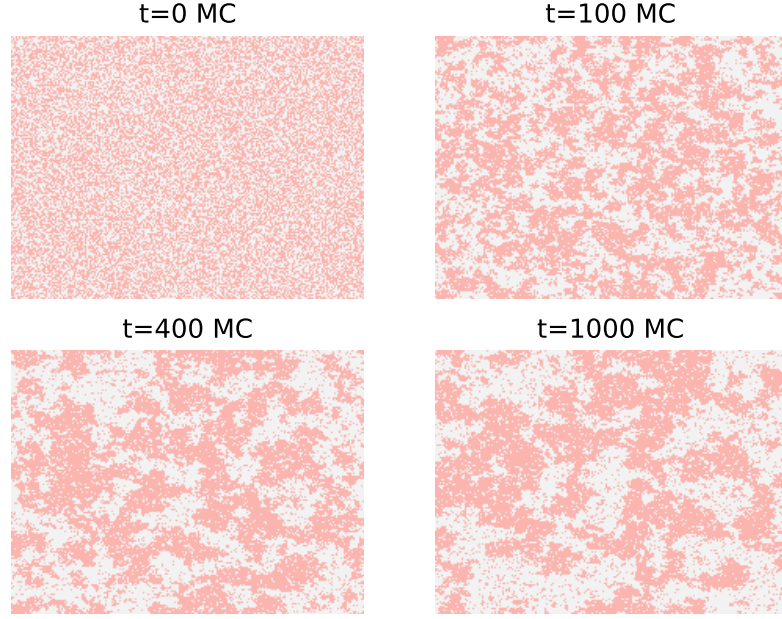


FIGURE 1.1 – Phénomène d’aggrégation à partir d’un refroidissement (*quench*) dans un modèle d’Ising de $T = \infty$ à $T = T_C$ pour différents temps en étapes de Monte Carlo, pour un système 600×600 avec une dynamique non-conservée de Glauber.

riations au sein du système, et le second terme est un potentiel en double puit $V(\phi) = \frac{\lambda}{2}(\phi^2 - 1)^2$?? simulant une interaction repoussante entre les deux types de particules. Ce terme explique la création de clusters de la figure 1.1.

Dans les expériences en laboratoire, les systèmes sont souvent couplés à des champs magnétiques ou chimiques $h(x)$ d’Hamiltonien

$$H_1 = - \int d^d x h(x) \phi(x) \quad (1.45)$$

qui induit un changement de stabilité entre les phases, le signe négatif étant pour que le système s’aligne sur le champ.

La fonction de partition du système s’écrit

$$\mathcal{Z} = \int D[\phi] e^{-\beta(H)} \quad (1.46)$$

avec $H = H_0 + H_1$. Dans le cas où le paramètre d’ordre est conservé avec pour valeur fixe

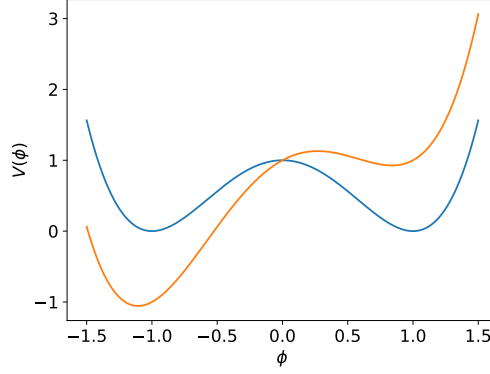


FIGURE 1.2 – Potentiel en double puits 1.44 pour $\lambda = 1$ en bleu. Le potentiel a deux positions d'équilibre stables à ± 1 , ce qui induit une séparation de phase. En orange, l'ajout d'un champ externe 1.45 constant $h\phi(x)$ rend la phase $+1$ métastable.

M , un terme supplémentaire égal à $\delta(\int d^d x \phi(x) - M)$ apparaît. Ce terme empêche toute résolution analytique de la fonction de partition, mais nous verrons plus tard certaines méthodes pour contourner ce problème. La valeur moyenne de ϕ est alors

$$\langle \phi \rangle = -\frac{\delta F}{\delta h(x)} \quad (1.47)$$

qui est nul en l'absence d'un champ extérieur $h(x)$. La fonction de corrélation à deux points de cet Hamiltonien est donné par

$$C(x, y) = \langle \phi(x) \phi(y) \rangle = \frac{k_B T}{\sigma} \int_q \frac{e^{iq(x-y)}}{\xi^{-2} + q^2} \quad (1.48)$$

et le facteur de structure par

$$S(k) = \langle \tilde{\phi}(k) \tilde{\phi}(q) \rangle = (2\pi)^d \delta_{k,q} \frac{k_B T}{\sigma} \frac{1}{\xi^{-2} + q^2} \quad (1.49)$$

où l'on voit apparaître ici la longueur de corrélation à l'équilibre ξ .

Dans l'ensemble grand-canonique, les particules ont la possibilité de se transformer en d'autres particules par réaction chimique ou par exemple inversion des spins dans un système ferromagnétique. L'équation dépendante du temps de Ginzburg-Landau (TDGL)

décrit l'évolution du champ moyen en minimisant l'énergie libre du système

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\alpha \frac{\delta H}{\delta \phi} \quad (1.50)$$

$$= \frac{\delta H}{\delta h} \frac{\delta h}{\delta \phi} \quad (1.51)$$

Le terme α est un coefficient cinétique décrivant le temps de relaxation du système. La minimisation de l'énergie tend à minimiser l'interface entre les différentes phases ainsi qu'à privilégier les phases homogènes. Dans un système infini, afin de minimiser la tension superficielle, les clusters grandissent au fur et à mesure de sorte que la longueur de corrélation ξ , qui décrit la longueur typique des phases, augmente comme $\xi(t) \propto t^{1/2}$.

Ces clusters sont définis pas l'interface¹ comme une courbe imaginaire où nous avons, en moyenne, un très fort gradient du champ ϕ . En considérant que de part et d'autre du système nous avons deux phases différentes complètement homogènes selon l'axe des z , c'est-à-dire $\phi(z \rightarrow -\infty) = -1$ et $\phi(z \rightarrow +\infty) = +1$, on peut minimiser l'énergie libre selon z afin d'obtenir le profil de l'interface. L'équation $\frac{\delta H}{\delta \phi} = 0$ nous donne une équation différentielle du second ordre en ϕ qui a pour solution selon l'axe z

$$\phi(z) = \tanh\left(\frac{1}{\xi_{\perp}}(z - h)\right) \quad (1.52)$$

où $\phi(z)$ est moyennée sur les autres variables spatiales et sur le temps, $\xi_{\perp} = (2\lambda)^{-\frac{1}{2}}$ est la largeur moyenne de l'interface, et h est la hauteur moyenne de l'interface, que l'on peut fixer comme on le désire. Bien sûr, cette équation n'est valable qu'à la frontière entre deux domaines. Proche d'une transition de phase, la longueur de corrélation de l'interface ξ_{\perp} diverge selon des exposants critiques spécifiques à chaque classe d'universalité. Pour une étude complète des exposants critiques pour chaque classe d'universalité, se référer à [6].

réécrire La tension superficielle est donnée par l'énergie apportée par l'interface comparée à un milieu parfaitement homogène, c'est-à-dire où le terme $\frac{1}{2}(\nabla\phi)^2$ de l'hamiltonien est nul. La densité d'énergie par unité de surface est donc

$$\sigma = H_{inhomogène} - H_{homogène} = \int_{-\infty}^{\infty} dz \left(\frac{\partial \phi}{\partial z} \right)^2 \quad (1.53)$$

Dans le **modèle B**, c'est-à-dire dans l'ensemble canonique, les particules ne peuvent réagir chimiquement entre elles. Avec l'agitation thermique, les particules auront cepen-

1. Dans les systèmes 1D, on retrouve le terme de mur entre deux domaines (*domain wall*).

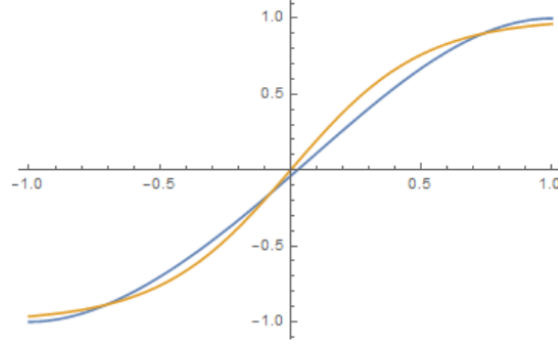


FIGURE 1.3 – Profil de l’interface pour un paramètre d’ordre conservé (orange) et non-conservé (bleu) avec les conditions aux limites $\phi(+\infty) = 1$ et $\phi(+\infty) = +1$. Pour le modèle non-conservé, la résolution de l’équation nécessite deux autres conditions supplémentaires. Nous avons donc mis $\phi(-1) = -1, \phi(1) = 1, \phi'(-1) = \phi'(1) = 0$. **relancer code en résolvant la solution conservée au lieu de $\tanh(2x)$. Besoin mathematica.**

dant tendance à se déplacer, en échangeant leur position avec celle de leur plus proche voisin. Cette dynamique locale, qui décrit les phénomènes locaux comme la diffusion, est régie par l’équation de Cahn-Hilliard[7, 8, 9]

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = D \nabla^2 \frac{\delta H}{\delta \phi} \quad (1.54)$$

où D est la diffusivité des particules. Dans cette dynamique plus lente, la taille typique des clusters est de l’ordre de $\xi(t) \propto t^{1/3}$.

L’ajout d’un terme de bruit thermique aux équations de Langevin 1.51 et 1.54 leur donne la même allure que les modèles **A** et **B** respectivement de la théorie de la dynamique au point critique[1]. Les équations précédents sont bien une approximation à $T = 0$.

1.3 Taille finie et effet Casimir critique

Sans perte de généralités en 3D, supposons un système de taille $L \times L'$ où $L < L'$. L’énergie libre $F(\beta, L, L') = -\frac{1}{\beta} \ln(Z(\beta, L, L'))$ est une grandeur extensive lorsque la longueur de corrélation est plus petite que la taille du système L . Cette énergie libre peut se décomposer entre l’énergie de chaque phase ω_{bulk} et l’énergie de tension superficielle aux interfaces ω_{surf} [10, §4]. À noter qu’à haute température dans un système complètement homogène, ce dernier terme disparaît.

Cependant, lorsque $\xi \simeq L$, la contrainte exercée sur les fluctuations thermiques par

les conditions aux bords implique une modification de l'énergie libre, créant une force les parois. Cet effet, premièrement prédit Hendrik Casimir[11], fut étendu aux systèmes critiques[12], où la divergence de la longueur de corrélation rend les expériences bien plus faciles[13].

L'énergie libre d'un tel système se décompose maintenant en

$$\Omega(\beta, L, L') = L\omega_{bulk}(\beta) + \omega_{surf}(\beta) + L\omega_{ex}(\beta, L) \quad (1.55)$$

où $\omega_{bulk}(L)$ est le surplus d'énergie libre due au confinement des fluctuations, qui devient nul dans la limite $L \rightarrow \infty$.

La force de confinement est défini par

$$F_{\perp}(\beta, L) = -\frac{1}{L'} \frac{\partial \Omega}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} = -\omega_{bulk}(\beta) - \frac{\partial \omega_{ex}(\beta, L)}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} \quad (1.56)$$

où le premier terme est la pression exercée par le système, tandis que le second terme est la force de Casimir, qui n'est pas extensive. Afin d'extraire la force de Casimir, il suffit alors de soustraire deux quantités extensives, c'est-à-dire

$$F_{\perp}(\beta, L_1) - F_{\perp}(\beta, L_2) = \frac{\partial \omega_{ex}(\beta, L_2)}{\partial L_2} \Big|_{\beta, L'} - \frac{\partial \omega_{ex}(\beta, L_1)}{\partial L_1} \Big|_{\beta, L'} \quad (1.57)$$

Puisque le surplus d'énergie est nul lorsque $L \rightarrow \infty$, on obtient que

$$F_{\perp}(\beta, L_1) - F_{\perp}(\beta, \infty) = -\frac{\partial \omega_{ex}(\beta, L_1)}{\partial L_1} \Big|_{\beta, L'} \quad (1.58)$$

Cardozo et Holdsworth[10, §5] ont développé une méthode numérique de calcul pour calculer numériquement cet excès. Nous y reviendrons plus tard.

1.4 Modèles d'interface

Dans la réalité, les phases sont extrêmement inhomogènes, avec des bulles ou des digitations qui empêchent une description dynamique aisée de l'interface. Si l'on désire étudier l'interface de ces bulles ou digitations, où localement l'interface est bien définie par une fonction d'une seule variable, l'approche du champ moyen suffit. C'est le cas par exemple des régimes d'échelle (*scaling regime*) où les interfaces se comportent toujours de façon correcte. De la même manière, ce régime d'échelle peut s'obtenir dans un milieu inhomogène en supposant qu'il est, au contraire, homogène. On suppose dans ce cas

qu'il n'y a ni digitation ni bulles d'évaporation. Dans cette approximation l'interface est parfaitement définie en un point $h(x)$ (et non dans un profil comme dans 1.52. Tous les points du champ se trouvant en bas de l'interface prennent une unique valeur strictement différente de tous les points du champ au-dessus de l'interface. Sans perte de généralité, nous pouvons séparer les variables spatiales par x pour toutes les coordonnées parallèles à l'interface et par z la coordonnée transverse. Cela se traduit par

$$\phi(z) = f(z - h(x)) \quad (1.59)$$

où $f(x > 0) = \phi_1$ et $f(x < 0) = \phi_2$. Notre système est maintenant complètement défini par l'interface $h(x)$ d'Hamiltonien

$$H = \int d^d x \frac{\sigma}{2} (\nabla h(x))^2 + V(h) \quad (1.60)$$

où le premier terme est l'analogie au premier terme dans 1.44 représentant la tension superficielle et le potentiel V fait référence au champ externe 1.45. Une interface se caractérise le plus généralement sa hauteur moyenne $\langle h(t) \rangle$ de l'interface dans l'espace, et sa fonction de corrélation parallèle à l'interface qui décrit les modes de fluctuation de l'interface (sa rugosité)

$$C_{\parallel}(r, t) = \langle h(x, t) h(x + r, t) \rangle_x - \langle h(0, t) \rangle^2 = \sum_i A_i \left(\frac{r}{\xi_i} \right) \quad (1.61)$$

Comme démontré dans la section 5, la décroissance spatiale est une somme de modes i ayant des longueurs de corrélation différentes ξ_i à décroissance exponentielle dont, dans la limite thermodynamique, seul le mode de plus basse énergie est observable. L'épaisseur de l'interface est donnée par $\omega(t) = \sqrt{C_{\parallel}(0, t)} = \sqrt{\langle h(t)^2 \rangle - \langle h(t) \rangle^2}$. Cet observable est très facilement calculable dans les simulations de Monte Carlo.

1.4.1 Paramètre d'ordre non conservé

Supposons une surface à laquelle viennent s'agréger des particules provenant d'un réservoir afin de créer un dépôt. L'interface est alors définie par la hauteur de l'aggrégat par rapport à la surface de dépôt.

En partant de 1.51 et en insérant 1.59 avec le changement de variable $u = z - h$, on a [14]

$$\frac{\partial h}{\partial t} f'(u) = \nabla^2 h f'(u) - V'(f) + \xi(x, t) \quad (1.62)$$

avec $\xi(x, t)$ un bruit blanc gaussien. En multipliant les deux côtés par $f'(u)$ et en intégrant de $-\infty$ à $+\infty$, puisque le terme $\int_{-\infty}^{\infty} V'(f)f'(u)du = 0$, on obtient l'équation d'Edwards-Wilkinson [15]

$$\frac{\partial h}{\partial t} = D + D\nabla^2 h + \eta(x, t) \quad (1.63)$$

où $\eta(x, t)$ est un bruit blanc de moyenne nulle et de corrélation

$$\langle \eta(x, t)\eta(x', t') \rangle = 2DT\delta(x - x')\delta(t - t') \quad (1.64)$$

Ici $D + \sqrt{2DT}\eta(x, t)$ est le flux de particules s'aggrégeant en fonction du temps et $D\nabla^2 h$ dépend de la forme de l'interface, favorisant ou non le dépôt de particules à certains endroits. La hauteur moyenne de l'interface varie donc comme $\langle h(t) \rangle = Dt$. En se positionnant dans le référentiel de l'interface via la transformation $h \rightarrow h + Dt$, on obtient

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nabla^2 h + \eta(x, t) \quad (1.65)$$

On remarquera la similarité entre cette équation et l'équation 1.51 en l'absence de potentiel en double puits et de champ externe.

L'ajoute d'un potentiel en double puits est cependant nécessaire afin d'obtenir une séparation de phases. L'équation KPZ[16] étudie un champ moyen en ϕ^4 , ce qui introduit des nonlinéarités indispensables pour certaines propriétés des interfaces.

$$\frac{\partial h}{\partial t} = D\nabla^2 h + \lambda(\nabla h)^2 + \eta(x, t) \quad (1.66)$$

Il est intéressant de calculer la probabilité de distribution de la hauteur de l'interface par rapport à sa moyenne. La probabilité $p(h)$ de trouver l'interface à la distande h de la hauteur moyenne est donnée par l'équation de Focker-Planck[4, p.241] associée à 1.65

$$\frac{\partial p(h, t)}{\partial t} = - \int dx \frac{\delta}{\delta h} \left[\left(D\nabla^2 h + \frac{\lambda}{2}(\nabla h)^2 \right) p \right] + \int dx \frac{\delta^2 p}{\delta^2 h} \quad (1.67)$$

Dans le régime stationnaire $\frac{\partial p(h, t)}{\partial t} = 0$ en une dimension, on trouve la distribution

$$p(h) = \frac{e^{-\frac{D}{2} \int_0^L dx (\nabla h)^2}}{Z} \quad (1.68)$$

Cette distribution gaussienne ne prend pas en compte le terme nonlinéaire de l'équation

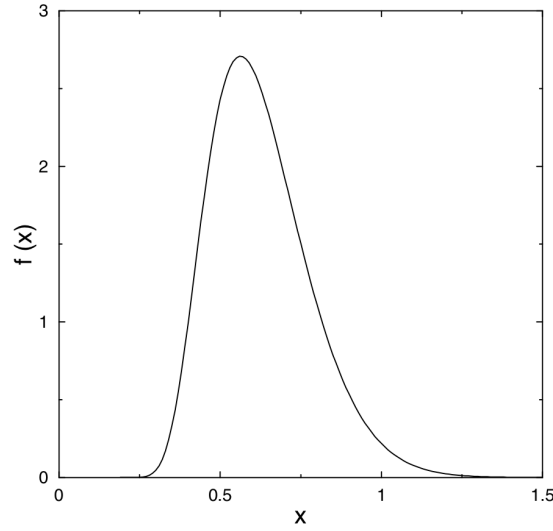


FIGURE 1.4 – Fonction $f(x)$ de la distribution des hauteurs d'une interface Edwards-Wilkinson avec des conditions aux bords périodiques[21] en 1+1 dimensions.

KPZ, qui a donc, à l'équilibre en une dimension, le même profil que l'interface EW. Des études du profil KPZ dans le régime transient [17, 18, 19, 20] donnent des résultats non symétriques, puisque l'interface bouge avec le temps.

D'autres études de l'équation EW avec des conditions aux bords périodiques $h(0) = h(L) = 0$ en 1+1 dimensions, prouve que l'hypothèse du régime d'échelle est justifié[21], puisque la distribution de l'interface est de la forme

$$p(h, L) = L^{-\frac{1}{2}} f(hL^{-\frac{1}{2}}) \quad (1.69)$$

avec la fonction $f(x)$ montré sur la figure 1.4. L'exposant $\frac{1}{2}$ est l'exposant critique du modèle KPZ en une dimension.

1.4.2 Paramètre d'ordre conservé

Si l'on se place dans le référentiel du centre de l'interface, les équations 1.65 et 1.66 conservent le paramètre d'ordre en moyenne. Néanmoins, la transformation $h \rightarrow h + Dt$ ne prend pas en compte les fluctuations thermiques qui viennent perturber l'interface, ce qui fait que $h(t) \neq cte$. L'astuce vient ici de [22, 23], où l'on reprend l'équation de

Cahn-Hilliard-Cook pour les interfaces

$$\frac{\partial h}{\partial t} = D\nabla^2 \frac{\delta H}{\delta h} + \eta(x, t) \quad (1.70)$$

qui nous donne l'équation Villain-Lai-Das Sarma[24, 25]

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -D\nabla^4 h + \lambda\nabla^2 (\nabla h)^2 + \eta(x, t) \quad (1.71)$$

qui a fait l'objet de nombreuses études[26, 18].

L'intérêt d'un tel système est qu'il est contraint à une dynamique locale qui permet d'obtenir un système hors-équilibre. La distribution de la hauteur de l'interface respecte ici aussi le régime d'échelle [27, 28] dans le régime transient.

1.5 Cisaillement d'une interface

enrichir de résultats et manip Il suffit d'avoir une force conservative dans le système pour qu'il soit hors-équilibre, le cisaillement en est l'expression la plus simple. Le cisaillement intervient dans la sédimentation des particules, le mouvement forcé de particules chargées dans un champ électrique ou bien par la pression de radiation exercée par un laser. Dans un cisaillement, certaines particules ont tendance à bouger préférentiellement dans un sens par rapport aux autres particules, impliquant un flux non nul. Cette dynamique étant locale, elle ne peut exister que si le paramètre d'ordre est conservé. L'équation générale d'un système d'interface avec un cisaillement est[29, 14]

$$\frac{\partial h}{\partial t} + v\nabla h = \mathcal{L}h + \eta(x, t) \quad (1.72)$$

où l'opérateur \mathcal{L} est associé au modèle A ou B, et le terme $v\nabla h$ est un terme de d'advection du au flux produit par le cisaillement.

Le cisaillement le plus évident est un cisaillement homogène, par exemple un champ gravitationnel qui sédimente les particules. Dans ce cas, le champ de vitesse v étant constant, l'équation 1.72 est invariante par la transformation galiléenne $x \rightarrow x + vt$. Néanmoins de nombreuses expériences[30] et simulations numériques [31, 32, 33, 34, 35, 36, 37] montrent que le cisaillement provoque un confinement de l'interface. Dans les expériences, cette invariance galiléenne est brisée par la disparité du champ de vitesse sur les différentes particules, comme expliqué en détail au chapitre 7² Pour les simulations

2. Ce chapitre a été publié dans [38].

numériques, l'invariance est brisée par la dynamique même du système, puisque les mouvements sont fait séquentiellement.

Chapitre 2

Modèle Solid-On-Solid

2.1 Hamiltonien

Quelle que soit la méthode utilisée, le système se simplifie dès lors que nous désirons étudier uniquement l'interface d'un système et non son ensemble, telles que les longueurs de corrélations dans le *bulk*, l'aimantation moyenne, la chaleur spécifique ou la susceptibilité magnétique. À très basse température, les interfaces sont bien délimitées et il y a très peu de gouttes d'évaporations d'une phase dans l'autre. En considérant le système très peu mélangé, il est possible de définir la présence d'une phase par rapport à la hauteur h_i de l'interface. Chaque spin prend la valeur

$$\sigma_{i,j} = \text{sgn}(h_i - j)$$

où la fonction $\text{sgn}(x)$ est égale à $+1$ si $x \geq 0$ et à -1 sinon. Cela revient à considérer que l'énergie d'interaction perpendiculaire est prohibitif par rapport aux liaisons parallèles à l'interface $J_\perp \gg J_\parallel$.

En utilisant l'identité $\min(a, b) - \max(a, b) = |a - b|$, on a

$$\sum_{j=0}^L \text{sgn}(h - j) \text{sgn}(h' - j) = L - 2|h - h'|$$

Ainsi, pour un système de longueur L_X et de largeur L_Y l'hamiltonien du modèle d'Ising en absence de potentiel se réécrit comme

$$H = 4JL_X(2 - L_Y) + 4J \sum_i |h_i - h_{i+1}| \quad (2.1)$$

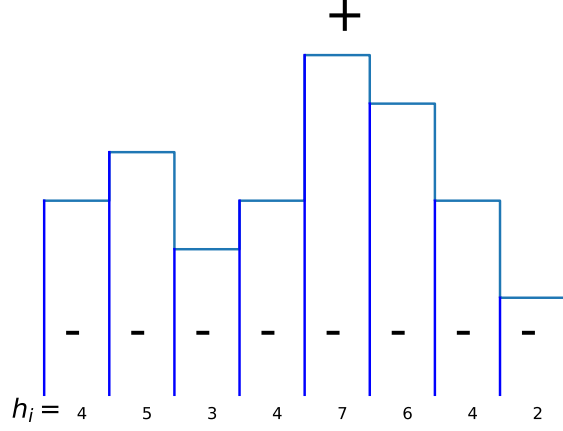


FIGURE 2.1 – Une configuration possible de modèle SOS. Dans la i -ème colonne le bord horizontal de l'interface passe à la hauteur h_i . Toutes les particules au-dessus de l'interface sont des spins positifs et négatifs en dessous. La représentation classique du modèle SOS diffère de ce schéma par l'hypothèse que les particules sont discernables. Nous y reviendrons plus tard.

Le terme $|h_i - h_{i+1}|$ représente la surface de contact horizontale entre les deux phases qui dépend directement de la hauteur, tandis que le terme constant représente la surface de contact verticale. En retirant la partie constante de l'énergie et simplifiant $4J = J$ et en gardant $L_X = L$, nous obtenons l'hamiltonien du **modèle Solid-On-Solid**

$$H = J \sum_i |h_i - h_{i+1}| \quad (2.2)$$

Nous avons ici réussi à réduire la dimensionalité du système en ne prenant en compte que la hauteur h_i au site i . L'énergie du système est alors décrite par la différence de hauteur entre deux sites voisins, et βJ prend ici alors le rôle de la tension de surface.

Puisqu'il n'y a plus de transition de phase possible dans ce modèle, la température critique β_C du modèle d'Ising n'a plus de rôle à jouer ici. Pour rester dans le domaine de l'approximation, si nous désirons comparer les résultats avec ceux du modèle d'Ising, il faudra veiller à rester dans le domaine $T < T_C$, l'approximation étant de plus en plus valable plus la température est basse. Par la suite, puisque nous désirons étudier le modèle SOS et non le comparer avec le modèle d'Ising, nous prendrons, sauf cas contraire explicité, $\beta = \beta_C \simeq 0.44$ et $J = 1$ par soucis de simplicité.

2.2 Matrice de Transfert

De manière plus générale, l'Hamiltonien d'un système avec des interactions entre les particules peut se réécrire comme $H = \sum_{\langle ij \rangle} H(i, j)$ avec

$$H(h_i, h_{i+1}) = f(h_i, h_{i+1}) + V(h_i, h_{i+1})$$

où $f(h_i, h_j)$ est l'énergie d'interaction entre plus proches voisins et $V(h_i, h_j) = \frac{V(h_i) + V(h_j)}{2}$ le potentiel symétrisé. La fonction de partition de notre système s'écrit alors

$$Z = \sum_{h_1 h_2 \dots h_L} e^{-\beta \sum_i H(h_i, h_{i+1})} = \sum_{h_1 h_2 \dots h_L} \prod_i e^{-\beta H(h_i, h_{i+1})}$$

La matrice $T(i, j) = e^{-\beta H(i, j)}$ est appelée matrice de transfert. Cette matrice est périodique aux bords, c'est-à-dire $T(L, L+1) = T(L, 1)$ et est symétrique, ce qui implique qu'elle est diagonalisable dans la base des vecteurs propres $|\lambda\rangle$ de valeur propre λ . On dénote par λ_0 la plus grande valeur propre de T , -par λ_1 la deuxième plus grande valeur propre et ainsi de suite. Ainsi la fonction de partition devient[]

$$Z = \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \dots \sigma_L} \prod_i T(i, i + i) = \text{Tr} T^L = \sum_{\lambda} \langle \lambda | T^L | \lambda \rangle = \sum_{\lambda} \lambda^L \quad (2.3)$$

Dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$, seuls les plus grands vecteurs propres jouent un rôle. Afin de calculer les observables de notre système, il convient d'introduire la matrice des hauteurs $\tilde{M}(i, j) = \delta_{ij} i$. Nous avons donc ¹

— L'énergie libre par site :

$$F = -\frac{1}{L\beta} \ln(Z) \simeq -\frac{1}{L\beta} \ln(\lambda_0) \quad (2.4)$$

— La densité de probabilité qu'un site se trouve à la hauteur h :

$$p(h) = \frac{1}{Z} \sum_{\lambda} \lambda^L \langle \lambda | h \rangle^2 \simeq \langle \lambda_0 | h \rangle^2 \quad (2.5)$$

— La magnétisation moyenne :

$$M = \langle h \rangle = \langle \lambda_0 | \tilde{M} | \lambda_0 \rangle \quad (2.6)$$

1. Pour une démonstration plus détaillée sur les matrices de transfert, se référer à [?]]

— La variance des hauteurs :

$$\sigma = \langle (h - \langle h \rangle)^2 \rangle = \langle \lambda_0 | \tilde{M}^2 | \lambda_0 \rangle \quad (2.7)$$

2.3 Stabilité de l'interface

Soit $\psi_\lambda(h)$ la projection du vecteur propre associé à la valeur propre λ de la matrice de transfert sur la base des hauteurs dans un système infini de par et d'autre de l'interface. En absence de potentiel[?], l'équation du vecteur propre donne

$$\sum_{h=-\infty}^{\infty} T(h, h') \psi_\lambda(h) = \lambda \psi_\lambda(h') \quad (2.8)$$

En introduisant l'ersatz $\psi_\lambda(h) = \alpha^h$ qui respecte la symétrie du système, et en séparant de la somme les termes pour h négatifs et positifs, on trouve aisément que

$$\frac{\sinh(\beta J)}{\cosh(\beta J) - (\alpha + \frac{1}{\alpha})} \alpha^{h'} = \alpha^{h'} \lambda \quad (2.9)$$

Dans la limite thermodynamique, la probabilité de présence de l'interface à la hauteur h est $p(h) = \langle \lambda_0 | h \rangle^2 = |\psi_0(h)|^2$. Le système ne possédant aucune brisure de symétrie particulière, la probabilité $p(h)$ se doit d'être bornée pour tout h . Dès lors, l'ersatz supposé $\psi_\lambda(h) = \alpha^h$ implique que α soit de la forme e^{ik} où k est la longueur d'onde associée à la valeur propre λ . On obtient que

$$\psi_k(h) = e^{ikh} \quad (2.10)$$

$$\lambda_k = \frac{\sinh(\beta J)}{\cosh(\beta J) - \cos(k)} \quad (2.11)$$

Dans le cas plus général où l'hamiltonien s'écrit de la forme $T(h, h') = f(|h - h'|)$, on trouve

$$\lambda_k = \sum_{h=0}^{\infty} f(h) (\alpha^h + \alpha^{-h}) - f(0) \quad (2.12)$$

L'existence d'une solution de ce genre indique que l'interface n'est pas localisée dans le cas d'un système infini (ou semi-infini) en absence de tout potentiel, ce qui conduit à de nombreux problèmes numériques.

Il est à noter qu'à $\beta = 0$, c'est-à-dire pour une température infinie, la matrice de

transfert est uniformément égale à 1, menant à des vecteurs propres nuls. Dans cette limite, l'interface n'existe plus, le modèle SOS n'est donc pas valable. De même, pour une température nulle $\beta = \infty$, la matrice de transfert devient la matrice identité. Les valeurs propres deviennent toutes égales à 1 et les vecteurs propres sont $\psi_i(h) = \delta_{h,i}$ où ici i est l'indice de la i -ème valeur propre $\lambda_i = 1$. La probabilité de trouver l'interface à la hauteur h devient $p(h) = \frac{1}{Z} \sum_i \langle \lambda_i | h \rangle^2 = 1$. La température nulle a pour effet de geler l'interface sur une seule hauteur, mais toutes les hauteurs sont équiprobables. Bien que les micro-états soient extrêmement différents que pour une température finie, les propriétés macroscopiques sont identiques à cause du même poids statistique associé à chaque état.

Historiquement, une manière facile de localiser l'interface est de rajouter un potentiel $V(h) = -B\delta_{h,0}$ [?]. La présence du potentiel n'affecte pas la parité du système mais peut introduire un surplus de particules en 0. La recherche d'un état lié nous donne un ersatz de la forme

$$\psi_\lambda(h) = \begin{cases} |\alpha|^h & \text{si } h \neq 0 \\ \psi_{\lambda,0} & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.13)$$

L'équation du vecteur propre devient

$$\sum_{h=-\infty}^{\infty} e^{\beta|h-h'| - \beta B\delta_{h,0}} \psi_\lambda(h) = \lambda \psi_\lambda(h') \quad (2.14)$$

En notant $T(h, h') = R^{|h-h'|}$ pour $h \neq h' \neq 0$, on obtient la même équation à un signe près dans l'exposant que l'on soit à $h' > 0$ ou $h' < 0$

$$\left(\frac{R}{\alpha}\right)^{\pm h'} \left[\psi_{\lambda,0} + \frac{R\alpha}{1-R\alpha} + \frac{\alpha}{R-\alpha} \right] + \left[\frac{1}{1-R\alpha} - \frac{R}{R-\alpha} \right] = \lambda \quad (2.15)$$

Puisque cette équation est vraie pour tout h' , le premier terme doit être nul, ce qui nous donne

$$\psi_{\lambda,0} = -\frac{\alpha}{R-\alpha} - \frac{R\alpha}{1-R\alpha} \quad (2.16)$$

$$\lambda = \frac{1}{1-R\alpha} - \frac{R}{R-\alpha} \quad (2.17)$$

L'équation du vecteur propre à $h' = 0$ nous donne par ailleurs

$$\psi_{\lambda,0} + 2 \frac{R\alpha}{1 - R\alpha} = \lambda \psi_{\lambda,0} e^{-\beta B} \quad (2.18)$$

L'existence d'une solution cohérente $\alpha \ll 1$ autorise la présence d'une interface localisée grâce au pinning.

D'autres méthodes existent pour confiner l'interface. Le cisaillement d'une interface diminue sa largeur et permet de la localiser dans l'espace. On peut également proposer deux potentiels chimiques différents pour chaque phase à une hauteur de l'interface pré-définie, comme le ferait un laser dans les expériences de cisaillement[?] dans un système semi-infini. Cet cas sera étudié plus loin. Dans un système infini, une autre possibilité est de définir un champ magnétique symétrique rendant plus difficile la présence de l'interface loin de 0. Nous utiliserons ici un potentiel du style

$$V(h) = B|h| \quad (2.19)$$

Il est facile de se convaincre que loin de 0 le coût énergétique est si grand que la probabilité que l'interface s'y trouve soit petite, impliquant que l'interface est localisée. La position moyenne de l'interface se situe au minimum du potentiel qui est dans ce cas 0.

2.4 Ensemble canonique

Dans l'ensemble grand-canonique, le nombre de particules dans le système varie, dépendant du potentiel chimique vis-à-vis du réservoir dans lequel il est inséré, ce qui permet à l'interface de bouger librement. Lorsque l'on se place dans un système canonique, le nombre de particules (c'est-à-dire la magnétisation totale M) est fixe, ce qui introduit une contrainte dans la fonction de partition

$$Z(M) = \sum_{h_1 h_2 \dots h_L} e^{-\beta \sum_i H(h_i, h_{i+1})} \delta\left(\sum_i h_i = M\right) \quad (2.20)$$

avec la relation vis-à-vis de l'ensemble grand-canonique en l'absence de potentiel chimique

$$\Xi = \sum_M Z(M) \quad (2.21)$$

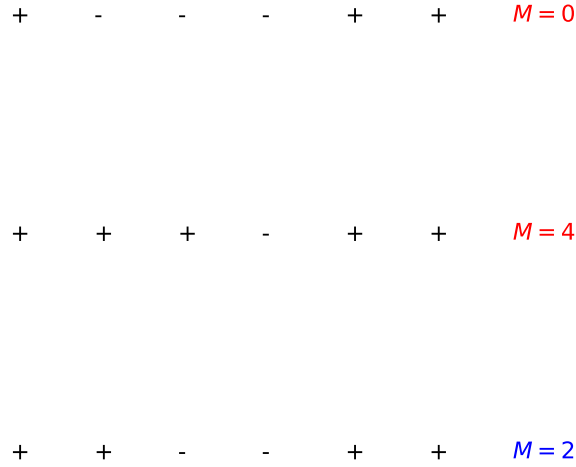


FIGURE 2.2 – Dans un modèle d’Ising à 1D, afin d’avoir une magnétisation moyenne du système à $\langle M \rangle = 2$, tous les états sont acceptés tant qu’il y en a d’autres afin de respecter la moyenne. Dans l’ensemble canonique, on n’a plus $\langle M \rangle = 2$ mais $M = 2$, interdisant les micro-états rouges.

La position moyenne de l’interface est maintenant définie et beaucoup d’états sont interdits, ce qui change énormément les propriétés thermodynamiques de la matrice de transfert comme la distribution des hauteurs de l’interface, même si la moyenne reste la même. Malheureusement, il est impossible de réécrire la contrainte dans le langage des matrices de transfert, empêchant ainsi de calculer analytiquement les différences entre les deux ensembles. Il est possible de construire la fonction de partition *ab initio*, mais le grand nombre de sites et de hauteurs permises dans un système classique empêchent le calcul dans un temps raisonnable.

2.5 Indiscernabilité des particules : Particle-Over-Particle

Dans le modèle d’Ising, les particules sont discernables puisque labellisées par leur position (i, j) . Cette discernabilité pose problème lorsque l’on utilise le modèle pour un système de gaz sur réseaux ou de fluides binaires par exemple. À cet égard le modèle SOS est meilleur, puisque la discernabilité ne concerne plus que les sites i contenant h_i particules indiscernables. En prenant le point de vue atomiste présent dans le modèle d’Ising, nous pouvons suivre la position de chaque particule au sein de nos sites. Cela a plusieurs implications. La première, c’est qu’en général, seules les couches proche de

l'interface sont actives, tandis que les mouvements dans le *bulk* sont bien plus lents. Ainsi, en prenant une particule au hasard dans nos simulations numériques, il est possible de donner une mobilité différente aux couches du modèle SOS. Nous n'explorons pas ces systèmes dans la présente thèse. Deuxièmement, lors des algorithmes de Monte Carlo définis au chapitre suivant, la probabilité de choisir un site au hasard n'est pas la même que celle de choisir une particule au hasard ! La fonction de partition d'un système où les particules sont discernables s'écrit maintenant

$$Z = \sum_{h_1 h_2 \dots h_L} e^{-\beta \sum_i H(i, i+1)} \frac{N!}{\prod_i n_i!} = N! \sum_{h_1 h_2 \dots h_L} e^{-\beta \sum_i H(i, i+1) - \sum_i \ln(n_i!)} \quad (2.22)$$

Ce nouveau système, que l'on appellera - par analogie avec Solid-On-Solid - le modèle Particle-Over-Particle sera étudié de manière détaillée dans les derniers chapitres.

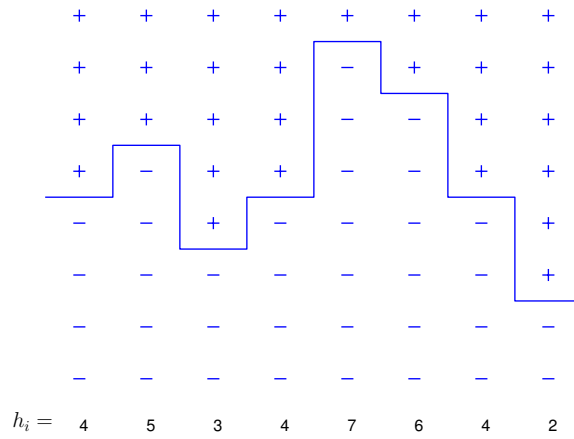


FIGURE 2.3 – Une configuration possible de modèle SOS lorsque les particules sont discernables. Cette représentation est la représentation classique dans la littérature.

Chapitre 3

Simulations

Les simulations numériques permettent de calculer propriétés des systèmes là où la diagonalisation directe des hamiltoniens est trop difficile. Elle permet également de faire varier facilement les géométries et les potentiels dans les systèmes. Les algorithmes mis en jeu sont en général lents et peu efficaces car ils essaient de calculer la fonction de partition complète du système. Les modèles 1D que nous étudions dans cette thèse ont l'avantage d'être rapides à calculer et donne une pléthore d'informations qui peut être extrapolée aux modèles 2D et 3D à basse température.

3.1 Algorithme de Metropolis

Les systèmes à l'équilibre sont, en présence d'une température non-nulle, définis par les moyennes statistiques des grandeurs observables. La moyenne statistique de l'observable A est définie vis-à-vis de la fonction de partition

$$\langle A \rangle = \sum_{\mu} e^{-\beta \mathcal{H}(\mu)} \quad (3.1)$$

où \sum_{μ} désigne la somme sur tous les micro-états μ possibles du système. Tandis qu'une diagonalisation de la fonction de partition nécessiterait de connaître tous les micro-états possibles, on observe que certains états sont plus probables que d'autres car d'énergie moindre, et donc contribuent plus aux moyennes statistiques que le reste. Les algorithmes de Monte Carlo ont pour objectif d'explorer l'espace des phases de manière aléatoire afin de découvrir quels micro-états sont les plus probables. En prenant suffisamment de micro-états au hasard de manière à satisfaire au bilan détaillé, l'algorithme de Monte Carlo espère converger vers la valeur limite $\langle A \rangle(t = \infty) = \langle A \rangle$. Une littérature extensive[?]]

existe sur le sujet. Nous nous contenterons ici d'expliquer le minimum.

Soit μ un micro-état de notre système d'énergie $E(\mu)$. À l'équilibre[?], la probabilité d'occupation du système est

$$p_\mu = \frac{1}{\mathcal{Z}} e^{-\beta E(\mu)} \quad (3.2)$$

qui définit la fonction de partition \mathcal{Z} . Dans un algorithme de Metropolis, on met à jour notre micro-état en prenant un site i au hasard¹ et en le changeant légèrement vers un état ν . La différence d'énergie notée $\Delta E(\mu \rightarrow \nu)$ donne la probabilité de transition entre les deux. Si l'état final ν a une énergie inférieure à l'état initial, alors il est forcément plus probable, et nous acceptons le changement. La probabilité d'acceptation de transition de Metropolis est

$$p(\mu \rightarrow \nu) = \min(1, e^{-\beta \Delta E(\mu \rightarrow \nu)}) \quad (3.3)$$

De cette manière on parcourt l'espace des phases en restant dans les micro-états les plus probables. Cette manière de procéder satisfait aux conditions du bilan détaillé pour une marche markovienne satisfaisant l'état d'équilibre de Boltzmann

$$\frac{p(\mu \rightarrow \nu)}{p(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\Delta E(\nu \rightarrow \mu)} \quad (3.4)$$

2

Une étape de Monte Carlo est achevée lorsque L tentatives de transition ont été faites. L'erreur obtenue à la fin sur notre observable $\langle A \rangle$ est

$$\sigma(A) = \sqrt{\frac{2\tau}{t_{max}} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)} \quad (3.5)$$

Cette variance dépend du temps de corrélation τ puisque deux micro-états très proches

1. L'utilisation d'un générateur de nombre aléatoire (*pRNG*) efficace est primordial. Il est déconseillé d'utiliser le générateur standard *default_random_engine* de la librairie C++ *rand* et conseillé d'opter pour des générateurs *sfc64* ou *xoroshiro*. Pour un pRNG booléen performant, voir <https://martin.ankerl.com/2018/12/08/fast-random-bool/>. Pour accélérer encore plus les calculs, ne pas oublier d'utiliser le flag d'optimisation *-O3* sur *gcc* si vous codez en C/C++.

2. La librairie OpenMP pour paralléliser le code est simple d'utilisation mais gère très mal - de sa nature de mémoire partagée - les pRNG. Je conseille vivement l'utilisation de la librairie MPI qui, bien que plus difficile d'accès, assure une étanchéité au niveau des pRNG entre chaque thread.

dans le temps étant fortement corrélés, l'observable n'aura pas eu le temps de bouger.

$$\mathcal{C}(t) = \langle A(t')A(t+t') \rangle - \langle A \rangle^2 = \frac{1}{T_{max}} \int_0^{T_{max}} A(t')A(t+t') - \langle A \rangle^2 dt' \quad (3.6)$$

Aux temps longs, la fonction $\mathcal{C}(t)$ décroît de manière exponentielle. Néanmoins, il existe plusieurs temps de corrélation dans un système qui font que la fonction de corrélation aux temps courts est une somme de plusieurs exponentielles[?]. Dans cette thèse nous ne sommes intéressés que par l'ordre de grandeur de ce temps de corrélation afin d'avoir une estimation de l'erreur de nos observables. En négligeant les termes provenant des temps de corrélation inférieurs, le calcul de l'intégrale³ nous donne directement

$$\tau = \int_0^\infty \mathcal{C}(t)/\mathcal{C}(0) dt \quad (3.7)$$

Nous pouvons de la même manière calculer la fonction de corrélation spatiale moyennée sur le temps, avec une longueur de corrélation qui se calcule avec l'équation 3.7

$$\mathcal{C}(x) = \frac{1}{L} \sum_{x'}^L A(x')A(x+x') - \langle A \rangle^2 \quad (3.8)$$

3.1.1 Ensemble grand-canonique : algorithme de Glauber

Le dépôt de particules provenant d'un réservoir permet de faire grandir un cristal à partir d'un substrat. Ce genre de systèmes est défini par le potentiel chimique μ des particules, dans le solvant et appartient à l'ensemble grand-canonique. Dans ce cas, on choisit au hasard de manière uniforme une colonne h_i dans laquelle on décide de mettre ou d'enlever une particule avec une probabilité de 50%, en respectant les conditions aux bords en y (c'est-à-dire si l'on désire par exemple une géométrie rectangulaire d'hauteur L , il faut que $0 < h_i < L$). En essayant d'aller du micro-état μ vers le micro-état ν où on a fait la transformation $h_i \rightarrow h_i + \alpha$ où $\alpha = \pm 1$, on obtient que la différence d'énergie est

$$\Delta E = |h_{i-1} - (h_i \pm 1)| + |h_{i+1} - (h_i \pm 1)| - |h_{i-1} - h_i| - |h_{i+1} - h_i| \quad (3.9)$$

$$= 2((h_i \leq h_{i-1}) + (h_i \geq h_{i+1}) - 1) \quad (3.10)$$

où $(h_i \leq h_{i-1})$ est un booléen valant 1 si la condition est vraie, 0 sinon. Le changement de magnétisation quand à lui est juste $\Delta M = \alpha$. La largeur de l'interface, quand à elle,

3. Numériquement, elle peut se faire précisément via la méthode de Simpson.

définie par $\sigma = \sum_i (h_i - h_{i+1})^2$ change comme

$$\Delta\sigma = 2\alpha(h_{i+1} - h_i) + 2 \quad (3.11)$$

On n'a donc pas besoin, à chaque pas de temps, de recalculer ces deux grandeurs, il suffit de les mettre à jour dans une variable pour avoir les observables à tout instant t .

Afin d'accélérer le processus d'équilibrage du système, il est recommandé de commencer directement avec la valeur moyenne de magnétisation calculée directement à partir de la matrice de transfert. On regarde ensuite le temps d'équilibrage par la courbe $E(t)$, en attendant d'atteindre la valeur à l'équilibre. À l'équilibre, le taux d'évaporation des particules doit être égal au temps de dépôt sur notre système. Cependant, en l'absence d'un potentiel qui contraint l'interface, l'interface est délocalisée, l'empêchant d'atteindre l'équilibre thermodynamique. C'est pour ça qu'une simulation numérique dans une dynamique de Glauber se doit de toujours avoir un potentiel permettant d'obtenir la localisation d'une interface.

Temps de corrélation sur un SOS, longueur de corrélation. Effet de la taille

3.1.2 Ensemble canonique : algorithme de Kasawaki

La diffusion des particules - par exemple un polymère dans un solvant - est une dynamique locale qui conserve le paramètre d'ordre du notre système, nommément la magnétisation m . Dans ce cas, on choisit au hasard de manière uniforme deux colonnes h_i et h_{i+1} dans lesquelles on va essayer d'échanger une particule entre les deux. Afin de respecter le bilan détaillé, il faut que la probabilité de choisir le mouvement $h_i \rightarrow h_{i+1}$ soit égale à $h_{i+1} \rightarrow h_i$. On peut juste définir à nouveau "l'ajout" d'une colonne vers ou à partir de l'autre via la transformation $h_i \rightarrow h_i + \alpha$ et $h_{i+1} \rightarrow h_{i+1} - \alpha$ (avec $\alpha = \pm 1$), en respectant toujours les conditions aux bords en y . Cette fois-ci il existe trois termes dans l'énergie qui sont modifiées⁴

$$\Delta E = |h_{i-1} - (h_i \pm 1)| + |h_{i+1} \pm 1 - (h_i \pm 1)| + |h_{i+1} \pm 1 - (h_{i+2})| \quad (3.12)$$

$$-|h_{i-1} - h_i| - |h_{i+1} - h_i| - |h_{i+1} - h_{i+2}| \quad (3.13)$$

La magnétisation totale est cette fois-ci conservée, tandis que la largeur de l'interface

4. Comme précédemment, il existe une version booléenne de l'équation, mais sa longueur n'offre aucun avantage en terme d'implémentation dans le code.

σ se calcule par

$$\Delta\sigma = 2\alpha + 1 \quad (3.14)$$

3.1.3 Dynamique hors-équilibre

L'ensemble grand-canonique ne nous permet d'avoir un système qu'à l'équilibre, puisqu'il est traduit par une dynamique non-locale. Seule une dynamique locale comme la dynamique de Kawasaki peut nous donner un tel résultat. L'implémentation la plus simple est d'introduire un terme de cisaillement dans notre modèle lorsque l'on décide de bouger une particule. Ce cisaillement diminue l'énergie du micro-état lorsque la particule bouge dans un sens et l'augmente sinon, ce qui brise le bilan détaillé. Les systèmes présentant un cisaillement perpendiculaire à l'interface ont tendance à la détruire, puisque l'on introduit un flux qui empêche toute stabilité. Néanmoins de nombreux travaux sur les systèmes hors-équilibre dans le modèle d'Ising ont été produits [35] présentant la diminution de la largeur de l'interface lorsque le cisaillement est produit de manière parallèle. On peut définir deux espèces de cisaillement parallèles. Le cisaillement aux bords dans un liquide non-visqueux ne permet de bouger que les particules aux bords du système : il n'est donc pas adaptable à un système infini ou semi-infini. Pour un système de taille L et pour un module de cisaillement de f , la différence d'énergie supplémentaire est

$$\Delta E_{bord} = f[(h_i == 1 || h_{i+1} == L - 1) - (h_i == L - 1 || h_{i+1} == 0)] \quad (3.15)$$

Dans le cas d'un fluide permettant un transport visqueux, le cisaillement aux bords entraîne un cisaillement plus faible proportionnel à la distance. En supposant que le cisaillement est nul au niveau de l'interface et que les particules vont à gauche dans la partie basse du système (et à droite dans la partie haute du système), on obtient alors

$$\Delta E_{prop} = fh_i \quad (3.16)$$

Cependant, pour des raisons de facilité de calcul plus tard afin de comparer les simulations numériques aux résultats analytiques, on utilise un cisaillement uniforme qui pousse les particules dans un sens. Ce genre de système correspond à un flux laminaire, par exemple dû à la gravité face à une interface verticale qui tire les particules vers le

bas[]]. La différence d'énergie devient

$$\Delta E_{uni} = \alpha f \quad (3.17)$$

où $\alpha = 1$ si la particule va vers la droite, -1 sinon.

3.1.4 Modèle POP

Dans le modèle POP, le modèle n'est plus structuré en fonction des sites i mais bien des particules $\sigma(n) = i$, la hauteur d'un site⁵ devenant alors

$$h_i = \sum_{n=0}^N \delta_{\sigma_n, i} \quad (3.18)$$

Lors d'une dynamique de Kawasaki, à chaque étape, on choisit au hasard une particule parmi les N présentes dans le système pour la déplacer d'une colonne.

Il est également possible de donner des constantes de diffusion différentes à chaque particule⁶ afin d'émuler différents types de particules.

La question est plus délicate lorsqu'il s'agit d'une dynamique de Glauber. Puisque chaque particule a une probabilité d'être sélectionnée pour être détruite, comment choisir la probabilité d'ajouter une particule au système ? Nous laissons aux suivants le soin de répondre à cette question.

5. Cette hauteur est mise à jour à chaque étape mouvement d'une particule dans un second tableau.

6. Grâce à la construction d'un générateur via *random : :discrete_distribution* où chaque particule a une probabilité différente d'être sélectionnée.

Chapitre 4

Résultats pour le modèle SOS

On considère un système de longueur L et de hauteur N . Pour N très grand, si la position de l'interface est loin de 0 ou de N , on s'attend à retrouver toutes les propriétés d'un modèle infini centré en 0. Si l'interface est proche de 0, on pourra étudier les effets au bord, comme dans un système semi-infini¹. On fixe la hauteur moyenne $\langle h_i \rangle = H$ grâce au potentiel chimique μ ².

4.1 Différences Glauber/Kawasaki

figure énergie moyenne, sigma, distribution de probabilité via Airy

4.2 Effet du cisaillement

Dans les expériences, le système est soumis à un cisaillement au niveau de l'interface, ce qui modifie les observables par rapport à l'état d'équilibre. Nous optons ici pour un modèle de cisaillement uniforme dont le sens est défini par $\text{sgn}(i - j)$, i et j étant des sites de hauteurs respectives h_i et h_j . La différence d'énergie entre un micro-état et le suivant d'une étape de Monte Carlo sous une dynamique de diffusion (Kawasaki) est

1. Dans les simulations numériques ainsi que pour la diagonalisation des matrices nous sommes obligés de choisir une taille finie de notre système. Cependant l'équivalence avec les calculs analytiques dans les systèmes (semi)infinis est vraie pour de grandes tailles de systèmes

2. Calculer la magnétisation moyenne via des bibliothèques comme Eigen en C++ (contrairement à la bibliothèque GSL plus difficile d'accès) permet d'accélérer grandement l'étape d'équilibrage du système pour le Monte Carlo.

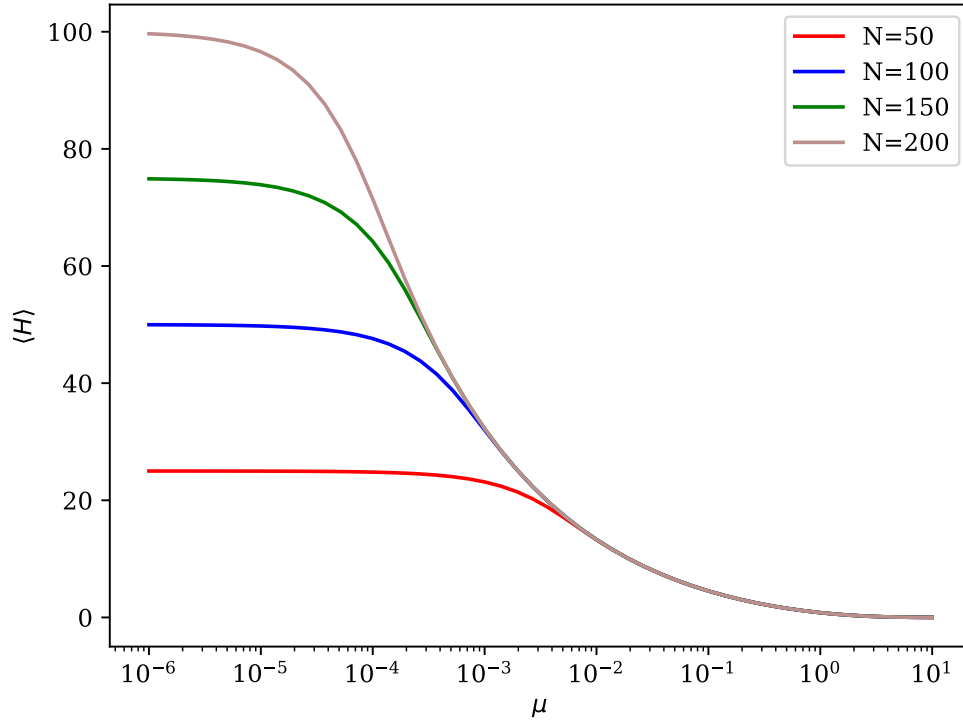


FIGURE 4.1 – Hauteur moyenne de l'hamiltonien $H = \sum_i |h_i - h_{i+1}| + \mu \frac{h_i + h_{i+1}}{2}$ en fonction de μ calculée grâce à la diagonalisation d'une matrice de transfert de taille N . Lorsque le potentiel chimique est trop faible, l'interface est délocalisée et se retrouve à la position $\frac{N}{2}$.

alors

$$\Delta E = J \sum_i [|h'_i - h'_{i+1}| - |h_i - h_{i+1}|] \pm f \quad (4.1)$$

où $h'_i(t) = h_i(t+1)$ - le temps étant discrétisé, f le module de cisaillement et le signe du cisaillement étant pris de manière aléatoire à chaque étape, regardant ainsi si ce mouvement va dans ou contre le sens du flux.

Pour rappel, à chaque étape on essaie de transférer une particule du site i vers son voisin (gauche ou droit) j , ce qui se traduit par $h'_i = h_i - 1$ et $h'_j = h_j + 1$. Pour $f = 0$,

en remarquant que les valeurs absolues ont les propriétés suivantes

$$|a \pm 1| - |a| = \pm 1 \quad (4.2)$$

$$|a \pm 2| - |a| = 0, \pm 2 \quad (4.3)$$

nous voyons facilement l'émergence d'une sélection des énergies possibles entre deux micro-états successifs dans $-4, -2, 0, 2, 4$. Ainsi, toutes les transformations diminuant l'énergie totale du système seront toujours acceptées. En augmentant le cisaillement il devient alors possible de refuser des états réduisant l'énergie et d'accepter ceux qui l'augmente. Nous nous attendons alors à trois régimes différents :

- $f < 2J$: à faible cisaillement, la symétrie du système impose les observables à être paire vis-à-vis de f , comme le prouve le fit en carré des figures.
- $2J < f < 4J$: à cisaillement moyen, certains mouvements augmentant la rugosité de l'interface sont toujours acceptés.
- $f > 4J$: à haut cisaillement, tous les mouvements augmentant l'entropie du système sont acceptés. Une saturation du système se produit lorsque l'énergie de lien entre les sites devient négligeable face au cisaillement.

4.2.1 Différences avec le modèle d'Ising

Le modèle d'Ising repose sur la perméabilité entre les deux phases, avec des bulles d'une phase dans l'autre. Dans les travaux sur le rôle du cisaillement au niveau de l'interface dans un modèle d'Ising ([34],[35].), le cisaillement s'applique à toutes les particules, ce qui a pour but d'étirer les bulles, les rendant plus fragiles au bain thermique. Cet effet participe à leur évaporation vers l'interface et à la dissipation de l'énergie injectée par le cisaillement.

Au contraire, dans les modèles que nous utilisons ici, où l'interface peut fluctuer mais est imperméable, l'énergie injectée au niveau de l'interface ne peut être dissipée par évaporation, ce qui conduit à l'émergence d'une phénoménologie différente. Il est ainsi impossible de définir un cisaillement qui soit appliqué à l'intérieur des phases, puisqu'il n'existe aucune notion de particules. Plus loin nous développons un modèle qui s'abstrait de ces difficultés.

4.3 Cisaillement avec deux types de particules

La construction naïve d'un modèle continu du cisaillement avec un seul type de particules ne donnera aucun résultat. En effet, pour que le cisaillement induise des effets

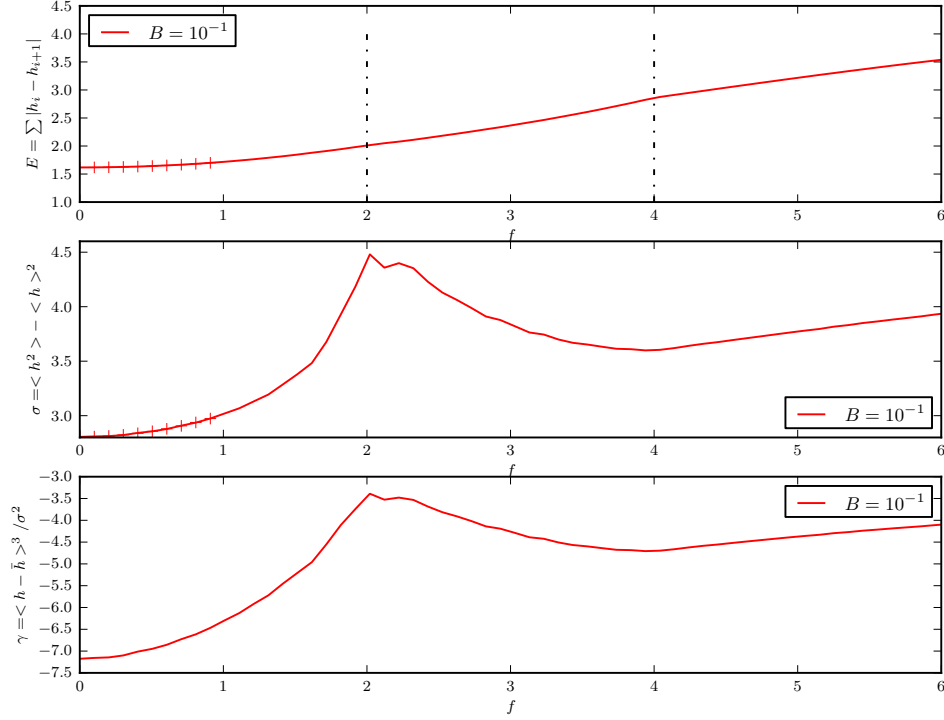


FIGURE 4.2 – Énergie $E = \langle \sum_i |h_i - h_{i+1}| \rangle$ (en pointillé sa dérivée), variance $\sigma = \langle (H - \langle H \rangle)^2 \rangle$ et asymétrie $\gamma = \langle (H - \langle H \rangle)^3 \rangle / \sigma^2$ pour $B^{0.1}$. La magnétisation est constante et égale à $\langle H \rangle = 4.51$. Le temps de corrélation du système est presque constant en fonction du cisaillement f , allant de $\tau(f=0) = 5.04$ à $\tau(f=6) = 5.00$ étapes de Monte Carlo. On note une brisure à $f = 2J$ et $f = 4J$. Les croix notent un fit en carré pour petit f , montrant la symétrie du système par inversion du signe de f .

hors équilibre, il faut que la dynamique des particules dans tout repère galiléen soit la même. Si l'on considère une force de cisaillement uniforme qui induit la même vitesse moyenne sur toutes les particules du système, en nous plaçant dans un repère bougeant à la même vitesse que cette vitesse moyenne, nous retrouvons les mêmes propriétés à l'équilibre. Afin de briser la symétrie de translation, il faut soit induire un cisaillement non-uniforme, soit introduire des particules qui réagissent de manière différente vis-à-vis de cette force. Dans notre exemple sur les colloïdes, la gravité agit bien sur les polymères mais bien moins sur le solvant, ce qui brise en effet l'invariance galiléenne. Plusieurs études récentes portent sur le mouvement de systèmes avec plusieurs particules browniennes[? ? ? ? ? ?], incluant le problème des électrolytes étudié par Onsager [?

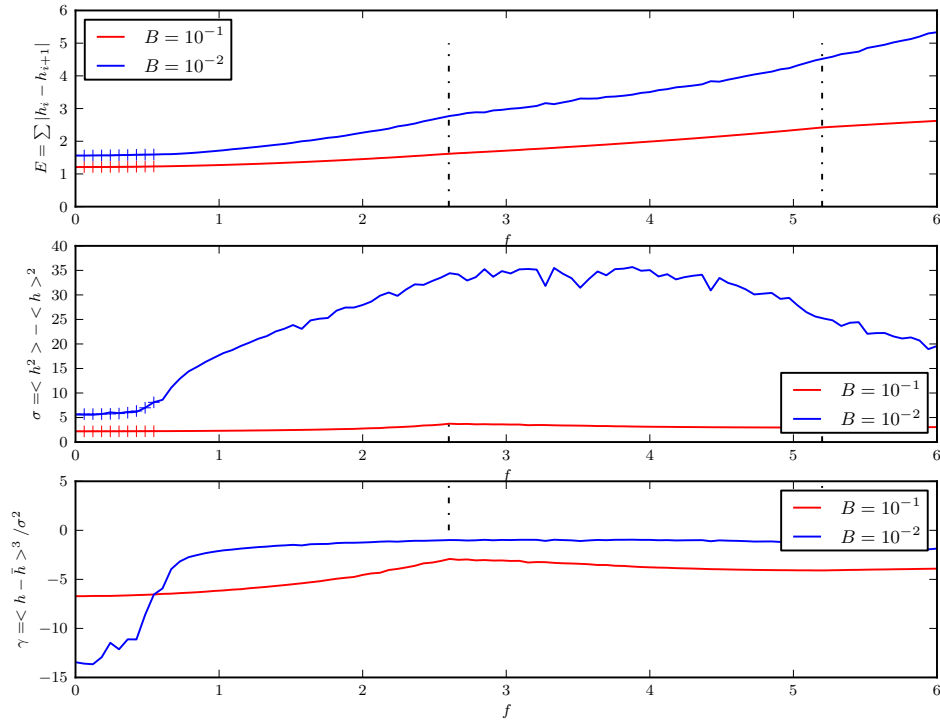


FIGURE 4.3 – Same as before, with $J = 1.3$ We observe a net inflexion in the energy at $2J$ for $B = 0.01$ which corresponds to $\langle H \rangle = 11$. Nevertheless there is not threshold at $4J = 5.2$. My guess is that the system is too far away from the boundary in order to interact strongly with it. Interestingly enough, for $B = 0.1$, $\langle H \rangle = 3$ and we are too close to the boundaries to see anything.

] il y a longtemps.

4.3.1 Discussion about the Gaussian model

The Gaussian model has a stronger interaction, been as

$$\Delta E = J \sum (h'_i - h'_{i+1})^2 - (h_i - h_{i+1})^2 + f(i - j) \quad (4.4)$$

In this model the bond energy between two microstates can take any integer, as

$$(h_i - h_j + 2)^2 - (h_i - h_j)^2 = 4(h_i - h_j + 1)$$

The gaussian interaction is very strong, so we could expect a very smooth interface. The mean difference between two sites should be about $h_i - h_{i+1} \simeq 1$. In that case, the energy difference is discretized as $-8, -4, 0, 4, 8$. Nonetheless we cannot predict exactly the same behaviour as in the SOS model because this approximation has to be verified everytime, which is false. 1

4.4 Interpretation

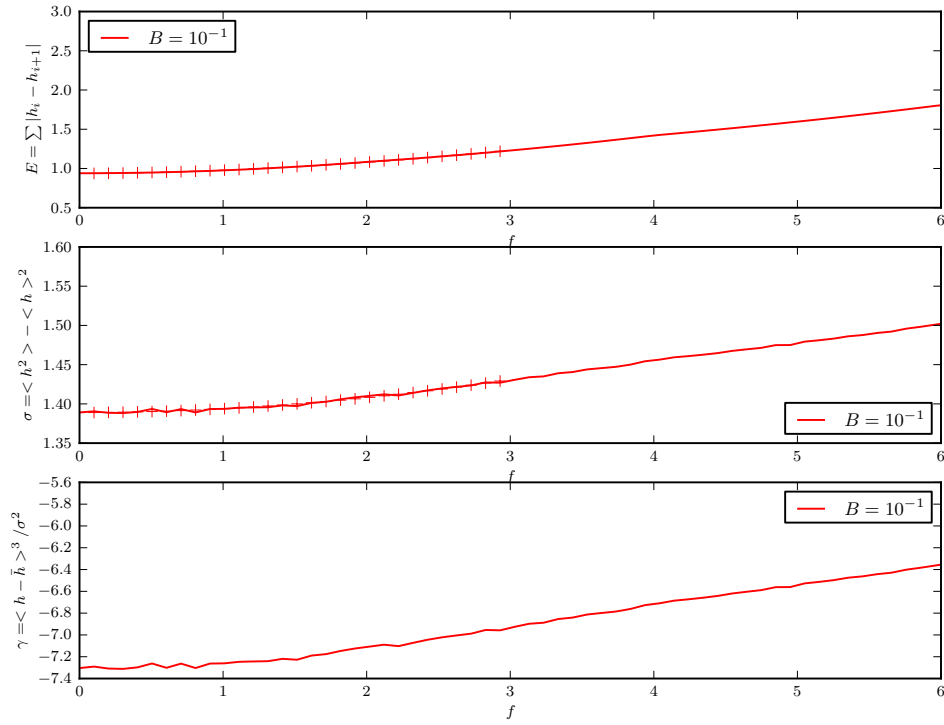


FIGURE 4.4 – Bond energy, thickness (variance) and skewness of the interface for two different magnetic pressures. The magnetisation is constant and is equal to $\langle H \rangle = 2$ for $B = 0.1$. As we are very close to the boundary, we see no threshold with the drive force. Simulations take longer with this model because the interaction is stronger

Chapitre 5

Champ magnétique $|h_i|$

Certains systèmes qui favorisent une espèce de particules d'un côté de l'interface et une autre espèce de l'autre côté se retrouvent dans plusieurs expériences, par exemple une croissance de cristaux contrôlée par un champ optique[] ou le forçage d'une phase dans une autre dans des expériences d'optofluidique[?]. Ces systèmes ont la particularité d'avoir une singularité dans le champ magnétique au niveau de l'interface, du genre

$$B(y) = B \operatorname{sgn}(y) \quad (5.1)$$

où l'interface est placée convenablement en 0 et B est l'intensité du champ magnétique. Dans le formalisme SOS, ce champ magnétique se traduit par

$$B(h_i) = B|h_i| \quad (5.2)$$

Pour $B > 0$, le potentiel a un minimum absolu en 0, confinant ainsi l'interface. On s'attend à ce que plus le champ magnétique devienne élevé, plus l'interface devienne confinée.

Nous discuterons brièvement à la fin du chapitre le cas où B est négatif.

5.1 Modèle gaussien

Un potentiel aussi complexe présente de nombreuses difficultés pour la diagonalisation. Une des difficultés provient du grand nombre de degrés de liberté du système. Afin de diminuer la complexité du calcul, supposons que l'interface soit continue, c'est-à-dire que l'interface au point x soit notée $h(x)$. Cette interface n'est plus définie uniquement aux sites discrets i , puisque l'on s'intéresse aux propriétés mésoscopiques du système.

L'énergie du modèle SOS est directement dictée par $E = \sigma \mathcal{L}$, où σ est la tension

superficielle de notre interface et \mathcal{L} la longueur totale de notre interface. Cette longueur correspond à la distance parcourue par un marcheur brownien le long de l'interface dans des conditions en x périodiques. D'un point de vue continu, la distance effectuée pour de petits déplacements est $d(L) = \sqrt{1 + \frac{dh^2}{dx^2}} \simeq h'^2$. L'Hamiltonien discret correspondant devient gaussien

$$H = J \sum_i (h_i - h_{i+1})^2 \quad (5.3)$$

tandis qu'une version continue du problème est

$$H = \frac{\sigma}{2} \int_0^L h'^2(x) dx - B \int_0^L |h(x)| dx \quad (5.4)$$

Cet hamiltonien gaussien est très similaire à celui que l'on peut retrouver pour les ondes capillaires[] et facilite grandement les calculs.

5.2 Distribution de l'interface

Pour une interface avec des conditions aux bords fixe $h(0) = h$ et $h(L) = h^*$, la fonction de partition est donnée par

$$\mathcal{Z}(h, h^*, L) = \int_{h(0)=h} d[h] \delta(h(L) - h^*) e^{-\frac{\sigma}{2} \int_0^L h'^2(x) dx + B \int_0^L |h(x)| dx} \quad (5.5)$$

La configuration de l'interface à un instant t est similaire à celle de la trajectoire temporelle d'un marcheur brownien commençant à $h(0)$ et finissant à $h(L)$ []. La fonction de partition \mathcal{Z} obéit alors à l'équation de Schrödinger temporelle

$$\frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial L} = \frac{1}{2\beta\sigma} \frac{\partial^2 \mathcal{Z}}{\partial h^2} - B\beta|h|\mathcal{Z} \quad (5.6)$$

avec la condition initiale $\mathcal{Z}(h, h', 0) = \delta(h - h')$. En absence d'un potentiel externe on retrouve les solutions en sinus et cosinus décrivant une interface délocalisée à travers tout le système. En décomposant la fonction de partition dans la base des solutions stationnaires ψ_E correspondant aux énergies propres E

$$Z(h, h', L) = \sum_E e^{-EL} \psi_E(h) \psi_E(h') \quad (5.7)$$

À nouveau, dans la limite thermodynamique, seul l'état fondamental E_0 contribue à la distribution des hauteurs $p(h) = \psi_{E_0}^2(h)$. Chaque fonction propre obéit alors à l'équation de Schrödinger

$$\epsilon \psi_\epsilon = -\frac{1}{2} \frac{\partial^2 \psi_\epsilon}{\partial h^2} + \lambda |h| \psi_\epsilon \quad (5.8)$$

où l'équation a été adimensionalisée par $\epsilon = E\beta\sigma$ et $\lambda = \beta^2\sigma B$. Les solutions sont données par les fonctions d'ondes paires

$$\psi_\epsilon(h) = Ai\left((2\lambda)^{\frac{1}{3}}|h| - \frac{\epsilon}{\lambda}\right) \quad (5.9)$$

où $Ai(x)$ est la fonction de Airy. Par analogie avec l'oscillateur harmonique quantique, nous cherchons des solutions avec des conditions aux limites $\psi'_\epsilon(0) = 0$ pour les états pairs et $\psi_\epsilon(0) = 0$ pour les états impairs. Cela nous donne $\epsilon_n = 2^{-\frac{1}{3}}\lambda^{\frac{2}{3}}\alpha_n$ où $-\alpha_{2n} > 0$ est le $2n$ -ième zéro de la dérivée de la fonction d'Airy Ai' et $-\alpha_{2n+1} > 0$ est le $(2n+1)$ -ième zéro de la fonction d'Airy Ai . L'état fondamental est donné par le plus petit zéro de la fonction $\alpha_0 = 1.0187..$ et a une énergie de

$$E_0 = 2^{-\frac{1}{3}}\alpha_0\beta^{\frac{1}{3}}\sigma^{\frac{1}{3}}B^{\frac{2}{3}} \quad (5.10)$$

L'état fondamental s'écrit alors

$$\psi_0(h) = \frac{Ai((2\lambda)^{\frac{1}{3}}|h| - \alpha_0)}{\sqrt{2 \int_0^\infty dh Ai^2((2\lambda)^{\frac{1}{3}}|h| - \alpha_0)}} \quad (5.11)$$

où le terme d'en bas est une constante de normalisation utilisant la symétrie $p(h) = p(-h)$. On peut calculer les états excités suivants suivant leur parité, les états pairs s'écrivant

$$\psi_{2n}(h) = \frac{Ai((2\lambda)^{\frac{1}{3}}|h| - \alpha_{2n})}{\sqrt{2 \int_0^\infty dh Ai^2((2\lambda)^{\frac{1}{3}}|h| - \alpha_{2n})}} \quad (5.12)$$

et les états impairs

$$\psi_{2n+1}(h) = \frac{\text{sgn}(h) Ai((2\lambda)^{\frac{1}{3}}|h| - \alpha_{2n+1})}{\sqrt{2 \int_0^\infty dh Ai^2((2\lambda)^{\frac{1}{3}}|h| - \alpha_{2n+1})}} \quad (5.13)$$

d'énergie $E_n = E_0 \frac{\alpha_n}{\alpha_0}$.

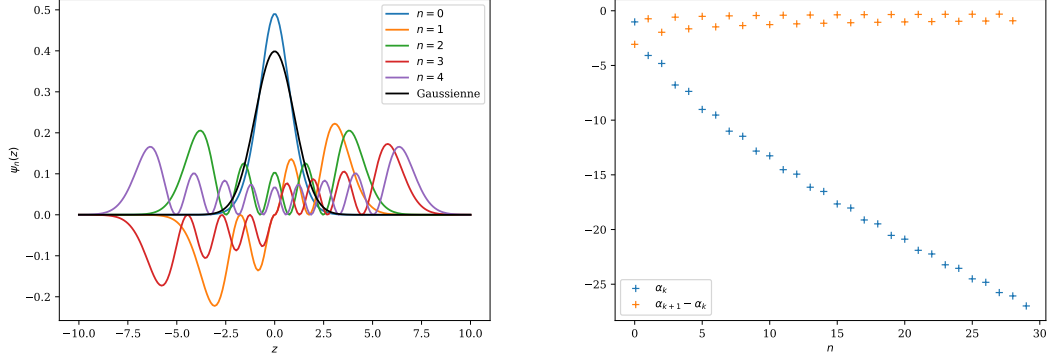


FIGURE 5.1 – À gauche, états propres ψ_n avec en noir, une référence par rapport à la distribution gaussienne. À droite, la série α_n .

On peut adimensionner la distribution des hauteurs par $z = (2\lambda)^{\frac{1}{3}}h$, et on peut définir une largeur caractéristique de l'interface

$$\xi_{\perp} = \frac{1}{(2\beta^2\sigma B)^{\frac{1}{3}}} \quad (5.14)$$

La distribution des hauteurs dans un système infini devient

$$p(z) = \psi_0^2(z) = \frac{Ai^2(|z| - \alpha_0)}{2 \int_0^{\infty} dz Ai^2(z - \alpha_0)} \quad (5.15)$$

Comme montré précédemment, le calcul numérique de la distribution de l'interface nous permet d'avoir accès à la tension de surface de notre modèle via la mesure de la longueur caractéristique ξ_{\perp} . Dans la figure 5.2, le fit de la distribution des hauteurs via l'équation 5.15 nous permet d'obtenir $\xi_{\perp}(\beta, B)$ de la figure 5.3. Ainsi, on obtient que

$$\xi_{\perp}(\beta, B) \propto \beta^{-0.34} B^{-0.70} \quad (5.16)$$

Est-ce utile de faire une étude plus poussée sur plus de B et β afin d'avoir une barre d'erreur sur les exposants ?

Grâce aux calculs, il est possible d'inverser 5.14 afin de trouver numériquement la tension superficielle du système. Dans le tableau 5.1, en supposant un exposant en β de -0.70 , un tableau à titre informatif sur la tension de surface calculée en fonction

1. En C++, les tableaux commençant par l'indice 0, il est donc plus simple de centrer le système loin de 0 afin de ne pas avoir à traduire les variables à chaque fois. Par ailleurs, le fit est très sensible aux conditions initiales.

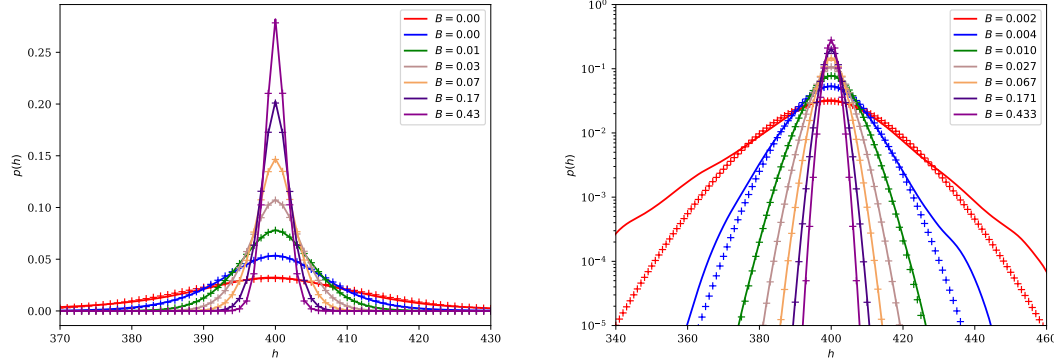


FIGURE 5.2 – Distribution de l'interface à $\beta = \beta_C$ autour d'un système centré à $L_Y = 400$ en ligne et un fit selon la distribution de Airy 5.15¹ en croix en échelle normale (à gauche) et en échelle log (à droite). Les écarts aux grandes fluctuations sont dues à un temps d'échantillonnage trop faible (10^8 MC steps) par rapport au temps de corrélation ($T_{cor} \simeq 100$), ce qui ne donne qu'environ 10^6 états décorrélés. Par comparaison, à haut champ magnétique, le temps de corrélation est $T_{cor} \simeq 2$.

de différents paramètres $T = \frac{1}{\beta}$ et B grâce à l'équation 5.14. Les grandes fluctuations de σ proviennent d'un échantillonnage trop faible du calcul de l'exposant de β et de B . De plus, d'après la figure 5.3, il semblerait que la loi en puissance ne soit pas valable dans tous les régimes, ce qui ajoute de l'incertitude à nos calculs. Au final on constate que $\sigma \simeq 4.5$ dans notre modèle pour $J = 1$. Des études plus approfondies utilisant la fonction de corrélation et $\xi_{||}$ permettraient calculer précisément la tension superficielle dans le modèle SOS.

T	B	ξ_{\perp}	Exposant de B	σ
0.5	0.01	3.94	-0.347	4.55
0.5	1.0	0.78	-0.347	4.01
1.0	0.01	6.29	-0.340	4.80
1.0	1.0	1.28	-0.340	4.23
1.5	0.01	8.36	-0.340	4.75
1.5	1.0	1.72	-0.340	4.36
2.0	0.01	10.26	-0.342	4.71
2.0	1.0	2.11	-0.342	4.37

TABLE 5.1 – Meilleure estimation possible de la tension superficielle d'après les simulations numériques pour quelques valeurs de T et de B .

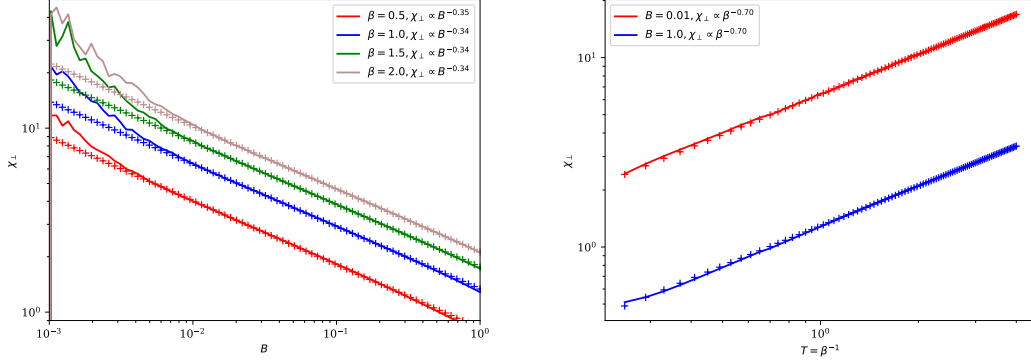


FIGURE 5.3 – ξ_{\perp} calculé via un fit de la distribution numérique par la distribution de Airy après 10^8 MC steps (5.15) en fonction du champ magnétique et à température constante (gauche) ou en fonction de la température et à champ magnétique constant (droite). Les fluctuations pour B petit s'expliquent par la difficulté d'équilibrage du système. On retrouve une loi en puissance comme dans l'équation 5.14.

5.3 Fonction de corrélation

On peut également calculer la fonction de corrélation à deux-points. D'après l'éq 5.7, l'énergie de chaque état est une longueur caractéristique de chaque mode, E_0 étant la plus importante contribution au système. La longueur de corrélation parallèle à l'interface étant de l'ordre de grandeur de E_0^{-1} , on a

$$\xi_{\parallel} = \frac{1}{E_0} = 2^{\frac{1}{3}} \beta^{-\frac{1}{3}} \sigma^{-\frac{1}{3}} B^{-\frac{2}{3}} \quad (5.17)$$

Dans la limite thermodynamique L grand, la fonction de corrélation à l'interface est

$$C_f(r) = \langle f(h(0))f(h(r)) \rangle - \langle f(h(0)) \rangle \langle f(h(r)) \rangle \quad (5.18)$$

Puisque nous sommes dans la limite thermodynamique, la fonction de partition devient $\mathcal{Z} \simeq e^{-E_0 L}$ et $\langle f(h(0)) \rangle = \langle f(h(r)) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dh f(h) \psi_0(h)^2$. On obtient alors que

$$C_f(r) = \sum_{n \neq 0} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dh f(h) \psi_n(h) \psi_0(h) \right]^2 \exp(-[\alpha_n - \alpha_0] \frac{r}{\xi_{\parallel}}) \quad (5.19)$$

En particulier, si

$$f(h) = \text{sign}(h - y) \quad (5.20)$$

alors $C_f(r) = C(y, r)$ est la fonction de corrélation spin-spin mesurée parallèlement à l'interface à la hauteur y . On peut décomposer l'intégrale en deux parties, et grâce à un changement de variable obtenir

$$\int_{-\infty}^{\infty} dh f(h) \psi_n(h) \psi_0(h) = 2 \int_y^{\infty} dh \psi_n(h) \psi_0(h) \quad (5.21)$$

Puisque les ψ_n sont des fonctions d'onde orthogonales répondant à l'équation de Schrödinger, l'intégrale pour $n \neq 0$ est

$$\begin{aligned} I(n, y) &= \int_y^{\infty} dh \psi_n(h) \psi_0(h) \\ &= \frac{1}{2} \frac{\psi_0(x) \psi'_n(y) - \psi_n(x) \psi'_0(y)}{\epsilon_n - \epsilon_0} \end{aligned} \quad (5.22)$$

Comme précédemment, on notant $z = \frac{y}{\xi_{\perp}}$, on simplifie la fonction de corrélation en

$$C(z, r) = \sum_{n \neq 0} \frac{[Ai(|z| - \alpha_0) Ai'(|z| - \alpha_n) - Ai(|z| - \alpha_n) Ai'(|z| - \alpha_0)]^2}{\int_0^{\infty} dz Ai^2(z - \alpha_0) 2 \int_0^{\infty} dz Ai^2(z - \alpha_n) (\alpha_n - \alpha_0)^2} e^{-[\alpha_n - \alpha_0] \frac{r}{\xi_{\parallel}}} \quad (5.23)$$

La constante de normalisation peut être encore simplifiée. L'intégration par partie donne

$$N_n = \int_0^{\infty} dz Ai^2(z - \alpha_n) = [z Ai^2(z - \alpha_n)]_0^{\infty} - 2 \int_0^{\infty} dz z Ai(z - \alpha_n) Ai'(z - \alpha_n) \quad (5.24)$$

Le terme aux limites est nul, et en utilisant l'équation d'Airy

$$Ai''(z) - z Ai(z) = 0 \implies z Ai(z - \alpha_n) = Ai''(z - \alpha_n) + \alpha_n Ai(z - \alpha_n) \quad (5.25)$$

on obtient

$$\begin{aligned} N_n &= -2 \int_0^{\infty} dz [Ai''(z - \alpha_n) + \alpha_n Ai(z - \alpha_n)] Ai'(z - \alpha_n) \\ &= Ai'^2(-\alpha_n) + \alpha_n Ai^2(-\alpha_n). \end{aligned} \quad (5.26)$$

Cela nous donne au final

$$C(z, r) = \frac{1}{6.7 \times 10^{-3}} \sum_{n \neq 0} \frac{[Ai(|z| - \alpha_0) Ai'(|z| - \alpha_n) - Ai(|z| - \alpha_n) Ai'(|z| - \alpha_0)]^2}{(Ai'^2(-\alpha_n) + \alpha_n Ai^2(-\alpha_n)) (\alpha_n - \alpha_0)^2} e^{-[\alpha_n - \alpha_0] \frac{r}{\xi_{\parallel}}} \quad (5.27)$$

À grande distance, seul le terme premier état excité $n = 1$ contribue à la fonction de corrélation, ce qui nous donne

$$C(x, r) \approx \frac{[\text{Ai}\left(\frac{|x|}{\xi_\perp} - \alpha_0\right) \text{Ai}'\left(\frac{|x|}{\xi_\perp} - \alpha_1\right) - \text{Ai}\left(\frac{|x|}{\xi_\perp} - \alpha_1\right) \text{Ai}'\left(\frac{|x|}{\xi_\perp} - \alpha_0\right)]^2}{[\text{Ai}'^2(-\alpha_1)\alpha_0\text{Ai}^2(-\alpha_0)](\alpha_1 - \alpha_0)^2} \exp(-[\alpha_1 - \alpha_0]\frac{r}{\xi_\parallel}). \quad (5.28)$$

This is still quite complicated but if we restrict attention to $x = 0$ we find

$$C(0, r) \approx \frac{1}{(\alpha_1 - \alpha_0)^2 \alpha_0} \exp(-[\alpha_1 - \alpha_0]\frac{r}{\xi_\parallel}). \quad (5.29)$$

However at $x = 0$ we can actually do better using the boundary conditions that $\text{Ai}(-\alpha_{2n+1}) = 0$ and $\text{Ai}'(-\alpha_{2n}) = 0$ to give

$$C(0, r) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\alpha_{2n+1} - \alpha_0)^2 \alpha_0} \exp(-[\alpha_{2n+1} - \alpha_0]\frac{r}{\xi_\parallel}). \quad (5.30)$$

We know that $C(0, 0) = 1$ and so (unless there is a mistake in the calculations) we have the remarkable identity

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\alpha_{2n+1} - \alpha_0)^2 \alpha_0} = 1. \quad (5.31)$$

The above calculation has some strange consequences, we see that for all x the correlation function for large r decays as

$$A\left(\frac{x}{\xi_\perp}\right) \exp(-[\alpha_1 - \alpha_0]\frac{r}{\xi_\parallel}), \quad (5.32)$$

where $A(x)$ is the x dependent amplitude, so the correlation length at large r is independent of the position x , now going into the bulk this predicts that $\xi_\parallel = \xi_b$ where ξ_b is the bulk correlation length (but in the presence of the magnetic field).

5.4 Conclusion

Peu d'études permettent de relier les propriétés macroscopiques d'un système à sa dynamique moléculaire. Dans ce chapitre, nous avons réussi à calculer, via différentes méthodes, l'adéquation entre la théorie et un système discret que l'on a pu simuler. Un fit de nos données a permis de relever une valeur pour la tension superficielle pour le

modèle SOS avec un hamiltonien gaussien et un champ magnétique agissant comme un laser.

Chapitre 6

Modèle Particle-Over-Particle

6.1 Particules indiscernables

Différence dans la fonction de partition en général

6.2 Avec le SOS

Le modèle Solid-On-Solid est l'approximation standard du modèle d'Ising car elle est étudiable analytiquement via sa matrice de transfert. Tout comme lorsque l'on déforme un flan seules les particules à l'interface flan-air peuvent bouger, dans le modèle SOS les particules loin de l'interface entre les deux phases ne peuvent bouger via l'agitation thermique. Nous proposons alors un modèle un peu plus physique, dans lequel chaque particule a le droit de bouger. Au lieu de ne considérer que la hauteur h_i au site i , nous considérons qu'il existe h_i particules empilées les unes sur les autres. Lors d'un déplacement, nous prenons une particule au hasard pour la déplacer vers le haut de la pile, puis vers un autre site j . Ainsi la fonction de partition devient

$$Z = \sum_{h_1 h_2 \dots h_L} e^{-\beta \sum_i H(i, i+1)} \frac{N!}{\prod_i n_i!} = N! \sum_{h_1 h_2 \dots h_L} e^{-\beta \sum_i H(i, i+1) - \sum_i \ln(n_i!)} \quad (6.1)$$

La matrice de transfert symétrisée devient donc

$$T(h, h') = e^{-J|h-h'| - \frac{1}{2}(\ln(h!) - \ln(h'!))} \quad (6.2)$$

où les termes $\ln(h)$ proviennent de l'entropie générée par la présence des particules au

sein même des sites. À notre connaissance, ce modèle n'a pas été aussi étudié que le modèle SOS bien qu'il soit physiquement plus proche du modèle d'Ising initial. Le fait que la matrice de transfert ne soit pas résolvable analytiquement en est peut-être la cause.

6.2.1 Modifications de l'algorithme Metropolis

au lieu de choisir un site, on choisit une particule, c'est-à-dire un site avec une proba pondérée.

6.3 Résultats modèle A

comment implémenter modèle A sur POP ? Différences avec SOS ?

6.4 Résultats modèle B

différences pour même hauteur moyenne, donner la distribution de hauteurs on en déduit quoi ? Mettre courbes de l'effet casimir, c'est pas mal

6.5 Résultats modèle A+B

certaines particules soumises à A, certaines à B.

Chapitre 7

A+B POP model : la totale

Précédemment, nous avons vu que l'écoulement injectée de l'énergie dans l'interface ne peut y être dissipée par des mécanismes d'évaporation, augmentant ainsi la largeur moyenne de l'interface. Nous avons également utilisé la présence de plusieurs types de particules afin de briser l'invariance par translation dans un repère galiléen par rapport à la vitesse moyenne induite par l'écoulement uniforme afin d'étudier les statistiques hors-équilibre.

Grâce à l'approche par la fonctionnelle de densité stochastique (SDFT) [?], nous étudions dans ce chapitre la possibilité de dispersion de l'énergie injectée par l'écoulement, et nous expliquons analytiquement pourquoi l'interface devient plus rigide. Afin de simplifier un peu les équations, nous allons supposer deux champs suivant le modèle C (selon la classification de Hohenberg et Halperin[1]). D'un côté nous avons les colloïdes, représentés par un champs possédant une dynamique conservée et se déplaçant à vitesse constante. De l'autre côté nous avons un couplage avec un réservoir d'un solvant.

7.1 Le modèle C=A+B

Soient deux champs scalaires ψ et ϕ représentant les valeurs moyennes mésoscopiques de deux types de particules différentes. On suppose que le système possède deux phases stables avec une concentration moyenne du champ $\phi(\vec{x})$ données par ψ_1 et ψ_2 , la différence du paramètre d'ordre entre les deux phases étant $\Delta\psi = \psi_2 - \psi_1 > 0$. On suppose également que $\phi(\vec{x}, z \rightarrow -\infty) = \psi_2$ et $\phi(\vec{x}, z \rightarrow \infty) = \psi_1$. On décompose l'hamiltonien deux parties,

$$H[\psi, \phi] = H_1[\psi] + H_2[\psi, \phi] \tag{7.1}$$

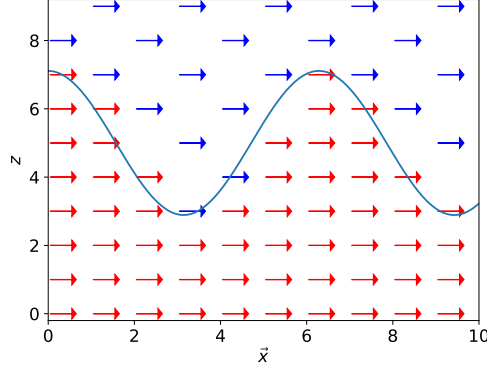


FIGURE 7.1 – Schéma d'un écoulement uniforme parallèle à l'interface dépendant de la phase. Ici, on prend un modèle d'interface ?? avec $\psi(\vec{x}) = \psi_2$ en dessous de l'interface et $\phi(\vec{x}) = \psi_1$ au dessus.

Le premier Hamiltonien H_1 , de la forme Landau-Ginzburg, correspond à l'énergie total du système

$$H_1[\psi] = \int d\vec{x} \left[\frac{\kappa}{2} [\nabla \psi(\vec{x})]^2 + V(\psi(\vec{x})) - gz\psi(\vec{x}) \right]. \quad (7.2)$$

où le premier terme représente la tension de surface et le troisième terme représente l'énergie due à la gravité. Ce même terme permet d'introduire une longueur de corrélation finie entre les deux phases.

Le second Hamiltonien H_2 est pris pour un couplage quadratique entre les deux champs

$$H_2 = \int d\vec{x} \frac{\lambda}{2} (1 - \psi(\vec{x}) - \phi(\vec{x}))^2, \quad (7.3)$$

où l'on considère la conservation du volume totale des fractions des phases. Le champ ϕ peut se comprendre comme la fraction volumique locale d'un solvant d'un système de colloïdes. L'objectif de ce champ est de proposer des particules qui ne sont pas concernées par l'écoulement, peut-être parce qu'elles bougent à une échelle de temps bien plus longue. La présence de ce champ ne change cependant rien aux propriétés à l'équilibre du champ de colloïdes ψ . L'ajout de ce champ couplé permet de supprimer l'invariance galiléenne par rapport à la vitesse moyenne provoquée par l'écoulement.

La fonction de partition s'écrit

$$Z = \int d[\phi] d[\psi] \exp(-\beta H_1[\psi] - \beta H_2[\psi, \phi]) = CZ_{eff}, \quad (7.4)$$

expliciter l'étape d'intégration où Z_{eff} est une fonction de partition effective ne dépendant que du champ ψ . is the effective partition function for the field ψ , after we have integrated out the degrees of freedom corresponding to the field ϕ , and C is a constant term resulting from this integration. The effective partition function is thus simply given by

La nouvelle fonction de partition est alors

$$Z_{eff} = \int d[\psi] \exp(-\beta H_1[\psi]), \quad (7.5)$$

Comme expliqué plus haut, on voit que le champ ϕ n'a plus aucun effet sur les propriétés statistiques à l'équilibre du champ ψ .

On considère maintenant la dynamique de schamps. On prend la modèle de diffusivité local (modèle B selon la classification d'Hohenberg et Halpering) pour le champ ψ tandis que l'on prend un modèle non conservé (modèle A) pour le solvant ϕ .

$$\frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{x}, t) = D \nabla^2 \frac{\delta H}{\delta \psi(\vec{x})} + \sqrt{2DT} \nabla \cdot \boldsymbol{\eta}_1(\vec{x}, t) \quad (7.6)$$

$$\frac{\partial \phi(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\alpha \frac{\delta H}{\delta \phi(\vec{x})} + \sqrt{2\alpha T} \eta_2(\vec{x}, t). \quad (7.7)$$

La première équation correspond à une diffusivité locale D et un terme d'advection par une champ de vitesse constant \vec{v} . La seconde équation correspond juste à l'équation du modèle A, avec un coefficient cinétique α correspondant au temps de relaxation du système vers l'équilibre.

The second equation has no advection term and is simple model A dynamics. In principle we can also treat the case where the dynamics of the field ϕ is also diffusive and thus of model B type, the analysis given here can be extended to this case but the analysis of the resulting equations is considerably more complicated. The use of model A dynamics for the solvent is justified by assuming that its dynamics is faster than that of the colloids and that the volume fraction can vary due to local conformational changes rather than diffusive transport.

The noise terms above are uncorrelated and Gaussian with zero mean, their correlation functions are given by

$$\langle \eta_{1i}(\vec{x}, t) \eta_{1j}(\vec{x}', t) \rangle = \delta_{ij} \delta(t - t') \delta(\vec{x} - \vec{x}') \quad (7.8)$$

$$\langle \eta_2(\vec{x}, t) \eta_2(\vec{x}', t) \rangle = \delta(t - t') \delta(\vec{x} - \vec{x}'), \quad (7.9)$$

and T is the temperature in units where $k_B = 1$. These dynamical equations are thus

explicitly given by

$$\frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \psi(\vec{x}, t) = D \nabla^2 \left[\frac{\delta H_1}{\delta \psi(\vec{x})} + \lambda(\phi(\vec{x}, t) + \psi(\vec{x}, t)) \right] + \sqrt{2DT} \nabla \cdot \boldsymbol{\eta}_1(\vec{x}, t) \quad (7.10)$$

and

$$\frac{\partial \phi(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\alpha \lambda [\phi(\vec{x}, t) + \psi(\vec{x}, t)] + \sqrt{2\alpha T} \eta_2(\vec{x}, t). \quad (7.11)$$

Taking the temporal Fourier transform, defined with the convention

$$\tilde{F}(\vec{x}, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(-i\omega t) F(\vec{x}, t), \quad (7.12)$$

we can eliminate the field $\tilde{\phi}$ which is given by

$$\tilde{\phi}(\vec{x}, \omega) = \frac{-\alpha \lambda \tilde{\psi}(\vec{x}, \omega) + \sqrt{2\alpha T} \tilde{\eta}_2(\vec{x}, \omega)}{i\omega + \alpha \lambda}, \quad (7.13)$$

this then gives the closed equation for $\tilde{\psi}$:

$$\left[1 - \frac{\lambda D \nabla^2}{i\omega + \alpha \lambda} \right] i\omega \tilde{\psi}(\vec{x}, \omega) + \vec{v} \cdot \nabla \tilde{\psi}(\vec{x}, \omega) = D \nabla^2 \tilde{\mu}(\vec{x}, \omega) + \tilde{\zeta}(\vec{x}, \omega), \quad (7.14)$$

where

$$\mu(\vec{x}, t) = \frac{\delta H_1}{\delta \psi(\vec{x}, t)} \quad (7.15)$$

is the effective chemical potential associated with the field ψ and the noise term is given by

$$\tilde{\zeta}(\vec{x}, \omega) = \frac{\sqrt{2\alpha T} D \lambda}{i\omega + \alpha \lambda} \nabla^2 \tilde{\eta}_2(\vec{x}, \omega) + \sqrt{2DT} \nabla \cdot \tilde{\boldsymbol{\eta}}_1(\vec{x}, \omega). \quad (7.16)$$

Inverting the temporal Fourier transform then gives the effective evolution equation

$$\frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} - \lambda D \nabla^2 \int_{-\infty}^t dt' \exp(-\alpha \lambda(t-t')) \frac{\partial \psi(\vec{x}, t')}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \psi(\vec{x}, t) = D \nabla^2 \mu(\vec{x}, t) + \zeta(\vec{x}, t). \quad (7.17)$$

7.2 Effective interface dynamics

We now follow the method of [? ?] to derive the dynamical equation for the interface between the two phases. It is assumed that the driving is in the $\mathbf{r} = (x, y)$ plane and that the system varies from phase 1 to phase 2 in the z direction. The dynamical evolution

for the field ψ in Eq. (7.17) is first written as

$$\nabla^{-2} \left[\frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla \psi(\vec{x}, t) \right] - \lambda D \int_{-\infty}^t dt' \exp(-\alpha \lambda(t-t')) \frac{\partial \psi(\vec{x}, t')}{\partial t'} = D\mu(\vec{x}, t) + \nabla^{-2} \zeta(\vec{x}, t). \quad (7.18)$$

We now assume that the field ψ can be written in the form

$$\psi(\vec{x}, t) = f(z - h(\mathbf{r}, t)), \quad (7.19)$$

and $f(z) \rightarrow \psi_2$ as $z \rightarrow -\infty$ and $f(z) \rightarrow \psi_1$ as $z \rightarrow \infty$. We now note the following results

$$\frac{\partial f(z - h(\mathbf{r}, t))}{\partial t} = -f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \frac{h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \quad (7.20)$$

$$\nabla f(z - h(\mathbf{r}, t)) = [\mathbf{e}_z - \nabla h(\mathbf{r}, t)] f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \quad (7.21)$$

$$\nabla^2 f(z - h(\mathbf{r}, t)) = f''(z - h(\mathbf{r}, t)) [1 + [\nabla h(\mathbf{r}, t)]^2] - \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \quad (7.22)$$

and thus we find

$$\mu(\vec{x}, t) = -\kappa \left(f''(z - h(\mathbf{r}, t)) [1 + \nabla^2 h(\mathbf{r}, t)] - \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \right) + V'(f(z - h(\mathbf{r}, t))) - gz. \quad (7.23)$$

Multiplying both sides of the above by $f'(z - h(\mathbf{r}, t))$ yields

$$\begin{aligned} f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \mu(\vec{x}, t) &= \\ &= -\kappa \left(f'(z - h(\mathbf{r}, t)) f''(z - h(\mathbf{r}, t)) [1 + \nabla^2 h(\mathbf{r}, t)] - \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) f'(z - h(\mathbf{r}, t))^2 \right) + V'(f(z - h(\mathbf{r}, t))) f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \\ &\quad - gz f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \end{aligned}$$

and then integrating over z we obtain

$$\begin{aligned} \int_{-\infty}^{\infty} dz f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \mu(\vec{x}, t) &= \kappa \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) \int_{-\infty}^{\infty} dz f'(z - h(\mathbf{r}, t))^2 - \int_{-\infty}^{\infty} dz gz f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \\ &= \kappa \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) \int_{-\infty}^{\infty} dz' f'(z')^2 - \int_{-\infty}^{\infty} dz' g(z' + h(\mathbf{r}, t)) f'(z') \\ &= \kappa \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) \int_{-\infty}^{\infty} dz' f'(z')^2 - \Delta \psi gh(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (7.24)$$

In the above we have assumed that $\int_{-\infty}^{\infty} dz' z' f'(z') = 0$ by symmetry (this is also consistent with the approximation made later on in Eq. (7.28)). Furthermore one can show that [? ?]

$$\kappa \int_{-\infty}^{\infty} dz' f'(z')^2 = \sigma, \quad (7.25)$$

where σ is the mean-field equilibrium Cahn-Hilliard estimate of the surface tension, obtained by assuming that $f(z) = \psi_{MF}(z)$ is the equilibrium mean field profile of the field ψ . We thus find

$$\int_{-\infty}^{\infty} dz f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \mu(\vec{x}, t) = \sigma [\nabla^2 h(\mathbf{r}, t) - m^2 h(\mathbf{r}, t)] \quad (7.26)$$

where $m^2 = \Delta\psi g/\sigma$. We now carry out the same operation on the left hand side of Eq. (7.18). First we have

$$\begin{aligned} \nabla^{-2} \frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} &+ \vec{v} \cdot \nabla \psi(\vec{x}, t) + \lambda D \int_{-\infty}^t dt' \exp(-\alpha \lambda(t - t')) \frac{\partial \psi(\vec{x}, t')}{\partial t'} = \\ &- \nabla^{-2} f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \left[\frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla h(\mathbf{r}, t) \right] + \lambda D \int_{-\infty}^t dt' \exp(-\alpha \lambda(t - t')) f'(z - h(\mathbf{r}, t')) \\ &\approx -\nabla^{-2} f'(z) \left[\frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla h(\mathbf{r}, t) \right] + \lambda D \int_{-\infty}^t dt' \exp(-\alpha \lambda(t - t')) f'(z) \frac{\partial h(\mathbf{r}, t')}{\partial t'}, \end{aligned}$$

where in the last line above we have neglected terms quadratic in h . Note that the neglecting of these additional terms is not strictly justified, they could potentially induce non-perturbative effects which render the surface fluctuations non-Gaussian. However we see here that the first order computation we carry out tends to reduce fluctuations with respect to equilibrium or non-driven interfaces and so if the equilibrium theory can be described by an equation which is linear in height fluctuations, it seems physically reasonable to assume that the approximation also holds for the driven interface. Again, we multiply the above by $f'(z)$ and integrate over z . In the first term we make use of the approximation

$$f'(z) = \Delta\psi \delta(z) \quad (7.28)$$

and in the second we use the relation in Eq. (7.25). Putting this all together we obtain

$$\Delta\psi^2 \int d\mathbf{r} G(0, \mathbf{r} - \mathbf{r}') \left[\frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla h(\mathbf{r}, t) \right] + \frac{\sigma \lambda D}{\kappa} \int_{-\infty}^t dt' \exp(-\alpha \lambda(t - t')) \frac{\partial h(\mathbf{r}, t')}{\partial t'} = \sigma [\nabla^2 h(\mathbf{r}, t) - m^2 h(\mathbf{r}, t)] \quad (7.29)$$

where $G = -\nabla^{-2}$, or more explicitly

$$\nabla^2 G(z - z', \mathbf{r} - \mathbf{r}') = -\delta(z - z') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (7.30)$$

The noise term ξ is given by

$$\xi(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} dz f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \nabla^{-2} \zeta(\vec{x}, t). \quad (7.31)$$

Now, as the equations of motion have been derived to first order in h and we wish to recover the correct equilibrium statistics for the non-driven system, we ignore the h dependence in the noise and make the approximation

$$\xi(\mathbf{r}, t) \approx \int_{-\infty}^{\infty} dz f'(z) \nabla^{-2} \zeta(\vec{x}, t). \quad (7.32)$$

The correlation function of this noise is most easily evaluated in terms of its Fourier transform with respect to space and time defined by

$$\hat{F}(\mathbf{q}, \omega) = \int dt d\mathbf{r} \exp(-i\omega t - i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) F(\mathbf{r}, t). \quad (7.33)$$

Using the relations Eqs. (7.25) and (7.28) one can show that

$$\langle \hat{\xi}(\mathbf{q}, \omega) \hat{\xi}(\mathbf{q}', \omega') \rangle = 2T(2\pi)^d \delta(\omega + \omega') \delta(\mathbf{q} + \mathbf{q}') \left[\frac{\sigma}{\kappa} \frac{\alpha D^2 \lambda^2}{\omega^2 + \alpha^2 \lambda^2} + \frac{D \Delta \psi^2}{2q} \right]. \quad (7.34)$$

In full Fourier space the equation of motion for the field ψ then reads

$$\left[i(\omega + \mathbf{q} \cdot \vec{v}) \frac{\Delta \psi^2}{2q} + \frac{D\sigma\lambda}{\kappa} \frac{i\omega}{\alpha\lambda + i\omega} \right] \hat{h}(\mathbf{q}, \omega) = -D\sigma(q^2 + m^2) \hat{h}(\mathbf{q}, \omega) + \hat{\xi}(\mathbf{q}, \omega). \quad (7.35)$$

From this, the full Fourier transform of the correlation function of the interface height is given by

$$\hat{C}(\mathbf{q}, \omega) = 2TD \frac{\left[\frac{\Delta \psi^2}{2q} (\omega^2 + \alpha^2 \lambda^2) + \frac{\sigma \alpha D \lambda^2}{\kappa} \right]}{\left| i \left[\frac{\alpha \lambda \Delta \psi^2}{2q} (\omega + \mathbf{q} \cdot \vec{v}) + \frac{\lambda \sigma D}{\kappa} \omega + D\sigma(q^2 + m^2) \omega \right] + [\alpha \lambda D \sigma(q^2 + m^2) - \frac{\Delta \psi^2}{2q} \omega (\omega + \mathbf{q} \cdot \vec{v})] \right|^2}. \quad (7.36)$$

Using the above we can extract the equal time height-height correlation function in the steady states. Its spatial Fourier transform can shown to be given by

$$\begin{aligned} \tilde{C}_s(\mathbf{q}) &= \frac{1}{2\pi} \int d\omega \hat{C}(\mathbf{q}, \omega) \\ &= T \frac{(2D\sigma q(\kappa[q^2 + m^2] + \lambda) + \alpha \kappa \lambda \Delta \psi^2)^2 + \kappa^2 \Delta \psi^4 (\mathbf{q} \cdot \vec{v})^2}{\sigma[q^2 + m^2] (2Dq\sigma(\kappa[q^2 + m^2] + \lambda) + \alpha \kappa \lambda \Delta \psi^2)^2 + \kappa (\kappa \sigma[q^2 + m^2] + \lambda \sigma) \Delta \psi^4 (\mathbf{q} \cdot \vec{v})^2} \end{aligned} \quad (7.37)$$

An outline of the derivation of this result is given in the Appendix to the paper. In the absence of driving, *i.e.* when $\vec{v} = \mathbf{0}$ we recover the equilibrium correlation function

$$\tilde{C}_s(\mathbf{q}) = \tilde{C}_{eq}(\mathbf{q}) = \frac{T}{\sigma[q^2 + m^2]}, \quad (7.38)$$

here we see that $1/m = \xi_{eq}$ is the so called capillary length, which is the equilibrium correlation length of the height fluctuations. We also notice that the correlation function for wave vectors perpendicular to the driving direction is simply the equilibrium one.

If we write $C_s(\mathbf{q}) = T/H_s(\mathbf{q})$ we can interpret $H_s(\mathbf{q})$ as an effective quadratic Hamiltonian for the height fluctuations, it is thus given by

$$H_s(\mathbf{q}) = \sigma[q^2 + m^2] + \frac{\kappa\lambda\sigma\Delta\psi^4(\mathbf{q} \cdot \vec{v})^2}{(2D\sigma q(\kappa[q^2 + m^2] + \lambda) + \alpha\kappa\lambda\Delta\psi^2)^2 + \kappa^2\Delta\psi^4(\mathbf{q} \cdot \vec{v})^2} \quad (7.39)$$

For small q we find

$$H_s(\mathbf{q}) = \sigma m^2 + \sigma q^2 \left(1 + \frac{v^2 \cos^2(\theta)}{\alpha^2 \lambda \kappa}\right), \quad (7.40)$$

where θ is the angle between the wave vector \mathbf{q} and the direction of the driving. This thus gives a direction dependent surface tension

$$\sigma_s(\theta) = \sigma \left(1 + \frac{v^2 \cos^2(\theta)}{v_0^2}\right), \quad (7.41)$$

where we have introduced the intrinsic velocity $v_0 = \sqrt{\alpha^2 \lambda \kappa}$ which depends on the microscopic *dynamical* quantity α associated with the model A dynamics of the field ϕ , as well as the microscopic static quantities κ (which generates the surface tension) and λ the coupling between the field ψ and ϕ . This appearance of dynamical and static quantities that are otherwise hidden in equal time correlation functions in equilibrium is already implicit in the works of Onsager [?] where it is used to compute the conductivity of Brownian electrolytes and the explicit expressions were derived using stochastic density functional theory in [?]. We also note that the universal thermal Casimir effect between model Brownian electrolyte systems driven by an electric field exhibits similar features, developing a dependency on both additional static and dynamical variables with respect to the equilibrium case [?]

However for this small q expansion we see that the microscopic quantities D , the diffusion constant of the field ϕ , and the order parameter jump $\Delta\psi$ do not appear.

From the above, we see that in the direction of the driving the surface tension increases and the fluctuations of the surface are thus suppressed. We may also write

$$H_s(\mathbf{q}) = \sigma_s(\theta)[q^2 + m_e^2(\theta)], \quad (7.42)$$

with

$$m_s^2(\theta) = \frac{m^2}{1 + \frac{v^2 \cos^2(\theta)}{v_0^2}}, \quad (7.43)$$

this corresponds to a correlation length

$$\xi_s = \xi_{eq} \sqrt{1 + \frac{v^2 \cos^2(\theta)}{v_0^2}}, \quad (7.44)$$

and we see that it is increased in the direction of the driving.

As we have just remarked that the above results appear to be independent of the order parameter jump $\Delta\psi$ and the diffusion constant D , however the next order correction to H_s for small q is given by

$$H_s(\mathbf{q}) = \sigma_s(\theta)[q^2 + m_e^2(\theta)] - \frac{4Dq\sigma^2(\lambda + \kappa m^2)(\mathbf{q} \cdot \vec{v})^2}{\alpha^3 \kappa^2 \lambda^2 \Delta\psi^2}, \quad (7.45)$$

and so the small \mathbf{q} expansion breaks down at $\Delta\psi = 0$, indeed one can see that the system has exactly the equilibrium correlation function when $\Delta\psi = 0$.

In the limit of large q we see that the effective Hamiltonian is given, to leading order, by the original equilibrium Hamiltonian and so the out of equilibrium driving has no effect on the most energetic modes of the system.

The results here predict that for unconfined surfaces the long range height fluctuations are described by an isotropic form of capillary wave theory with an anisotropic surface tension which is largest in the direction of driving. Numerical simulations of driven lattice gases in two dimensions [?] show a more drastic change upon driving and find $C_s(q) \sim 1/q$ ⁶⁶ and thus a strong deviation from capillary wave theory.

7.3 A model of active interfaces

We can apply the results derived in the previous section to analyse a simple model for surfaces formed between two phases of active colloids. Activity is modelled by assuming that the colloidal field ψ has a temperature different to that of the solvent field ϕ . This models the effect that activity leads to enhanced colloidal diffusivity over and above the Brownian motion of particles due to thermal fluctuations [?].

In the absence of any driving the dynamical equations for the field ψ and ϕ become

$$\frac{\partial \psi(\vec{x}, t)}{\partial t} = D \nabla^2 \frac{\delta H}{\delta \psi(\vec{x})} + \sqrt{2DT_1} \nabla \cdot \boldsymbol{\eta}_1(\vec{x}, t) \quad (7.46)$$

$$\frac{\partial \phi(\vec{x}, t)}{\partial t} = -\alpha \frac{\delta H}{\delta \phi(\vec{x})} + \sqrt{2\alpha T_2} \eta_2(\vec{x}, t). \quad (7.47)$$

Following the same arguments as above we find that

$$\hat{C}(\mathbf{q}, \omega) = 2D \frac{\left[T_1 \frac{\Delta \psi^2}{2q} (\omega^2 + \alpha^2 \lambda^2) + T_2 \frac{\sigma \alpha D \lambda^2}{\kappa} \right]}{\left| i\omega \left[\frac{\alpha \lambda \Delta \psi^2}{2q} + \frac{\lambda \sigma D}{\kappa} + D\sigma(q^2 + m^2) \right] + [\alpha \lambda D\sigma(q^2 + m^2) - \frac{\Delta \psi^2}{2q} \omega^2] \right|^2}. \quad (7.48)$$

The equal time steady state height fluctuations thus have correlation function

$$\tilde{C}_s(q) = \frac{T_1}{\sigma(q^2 + m^2)} \left[1 - \left(1 - \frac{T_2}{T_1} \right) \frac{\lambda \sigma}{\kappa} \frac{1}{\frac{\alpha \lambda \Delta \psi^2}{2Dq} + \frac{\lambda \sigma}{\kappa} + \sigma(q^2 + m^2)} \right]. \quad (7.49)$$

We see, again, that the inclusion of a non-equilibrium driving changes the statistics of height fluctuations and leads to a steady state that depends on both dynamical variables D and α as well as static ones $\Delta \psi$, λ and κ that remain hidden in the equilibrium case. This phenomenon is again seen in the behavior of the universal thermal Casimir force between Brownian conductors held at different temperatures [?].

If we assume strong activity we can take the limit $T_1 \gg T_2$, in this case we find

$$\tilde{C}_s(q) = \frac{T_1}{\sigma(q^2 + m^2)} \frac{\frac{\alpha \lambda \Delta \psi^2}{2Dq} + \sigma(q^2 + m^2)}{\frac{\alpha \lambda \Delta \psi^2}{2Dq} + \frac{\lambda \sigma}{\kappa} + \sigma(q^2 + m^2)}. \quad (7.50)$$

Interpreted in terms of an effective Hamiltonian for an equilibrium system at the temperature T_1 the above gives

$$H_s(q) = \sigma(q^2 + m^2) \left[1 + \frac{\lambda \sigma}{\kappa} \frac{q}{\frac{\alpha \lambda \Delta \psi^2}{2D} + q\sigma(q^2 + m^2)} \right]. \quad (7.51)$$

In the case of an unconfined interface (where there is no gravitational effect on the surface fluctuations) *i.e.* $m = 0$ we see that for small q

$$H_s(q) \approx \sigma q^2 + \frac{2D\sigma^2}{\kappa \alpha \Delta \psi^2} q^3. \quad (7.52)$$

We see that the effective surface tension is not modified but a reduction of fluctuations

due to the presence of the term in q^3 arises. As in the case of a driven system, we see that the large q behavior of the effective Hamiltonian is given by the equilibrium case where $T = T_1 = T_2$.

In the case where the interface is confined, we see that for small q one obtains

$$H_s(q) \approx \sigma m^2 \left[1 + \frac{2D\sigma}{\kappa\alpha\Delta\psi^2} q \right], \quad (7.53)$$

and thus at the largest length scales of the problem there is a qualitative departure from capillary wave behavior, and the correlation length of height fluctuations at the largest length scales is given by

$$\xi_s = \frac{2D\sigma}{\kappa\alpha\Delta\psi^2}. \quad (7.54)$$

The above result should be compared with that obtained in [?] for systems with anisotropic thermal white noise, which breaks detailed balance and mimics random driving of the system parallel to the interface; for free interfaces it was found that $C_s(q) \sim 1/q$.

7.4 Conclusions

We have presented a model to analyse the effect of uniform driving on the dynamics of the interface in a two phase system. In order to generate a non-equilibrium state a second *hidden* order parameter was introduced. This models the behaviour of a local or solvent degree of freedom which is not influenced by the driving field. In this way, we obtain out of equilibrium interface fluctuations which are described by Gaussian statistics as found in the experimental study of [?]. The agreement with this experimental study also extends to qualitative agreement with the increase of the effective surface tension in the direction of driving and also an increase in the correlation length of the height fluctuations with respect to a non-driven equilibrium interface. However, we note that numerical simulations of a sheared Ising interface [?] also reveal a reduction of interface fluctuations but the lateral correlation length is found to be reduced.

The basic idea underlying this study would be interesting to apply to a number of possible variants of this model, for instance both the dynamics of the main field ϕ and the solvent field ϕ could be varied. To make a direct link with driven colloidal interfaces one should study model H type dynamics for the main field ϕ and other variants for the dynamics of the solvent field ϕ could also be considered.

As mentioned above, in lattice based models driving induces non-equilibrium states even in the simple Ising lattice gas. A model analogous to that studied here can be

formulated in a lattice based systems using the Hamiltonian

$$H = -J \sum_{(ij)} S_i S_j (1 + \sigma_{(ij)}), \quad (7.55)$$

where $S_i = \pm 1$ are Ising spins at the lattice sites i , and $\sigma_{(ij)} = \pm 1$ are Ising like dynamical solvent variables associated with the lattice links (ij) . The static partition function is given by

$$Z = \text{Tr}_{\sigma_{ij}, S_i} \exp \left[\beta J \sum_{(ij)} S_i S_j (1 + \sigma_{(ij)}) \right], \quad (7.56)$$

and the trace over the solvent variables can be trivially carried out to give

$$Z = \text{Tr}_{S_i} \left(\exp \left[\beta J \sum_{(ij)} S_i S_j \right] \prod_{(ij)} 2 \cosh(\beta J S_i S_j) \right) = [2 \cosh(\beta J)]^L \text{Tr}_{S_i} \exp(\beta J \sum_{(ij)} S_i S_j), \quad (7.57)$$

where L is the number of links on the lattice of the model. We thus see that the underlying effective static model is precisely the zero field Ising model.

This model can then be driven in a number of ways, for instance using conserved Kawasaki dynamics for the Ising spins to model diffusive dynamics in the presence of a uniform driving field parallel to the surface between the two phases at a temperature below the ferromagnetic ordering temperature T_c . The dynamics of the Ising spins on the lattice links can be given by non-conservative single spin flip, for instance Glauber, dynamics to keep the analogy with the continuum model discussed in the paper but diffusive dynamics or indeed a mixture of diffusive and non-conserved dynamics could be implemented. It would be interesting to see to what extent this modification of the driven lattice gas model affects the non-equilibrium driven states that arise.

It is also clear that this lattice model can be used to simulate the effect of activity where the Ising spins S_1 corresponding to the colloid field undergo Kawasaki dynamics at the temperature T_1 where as the link variables $\sigma_{(ij)}$ undergo single spin flip non-conserved dynamics at the temperature T_2 .

7.5 Acknowledgements

The authors acknowledge support from the ANR (France) Grant FISICS

.1 Evaluating Fourier integrals

Here we outline how the Fourier integration leading to Eq. (7.37) is carried out. Defining

$$I(f(\omega)) = \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{f(\omega)}{|i(A\omega + B) + (C - D\omega - E\omega^2)|} \quad (58)$$

we see that the integral we need to evaluate can be written in the form

$$I = aI(\omega^2) + bI(1). \quad (59)$$

The calculation leading to Eq. (7.35) can be carried out in the presence of a forcing term on the height profile in order to compute the response function for the surface which has a denominator of the form

$$\text{Den} = i(A\omega + B) + (C - D\omega - E\omega^2), \quad (60)$$

and due to causality the above only has poles in the upper complex plane (due to the convention of Fourier transforms used here). Consequently we find that

$$\int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{i(A\omega + B) + (C - D\omega - E\omega^2)} = 0, \quad (61)$$

as one may close the integration contour in the lower half of the complex plane. Taking the real and imaginary part of Eq. (61) leads to

$$CI(1) - DI(\omega) - EI(\omega^2) = 0 \quad (62)$$

$$AI(\omega) + BI(1) = 0. \quad (63)$$

Using this we can express $I(\omega^2)$ as a function of $I(1)$, and explicitly we have

$$I(\omega^2) = \frac{I(1)}{E} \left[C + \frac{DB}{A} \right]. \quad (64)$$

To evaluate $I(1)$ we now use

$$I(1) = -\text{Im} \int \frac{d\omega}{2\pi} \frac{1}{A\omega + B} \frac{1}{i(A\omega + B) + (C - D\omega - E\omega^2)}. \quad (65)$$

The integrand above has no poles in the lower half of the complex plane but has a *half*

pole at $\omega = -B/A$ on the real axis, thus using standard complex analysis we find

$$I(1) = \frac{1}{2(CA + BD - \frac{EB^2}{A})}. \quad (66)$$

Then after some laborious, but straightforward algebra, the results Eq. (7.37) is obtained.

The dynamics of discrete particle systems is however affected by uniform driving of identical particles. The study of driven lattice gases has revealed a wide range of intriguing physical phenomena and indeed shown how driving can even lead to phase separation [? ? ? ? ?]. The discrete nature of the dynamics of these systems, both in space and time, means that no Galilean transformation to an equilibrium state exists. Analytical studies of these systems require a phase ordering kinetics description in terms of a continuum order parameter. In order to break Galilean invariance the local mobility of the particles can be taken to be dependent on the local order parameter, this is then sufficient to induce non-trivial steady states under driving [? ? ? ? ?]. Interfaces between the separated phases in uniformly driven systems have non capillary behaviors which are, even today, not fully understood [?]. Taking random driving in a given direction also leads to non-equilibrium steady states, if the noise is Gaussian and white, the fluctuation dissipation theorem is violated and novel interface fluctuations are induced which, again, are not of the capillary type [?].

Conclusion et perspectives

Bibliographie

- [1] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin. Theory of dynamic critical phenomena. *Reviews of Modern Physics*, 49(3) :435–479, July 1977.
- [2] A. J. Bray. Theory of phase-ordering kinetics. *Advances in Physics*, 43(3) :357–459, June 1994.
- [3] Pavel L Krapivsky, Sidney Redner, and Eli Ben-Naim. *A Kinetic View of Statistical Physics*. Cambridge University Press, Leiden, 2010. OCLC : 669127014.
- [4] Timothy Halpin-Healy and Yi-Cheng Zhang. Kinetic roughening phenomena, stochastic growth, directed polymers and all that. Aspects of multidisciplinary statistical mechanics. *Physics Reports*, 254(4-6) :215–414, March 1995.
- [5] L. Landau and E. Lifchitz. *Physique théorique - T9 Physique Statistique*. Éditions Mir Moscou. 1990.
- [6] Andrea Pelissetto and Ettore Vicari. Critical Phenomena and Renormalization-Group Theory. *Physics Reports*, 368(6) :549–727, October 2002. arXiv : cond-mat/0012164.
- [7] John W Cahn and John E Hilliard. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. page 11.
- [8] J. S. Langer, M. Bar-on, and Harold D. Miller. New computational method in the theory of spinodal decomposition. *Physical Review A*, 11(4) :1417–1429, April 1975.
- [9] Kyozi Kawasaki, Mehmet C. Yalabik, and J. D. Gunton. Growth of fluctuations in quenched time-dependent Ginzburg-Landau model systems. *Physical Review A*, 17(1) :455–470, January 1978.

- [10] David Lopes Cardozo and Peter Holdsworth. *Finite size scaling et force de Casimir critique : aimants d'Ising et fluides binaires*. PhD thesis, Ecole normale supérieure de lyon-ENS LYON, 2015.
- [11] H. B. G. Casimir. On the attraction between two perfectly conducting plates. *Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences*, 51(7) :793–498, 1948.
- [12] Hrvoje Nikolić. Is zero-point energy physical? A toy model for Casimir-like effect. *Annals of Physics*, 383, 2017.
- [13] Van Duc Nguyen, Suzanne Faber, Zhibing Hu, Gerard H. Wegdam, and Peter Schall. Controlling colloidal phase transitions with critical Casimir forces. *Nature Communications*, 4(1), June 2013.
- [14] Alan J. Bray, Andrea Cavagna, and Rui D. M. Travasso. Interface fluctuations, Burgers equations, and coarsening under shear. *Physical Review E*, 65(1) :016104, December 2001.
- [15] S. F. Edwards and D. R. Wilkinson. The Surface Statistics of a Granular Aggregate. *Proceedings of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences*, 381(1780) :17–31, 1982.
- [16] Mehran Kardar, Giorgio Parisi, and Yi-Cheng Zhang. Dynamic Scaling of Growing Interfaces. *Physical Review Letters*, 56(9) :889–892, March 1986.
- [17] L. Miettinen, M. Myllys, J. Merikoski, and J. Timonen. Experimental determination of KPZ height-fluctuation distributions. *The European Physical Journal B*, 46(1) :55–60, July 2005.
- [18] T. A. de Assis and F. D. A. Aarão Reis. Dynamic scaling and temperature effects in thin film roughening. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2015(6) :P06023, 2015.
- [19] G. Foltin, K. Oerding, Z. Rácz, R.L. Workman, and R.K.P. Zia. Width distribution for random-walk interfaces. *Physical Review E*, 50(2), 1994.
- [20] Tibor Antal and Zoltán Rácz. Dynamic scaling of the width distribution in Edwards-Wilkinson type models of interface dynamics. *Physical Review E*, 54(3) :2256–2260, September 1996.

- [21] Satya N. Majumdar and Alain Comtet. Airy Distribution Function : From the Area Under a Brownian Excursion to the Maximal Height of Fluctuating Interfaces. *Journal of Statistical Physics*, 119(3-4) :777–826, May 2005.
- [22] Kyozi Kawasaki. Diffusion Constants near the Critical Point for Time-Dependent Ising Models. I. *Physical Review*, 145(1) :224–230, May 1966.
- [23] Kyozi Kawasaki. Correlation-Function Approach to the Transport Coefficients near the Critical Point. I. *Physical Review*, 150(1) :291–306, October 1966.
- [24] J. Villain. Continuum models of crystal growth from atomic beams with and without desorption. *Journal de Physique I*, 1(1) :19–42, January 1991.
- [25] Z.-W. Lai and S. Das Sarma. Kinetic growth with surface relaxation : Continuum versus atomistic models. *Physical Review Letters*, 66(18) :2348–2351, May 1991.
- [26] Yup Kim, D. K. Park, and Jin Min Kim. Conserved growth in a restricted solid-on-solid model. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 27(15) :L533, 1994.
- [27] T. J. Oliveira and F. D. A. Aarão Reis. Maximal- and minimal-height distributions of fluctuating interfaces. *Physical Review E*, 77(4), April 2008.
- [28] Tapas Singha and Malay K Nandy. A renormalization scheme and skewness of height fluctuations in $(1 + 1)$ -dimensional VLDS dynamics. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2016(2) :023205, February 2016.
- [29] Alan J. Bray, Andrea Cavagna, and Rui D. M. Travasso. Interface fluctuations under shear. *Physical Review E*, 64(1) :012102, June 2001.
- [30] Didi Derks, Dirk G. A. L. Aarts, Daniel Bonn, Henk N. W. Lekkerkerker, and Arnout Imhof. Suppression of Thermally Excited Capillary Waves by Shear Flow. *Physical Review Letters*, 97(3), July 2006.
- [31] Kwan-tai Leung and John L. Cardy. Field theory of critical behavior in a driven diffusive system. *Journal of Statistical Physics*, 44(3-4) :567–588, August 1986.
- [32] Per Arne Rikvold and M. Kolesik. Microstructure and velocity of field-driven solid-on-solid interfaces : Analytic approximations and numerical results. *Physical Review E*, 66(6) :066116, December 2002.

- [33] G. Gonnella, A. Pelizzola, L. Rondoni, and G. P. Saracco. Nonequilibrium work fluctuations in a driven Ising model. *Physica A : Statistical Mechanics and its Applications*, 388(14) :2815–2820, July 2009.
- [34] Thomas HR Smith. *Driven interfaces in the Ising model*. PhD thesis, University of Bristol, 2010.
- [35] Thomas H R Smith, Oleg Vasilyev, Douglas B Abraham, Anna Maciołek, and Matthias Schmidt. Interfaces in confined Ising models : Kawasaki, Glauber and sheared dynamics. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 20(49) :494237, December 2008.
- [36] Tridib Sadhu, Satya N. Majumdar, and David Mukamel. Non-local response in a lattice gas under a shear drive. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 47(50) :505005, 2014.
- [37] O. Cohen and D. Mukamel. Interface localization in the 2D Ising model with a driven line. *Journal of Physics A : Mathematical and Theoretical*, 49(15) :155002, 2016.
- [38] David S. Dean, Paul Gersberg, and Peter C. W. Holdsworth. The effect of driving on model C interfaces. *arXiv :2001.04245 [cond-mat]*, January 2020. arXiv : 2001.04245.