

Table des matières

Introduction	iii
1 Équations dynamiques des systèmes statistiques	1
1.1 Équation dynamique d'un champ	3
1.1.1 Champ avec un nombre de degrés de liberté fini	3
1.1.2 Théorie statistique des champs	5
1.1.3 Modèle ϕ^4	7
1.1.4 Tension superficielle	10
1.2 Effets de taille finie	11
1.2.1 Hypothèse d'invariance d'échelle	11
1.2.2 Pression de séparation et force de Casimir critique	14
1.2.3 Intégration sur le paramètre d'ordre	15
1.3 Modèles d'interface	16
1.3.1 Modèle A	17
1.3.2 Modèle B	19
1.4 Systèmes hors équilibre	21
1.5 Conclusion	23
2 Modèles sur réseaux	25
2.1 Le modèle d'Ising	26
2.1.1 Caractérisation de l'interface	28
2.1.2 Méthode de calcul de la force de Casimir	29
2.2 Modèle Solid-On-Solid	31
2.2.1 Définition du modèle	31
2.2.2 Ensemble grand-canonique et potentiel chimique	34
2.2.3 Matrice de Transfert	36
2.2.4 États libres dans un système SOS infini	39

2.3	Conclusion	42
3	Méthodes numériques	43
3.1	Algorithme de Monte Carlo Metropolis	44
3.2	Suite	47
3.2.1	Ensemble grand-canonique : algorithme de Glauber	49
3.2.2	Ensemble canonique : algorithme de Kawasaki	50
3.2.3	Dynamique hors-équilibre	51
3.2.4	Modèle POP	53
3.3	Conclusion	53
4	Effets de taille finie	55
4.1	Limite thermodynamique	56
4.2	Effet Casimir	56
4.3	Hamiltonien de transition	59
4.4	Intégration sur le potentiel chimique	59
4.5	Conclusion	62
5	Interaction gaussienne avec champ magnétique confinant	65
5.1	Interface statique	66
5.1.1	Distribution de probabilité de l'interface	66
5.1.2	Fonction de corrélation	69
5.1.3	Tension superficielle effective	72
5.2	Interface hors-équilibre	74
5.3	Conclusion	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 intéressantes. Lors d'une transition de phase continue, la largeur de l'interface entre deux phases diverge jusqu'à atteindre une taille macroscopique. Lorsque cette largeur caractéristique devient du même ordre de grandeur que la cellule expérimentale ou numérique, le système ainsi confiné est soumis 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 de degrés de liberté du système. Une manière de simplifier le problème est de réduire la dimensionnalité du système d'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, rendant possible l'usage du formalisme stochastique. Cette méthode permet d'étudier la théorie des ondes capillaires, théorie décrivant les propriétés des interfaces. 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 lorsque le système est de taille finie dans une direction avec ou sans les conditions de bords sur les surfaces correspondantes. Cependant, les propriétés d'une interface varient également lorsqu'elle est mise hors-équilibre, par exemple via une force générée par un 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.

Au final, la présence d'effets de taille finie nous mène à prendre en compte la non-équivalence des ensembles thermodynamiques canoniques et grand-canoniques loin de la limite thermodynamique. Nous porterons une attention particulière dans les cas où ces deux ensembles se comportent de manière différente.

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 lesquelles 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

Équations dynamiques des systèmes statistiques

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, se comportent de manière dynamique. L'exemple le plus connu est le modèle d'Ising en absence de champ magnétique, le paramètre d'ordre de la transition étant la magnétisation totale du système. Dans la phase haute température, le système est homogène et sa magnétisation est nulle. 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 brisure spontanée de symétrie fera que l'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 égaux sont de taille égale à la longueur de corrélation du système. Dans les transitions de phase telles que celles du modèle d'Ising, cette longueur de corrélation diverge lorsque l'on s'approche de la température critique T_C . Dans un système thermodynamique, elle devient infinie, impliquant que le système prend un temps infini pour atteindre l'équilibre thermodynamique : c'est le ralentissement critique. Ce processus de croissance des domaines depuis la phase désordonnée s'appelle le *coarsening* et la théorie de la cinétique d'ordre des phases est la théorie développée pour le comprendre. Cette thèse s'appuie sur cette théorie afin de déterminer les propriétés

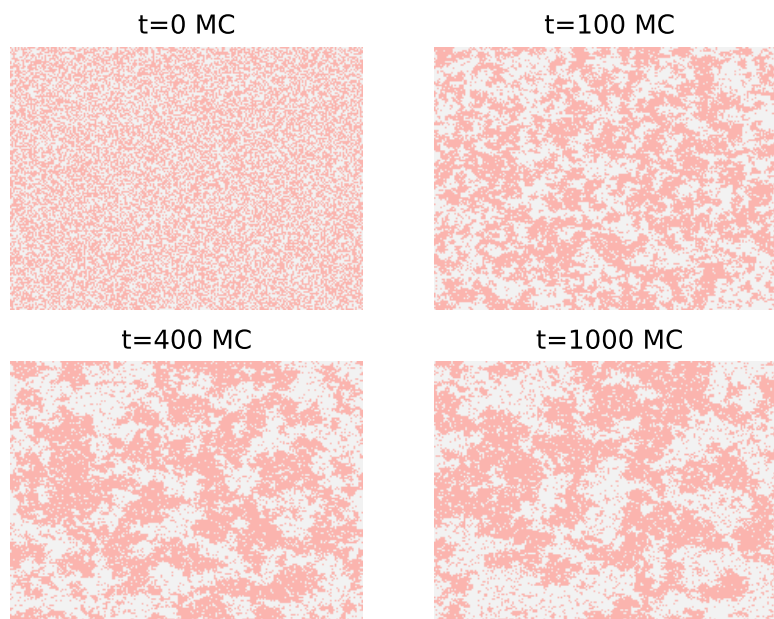


FIGURE 1.1 – Phénomène d’aggrégation à partir d’une trempe (*quench*) dans un modèle d’Ising de $T = \infty$ à $T = T_{2D,C}$ [5] pour différents temps en étapes de Monte Carlo, pour un système 600×600 avec une dynamique non-conservée de Glauber.

statistiques (telles que la position moyenne et la tension superficielle) des interfaces entre deux phases coexistantes.

Les configurations d’équilibre possibles proviennent du compromis entre la minimisation de l’énergie totale et la maximisation de l’entropie. La dynamique hors-équilibre du coarsening qui en résulte peut être étudiée en construisant un modèle qui minimise l’énergie en fonction du temps, malgré le bruit thermique. Dans la figure 1.1, nous montrons un exemple de coarsening dans le cas du modèle d’Ising en fonction du temps. Nous verrons tout au long de ce travail comment les propriétés statistiques sont influencées par l’ensemble thermodynamique dans lequel on se place. Nous nous référons principalement dans ce chapitre aux références [1, 2, 3, 4].

La mesure des observables nécessite une connaissance parfaite de la dérivée de la fonction de partition \mathcal{Z} , et donc d’explorer l’espace des phases des configurations du système. 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 de mesure est bonne, et plus la mesure des observables dérivées de la fonction de partition est précise. Si $\Phi(\mathbf{x}, t)$ est le champ réel de l'observable du système, alors l'appareil, possédant une précision dans le temps et l'espace de $(dt, 2dx, 2dy, 2dz)$ mesure le champ

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{8 \, dt \, dx \, dy \, dz} \int_{t-dt}^t dt' \int_{x-dx}^{x+dx} dx' \int_{y-dy}^{y+dy} dy' \int_{z-dz}^{z+dz} dz' \Phi(x, y, z, t) \quad (1.1)$$

1.1 Équation dynamique d'un champ

1.1.1 Champ avec un nombre de degrés de liberté fini

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

$$Z = \int d\mathbf{q} \exp(-\beta H(\mathbf{q})) \quad (1.2)$$

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

$$P_{eq}(\mathbf{q}) = \frac{\exp(-\beta H(\mathbf{q}))}{Z} \quad (1.3)$$

À cause du trop grand nombre de degrés de libertés, la fonction de partition est rarement calculable analytiquement. Dans la limite $\beta \rightarrow \infty$, l'entropie des états excités devient négligeable, et l'intégrale peut s'approcher par la méthode de Laplace pour l'évaluation des intégrales

$$Z_{MF} = \exp(-\beta H(\mathbf{q}^*)) \quad (1.4)$$

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

$$\frac{\partial H}{\partial q_i} \Big|_{\mathbf{q}=\mathbf{q}^*} = 0 \quad (1.5)$$

À cause du bruit thermique, le système évolue dans le voisinage de \mathbf{q}^* dans l'espace des configuration : c'est **le champ moyen**. Dans cette approximation de champ moyen, toute observable est donnée par

$$\langle f(\mathbf{q}) \rangle = f(\mathbf{q}^*) \quad (1.6)$$

On considère maintenant l'évolution temporelle du champ réel \mathbf{q}

$$\frac{dq_i}{dt} = -L_{ij} \frac{\partial H(\mathbf{q})}{\partial q_j} + \eta_i(t) \quad (1.7)$$

où L_{ij} est un opérateur matriciel à définir afin que le système respecte la distribution à l'équilibre de Gibbs-Boltzmann, et $\eta_i(t)$ un bruit blanc gaussien de fonction de corrélation

$$\langle \eta_i(t) \eta_j(t') \rangle = \delta(t - t') \Gamma_{ij} \quad (1.8)$$

Le bruit blanc gaussien représente l'effet des fluctuations thermiques sur le système. On considère ici que le temps de corrélation de ces fluctuations est bien plus court que le temps caractéristique de l'évolution temporelle des degrés de liberté q_i , ce qui est de plus en plus vrai lorsque l'on se rapproche du point critique[], à cause du ralentissement critique. Par symétrie des fonctions de corrélation et de l'équation précédente nous pouvons en déduire que la matrice Γ_{ij} doit être symétrique et ne contenir que des valeurs propres positives. À $T = 0$, le système a tendance à minimiser son énergie, c'est-à-dire que

$$\frac{\partial H(\mathbf{q})}{\partial q_j} = 0 \quad (1.9)$$

Dans cette limite, l'équation 1.7 devient $\frac{dq_i}{dt} = 0$, impliquant que le terme $\frac{\partial H(\mathbf{q})}{\partial q_j}$ est le seul responsable de l'évolution du système. Tant que la matrice L_{ij} est inversible, la dynamique à $T = 0$ fera tendre le système vers le minimum global en absence de configurations métastables. L'équation de Fokker-Planck de la densité de probabilité de la fonction des degrés de liberté $p(\mathbf{q}, t)$ s'écrit

$$\frac{\partial p(\mathbf{q}, t)}{\partial t} = \frac{\partial}{\partial q_i} \left[\frac{1}{2} \Gamma_{ij} \frac{\partial p(\mathbf{q}, t)}{\partial q_j} + p(\mathbf{q}, t) L_{ij} \frac{\partial H(\mathbf{q})}{\partial q_j} \right] \quad (1.10)$$

ou de manière plus concise

$$\frac{\partial p(\mathbf{q}, t)}{\partial t} + \frac{\partial}{\partial q_i} J_i(\mathbf{q}, t) = 0 \quad (1.11)$$

où $\mathbf{J}(\mathbf{q}, t)$ est le courant de probabilité. Le système respecte l'équilibre de Gibbs-Boltzmann si et seulement si $p(\mathbf{q}, t) = P_{eq}(\mathbf{q})$ (donné par l'équation 1.3) et que le courant est nul,

c'est-à-dire

$$\left[-\frac{\beta}{2}\Gamma_{ij} + L_{ij} \right] \frac{\partial H(\mathbf{q})}{\partial q_j} = 0 \quad (1.12)$$

Puisque cette relation est vraie quelque soit l'Hamiltonien considéré, on trouve pour tout système thermodynamique à l'équilibre la relation

$$\Gamma_{ij} = 2k_B T L_{ij} \quad (1.13)$$

avec k_B la constante de Boltzmann.

1.1.2 Théorie statistique des champs

On considère maintenant un système d'Hamiltonien $H[\phi]$ dépendant d'un champ continu $\phi(\mathbf{x})$. Comme précédemment, la fonction de partition est donnée par

$$Z = \int d[\phi] \exp(-\beta H[\phi]) \quad (1.14)$$

L'intégrale fonctionnelle sur tous les champs ϕ peut être prise dans la limite où ϕ est définie sur un réseau fini et où l'espacement entre chaque point tend vers 0. L'approximation du champ moyen devient maintenant

$$Z_{MF} = \exp(-\beta H[\phi_{MF}]) \quad (1.15)$$

où ϕ_{MF} est la solution de champ moyen qui minimise H , c'est-à-dire

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

Considérons maintenant l'Hamiltonien

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

où le premier terme correspond à l'énergie d'interaction cherchant à diminuer les variations au sein du système, et le second terme est un potentiel symétrique possédant deux minima globaux à basse température à $\pm \phi_C$ responsable de la séparation des phases, et possédant un minimum global à $\phi = 0$ à haute température.

Par analogie avec le système avec un nombre fini de degré de libertés, on peut écrire

l'équation de Langevin

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = -L \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (1.18)$$

avec la fonction de corrélation du bruit blanc gaussien

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t) \rangle = \delta(t - t') \Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \quad (1.19)$$

où L est un opérateur défini par son action sur la fonction f comme

$$Lf(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x}' L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') f(\mathbf{x}') \quad (1.20)$$

et de manière identique pour Γ . De la même manière que précédemment, on trouve que

$$\Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 2k_B T L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \quad (1.21)$$

Il est possible de choisir l'opérateur L que l'on désire, puisque la distribution de Gibbs-Boltzmann à l'équilibre ne repose que sur la relation entre L et Γ . Halperin et Hohenberg [1] ont classifié les formes d'opérateurs les plus importants correspondant à des systèmes physiques.

La forme la plus simple est le **modèle A** donnée par $L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = -\alpha \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{x}, t) \quad (1.22)$$

de bruit blanc

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t) \rangle = 2T\alpha \delta(t - t') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (1.23)$$

On peut voir que la valeur moyenne $\bar{\phi}(t) = \frac{1}{V} \int d\mathbf{x} \phi(\mathbf{x}, t)$ n'est pas conservée. Le modèle A correspond alors à un système dans l'ensemble grand-canonique. Ici, le terme α est un coefficient cinétique décrivant le temps de relaxation du système.

Un autre modèle est le **modèle B**, donné par $L(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -D \nabla^2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$ où le signe moins est nécessaire pour garantir la positivité de l'opérateur. On obtient l'équation d'évolution

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = D \nabla^2 \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{x}, t) \quad (1.24)$$

de bruit blanc

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t) \rangle = -2TD\delta(t - t') \nabla^2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (1.25)$$

En introduisant un bruit blanc vectoriel de composantes $\eta_i(\mathbf{x}, t)$ tel que

$$\langle \eta_i(\mathbf{x}, t) \eta_j(\mathbf{x}', t') \rangle = \delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \quad (1.26)$$

où $\delta_{ij} = 1$ for $i = j$ et 0 sinon. On pose

$$\eta(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t) \quad (1.27)$$

L'équation 1.24 devient

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = \nabla \cdot \left[D \nabla \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t) \right] \quad (1.28)$$

Écrit sous cette forme, il est facile de voir que la valeur moyenne du paramètre d'ordre ϕ est conservé dans le temps. Le modèle B correspond à un système dans l'ensemble canonique, utile pour décrire les phénomènes de diffusion et d'accrétion.

À défaut de fluctuations thermiques, les équations 1.22 et 1.24 s'appellent respectivement les équations Ginzburg-Landau et de Cahn-Hilliard [6, 7, 8] et donnent l'évolution temporelle du champ moyen.

1.1.3 Modèle ϕ^4

Le modèle standard des séparations de phase, appelé ϕ^4 est donné par le potentiel en double-puits de Landau-Ginzburg [9, § 45]

$$V(\phi) = \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + \frac{\lambda}{4!} \phi^4 \quad (1.29)$$

où $m^2 = T - T_C$. Pour $m^2 < 0$, ce potentiel symétrique possède deux minima globaux à $\phi_C = \pm \sqrt{-\frac{6m^2}{\lambda}}$. Pour $m^2 \geq 0$, ce potentiel possède un minimum global à $\phi_C = 0$.

Dans les expériences en laboratoire, les systèmes sont souvent couplés à champ magnétique $h(x)$ d'Hamiltonien

$$H_1 = - \int d^d x h(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \quad (1.30)$$

Comme on le voit dans la figure 1.2, l'ajout d'un champ externe uniforme au potentiel

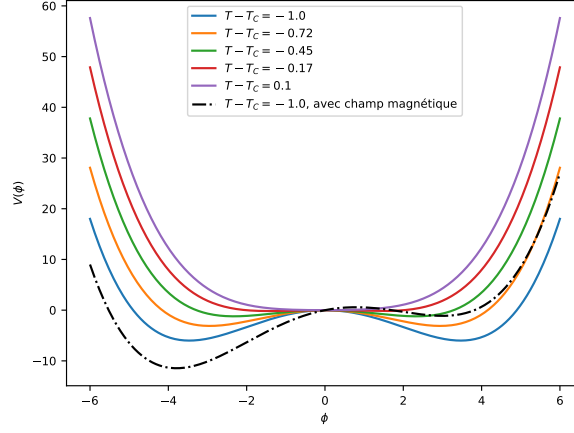


FIGURE 1.2 – Potentiel en double-puits 1.29 pour $\lambda = 1$ en fonction de la différence entre la température et la température critique avec $m^2 = T - T_C$. Dans la phase ordonnée, les minima stables sont à $\phi_C = \pm\sqrt{-\frac{6m^2}{\lambda}}$, pour la phase désordonnée à $\phi_C = 0$. En noir, l'ajout d'un champ magnétique uniforme $h(\mathbf{x}) = 1$ rend la phase positive métastable.

1.29 favorise l'une des deux phases par rapport à l'autre. La nouvelle fonction de partition est

$$\mathcal{Z}[h] = \int d[\phi] \exp \left(-\beta \int d^d x \left(\frac{\kappa}{2} (\nabla \phi(\mathbf{x}))^2 + V(\phi(\mathbf{x})) \right) + \beta \int d^d x h(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \right) \quad (1.31)$$

La valeur moyenne de ϕ est alors

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}[h]} \int d[\phi] \phi(\mathbf{x}) \exp \left(-\beta \int d^d x \left(\frac{\kappa}{2} (\nabla \phi(\mathbf{x}))^2 + V(\phi(\mathbf{x})) \right) + \beta \int d^d x h(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \right) \quad (1.32)$$

Plaçons-nous maintenant dans la phase désordonnée, où $m^2 \geq 0$ et $\lambda \sim 0$, ce qui nous permet d'avoir une approximation gaussienne. Si on réécrit l'Hamiltonien sous forme d'opérateurs, on obtient

$$H[\phi] = \frac{1}{2} \int d^d x d^d y \phi(\mathbf{x}) \mathcal{L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}) - \int d^d x h(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \quad (1.33)$$

où l'on a introduit l'opérateur $\mathcal{L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = (m^2 - \kappa \nabla^2) \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y})$. La fonction de partition

prend maintenant la forme gaussienne

$$\mathcal{Z}[h] \propto \exp\left(-\frac{\beta}{2} \int d^d x d^d y h(\mathbf{x}) \mathcal{L}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) h(\mathbf{y})\right) \quad (1.34)$$

où \mathcal{L}^{-1} est déterminé par

$$(m^2 - \kappa \nabla_{\mathbf{y}}^2) \mathcal{L}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (1.35)$$

Par identification avec la fonction de Green $\Gamma(\mathbf{x})$ de l'opérateur $m^2 - \kappa \nabla^2$, on obtient que l'énergie libre du modèle gaussien est au final donné par

$$F[h] = F_0 - \frac{1}{2} \int d^d x d^d y h(\mathbf{x}) \Gamma(\mathbf{x} - \mathbf{y}) h(\mathbf{y}) \quad (1.36)$$

La transformée de Fourier de l'équation de la fonction de Green

$$(m^2 - \kappa \nabla^2) \Gamma(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x}) \quad (1.37)$$

donne

$$\tilde{\Gamma}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\kappa} \frac{1}{\xi^{-2} + q^2} \quad (1.38)$$

Par inversion de la transformée de Fourier on obtient

$$\Gamma(\mathbf{x}) = \frac{1}{\kappa} \int \frac{d^d q}{(2\pi)^d} \frac{\exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{x})}{\xi^{-2} + q^2} \quad (1.39)$$

où l'on a introduit la longueur de corrélation du système $\xi = \sqrt{\frac{\kappa}{m^2}}$. Par ailleurs, par différentiation fonctionnelle directe de la fonction de partition, on voit que

$$\langle \phi(\mathbf{x}) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}[h]} \frac{1}{\beta} \frac{\delta \mathcal{Z}[H]}{\delta h(\mathbf{x})} = \frac{\delta(k_B T \ln \mathcal{Z}[h])}{\delta h(\mathbf{x})} = -\frac{\delta F}{\delta h(\mathbf{x})} = \int d^d \mathbf{y} \Gamma(\mathbf{x} - \mathbf{y}) h(\mathbf{y}) \quad (1.40)$$

avec l'énergie libre du système $F[h] = -k_B T \ln(\mathcal{Z}[h])$. Ce résultat n'est valable que pour $h \neq 0$ ou $h \rightarrow 0$. En absence de champ extérieur, la magnétisation est nulle. De la même manière, on peut démontrer que la fonction de corrélation est égale à

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \phi(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{y}) \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\delta \langle \phi(\mathbf{x}) \rangle}{\delta h(\mathbf{y})} = \frac{1}{\beta} \Gamma(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (1.41)$$

et le facteur de structure

$$S(\mathbf{k}, \mathbf{q}) = \langle \tilde{\phi}(\mathbf{k}) \tilde{\phi}(\mathbf{q}) \rangle = \frac{(2\pi)^d}{\beta} \delta(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \tilde{\Gamma}(\mathbf{q}) \quad (1.42)$$

Dans la phase désordonnée, où $m^2 < 0$ et $\lambda \neq 0$, l'approximation gaussienne du modèle ϕ^4 donne le même résultat que 1.39 avec le facteur m^2 renormalisé par l'équation auto-consistante [10, ¶4.3]

$$m_0^2 = m^2 + \frac{1}{2} \lambda \int d^d q \frac{1}{m_0^2 + \mathbf{q}^2} \quad (1.43)$$

1.1.4 Tension superficielle

En considérant l'Hamiltonien 1.17, l'équation 1.16 devient

$$\frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} = -\kappa \nabla^2 \phi(\mathbf{x}) + V'(\phi) = 0 \quad (1.44)$$

Puisque le potentiel $V(\phi)$ est supposé symétrique et possédant deux minima globaux en $\pm \phi_C$, le système tend vers la solution homogène $\phi(\mathbf{x}) = \pm \phi_C$ correspondant à l'énergie libre $F = H[\phi_C] = 0$. Néanmoins, dans le cas où le paramètre d'ordre est conservé

$$\int d\mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) = 0 \quad (1.45)$$

la solution $\phi(\mathbf{x}) = \pm \phi_c$ est impossible. Dans ce cas, le système va se séparer localement en plusieurs phases homogènes $\phi(\mathbf{x}) = \pm \phi_c$. Plaçons-nous au voisinage de l'interface entre deux phases, c'est-à-dire que le champ ϕ est invariant par translation en x et y mais pas par rapport à z , et que la longueur de corrélation ξ est bien plus grande que la taille de l'interface. On considère alors que $\phi(\mathbf{x}) = \phi_K(z)$ (où K désigne un *kink*) et $\lim_{z \rightarrow \pm\infty} \phi_K(z) = \pm \phi_c$, ce qui d'après 1.44 donne

$$\kappa \phi_K''(z) = V'(\phi_K) \quad (1.46)$$

En multipliant de chaque côté par $\phi_K'(z)$ et en utilisant les conditions aux limites, on trouve que

$$H[\phi_K] = A \int dz \kappa \phi_K'^2(z) \quad (1.47)$$

où A est l'aire de la surface du système dans le plan perpendiculaire à la direction z . On peut identifier l'intégrale à une énergie libre par unité de surface, c'est à dire la tension

superficielle de l'interface σ définie par l'équation d'Allen-Cahn ??

$$\sigma = \int dz \kappa \phi_K'^2(z) \quad (1.48)$$

Il s'ensuit que l'excès d'énergie est localisé au niveau de l'interface, et que la force principale de la croissance des domaines est la courbure du profil de l'interface, puisque l'énergie du système ne peut diminuer que par une réduction de l'aire totale de l'interface.

Dans le cas du modèle ϕ^4 définie à l'équation 1.29, l'équation 1.46 devient

$$\kappa \phi_K''(z) = m^2 \phi_K(z) \left(1 + \phi_C \phi_K(z)^2\right) \quad (1.49)$$

Dans le modèle, le comportement est seulement déterminé par le ratio entre m^2 et λ . Posons donc sans perte de généralité $\phi_C = 1$. La solution est

$$\phi_K(z) = \phi_C \tanh\left(\frac{z}{\xi}\right) \quad (1.50)$$

où $\xi = \sqrt{\frac{-2\kappa}{m^2}}$. Cette longueur de corrélation diverge lorsque $T \rightarrow T_C$. On remarque que plus la longueur de corrélation augmente, plus la dérivée de l'interface est faible, menant à une diminution de la tension superficielle 1.48. Aussi, l'étude expérimentale des systèmes quasi-critiques est une porte d'accès pour l'étude des systèmes à ultra basse tension superficielle [11]. De tels systèmes sont extrêmement sensibles aux instabilités hydrodynamiques causées par l'agitation thermique, présentant de nombreuses applications en microfluidique par exemple [12].

1.2 Effets de taille finie

1.2.1 Hypothese d'invariance d'échelle

La divergence de la longueur de corrélation au point critique signifie que les fluctuations existent à toutes les échelles, que ce soit à l'échelle microscopique ou macroscopique. On s'attend alors que toutes les propriétés d'un système critique infini soient similaires. On parle alors d'invariance d'échelle. Dans un système homogène de volume V , on décompose l'énergie libre en une partie de bulk ω_b qui est extensive, et une partie non-analytique ω_s provenant de la divergence des fluctuations proche du point critique. En posant $t = \frac{T-T_C}{T_C}$ la distance au point critique et h le champ magnétique externe

appliqué, on a

$$\Omega(t, h) = V\omega_b(t, h) + V\omega_{na}(t, h) \quad (1.51)$$

On s'intéresse maintenant à la partie non-analytique de l'énergie libre. Si l'on procède à une transformation dans le groupe de renormalisation (RG) [13] par une longueur b , le groupe de renormalisation nous donne

$$V\omega_{na}(t, h) = V'\omega_{na}(t', h') \quad (1.52)$$

avec $b^d V' = V$, $t' = b^{y_1} t$ et $h' = b^{y_2} h$ où y_1 et y_2 sont des exposants positifs issus de la renormalisation des champs t et h . Cela signifie que

$$\omega_{na}(t, h) = \frac{1}{b^d} \omega_{na}(b^{y_1} t, b^{y_2} h) \quad (1.53)$$

Posons par simplicité $t \geq 0$, bien que le même argument est généralisable au cas $t < 0$. La transformation RG de la fonction de corrélation est de la forme

$$C(r, t, h) = \lambda^2(b) C\left(\frac{r}{b}, b^{y_1} t, b^{y_2} h\right) \quad (1.54)$$

On voit que la distance est modifiée par $r' = \frac{r}{b}$. En étudiant le cas particulier $h = 0$ et $b^{y_1} t = 1$, on obtient que la fonction de corrélation s'écrit comme

$$C(r, t, h) = \lambda^2(t^{-\frac{1}{y_1}}) C(r/t^{-\frac{1}{y_1}}, 1, 0) \simeq f\left(\frac{r}{\xi}\right) \quad (1.55)$$

par définition, ce qui nous donne une longueur de corrélation de la forme

$$\xi = t^{-\frac{1}{y_1}} \quad (1.56)$$

Supposons maintenant que le système est fini dans l'une des directions, avec des conditions aux bords soit périodiques ou soit fixes. Puisque les modes de fluctuations sont maintenant contraints par la longueur maximale du système L , l'hypothèse d'invariance d'échelle n'est plus valable. La nouvelle hypothèse pour un bloc d'aire A et de hauteur L avec $\sqrt{A} := L' \gg L$, l'hypothèse de taille finie (*finite size scaling*) s'écrit

$$\omega_{na}(t, h, L^{-1}) = \frac{1}{b^d} \omega_{na}(b^{y_1} t, b^{y_2} h, bL^{-1}) \quad (1.57)$$

Le champ L^{-1} est maintenant un champ relevant dans le langage RG d'exposant $y_L = 1$. Le point important à propos des effet de taille finie, c'est qu'elles lissent la singularité liée à la transition de phase thermodynamique. Dans le cas où L est grand, un développement limité nous donne une extensive et une contribution de surface

$$\omega_{na}(t, h, L^{-1}) = \underbrace{\omega_s(t, h, 0)}_{\omega_{ex}} + \underbrace{L^{-1} \frac{\partial \omega_s(t, h, 0)}{\partial x_3}}_{\omega_s} \quad (1.58)$$

où l'on a défini ω_{ex} comme étant l'énergie libre d'excès dû au confinement des fluctuations, et ω_s un terme de surface dû aux conditions aux bords. Le second terme donne une contribution à la partie singulière de l'énergie libre de l'ordre de $AL \times L^{-1}$, c'est-à-dire qu'il se comporte comme une tension de surface effective γ . Par les mêmes arguments RG que précédemment, on trouve que

$$\gamma \simeq t^{\frac{d-1}{y_1}} = \xi^{-(d-1)} \quad (1.59)$$

Ce découplage entre un terme de surface et un terme d'excès de bulk n'est strictement valide que dans la limite thermodynamique. Cependant une telle décomposition pour L finie nous permet d'étudier phénomélogiquement le système. Pour L fini, le découplage n'est plus valide, mais on trouve, en posant $b^{y_1}t = 1$ dans la version renormalisée de l'équation 1.57, que

$$\omega_{na}(t, h, L^{-1}) = \frac{1}{L^d} \Theta\left(\frac{L}{\xi}, \xi^{y_2} h\right) \quad (1.60)$$

où la fonction Θ est une fonction analytique appelée fonction d'échelle universelle. Le calcul de cette fonction universelle a premièrement été fait par Hendrik Casimir [14] pour deux plaques conductrices dans le vide, puis par De Gennes et Fisher dans le cas des systèmes critiques [15]. Sur l'étude de cette fonction universelle, se référer à [16, 17]. Il est possible que plusieurs systèmes physiques différents partagent la même fonction d'échelle universelle mais avec des amplitudes différentes. Ces systèmes possèdent donc le même comportement proche du point. On dit que ces systèmes appartiennent à la même classe d'universalité. En mettant ensemble les équations 1.51 et 1.58, on trouve que l'énergie libre totale du système, en présence de conditions aux bords qui contraignent les fluctuations, est

$$\Omega(t, h, L^{-1}) = AL (\omega_b(t, h) + \omega_{ex}(t, h, L)) + Aw_s(t, h) \quad (1.61)$$

Bien sûr, dans la limite où $L \rightarrow \infty$, le terme d'excès $\omega_{ex}(t, h, L^{-1}) \rightarrow 0$, puisque la contrainte sur les modes de fluctuations est relâchée.

1.2.2 Pression de séparation et force de Casimir critique

La décomposition de l'énergie libre en un terme de bulk, un terme de surface et un terme d'excès, a été développée de manière rigoureuse pour les systèmes critiques. Cependant, cette décomposition peut se faire même en absence d'invariance d'échelle, lorsque la taille des fluctuations devient du même ordre de grandeur que la taille du confinement. La dérivée de l'énergie libre totale, divisé par l'aire du système nous donne la pression

$$F(t, h, L) = -\frac{1}{A} \frac{\partial \Omega(t, h, L^{-1})}{\partial L} \quad (1.62)$$

Cette pression se retrouve dans les systèmes critiques[?] où elle est appelée force de Casimir critique, dans les systèmes classiques - comme les émulsions - où est nommée pression de séparation (*disjoining pressure*) [18], et dans les biomembranes [19]. En utilisant la décomposition 1.61, on obtient que la force de confinement s'écrit comme

$$F(t, h, L) = -A\omega_b(t, h) - A \frac{\partial(L\omega_{ex}(t, h, L))}{\partial L} \quad (1.63)$$

à laquelle on ajoute la relation 1.60 pour trouver que la force de Casimir dépend de la fonction d'échelle universelle Θ selon

$$F(t, h, L) = -A\omega_b(t, h) - A \frac{1}{L^d} \theta\left(\frac{L}{\xi}, \xi^{y_2} h\right) \quad (1.64)$$

où $f_c := -L^{-d}\theta$ est la pression de Casimir, reliée à la fonction d'échelle universelle Θ par l'équation

$$\frac{1}{L^d} \theta\left(\frac{L}{\xi}, \xi^{y_2} h\right) = -\frac{\partial(L^{1-d}\Theta(\frac{L}{\xi}, \xi^{y_2} h))}{\partial L} \quad (1.65)$$

On rappelle la relation 1.59 entre la température réduite et la longueur de corrélation. Si l'on trouve la force de Casimir, il est alors possible de remonter à la fonction d'échelle universelle [20]. Cette force de Casimir dépend des conditions aux bords du système [21, 22] ainsi que de l'ensemble thermodynamique dans lequel on se place [23, 24]. Cette force étant une force émergente d'origine entropique, la somme des forces exercées individuellement par chaque particule du système n'est pas égale à la force totale appliquée

sur le système[25].

La détection expérimentale de ce phénomène se fait traditionnellement dans des fluides binaires par *Total Internal Reflection Microscopy* (TIRM) [26, 27, 16, 28]. La méthode consiste à mesurer le potentiel d'une sphère flottant sur un fluide binaire critique reposant sur une plaque. Cette sphère et cette plaque sont traitées chimiquement afin de favoriser l'une des deux phases à leur voisinage. Ainsi il est possible de créer des conditions aux bords $(++)$, $(+-)$ ou $(--)$ qui modifient la forme de la fonction universelle 1.60. À l'inverse, il est possible de mesurer la force de Casimir [29] afin d'étudier les transitions de phases colloïdales.

1.2.3 Intégration sur le paramètre d'ordre

mettre dans le chapitre 3. C'est une méthode numérique que j'ai utilisé. Afin d'isoler la force de Casimir du terme de volume dans la force de confinement, il convient de retirer la force de confinement d'un système de taille différente. Ainsi, pour deux systèmes de taille $L_1 < L_2$, on a

$$F(t, h, L_1) - F(t, h, L_2) = f_c(t, h, L_1) - f_c(t, h, L_2) = -\frac{\partial \Omega(t, h, L_1)}{\partial L} + \frac{\partial \Omega(t, h, L_2)}{\partial L} \quad (1.66)$$

Puisque le surplus d'énergie dû au confinement est nul lorsque $L_2 \rightarrow \infty$, on obtient une approximation sur la force de Casimir lorsque $\frac{L_1^d}{L_2^d} \ll 1$

$$f_c(t, h, L_1) \simeq \frac{\partial \Omega(t, h, L_2)}{\partial L} - \frac{\partial \Omega(t, h, L_1)}{\partial L} \quad (1.67)$$

Or, nous savons grâce à l'équation 1.40 que dans le cas d'un champ magnétique uniforme $h(\mathbf{x})$, la moyenne du paramètre d'ordre est reliée à l'énergie libre par

$$\langle \phi(\mathbf{x}) \rangle(t, h, L) = -\frac{\delta \Omega(t, h, L)}{\delta h(\mathbf{x})} \quad (1.68)$$

Si on pose $h(\mathbf{x}) = h$, alors il est possible d'obtenir une différence entre deux énergies libres à champs magnétiques différents [30]

$$\Delta \Omega = \Omega(t, h_1, L) - \Omega(t, h_2, L) = -\int_{h_1}^{h_2} \langle \phi(\mathbf{x}) \rangle(t, h, L) dh \quad (1.69)$$

Dans le cas où l'on connaît la configuration lorsque $h_2 \rightarrow \infty$ ou $h_1 \rightarrow 0$, il est possible de mesurer directement l'énergie libre d'un système pour n'importe quelle température et

taille en intégrant selon 1.69. Dans le cas où $h_2 \rightarrow \infty$, le potentiel en double-puit 1.29 ne possède qu'un seul minimum, l'énergie libre d'un tel système est alors uniquement lié à l'énergie libre du volume. La différence 1.69 contient donc toute l'information nécessaire afin de mesurer la force de Casimir. On peut alors calculer la dérivée 1.67 avec

$$dL \frac{\partial \Omega(t, h, L)}{\partial L} = \Delta \Omega(t, h, L) - \Delta \Omega(t, h, L - dL) \quad (1.70)$$

1.3 Modèles d'interface

La phase désordonnée, où cohabitent la phase 1 et la phase 2, est inhomogène, avec des gouttes ou des digitations. Afin d'étudier les fluctuations au niveau des interfaces entre les phases, nous mettons au point un modèle effectif d'interfaces. Le modèle le plus simple est de considérer que l'interface est définie par une hauteur $h(\mathbf{r})$, avec $\mathbf{x} := (\mathbf{r}, z)$. On suppose également que $h(\mathbf{x}) = h(\mathbf{r})$. On va maintenant poser les équations de la dynamique de la hauteur de l'interface à partir des équations de la théorie statistique des champs. On suppose que les phases sont séparées selon l'axe z et que la hauteur moyenne de l'interface se trouve à $z = 0$. L'approximation de l'interface nous permet alors de poser le champ ϕ comme étant égal à

$$\phi(\mathbf{r}, z, t) = f(z - h(\mathbf{r}, t)) \quad (1.71)$$

où $f(z) = \phi_K(z)$ est la solution kink du champ moyen 1.46, et $f(z \rightarrow -\infty) = \phi_1$ et $f(z \rightarrow \infty) = \phi_2$. L'Hamiltonien considéré est l'Hamiltonien de Landau-Ginzburg 1.17

$$H[\phi] = \int d\mathbf{x} \frac{\kappa}{2} [\nabla \phi]^2 + V(\phi) \quad (1.72)$$

D'un autre côté, l'Hamiltonien d'une interface libre décrit l'énergie de la surface totale A uniquement, c'est-à-dire que l'on peut trouver un Hamiltonien effectif

$$H[h] = \sigma \int_A d\mathbf{r} \sqrt{1 + [\nabla h]^2} \quad (1.73)$$

où l'intégrale est faite sur tout le plan perpendiculaire à l'axe z d'aire A . Lorsque les fluctuations de l'interface sont faibles, le développement limité au second ordre nous donne

$$H[h] = A\sigma + \frac{\sigma}{2} \int_A d\mathbf{r} [\nabla h]^2 \quad (1.74)$$

Le premier terme est indépendant de la hauteur. On peut donc réécrire l'Hamiltonien sous la forme d'un Hamiltonien effectif

$$H_{eff}[h] = \frac{\sigma}{2} \int_A d\mathbf{r} [\nabla h]^2 \quad (1.75)$$

1.3.1 Modèle A

Pour rappel, l'équation de la dynamique du champ dans le modèle A s'écrit

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = -\alpha \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{x}, t) \quad (1.76)$$

En utilisant le fait que

$$\begin{aligned} \frac{\partial f(z - h(\mathbf{r}, t))}{\partial t} &= -f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} \\ \nabla f(z - h(\mathbf{r}, t)) &= [\mathbf{e}_z - \nabla h(\mathbf{r}, t)] f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \\ \nabla^2 f(z - h(\mathbf{r}, t)) &= f''(z - h(\mathbf{r}, t)) - \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) f'(z - h(\mathbf{r}, t)) + [\nabla h(\mathbf{r}, t)]^2 f''(z - h(\mathbf{r}, t)) \end{aligned}$$

on introduit l'approximation 1.71 dans l'équation de champ moyen afin de trouver

$$\begin{aligned} -f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \alpha \kappa \times \left[f''(z - h(\mathbf{r}, t)) - \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) f'(z - h(\mathbf{r}, t)) + [\nabla h(\mathbf{r}, t)]^2 f''(z - h(\mathbf{r}, t)) \right] \\ &\quad - \alpha V'(f'(z - h(\mathbf{r}, t))) + \eta(\mathbf{r}, z, t). \end{aligned} \quad (1.77)$$

En multipliant de part et d'autre l'équation par $f'(z - h(\mathbf{r}, t))$ et en introduisant le changement de variable $\zeta = z - h(\mathbf{r}, t)$, on intègre ζ sur $[-\infty, \infty]$. Puisque $f(\zeta \rightarrow \pm\infty) = \pm\phi_c$ et que $V(\phi_c) = V(-\phi_c) = 0$, on obtient deux identités supplémentaires

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\zeta f'(\zeta) f''(\zeta) = \left[\frac{1}{2} f'^2(\zeta) \right]_{-\infty}^{\infty} = 0 \quad (1.78)$$

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\zeta f'(\zeta) V'(f) = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \frac{dV(f)}{d\zeta} = [V(f(\zeta))]_{-\infty}^{\infty} = 0 \quad (1.79)$$

Les termes non nuls dans l'équation 1.76 sont donc

$$- \int_{-\infty}^{\infty} f'^2(\zeta) d\zeta \frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\alpha \int_{-\infty}^{\infty} f'^2(\zeta) d\zeta \kappa \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) + \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \eta(\mathbf{r}, \zeta + h(\mathbf{r}, t)) f'(\zeta) \quad (1.80)$$

En utilisant l'estimation de Cahn-Hilliard pour la tension superficielle 1.48, on obtient

$$\frac{\sigma}{\kappa} \frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \alpha \sigma \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) + \xi(\mathbf{r}, t), \quad (1.81)$$

avec le bruit

$$\xi(\mathbf{r}, t) = \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta \eta(\mathbf{r}, \zeta + h(\mathbf{r}, t)) f'(\zeta) \quad (1.82)$$

Ce bruit est de moyenne nulle et sa fonction de corrélation est

$$\begin{aligned} \langle \xi(\mathbf{r}, t) \xi(\mathbf{r}', t') \rangle &= 2\alpha T \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta d\zeta' \delta(\zeta - \zeta') f'(\zeta) f'(\zeta') \\ &= 2\alpha T \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \int_{-\infty}^{\infty} d\zeta f'^2(\zeta) \\ &= \frac{2\alpha T \sigma}{\kappa} \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \end{aligned} \quad (1.83)$$

On obtient

$$\frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \kappa \alpha \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) + \eta(\mathbf{r}, t) \quad (1.84)$$

où

$$\langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t') \rangle = \frac{2\alpha T \kappa}{\sigma} \delta(t - t') \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}') \quad (1.85)$$

En posant $\alpha' = \frac{\kappa \alpha}{\sigma}$, on obtient finalement que

$$\frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \alpha' \sigma \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) + \eta(\mathbf{r}, t). \quad (1.86)$$

Cette équation est la même forme que l'équation du modèle A pour la hauteur de l'interface. Le potentiel $V(\phi)$ étant responsable de la séparation de phase uniquement, il est normal de ne pas le retrouver dans l'équation finale, où l'on étudie un modèle d'interface. En utilisant l'Hamiltonien effectif 4.4, on obtient l'équation d'Edwards-Wilkinson [31]

$$\frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = -\alpha' \frac{\delta H_{eff}[h]}{\delta h(\mathbf{r})} + \eta(\mathbf{r}, t), \quad (1.87)$$

avec

$$\langle \eta(\mathbf{r}, t) \eta(\mathbf{r}', t') \rangle = 2T \alpha' \delta(t - t'). \quad (1.88)$$

Cette équation est consistante avec l'idée de décrire la surface de l'interface en termes d'une hauteur variable avec une énergie donnée par une tension de surface.

1.3.2 Modèle B

On propose de refaire le même calcul d'interface avec l'équation du Modèle B 1.24 :

$$-\nabla^{-2} \frac{\partial \phi(\mathbf{x}, t)}{\partial t} = -D \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \theta(\mathbf{x}, t) \quad (1.89)$$

où $-\nabla^{-2}$ représente la fonction de Green G qui obéit à

$$\nabla^2 G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') = -\delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (1.90)$$

et

$$\theta(\mathbf{x}, t) = -\nabla^{-2} \eta(\mathbf{x}, t) = \int d\mathbf{x}' G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \eta(\mathbf{x}', t) \quad (1.91)$$

La fonction de corrélation de ce bruit est donné par

$$\begin{aligned} \langle \theta(\mathbf{x}, t) \theta(\mathbf{y}, t') \rangle &= -2DT \delta(t - t') \int d\mathbf{x}' G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{y}' G(\mathbf{y} - \mathbf{y}') \nabla^2 \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{y}') \\ &= -2DT \delta(t - t') \int d\mathbf{x}' G(\mathbf{x} - \mathbf{x}') d\mathbf{y}' \nabla^2 G(\mathbf{y} - \mathbf{y}') \delta(\mathbf{x}' - \mathbf{y}') \\ &= 2DT \delta(t - t') G(\mathbf{x} - \mathbf{y}). \end{aligned} \quad (1.92)$$

Comme précédemment, on multiplie l'équation de chaque côté par $f'(z - h(\mathbf{r}, t))$ puis on intègre z sur $[-\infty, \infty]$ pour trouver

$$-\int dz f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \int dz' d\mathbf{r}' G(z - z', \mathbf{r} - \mathbf{r}') f'(z' - h(\mathbf{r}', t)) \frac{\partial h(\mathbf{r}', t)}{\partial t} = -D\sigma \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) + \chi(\mathbf{r}, t) \quad (1.93)$$

avec le bruit

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \int dz f'(z - h(\mathbf{r}, t)) \theta(\mathbf{r}, z, t) \quad (1.94)$$

En suppose maintenant que les fluctuations de l'interface sont concentrées autour de 0, ce qui nous permet de faire ne garder que les termes à l'ordre 0, ce qui nous donne

$$-\int dz f'(z) \int dz' d\mathbf{r}' G(z - z', \mathbf{r} - \mathbf{r}') f'(z') \frac{\partial h(\mathbf{r}', t)}{\partial t} = -D\sigma \nabla^2 h(\mathbf{r}, t) + \chi(\mathbf{r}, t) \quad (1.95)$$

avec le bruit donné par

$$\chi(\mathbf{r}, t) = \int dz f'(z) \theta(\mathbf{r}, z', t) \quad (1.96)$$

Cette équation linéaire peut maintenant subir une transformation de Fourier dans le plan \mathbf{r} , ce qui nous donne

$$- \int dz f'(z) \int dz' d\mathbf{r}' \tilde{G}(z - z', \mathbf{k}) f'(z') \frac{\partial \tilde{h}(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = Dk^2 \sigma \tilde{h}(\mathbf{k}, t) + \tilde{\chi}(\mathbf{k}, t) \quad (1.97)$$

La transformée de Fourier de G dans le plan \mathbf{r} suit

$$\frac{d^2 \tilde{G}(z - z', \mathbf{k})}{dz^2} - k^2 \tilde{G}(z - z', \mathbf{k}) = -\delta(z - z') \quad (1.98)$$

dont la solution avec la condition au bord $\tilde{G}(z - z', \mathbf{k}) \rightarrow 0$ lorsque $|z - z'| \rightarrow \infty$ est

$$\tilde{G}(z - z', \mathbf{k}) = \frac{\exp(-k|z - z'|)}{2k} \quad (1.99)$$

avec $k = |\mathbf{k}|$. On suppose maintenant que l'interface est abrupte, c'est-à-dire que $f(z) = 2\phi_c \delta(z)$, qui est la limite $\xi \rightarrow 0$ de la solution 1.46. On obtient

$$-4\phi_c^2 \tilde{G}(0, k) \frac{\partial h(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = Dk^2 \sigma h(\mathbf{r}, t) + \tilde{\chi}(\mathbf{k}, t) \quad (1.100)$$

que l'on réécrit comme

$$\frac{\partial \tilde{h}(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = -\frac{Dk^3 \sigma}{2\phi_c^2} \tilde{h}(\mathbf{k}, t) + \tilde{\xi}(\mathbf{k}, t) \quad (1.101)$$

avec

$$\tilde{\xi}(\mathbf{k}, t) = -\frac{k}{2\phi_c^2} \tilde{\chi}(\mathbf{k}, t) = -\frac{k}{2\phi_c^2} \int dz f'(z) \tilde{\theta}(\mathbf{k}, z, t) \quad (1.102)$$

La fonction de corrélation de $\tilde{\theta}(\mathbf{k}, t)$ est

$$\langle \theta(\mathbf{k}, t) \theta(\mathbf{k}', t') \rangle = 2DT(2\pi)^d \delta(t - t') \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \tilde{G}(z - z', k) \quad (1.103)$$

ce qui nous donne

$$\begin{aligned}\langle \chi(\mathbf{k}, t) \chi(\mathbf{k}', t') \rangle &= 2DT(2\pi)^d \delta(t - t') \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \int dz dz' f(z) f(z') \tilde{G}(z - z', k) \\ &= 2DT(2\pi)^d \delta(t - t') \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \frac{2\phi_c^2}{k}\end{aligned}\quad (1.104)$$

où l'on a utilisé l'approximation de l'interface abrupte pour passer de la première à la seconde ligne, ce qui nous donne

$$\langle \xi(\mathbf{k}, t) \xi(\mathbf{k}', t') \rangle = 2DT(2\pi)^d \delta(t - t') \delta(\mathbf{k} + \mathbf{k}') \frac{k}{2\phi_c^2} \quad (1.105)$$

L'équation finale de la dynamique de l'interface pour le modèle B dans l'espace de Fourier est

$$\frac{\partial h(\mathbf{k}, t)}{\partial t} = -\frac{Dk^3\sigma}{2\phi_c^2} \tilde{h}(\mathbf{k}, t) + \tilde{\xi}(\mathbf{k}, t) \quad (1.106)$$

On obtient au final, dans l'espace réel,

$$\frac{\partial h(\mathbf{x})}{\partial t} = -L \frac{\delta H_{eff}}{\delta h(\mathbf{x})} + \xi(\mathbf{x}, t) \quad (1.107)$$

où l'opérateur L est défini dans l'espace de Fourier par

$$\tilde{L}(\mathbf{k}) = \frac{Dk}{2\phi_c^2} \quad (1.108)$$

1.4 Systèmes hors équilibre

Les systèmes à l'équilibre ont la particularité que les états ont une probabilité en accord avec la distribution de Gibbs-Boltzmann 1.3, c'est-à-dire que le courant 1.11 est nul. La manière la plus simple de mettre le système hors-équilibre est donc d'induire un courant dans le champ $\phi(\mathbf{x}, t)$. L'évolution d'un système depuis une condition initiale vers ses configurations d'équilibre est le moyen le plus simple d'étudier les conditions hors-équilibre. On retrouve également dans le régime stationnaire beaucoup de systèmes hors-équilibre. Expérimentalement, les colloïdes sédimentant dans un champ gravitationnel induisent un écoulement hors-équilibre. Il est également possible d'induire un flux sur des particules chargées dans un champ électrique via la pression de radiation exercée par un laser ou par un cisaillement dans un liquide visqueux[32]. Cette dynamique étant locale, elle ne peut exister que si le paramètre d'ordre est conservé. L'équation générale

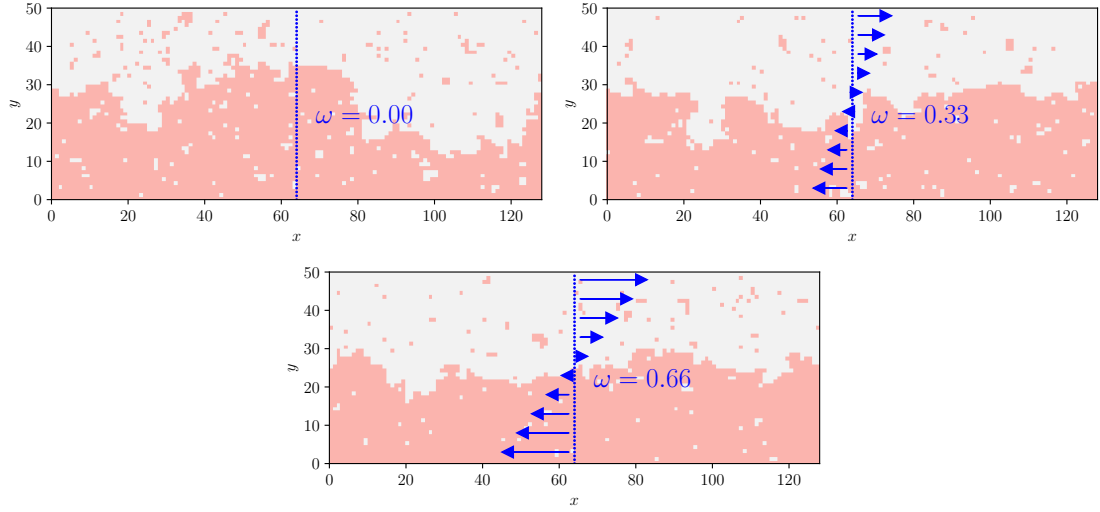


FIGURE 1.3 – Photos d'un système d'Ising en fonction du cisaillement 1.110 via des simulations de Monte Carlo avec un algorithme de Kawasaki. Ledit algorithme sera expliqué plus en détail au chapitre 3.

d'un système d'interface avec un cisaillement est [33, 34]

$$s \frac{\partial h(\mathbf{r}, t)}{\partial t} + \nabla(\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)h(\mathbf{r}, t)) = L \frac{\partial H[h]}{\partial h(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{r}, t) \quad (1.109)$$

où L est l'opérateur défini pour le modèle B à l'équation 1.108 et $\mathbf{v}(\mathbf{x}, t)$ est un champ de vitesse quelconque. Un champ de vitesse d'intérêt est celui un champ de cisaillement de la forme

$$\mathbf{v}(\mathbf{x}, t) = \omega z \vec{e}_x \quad (1.110)$$

Ce champ de cisaillement, dont une illustration est donné en figure 1.3 et dont l'effet dans des simulations de Monte Carlo est évident, a été extensivement étudié expérimentalement [35], théoriquement [36, 37, 33, 34] ou dans les simulations numériques dans le cas du modèle d'Ising [38, 39, 40, 41, 42, 43] expliquent en détail pourquoi un cisaillement de ce type entraîne la suppression des modes de fluctuations excités, ce qui aplanit l'interface.

Dans le chapitre ??, nous étudions plus en détail le cas d'un écoulement uniforme, et montrons qu'il a également tendance à réduire les fluctuations au niveau de l'interface.

1.5 Conclusion

Nous avons présenté les modèles standards des transitions de phase et avons étudié l'importance de l'ensemble thermodynamique dans ces systèmes. Dans l'ensemble grand-canonique où le paramètre d'ordre n'est pas conservé, les équations dynamiques du modèle A 1.22 appliqués au champ $\phi(\mathbf{x}, t)$ permettent de calculer la fonction de corrélation du système pour le modèle ϕ^4 . Le modèle ϕ^4 permet de basculer naturellement vers un modèle d'interface $h(\mathbf{x}, t)$ qui réduit la dimensionalité des équations et permet de n'étudier qu'une partie précise du problème. Nous avons expliqué comment passer d'un modèle de champ à un modèle d'interface, en dérivant des équations très similaires entre les deux modèles.

Lorsque la longueur de corrélation des fluctuations deviennent de l'ordre de grandeur de la taille du système, la contrainte influe sur l'énergie libre totale. On a démontré que l'énergie libre se décompose alors en un terme de volume, un terme de surface dépendant des conditions aux bords, et d'un terme d'excès. La dérivée de l'énergie libre en fonction de la taille du système nous donne une pression de confinement, qui dans les systèmes critiques, s'appelle force de Casimir. Nous avons expliqué comment mesurer cette force par une intégration sur le paramètre d'ordre, dans le cas où il n'est pas possible de calculer analytiquement l'énergie libre du système.

Une attention particulière a été portée aux ensembles thermodynamiques. Bien que l'hypothèse de l'équivalence des ensembles thermodynamiques implique que les systèmes se comportent identiquement à l'équilibre pour des systèmes thermodynamiques, la dynamique des systèmes confinés est particulièrement différente dans les deux cas. De plus, nous avons vu que seul l'ensemble canonique permettait, grâce à une dynamique locale, d'obtenir des systèmes hors-équilibre. Expérimentalement, la manière la plus simple est de cisailer les parois du système afin d'induire un flux stationnaire.

Chapitre 2

Modèles sur réseaux

Comme indiqué dans l'équation 1.1, le champ $\phi(\mathbf{x}, t)$ est un champ moyenné sur le temps et l'espace à cause de la précision de nos appareils de mesure. Si par exemple le champ ϕ représente une densité de particules, alors au niveau le plus fondamental, le champ est caractérisé par

$$\phi(\mathbf{x}, t) = \frac{1}{V} \sum_i \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}_i(t)) \quad (2.1)$$

où V est le volume d'intégration défini par la précision de notre mesure et $\mathbf{x}_i(t)$ est la position de la particule i à l'instant t . Ainsi à l'échelle des constituants du système, le champ est discontinu. Cette discontinuité inhérente du système microscopique nous mène naturellement sur des modèles de particules sur réseau. Dans les modèles sur réseau, nous fixons un ensemble de positions $\{\mathbf{x}_i\}$ que les particules peuvent occuper, puis nous regardons l'évolution temporelle d'un tel système en fonction des interactions désirées entre les sites.

Nous nous intéressons ici aux modèles sur réseaux cubiques, de taille $L' \times L' \times L$, dont le modèle d'Ising est le plus connu. Nous développons les principaux résultats obtenus dans les modèles d'Ising pour la force de Casimir critique et l'importance des forces de cisaillement sur les propriétés des interfaces. Puis nous expliquerons un modèle à $(d - 1)$ dimension du modèle d'Ising à basse température, le **modèle Solid-On-Solid** (SOS), avec les techniques propres au système 1D de la matrice de transfert ainsi que les propriétés analytiques de l'interface déjà connues.

La discrétisation du champ $\phi(\mathbf{x}, t)$ afin de faire des simulations numériques mène naturellement vers le modèle sur réseau par excellence, le modèle d'Ising. À partir de deux dimensions, ce modèle de particules à interaction avec les plus proches voisins, possède

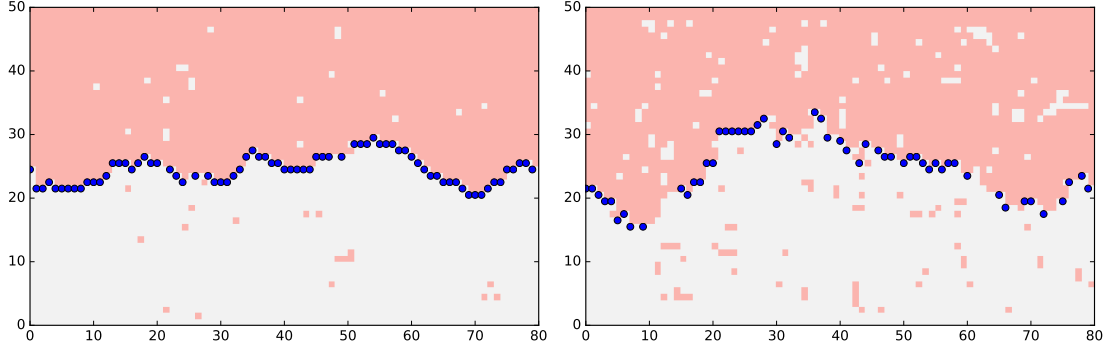


FIGURE 2.1 – Photo d'un modèle d'Ising pour deux températures différentes ($T = 0.7T_C$ et $T = 0.95T_C$) avec des conditions périodiques aux bords en X et fixés en Y qui forcent la présence d'une interface entre les phases + (rose) et - (blanc) du système. Plus la température est élevée et plus l'interface fluctue, jusqu'à cesser d'exister pour $T > T_C$.

une transition de second ordre depuis une phase ordonnée vers une phase désordonnée. Si l'on suppose l'énergie d'interaction entre toutes les particules plus proches voisins égale à J , la température critique est $\beta_{C,2D} = \frac{\ln(1+\sqrt{2})}{2}J \simeq 0.44J$ en deux dimensions [5]. et $\beta_{C,3D} \simeq 0.22J$ en trois dimensions [44] (via des simulations de Monte Carlo).

2.1 Le modèle d'Ising

Nous rappelons l'Hamiltonien 1.17 du champ moyen

$$H[\phi] = \int d\mathbf{x} \frac{\kappa}{2} [\nabla\phi]^2 + V(\phi) \quad (2.2)$$

où $V(\phi)$ est un potentiel de possédant deux minima en $\phi_C = \pm 1$. On considère maintenant que le champ sur les sites de notre réseau est égal à $\pm\phi_C = \pm 1$. On note $\mathbf{i} := (x, y, z)$ le site du réseau correspondant aux coordonnées (x, y, z) . Sur un réseau carré discret de pas $a = 1$, la discrétisation du premier terme au premier ordre se traduit par

$$\begin{aligned} [\nabla\phi(\mathbf{i})]^2 &= \left(\frac{\partial\phi(\mathbf{i})}{\partial x}\right)^2 + \left(\frac{\partial\phi(\mathbf{i})}{\partial y}\right)^2 + \left(\frac{\partial\phi(\mathbf{i})}{\partial z}\right)^2 \\ &= (\phi(x, y, z) - \phi(x+1, y, z))^2 + (\phi(x, y, z) - \phi(x, y+1, z))^2 + (\phi(x, y, z) - \phi(x, y, z+1))^2 \\ &= 2(1 - \phi(x, y, z)\phi(x+1, y, z)) + 2(1 - \phi(x, y, z)\phi(x, y+1, z)) + 2(1 - \phi(x, y, z)\phi(x, y, z+1)) \end{aligned} \quad (2.3)$$

Notons $\sigma_i = \phi(\mathbf{i}) = \pm 1$, et $J := \kappa$. On obtient alors l'Hamiltonien du modèle d'Ising

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J \sigma_i \sigma_j + \frac{V(\sigma_i) + V(\sigma_j)}{2} \quad (2.4)$$

où $\sum_{\langle ij \rangle}$ est une somme sur toutes les paires de premiers voisins. Le champ externe $V(i)$ a ici été symétrisé et le terme constant de 2.3 a été retiré. Le modèle d'Ising[45, 46] est donc un modèle sur réseau à interactions courtes entre les particules. Puisque les constituants σ_i du système sont tous égaux à ± 1 , on appelle ce système un système de spin sur réseau. Dans le cas où la variable σ_i est continue, on parle de modèle XY. Pour plus de généralité, il est également possible de varier l'interaction entre les plus proches voisins en posant $J = J_{ij}$. Si $J_{ij} = 0$, on parle d'interaction ferromagnétique favorisant à homogénéiser le système malgré l'agitation thermique. Si $J_{ij} < 0$, on parle d'interaction antiferromagnétique favorise les systèmes où chaque spin possède un signe différent de celui de tous ses plus proches voisins. On prendra pour le reste de cette thèse $J = 1$.

Ce modèle décrit précisément les transitions de phases dans les matériaux magnétiques uniaxiaux [47, 48, 49]. Il est par ailleurs le modèle le plus simple à l'intérieur de sa classe d'universalité, qui contient également les transitions liquide/gaz ainsi que l'émulsion de liquides binaires. Ce modèle ne possède pas de transitions de phase en une dimension. La solution en deux dimensions a été trouvée par [5], prouvant l'existence d'une transition de phase à

$$T_{2D,C} = \frac{2J}{k_B \ln(1 + \sqrt{2})} \simeq 2.27 \frac{J}{k_B} \quad (2.5)$$

Puisque ce modèle découle de la discrétisation du champ moyen, ces approches donnent beaucoup d'informations sur la transition de phase et ses propriétés au point critique en 4 dimensions et au-delà, avec $d = 4$ étant la dimension critique supérieure. Cependant le modèle n'a pas encore été résolu pour $d = 3$, bien que de nombreuses simulations numériques [50] ont permis de trouver que la transition critique était à

$$T_{3D,C} \simeq 4.51 \frac{J}{k_B} \quad (2.6)$$

En faisant la transformation[51]

$$n_i = \frac{\sigma_i + 1}{2} \quad (2.7)$$

afin que $n_i(\sigma_i = 1) = 1$ et $n_i(\sigma_i = -1) = 0$, on obtient l'Hamiltonien

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (4n_i n_j - 2(n_i + n_j) + 1) + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \frac{V(\sigma_i) + V(\sigma_j)}{2} \quad (2.8)$$

où le terme constant $\sum_{\langle ij \rangle} J_{ij}$ ne modifie la fonction de partition \mathcal{Z} que d'une constante. On définit alors

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{LG} &= -4 \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} n_i n_j + 2 \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (n_i + n_j) + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \frac{V(\sigma_i) + V(\sigma_j)}{2} \\ &= -4J \sum_{\langle ij \rangle} J n_i n_j + \mu \sum_i n_i + \sum_{\langle ij \rangle} J \frac{V(\sigma_i) + V(\sigma_j)}{2} \end{aligned} \quad (2.9)$$

où l'on a considéré $J_{ij} = J$ constant et définit le potentiel chimique pour les particules liquide-gaz comme $\mu = 4Jc$, avec c la connectivité du graphe ($z = 2$ en 1D, $z = 4$ en 2D et $z = 6$ en 3D). Une phase magnétique positive dans le modèle d'Ising s'apparente dès lors à un état de haute densité (un liquide), tandis qu'une phase négative est considérée comme une phase de basse densité, c'est-à-dire un gaz. Ce modèle représente également un mélange binaire entre deux types de particules A et B comme par exemple un polymère dans un solvant, les particules identiques s'attirent tandis que les particules d'un type différent se repoussent. Ici, le potentiel chimique μ est la variable conjuguée au nombre de particules $\sum_i n_i$, tandis que dans les systèmes de spins, le champ magnétique h est la variable conjuguée de l'aimantation $\sum_i \sigma_i$. On peut donc parler d'un champ magnétique uniforme pour un système de spins dans l'ensemble canonique ou de potentiel chimique pour un système de particules dans l'ensemble grand-canonique, et que la physique reste la même.

2.1.1 Caractérisation de l'interface

L'étude de l'interface entre les phases $+$ et $-$ nécessite la brisure de la symétrie de translation au sein du système. Cela peut se réaliser via des conditions aux bords non-périodiques dans la direction z , soit avec des conditions aux bords fixes avec $\sigma(z = 0) = -1$ et $\sigma(z = L) = +1$, soit en favorisant les spins sur les rangées du bords grâce à l'ajout d'un potentiel $V(z) = h(\delta(z) - \delta(z - L))$. Une interface se caractérise par sa position moyenne et sa largeur. La manière la plus simple de mesurer ces caractéristiques est de

comparer le profil de magnétisation [52] dans l'axe z perpendiculaire à l'interface

$$m(z) = \frac{1}{L^2} \left\langle \sum_{xy} \sigma(x, y, z) \right\rangle \quad (2.10)$$

aux résultats de champ moyen 1.46. Le fit nous donne alors la position moyenne et la largeur de l'interface. La largeur de l'interface est définie comme le déplacement moyen autour de la moyenne, c'est-à-dire

$$w^2 = \langle h^2 \rangle - \langle h \rangle^2 \quad (2.11)$$

où h est la position de l'interface. On trouve alors que la largeur de l'interface est égale à

$$w^2 = 2 \frac{\int_0^L dz z \frac{dm(z)}{dz}}{\int_0^L dz \frac{dm(z)}{dz}} \quad (2.12)$$

On définit maintenant la tension superficielle de l'interface comme la différence entre l'énergie libre en absence d'interface avec l'énergie libre de l'interface [53, 54, 55], c'est-à-dire

$$\sigma = \lim_{L', L \rightarrow \infty} \frac{1}{L'^2} \ln \left(\frac{Z^{+-}}{Z^{++}} \right) \quad (2.13)$$

où Z^{+-} est la fonction de partition du système avec des conditions aux bords $(+-)$ et Z^{++} la fonction de partition avec des conditions aux bords $++$. Par diagonalisation de la matrice de transfert du système (que nous introduirons plus tard), en absence de champ externe, nous obtenons la tension superficielle

$$\sigma = 2\beta J + \log(\tanh(\beta J)) \quad (2.14)$$

2.1.2 Méthode de calcul de la force de Casimir

Comme vu dans la section 1.2, on retrouve dans l'énergie libre du système toute l'information nécessaire sur les effets de taille finie, principalement la force de Casimir critique. L'énergie libre ne peut être exprimée par des moyennes d'observables facilement calculables dans les simulations de Monte Carlo. La force de Casimir étant

$$F(t, h, L) = -\frac{\partial \Omega}{\partial L} \quad (2.15)$$

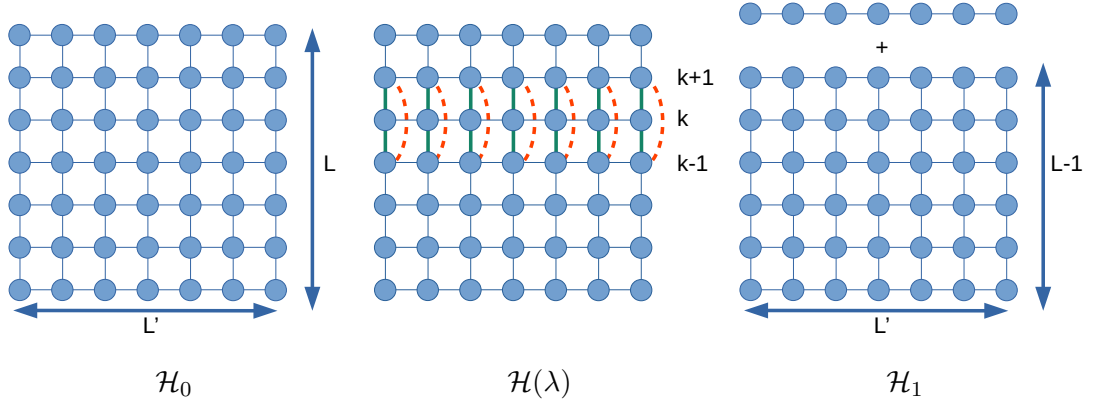


FIGURE 2.2 – Découplage progressif de la k -ième couche du système afin de calculer la variation de l'énergie libre grâce à l'Hamiltonien de transition. Les liens en bleu ont une énergie de βJ , les liens en rouge une énergie de $\lambda\beta J$ et les liens en vert une énergie de $(1 - \lambda)\beta J$. Reproduction 2D de [56].

on remarque que le calcul seul de la dérivée par rapport à la hauteur L du système est suffisant. Pour se faire, Vasilyec [56] a développé une méthode pour calculer sa dérivée vis-à-vis d'un paramètre fictif de couplage. Bien que la taille d'un système sur réseau soit discrète, il est possible d'obtenir une taille continue du réseau grâce au découplage progressif d'une couche du système. Si \mathcal{H}_0 est l'Hamiltonien du système de hauteur L et \mathcal{H}_1 l'Hamiltonien de hauteur $L - 1$ (voir figure 2.2), alors on pose l'Hamiltonien de transition

$$H_{tr}(\lambda) = (1 - \lambda)H_0 + \lambda H_1 \quad (2.16)$$

avec $\lambda \in [0, 1]$, et qui interpole H_0 et H_1 lorsque λ va de 0 à 1. L'Hamiltonien de transition $H_{tr}(\lambda)$ dépend également de la position $k_0 \in 1, 2, \dots, L$ (selon la direction z de la couche qui se découple du reste du système en fonction de λ , c'est-à-dire de 2.2(a) à 2.2(c)). L'Hamiltonien résultant est caractérisé par les constantes de couplage décrites dans la figure 2.2(b). L'énergie libre associée à cet Hamiltonien est

$$\Omega_{tr}(\lambda) = -k_B T \ln \left(\sum_{h_1 \dots h_L} \exp(-\beta H_{tr}(\lambda)) \right) \quad (2.17)$$

De la dérivée de l'énergie libre découle

$$\frac{\Omega_{tr}(\lambda)}{d\lambda} = \langle \mathcal{H}_1 - H_0 \rangle_{\mathcal{H}_{tr}(\lambda)} \quad (2.18)$$

où $\langle \cdot \rangle_{\mathcal{H}_{tr}(\lambda)}$ représente la moyenne statistique sur le système en transition, facilement calculable dans les simulations numériques. En intégrant sur le couplage, on trouve que

$$\Omega_1 - \Omega_0 = \int_0^1 d\lambda \langle H_1 - H_0 \rangle_{\mathcal{H}_{tr}(\lambda)} \quad (2.19)$$

Finalement, dans la limite où l'épaisseur du système est suffisamment grande pour que la variation d'une couche soit suffisamment petite ($L' \gg 1$), on trouve que

$$-\frac{\partial \Omega(t, h, L)}{\partial L} \simeq \int_0^1 d\lambda \langle \mathcal{H}_1 - \mathcal{H}_0 \rangle_{\mathcal{H}_{tr}(\lambda)} \quad (2.20)$$

Bien que $H_{tr}(\lambda)$ dépende de la rangée k_0 que l'on a décidé de découpler, et par transition $H_1 - H_0$ et $\langle H_1 - H_0 \rangle_{\mathcal{H}_{tr}(\lambda)}$, l'intégrale $\int_0^1 d\lambda \langle H_1 - H_0 \rangle_{\mathcal{H}_{tr}(\lambda)}$ est indépendante de ce choix tant que les conditions aux bords ne sont pas affectés par l'extraction de la couche k_0 .

rajouter quelques résultats sur la forme de la force de Casimir $+-$?

2.2 Modèle Solid-On-Solid

2.2.1 Définition du modèle

Le modèle d'Ising permet d'étudier de nombreux systèmes différents, que ce soit pour les propriétés de bulk, la dynamique de coarsening ou les propriétés de l'interface. Dans ce dernier cas, il n'est pas nécessaire de posséder toutes les informations sur le bulk afin d'obtenir les propriétés de l'interface. Tout comme on est passés des équations de champ moyen du modèle A et B aux équations d'interface Edwards-Wilkinson, le passage d'un système entier à l'étude spécifique de l'interface peut se faire dans les modèles sur réseau. À très basse température, les interfaces sont bien délimitées et il y a très peu de clusters de la phase $+$ dans la phase $-$, et vice-versa. 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 site prend alors la valeur

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

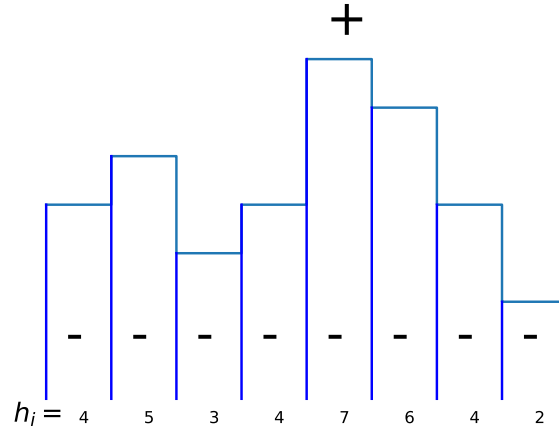


FIGURE 2.3 – Une configuration possible de modèle SOS. Dans la i -ème colonne le bord horizontal de l’interface passe à la hauteur h_i . Toutes les particules au-dessus de l’interface sont des spins positifs, et négatifs en dessous. La représentation classique du modèle SOS diffère de ce schéma par l’hypothèse que les particules sont discernables (voir Chapitre ??). **David : pourquoi tu veux mettre cette figure dans un autre chapitre??**

où la fonction $\text{sgn}(x)$ est égale à $+1$ si $x > 0$ et à -1 sinon. Cela revient à considérer que l’énergie d’interaction J_z dans l’axe perpendiculaire à l’interface est bien supérieure à l’énergie d’interaction perpendiculaire à l’interface.

En utilisant les identités

$$\min(a, b) = \frac{|a + b| - |a - b|}{2} \quad (2.21)$$

$$\max(a, b) = \frac{|a + b| + |a - b|}{2} \quad (2.22)$$

on a

$$\sum_{j=0}^L \text{sgn}(h - j) \text{sgn}(h' - j) = L - 2|h - h'| \quad (2.23)$$

Pour un système d’Ising en deux dimensions de taille $L' \times L$, l’Hamiltonien du modèle

d'Ising 2.4, se réécrit comme

$$H = 2JL'(1 - L) + 2J \sum_{i=0}^{L'} |h_i - h_{i+1}| + \sum_{i=0}^{L'} V(h_i) \quad (2.24)$$

où la somme se fait maintenant sur les sites i de hauteur h_i (voir figure 2.3), et le résultat a été divisé par deux pour ne pas compter deux fois les mêmes liens, et

$$V(h_i) = \sum_{j=0}^L V(\text{sgn}(h - j)) \quad (2.25)$$

On pose $h_{L'} = h_0$ comme conditions périodiques aux bords. On peut également calculer directement l'énergie d'un tel système depuis une configuration Solid-On-Solid. Il existe L_Y liens verticaux par colonne, dont tous sauf un ont une énergie de $-J$, et le lien passant à travers l'interface ayant une énergie de $+J$. L'énergie totale des liens verticaux est donc de $E_y = -JL_X(L_Y - 2)$. De même pour les liens horizontaux, il existe $L_X \times L_Y$ liens au total, dont $\sum_i |h_i - h_{i+1}|$ liens d'énergie $+J$, ce qui nous donne une énergie d'interaction horizontale de $E_x = -JL_X L_Y + 2 \sum_i |h_i - h_{i+1}|$. La somme des deux énergies redonne 2.24.

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 simplifiant $2J = J$ et en retirant l'énergie de volume qui est constante, nous obtenons l'hamiltonien du **modèle Solid-On-Solid** (SOS)

$$H = J \sum_{i=0}^{L'} |h_i - h_{i+1}| + \frac{V(h_i) + V(h_{i+1})}{2} \quad (2.26)$$

où l'on a symétrisé le potentiel $V(h)$. Dans le langage liquide/gaz utilisé précédemment dans le modèle d'Ising, on peut interpréter la hauteur h_i comme étant le nombre de particules au site i , avec les sites au-dessus de l'interface étant considérés comme vides. Lorsque le site i augmente d'une unité, on peut considérer qu'une particule s'est ajoutée au système, et qu'elle s'est évaporée si h_i décroît d'une unité.

La croissance des cristaux a été le premier système sur lequel le modèle SOS a été développé en 1972 [57]. Depuis, le modèle a été utilisé pour des systèmes de croissances de cristaux [58], a été trouvé en accord avec les expériences de croissance épitaxiale [59], ou dans le cas des membranes de polymères [60].

Dans le modèle SOS, les h_i peuvent prendre n'importe quelle valeur entre 0 et L . Une variante de ce modèle est celui où la hauteur h_{i+1} est restreinte uniquement aux valeurs

comprises dans $[h_i - a, h_i + a]$. La version du modèle où $a = 1$ est appelé le modèle Solid-On-Solid Restreint (RSOS)[61]. Ce modèle est une approximation du modèle SOS à très basse température. Dans ces conditions, l'interface est très lisse puisque l'on contraint les modes excités de l'interface [62, 63].

Un modèle qui est plus proche des modèles continus comme l'Hamiltonien 4.4 possède une l'interaction gaussienne

$$H = J \sum_{i=0}^{L'} (h_i - h_{i+1})^2 + \frac{V(h_i) + V(h_{i+1})}{2} \quad (2.27)$$

qui possède également une version restreinte. Le modèle SOS possède, quelque soit l'exposant de l'interaction, une relation étroite avec le modèle XY [64].

La dimensionalité du système a été réduite en ne prenant en compte que la hauteur h_i au site i à la place de la position de toutes les particules. L'approximation du modèle SOS implique que les configurations sont analogues à celles d'un mouvement brownien partiellement dirigé auto-évitant. Cette analogie a permis de diagonaliser complètement la fonction de partition dans le cas où il existe un champ magnétique et un potentiel confinant l'interface (nous y reviendrons au paragraphe 2.2.4) [65] et d'étudier les statistiques des déviations extrêmes de l'interface [66, 67].

2.2.2 Ensemble grand-canonique et potentiel chimique

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 l'ensemble canonique, le nombre de particules N sous l'interface est fixe, ce qui introduit une contrainte dans la fonction de partition

$$Z(N) = \sum_{h_0 h_1 \dots h_{L'}} \exp(-\beta \sum_i H(h_i, h_{i+1})) \delta_{\sum_i h_i, N} \quad (2.28)$$

La position moyenne de l'interface est maintenant imposée, ce qui interdit certains microétats, et change les propriétés thermodynamiques de la matrice de transfert comme la distribution des hauteurs de l'interface [68], 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 pour une taille donnée. 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 CPU raisonnable.

La fonction de partition 2.28 est en relation vis-à-vis de l'ensemble grand-canonique grâce au potentiel chimique μ par

$$\Xi(\mu) = \sum_N Z(N) \exp((\beta\mu N) \quad (2.29)$$

La grande fonction de partition peut s'écrire comme

$$\Xi = \sum_{h_0 h_1 \dots h_{L'}} \exp(-\beta H_{eff}(h_0, h_1, \dots, h_{L'})) \quad (2.30)$$

où

$$H_{eff} = J \sum_{i=0}^{L'} |h_i - h_{i+1}| + \sum_{i=0}^{L'} V(h_i) - \mu h_i \quad (2.31)$$

et de matrice de transfert

$$T(h, h') = \exp \left(-\beta(J|h - h'| - \mu \frac{h + h'}{2} + \frac{V(h) + V(h')}{2}) \right) \quad (2.32)$$

Dans la figure 2.4, on montre le nombre moyen de particules par site en fonction du potentiel chimique, pour différentes hauteurs maximales L . Ce potentiel chimique simule une pression externe imposée, qui peut soit confiner l'interface vers $h = 0$ si $\mu < 0$ (comme sur la figure), ou le confiner vers $h = L$ si $\mu > 0$. Ainsi, l'équivalence des ensembles canonique et grand-canonique dans la limite thermodynamique à μ fixé n'est valable que lorsque le nombre de particules du système canonique N est égal au nombre de particules dans l'ensemble grand-canonique.

Comme dans le modèle d'Ising, il existe une bijection entre l'usage d'un champ magnétique conjugué à une aimantation par site et l'usage d'un potentiel chimique conjugué à une densité de particules. Nous parlerons donc sans ambiguïté de potentiel chimique pour tout potentiel $V(h_i)$ que nous étudierons plus tard, ainsi que de densité de particules M .

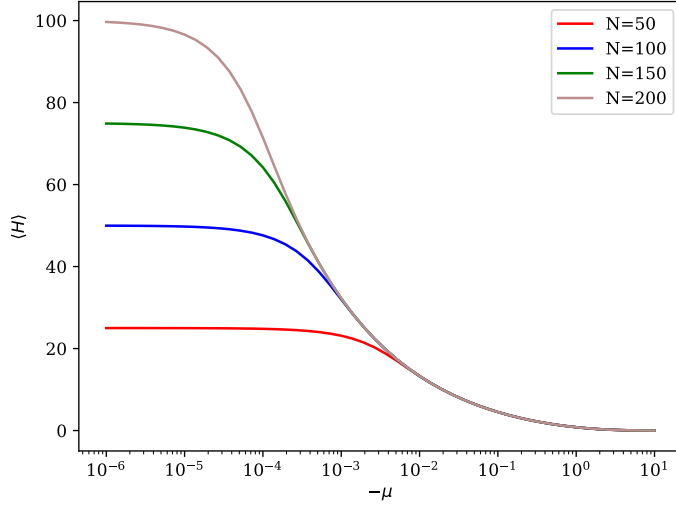


FIGURE 2.4 – Position d'équilibre de l'interface 2.32 en fonction de $-\mu$ via diagonalisation de la matrice de transfert 2.32. Lorsque le potentiel chimique est trop faible, l'interface est délocalisée et se retrouve à la position $\frac{N}{2}$.

2.2.3 Matrice de Transfert

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

$$H = \sum_{i=0}^{L'} f(h_i, h_{i+1}) + V(h_i, h_{i+1})$$

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. Pour un système possédant L' sites pouvant contenir des valeurs dans $[0, L]$, la fonction de partition de notre système s'écrit

$$Z = \sum_{h_1=0}^L \sum_{h_2=0}^L \dots \sum_{h_{L'}=0}^L \exp(-\beta \sum_{i=0}^{L'} H(h_i, h_{i+1})) = \sum_{h_1 h_2 \dots h_{L'}} \prod_{i=0}^{L'} \exp(-\beta H(h_i, h_{i+1})) \quad (2.33)$$

$$T = \begin{bmatrix} \ddots & \vdots & \ddots \\ e^{-\beta H(-1,-1)} & e^{-\beta H(-1,0)} & e^{-\beta H(1,-1)} \\ \ddots & e^{-\beta H(0,0)} & \ddots \\ e^{-\beta H(1,-1)} & e^{-\beta H(1,0)} & e^{-\beta H(1,1)} \\ \ddots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (2.38)$$

FIGURE 2.5 – Matrice de transfert infinie et symétrique 2.34.

La matrice

$$T(h_i, h_j) = e^{-\beta H(h_i, h_j)} \quad (2.34)$$

est appelée matrice de transfert. On a représenté dans la figure 2.5 une matrice infinie correspond à la limite thermodynamique dans le cas où les sites peuvent prendre n'importe quelle valeur dans $[-\infty, \infty]$, qui correspond au cas où l'interface est centrée en $h = 0$ et ne possède pas de conditions aux bords. Lorsqu'il s'agit de diagonaliser cette matrice infinie numériquement, il suffit de faire la translation $h_i \rightarrow h_i - \frac{L}{2}$, où L est la taille de la matrice de transfert, tendant vers l'infini.

Puisque le système est périodique (c'est-à-dire que $h_{L+1} = h_1$), la matrice est périodique également, c'est-à-dire que $T(h_L, h_{L+1}) = T(h_L, h_1)$ [69], et elle est également symétrique, La matrice de transfert peut donc être diagonalisée, nous écrivons ses vecteurs valeurs propres comme

$$T|\lambda\rangle = \lambda|\lambda\rangle \quad (2.35)$$

Ces vecteurs propres sont également orthonormaux

$$\langle\lambda|\lambda'\rangle = \delta_{\lambda\lambda'} \quad (2.36)$$

On note par λ_0 la plus grande valeur propre de T , par λ_1 la deuxième plus grande valeur propre et ainsi de suite. Ainsi on peut diagonaliser la fonction de partition par la trace de la matrice de transfert [53]

$$Z = \sum_{h_1 h_2 \dots h_{L'}} \prod_i T(h_i, h_{i+1}) = \text{Tr}(T^{L'}) = \sum_{\lambda} \langle\lambda|T^{L'}|\lambda\rangle = \sum_{\lambda} \lambda^{L'} \quad (2.37)$$

Dans la limite thermodynamique $L' \rightarrow \infty$, seul le plus grand vecteur propre est

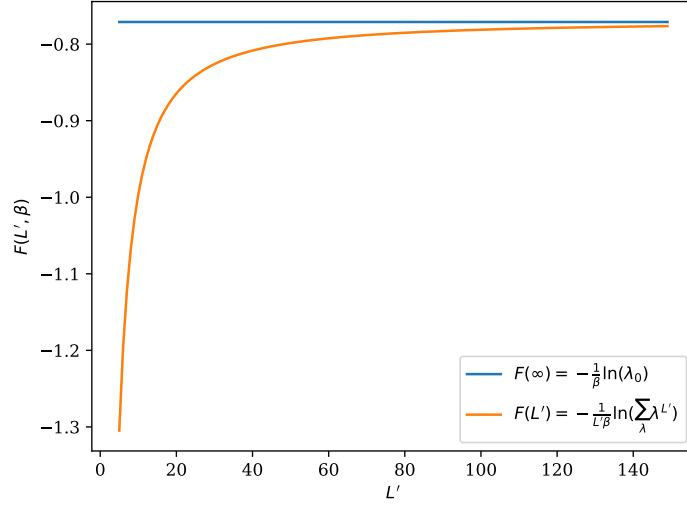


FIGURE 2.6 – Énergie libre par site $F(L')$ en fonction du nombre de sites L' comparé à la limite thermodynamique $F(\infty)$, pour un système de hauteur $L = 100$, $\beta = 1$, $J = 1$ et $V(h_i) = 0$.

relevant, puisque la fonction de partition devient

$$Z(L \rightarrow \infty) \simeq \lambda_0^{L'} \quad (2.39)$$

Nous trouvons alors que l'énergie libre par site est égale à

$$F = -\frac{1}{L'\beta} \ln(Z) \simeq -\frac{1}{\beta} \ln(\lambda_0) \quad (2.40)$$

Dans la figure 2.6 on montre l'évolution de l'énergie libre par site $F(L')$ dans le cas d'un potentiel nul. On détermine alors que l'approximation de la limite thermodynamique est vraie pour $L' > 150$. Afin de calculer la densité moyenne par site M , on introduit la matrice des hauteurs \hat{M} définie par son action sur les vecteurs $|h\rangle$ de la base de la matrice de transfert par

$$\langle h | \hat{M} | h' \rangle = \delta_{h,h'} h \quad (2.41)$$

On trouve alors la densité par site

$$M = \langle h \rangle = \frac{1}{L'} \sum_i h_i = \frac{1}{Z} \sum_{\lambda} \lambda^{L'} \langle \lambda | \hat{M} | \lambda \rangle \simeq \langle \lambda_0 | \hat{M} | \lambda_0 \rangle \quad (2.42)$$

On en déduit la variance sur la hauteur par site

$$w^2 = \langle (h - M)^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\lambda} \lambda^{L'} \langle \lambda | \hat{M}^2 | \lambda \rangle - \langle \lambda | \hat{M} | \lambda \rangle^2 \simeq \langle \lambda_0 | \hat{M}^2 | \lambda_0 \rangle - M^2 \quad (2.43)$$

On peut retrouver ces deux observables en calculant le premier et le second moment de la densité de probabilité qu'un site se trouve à la hauteur h

$$p(h) = \frac{1}{Z} \sum_{\lambda} \lambda^{L'} \langle \lambda | h \rangle^2 \simeq \langle \lambda_0 | h \rangle^2 \quad (2.44)$$

La fonction de corrélation à deux points du système se calcule grâce à la formule

$$C(r) = \langle h_i h_{i+r} \rangle - M^2 = \frac{1}{Z} \sum_{\lambda \neq \lambda_0} \langle \lambda_0 | M | \lambda \rangle \langle \lambda | M | \lambda_0 \rangle \left(\frac{\lambda}{\lambda_0} \right)^r \quad (2.45)$$

qui devient, dans la limite où r est grand,

$$C(r) \simeq \langle \lambda_0 | M | \lambda_1 \rangle \langle \lambda_1 | M | \lambda_0 \rangle \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)^r \quad (2.46)$$

what did you mean in your corrections by "explain when this is true-what happens to λ_2 etc"? À grande distance, cette fonction de corrélation a un caractère exponentiel, ce qui nous permet de définir la longueur de corrélation à grande distance ξ

$$\xi = -\frac{1}{\ln(\frac{\lambda_1}{\lambda_0})} \quad (2.47)$$

2.2.4 États libres dans un système SOS infini

Prenons un système de taille L dans la limite thermodynamique $L' \rightarrow \infty$. Comme vu précédemment, seules les valeurs de la plus grande valeur propre influent sur les propriétés statistiques. Soit

$$\psi_{\lambda}(h) = \langle h | \lambda \rangle \quad (2.48)$$

la projection du vecteur propre associé à la valeur propre λ de la matrice de transfert sur la base des hauteurs $|h\rangle$ dans un système infini de part et d'autre de l'interface. Dans la limite $\beta = 0$, c'est-à-dire pour une température infinie, tous les termes de la matrice de transfert sont égaux à 1, menant à des vecteurs propres nuls. Dans ce cas, la densité de probabilité $p(h)$ est nulle pour tout h , ce qui signifie qu'il n'existe pas d'interface. Le modèle SOS n'est donc pas valable dans cette limite. 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, même si toutes les hauteurs sont équiprobables. Bien que les micro-états soient extrêmement différents pour une température finie, les propriétés macroscopiques sont identiques à cause du même poids statistique associé à chaque état.

Pour une température finie et en absence de potentiel[70, 71], l'équation du vecteur propre donne

$$\sum_{h=-\infty}^{\infty} T(h, h') \psi_{\lambda}(h) = \lambda \psi_{\lambda}(h') \quad (2.49)$$

En introduisant l'ansatz $\psi_{\lambda}(h) = \alpha_{\lambda}^h$ et en séparant de la somme les termes pour h négatifs et positifs, on trouve aisément que

$$\lambda = \frac{\sinh(\beta J)}{\cosh(\beta J) - (\alpha_{\lambda} + \alpha_{\lambda}^{-1})} \quad (2.50)$$

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 $p(h)$ est finie pour tout h avec $p(h) = p(-h)$. Dès lors, l'ansatz supposé $\psi_{\lambda}(h) = \alpha_{\lambda}^h$ implique que α_{λ} soit de la forme e^{ik} où k est la longueur d'onde associée à la valeur propre λ . On obtient que

$$\psi_k(h) = e^{ikh} \quad (2.51)$$

$$\lambda = \frac{\sinh(\beta J)}{\cosh(\beta J) - \cos(k)} \quad (2.52)$$

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.

Une manière simple de localiser l'interface est de rajouter un potentiel $V(h) = -B\delta_{h,0}$ [72, 73, 74], qui augmente la probabilité de présence de l'interface à $h = 0$. La recherche

d'un état localisé nous donne un ansatz de la forme

$$\psi_\lambda(h) = \begin{cases} |\alpha|^h & \text{si } h \neq 0 \\ \psi_{\lambda,0} & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.53)$$

L'équation du vecteur propre devient

$$\sum_{h=-\infty}^{\infty} \exp(\beta|h-h'| - \beta B \delta_{h,0}) \psi_\lambda(h) = \lambda \psi_\lambda(h') \quad (2.54)$$

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 $h' < 0$

$$\left(\frac{R}{\alpha}\right)^{\pm h'} \left[\psi_{\lambda,0} + \frac{R\alpha}{1-R\alpha} + \frac{\alpha}{R-\alpha} \right] + \left[\frac{1}{1-R\alpha} - \frac{R}{R-\alpha} \right] = \lambda \quad (2.55)$$

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

$$\psi_{\lambda,0} = -\frac{\alpha}{R-\alpha} - \frac{R\alpha}{1-R\alpha} \quad (2.56)$$

$$\lambda = \frac{1}{1-R\alpha} - \frac{R}{R-\alpha} \quad (2.57)$$

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

$$\psi_{\lambda,0} + 2\frac{R\alpha}{1-R\alpha} = \lambda \psi_{\lambda,0} e^{-\beta B} \quad (2.58)$$

L'existence d'une solution cohérente $\alpha < 1$ autorise la présence d'une interface localisée grâce à un potentiel dit d'épinglage (*pinning*) [75, 76, 77, 78]. Dans le cas d'une géométrie semi-infinie, la présence d'un potentiel chimique exerçant une pression sur l'interface permet de la maintenir confinée, comme expliqué dans la section 2.2.2.

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 prédéfinie, comme le ferait un laser dans un liquide binaire dont chaque phase a un indice de réfraction différent [79, 80] (voir chapitre 5). 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.

2.3 Conclusion

La discrétisation sur un réseau carré du champ $\phi(\mathbf{x}, t)$ mène directement au modèle d'Ising. Ce modèle sur réseau est extrêmement important puisqu'il appartient à la même classe d'universalité que les ensembles liquide/gaz, les gaz sur réseau ou les liquides binaires. Sa relation étroite avec les théories de champ moyen lui donne de nombreuses méthodes d'approches, comme le groupe de renormalisation, et les simulations numériques de par sa nature discrète.

L'approximation basse température, dans laquelle on suppose qu'au niveau de l'interface entre deux phases il n'existe pas d'impuretés, s'appelle le modèle Solid-On-Solid. Ce modèle permet d'étudier les propriétés de l'interface par diagonalisation directe de la matrice de transfert, ou par simulations numériques. Pour finir, nous avons montré comment diagonaliser la matrice de transfert dans le cas le plus simple, celui d'un système infini en absence de tout potentiel, et nous avons vu comme dans un tel système, l'interface n'est pas localisée.

Chapitre 3

Méthodes numériques

En 1949, Metropolis [81] découvre une méthode pour calculer via des simulations numériques de Monte Carlo, la moyenne d'observables statistiques. Si Q est une quantité observable appartenant à un système statistique, comme l'énergie interne ou la densité moyenne de particules par site, alors la moyenne est calculée en pondérant la valeur de l'observable sur toutes les configurations C du système par rapport au poids statistique de ces configurations. Si l'on considère le système en équilibre thermodynamique alors chaque configuration C suit une distribution de Gibbs-Boltzmann, et la moyenne $\langle Q \rangle$ est vaut

$$\langle Q \rangle = \frac{\sum_C Q(C) \exp(-\beta E(C))}{\sum_C \exp(-\beta E(C))} \quad (3.1)$$

Pour un système SOS de taille 100×100 par exemple, petit par rapport à la limite thermodynamique comme discuté avec la figure 2.6, il existe 100^{100} configurations possibles, bien qu'une simulation numérique ne puisse explorer qu'environ 10^8 configurations différentes en un temps CPU raisonnable. Les modèles sur réseau se prêtent parfaitement aux simulations numériques de Monte Carlo, où le but est de calculer la valeur moyenne des observables telles que l'énergie interne ou la densité moyenne de particule par site. Toutes ces quantités peuvent être calculées directement pour le modèle SOS dans l'ensemble grand-canonique à l'aide des valeurs propres de la matrice de transfert, mais il est impossible d'utiliser une telle méthode dans l'ensemble canonique, comme expliqué dans le chapitre précédent.

Dans ce chapitre, nous commençons par expliquer le principe des simulations de Monte Carlo Metropolis, et comment choisir l'ensemble thermodynamique de la simulation numérique. En plus d'étudier l'ensemble canonique, les simulations numériques offrent

la possibilité d'étudier les régimes hors équilibre, dont nous justifierons la validité. Nous finirons le chapitre par expliquer comment accélérer la vitesse de simulation grâce à la parallélisation, ainsi que d'autres astuces de programmation, en insistant sur les écueils techniques à éviter.

Je remercie le Mésocentre de Calcul Intensif Aquitain (MCIA)¹ sur lequel j'ai effectué la très grande majorité de mes simulations numériques. L'intégralité du code produit pour cette thèse est accessible sur Github² sous la licence Creative Commons BY 3.0³. Les simulations numériques ont été codées en C++, la parallélisation avec la librairie MPI, l'automatisation du lancement des jobs en Bash, et la visualisation des données ainsi que les diagonalisations des matrices de transfert sous Python.

actuellement, est-ce que j'ai le droit de diffuser librement mon code? Le CNRS autorise la libre diffusion du code?

3.1 Algorithme de Monte Carlo Metropolis

Les simulations de Monte Carlo explorent l'espace des configurations de manière aléatoire [82] avec une probabilité $p(C)$ que nous définirons plus tard. En choisissant M états C_0, \dots, C_M , l'estimateur Q_M de Q est donnée par

$$Q_M = \frac{\sum_{i=0}^M Q(C_i) p(C_i)^{-1} \exp(-\beta E(C_i))}{\sum_{i=0}^M p(C_i)^{-1} \exp(-\beta E(C_i))} \quad (3.2)$$

Lorsque M augmente, l'estimateur devient une estimation de plus en plus précise de $\langle Q \rangle$, jusqu'à la limite $Q_{M \rightarrow \infty} = \langle Q \rangle$. Si l'on choisit les configurations sur lesquelles on échantillonne le système selon la distribution à l'équilibre de Gibbs-Boltzmann $p(\nu) = Z^{-1} e^{-\beta E(C)}$, alors l'estimateur de $\langle Q \rangle$ devient

$$Q_M = \frac{1}{M} \sum_{i=0}^M Q(C_i) \quad (3.3)$$

On se pose maintenant la question de savoir comment choisir les configurations afin que chacune apparaisse avec la bonne probabilité de Boltzmann.

Une dynamique pour les systèmes avec un espace des phases discret peut être construit à partir de chaînes de Markov. On laisse la dynamique évoluer dans un discret noté n , et $p_n(C)$ la probabilité que le système soit dans l'état C au temps n . Au pas

1. <https://redmine.mcia.fr/projects/mcia>

2. <https://github.com/Bulbille/Curta>

3. <https://creativecommons.org/licenses/by/3.0/fr/>

de temps suivant, si le système est dans l'état C il peut sauter vers un autre état C' avec la probabilité de transition $\rho(C \rightarrow C')$. Le système au temps $n + 1$ dépend alors uniquement de l'état au temps n : c'est un processus markovien. La probabilité $p_{n+1}(X)$ d'être dans l'état C au temps $n + 1$ est possible si le système était dans l'état C au temps n et y reste avec une probabilité $\rho(C \rightarrow C)$, ou s'il est dans un état C' et bouge vers l'état C avec une probabilité $\rho(C' \rightarrow C)$. On a alors l'équation maîtresse

$$p_{n+1}(C) = \rho(C \rightarrow C)p_n(C) + \sum_{C' \neq C} \rho(C' \rightarrow C)p_n(C') \quad (3.4)$$

Puisque $\rho(C' \rightarrow C)$ est une probabilité, on a la condition suivante

$$\sum_{C'} \rho(C' \rightarrow C) = 1 \quad (3.5)$$

Maintenant, si la dynamique décrit un système physique en interaction avec un réservoir de chaleur, la distribution à l'équilibre est donnée par

$$p_{eq}(C) = \frac{\exp(-\beta E(C))}{Z} \quad (3.6)$$

avec Z la fonction de partition canonique. Puisque la distribution à l'équilibre n'évolue pas au cours du temps, on a

$$p_{eq}(C) = \rho(C \rightarrow C)p_{eq}(C) + \sum_{C' \neq C} \rho(C' \rightarrow C)p_{eq}(C') \quad (3.7)$$

Une autre condition que l'on impose à notre chaîne de Markov afin qu'elle génère une probabilité de distribution de Boltzmann après équilibrage, est qu'elle respecte le bilan détaillé. Afin qu'un système respecte le bilan détaillé, il faut que le taux auquel il fait des transitions vers à partir de n'importe quel état C soit égal. Mathématiquement, cela revient à dire que

$$\sum_{C'} p(C)\rho(C \rightarrow C') = \sum_{C'} p(C')\rho(C' \rightarrow C) \quad (3.8)$$

On peut démontrer que cette relation est équivalente à [82]

$$\frac{\rho(C' \rightarrow C)}{\rho(C \rightarrow C')} = \frac{p(C)}{p(C')} = \frac{\exp(-\beta E(C))}{\exp(-\beta E(C'))} \quad (3.9)$$

En adoptant le bilan détaillé, on voit facilement que la distribution à l'équilibre cal-

culée via 3.7 redonne bien la distribution de Gibbs-Boltzmann. Durant une étape de Metropolis, la probabilité pour que la transition $C \rightarrow C'$ soit acceptée est

$$p_a(C \rightarrow C') \quad (3.10)$$

Systems with a canonical heat bath can be simulated on a computer using an algorithm obeying detailed balance. For example consider a system of N Ising spins $S_i = \pm 1$ interacting via a Hamiltonian $H(S_1, S_2, \dots, S_N)$. We choose 1 of the spins randomly uniformly with a probability $p = 1/N$ and calculate the new energy of the system when the spin, S_j say is changed to $-S_j$. In Metropolis dynamics the probability of accepting the spin flip $p_a(S_j \rightarrow -S_j)$ is given by

$$p_a(S_j \rightarrow -S_j) \quad (3.11)$$

if $H(S_1, S_2, \dots, -S_j, \dots, S_N) < H(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N)$ but if $H(S_1, S_2, \dots, -S_j, \dots, S_N) > H(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N)$ then the flip is accepted with probability

$$p_a(S_j \rightarrow -S_j) = \exp[-\beta(H(S_1, S_2, \dots, -S_j, \dots, S_N) - H(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N))] < 1. \quad (3.12)$$

The total probability at a given discrete time of changing S_j is thus equal to

$$p(S_j \rightarrow -S_j) = \frac{1}{N} p_a(S_j \rightarrow -S_j) \quad (3.13)$$

as we choose the spin S_j with probability $1/N$. Therefore we have

$$\frac{p(S_j \rightarrow -S_j)}{p(-S_j \rightarrow S_j)} = \frac{p_a(S_j \rightarrow -S_j)}{p_a(-S_j \rightarrow S_j)}. \quad (3.14)$$

In the case where the change $S_j \rightarrow -S_j$ lowers the energy we have

$$p_a(S_j \rightarrow -S_j) = 1, \quad (3.15)$$

however the reverse move $-S_j \rightarrow S_j$ costs energy so

$$p_a(-S_j \rightarrow S_j) = \exp[-\beta(H(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N) - H(S_1, S_2, \dots, -S_j, \dots, S_N))], \quad (3.16)$$

which gives

$$\begin{aligned} \frac{p(S_j \rightarrow -S_j)}{p(-S_j \rightarrow S_j)} &= \frac{1}{\exp[-\beta(H(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N) - H(S_1, S_2, \dots, -S_j, \dots, S_N))]} \\ &= \frac{\exp[-\beta H(S_1, S_2, \dots, -S_j, \dots, S_N)]}{\exp[-\beta H(S_1, S_2, \dots, S_j, \dots, S_N)]}, \end{aligned} \quad (3.17)$$

and so in this case we see that detailed balance is respected. In the case of a move which increases the energy it is easy to see that detailed balance is again respected.

If we consider a case where the spins $+$ represent one type of particle and the $-$ another type and insist that the total chemical composition remains the same the above dynamics is not correct as you cannot convert a $+$ into a $-$ and vice-a-versa. However a $+$ next to a $-$ can change places. Kawasaki dynamics chooses a neighbouring pair of $+$ and $-$ and tries to switch their positions, e.g. $\cdot + - \cdot \rightarrow \cdot - + \cdot$, the move is accepted with probability 1 if the energy change $\Delta E \leq 0$ and with probability $p_a = \exp(-\beta \Delta E)$ if $\Delta E > 0$.

Practically in a computer program if $\Delta E > 0$ one draws a uniformly distributed random number $r \in [0, 1]$ (for example `rand` in Fortran and Matlab), if $r \leq p_a$ the move is accepted but if $r > p_a$ it is refused and the system stays in its initial state.

3.2 Suite

qui définit la fonction de partition \mathcal{Z} . Dans un algorithme de Metropolis, on met à jour le micro-état en prenant un site i au hasard⁴ et en le changeant légèrement vers un état ν . Dans un système d'Ising, nous choisissons un spin σ_i au hasard et regardons s'il peut être renversé ou échangé avec l'un de ses plus proches voisins. Dans le modèle SOS, nous choisissons une colonne h_i au hasard et regardons s'il est possible d'ajouter ou de retirer une unité à la hauteur (c'est le nombre de particules sous l'interface au site h_i), ou d'échanger une particule d'une colonne vers une de ses plus proches voisins. 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 que μ ,

4. 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++. Tout cela combiné accélère le code d'un facteur 20 environ.

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

et nous acceptons le changement. Dans le cas où $E_\nu > E_\mu$, on accepte le changement avec une probabilité satisfaisant au bilan détaillé pour une marche markovienne satisfaisant à l'état d'équilibre de Boltzmann

$$\frac{p(\mu \rightarrow \nu)}{p(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\Delta E p(\nu \rightarrow \mu)} \quad (3.18)$$

ce qui nous donne la probabilité de transition $\mu \rightarrow \nu$ de Metropolis

$$p(\mu \rightarrow \nu) = \min(1, e^{-\beta \Delta E(\mu \rightarrow \nu)}) \quad (3.19)$$

Ensuite on prend un nombre aléatoire q entre 0 et 1. Si $q < p(\mu \rightarrow \nu)$, alors la transition est validée. Une étape de Monte Carlo est achevée lorsque L tentatives de transition ont été faites. Cependant, il est possible d'accélérer l'algorithme en utilisant un temps continu [82] ou en prenant en compte les états dont la transition a été refusée [83]. L'erreur obtenue à la fin sur notre observable $\langle A \rangle$ au cours d'une simulation ayant duré t_{max} étapes de Monte Carlo est

$$E(A) = \sqrt{\frac{2\tau}{t_{max}} (\langle A^2 \rangle - \langle A \rangle^2)} \quad (3.20)$$

Cette variance dépend du temps de corrélation τ puisque si deux micro-états sont très rapprochés dans le temps, l'observable en question n'aura pas grandement évolué. En pratique, il suffit que $\frac{\tau}{t_{max}} < 10^{-4}$ pour obtenir une erreur inférieure à 1%. Ce temps de corrélation τ se calcule via la fonction d'auto-corrélation

$$\mathcal{C}(t) = \langle A(t')A(t+t') \rangle - \langle A \rangle^2 = \frac{1}{T_{max}} \int_0^{T_{max}} A(t')A(t+t') - \langle A \rangle^2 dt' \simeq e^{-\frac{t}{\tau}} \quad (3.21)$$

qui se comporte comme une somme d'exponentielles, mais où dans la limite thermodynamique, seul le mode de relaxation le plus long compte[84]. En supposant la limite thermodynamique, l'ordre de grandeur de τ - et donc de la variance de nos observables - est donnée par le calcul de l'intégrale⁵

$$\tau = \int_0^\infty \mathcal{C}(t)/\mathcal{C}(0) dt \quad (3.22)$$

5. Je recommande d'intégration de Simpson.

Le calcul de la plus grande longueur de corrélation ξ du système se fait de manière analogue en intégrant la fonction de corrélation spatiale définie par

$$\mathcal{C}(x) = \frac{1}{L} \sum_{x'} A(x') A(x + x') - \langle A \rangle^2 \simeq e^{-\frac{x}{\xi}} \quad (3.23)$$

Une discussion plus rigoureuse sur la forme de la fonction de corrélation spatiale sera donnée dans la section 5.

3.2.1 Ensemble grand-canonique : algorithme de Glauber

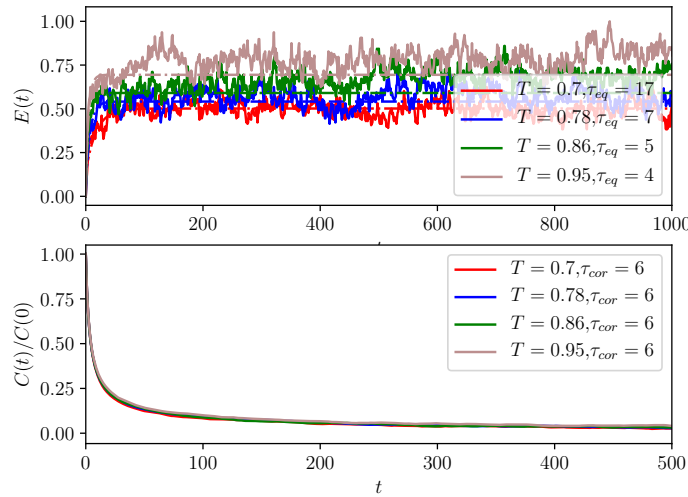


FIGURE 3.1 – Courbe de l'énergie (haut) et fonction d'auto-corrélation (bas) dans avec un **paramètre d'ordre non-conservé** à partir de la condition initiale. Le temps d'équilibre (en étapes de Monte Carlo) diminue avec la température, tandis que le temps de corrélation reste relativement constant. Le temps de corrélation étant extrêmement faible, 10^7 étapes de Monte Carlo suffisent à avoir une erreur de moins de 0.1% sur les moyennes mesurées.

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 selon le flux de particules ν vu dans l'équation d'Edwards-Wilkinson ?? . Si l'on se place à l'équilibre thermodynamique, c'est-à-dire qu'autant de

particules se déposent au niveau de l'interface que de particules la quittent, alors il faut que la probabilité de ces deux événements soient égales entre elles, et donc égales à 50%. Dans le cas où la géométrie est infinie, les valeurs des h_i ne sont pas bornées, tandis que dans une géométrie torique de hauteur L , on rejette toutes les configurations qui ne respectent pas aux conditions $0 \leq h_i \leq L$. 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

$$\Delta E = |h_{i-1} - (h_i \pm 1)| + |h_{i+1} - (h_i \pm 1)| - |h_{i-1} - h_i| - |h_{i+1} - h_i| \quad (3.24)$$

$$= 2((h_i \leq h_{i-1}) + (h_i \geq h_{i+1}) - 1) \quad (3.25)$$

où $(h_i \leq h_{i-1})$ est un booléen valant 1 si la condition est vraie, 0 sinon. Le changement de magnétisation est alors $\Delta M = \alpha$, et la largeur de l'interface, définie par $\sigma = \sum_i (h_i - h_{i+1})^2$, change comme

$$\Delta \sigma = 2\alpha(h_{i+1} - h_i) + 2 \quad (3.26)$$

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

Afin d'accélérer le processus d'équilibration du système, il est recommandé de commencer directement avec la valeur moyenne de magnétisation calculée à partir de la matrice de transfert. On regarde ensuite le temps d'équilibration 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 taux 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 la raison pour laquelle une simulation numérique dans une dynamique de Glauber se doit toujours d'avoir un potentiel permettant d'obtenir la localisation d'une interface.

3.2.2 Ensemble canonique : algorithme de Kawasaki

La diffusion des particules - par exemple un polymère dans un solvant - est une dynamique locale qui conserve le paramètre d'ordre du notre système, nomméement 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 colonnes. 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

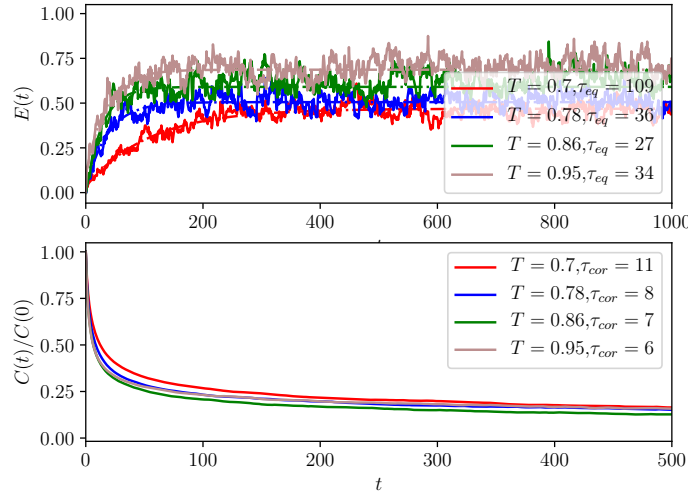


FIGURE 3.2 – Courbe de l'énergie (haut) et fonction d'auto-corrélation (bas) dans avec un **paramètre d'ordre conservé** à partir de la condition initiale. Le temps d'équilibrage (en étapes de Monte Carlo) diminue avec la température, tandis que le temps de corrélation reste relativement constant. Le temps de corrélation est similaire à la dynamique de Glauber, bien que l'équilibrage soit plus long à se faire.

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 . Trois termes dans l'énergie sont modifiées⁶

$$\Delta E = |h_{i-1} - (h_i \pm 1)| + |h_{i+1} \pm 1 - (h_i \pm 1)| + |h_{i+1} \pm 1 - (h_{i+2})| \quad (3.27)$$

$$-|h_{i-1} - h_i| - |h_{i+1} - h_i| - |h_{i+1} - h_{i+2}| \quad (3.28)$$

La magnétisation totale est ainsi conservée, tandis que la largeur de l'interface σ se calcule par

$$\Delta\sigma = 2\alpha + 1 \quad (3.29)$$

3.2.3 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

6. Comme précédemment, il existe une version booléenne de l'équation, mais sa longueur n'offre aucun avantage en terme d'implémentation dans le code comparé au gain de temps de CPU engendré.

dynamique de Kawasaki peut nous donner des états hors-équilibre. 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 si elle bouge dans l'autre sens, ce qui brise le bilan détaillé. De nombreux travaux sur les systèmes hors-équilibre dans le modèle d'Ising ont été produits [40] 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 premier genre de cisaillement se produit aux bords d'un liquide non-visqueux, ce qui 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

$$\Delta E_{bord} = f[(h_i == 1 || h_{i+1} == L - 1) - (h_i == L - 1 || h_{i+1} == 0)] \quad (3.30)$$

Le second genre de cisaillement se produit aux bords d'un fluide permettant un transport visqueux, ce qui entraîne un cisaillement proportionnel à la distance aux bords comme sur la figure 1.3. 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

$$\Delta E_{prop} = fh_i \quad (3.31)$$

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 type 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

$$\Delta E_{uni} = \alpha f \quad (3.32)$$

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

3.2.4 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 site⁷ devenant alors

$$h_i = \sum_{n=0}^N \delta_{\sigma_n, i} \quad (3.33)$$

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 particule⁸ 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? À l'équilibre, le flux de particules entrantes est égale au flux de particules sortantes, c'est-à-dire $p_{ajout} = p_{retrait} = 0.5\%$. Dans ce cas, il suffit de choisir un booléen au hasard, puis détruire une particule et son label ou ajouter une particule à un site particulier. L'avantage de la dynamique conservée est qu'il n'est pas nécessaire de reconstruire une distribution pRNG à chaque étape, même si le constructeur est rapide⁹.

3.3 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons décrit les différentes méthodes de calcul numérique qui vont de pair avec le modèle A et le modèle B, et la manière de mesurer les observables ainsi que leur barre d'erreur. Dans la pratique, les temps de corrélation sont si faibles qu'il suffit de faire environ 10^7 étapes de Monte Carlo afin d'obtenir de bonnes statistiques, ce qui en une dimension, est extrêmement rapide. La rapidité des simulations dans le modèle SOS nous permet ainsi d'étudier une très vaste plage de paramètres, que ce soit pour différentes températures, cisaillements, hauteurs maximales ou champs externes.

mux

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

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

9. Le constructeur a une complexité en $\mathcal{O}(n)$ au pire. http://www.cplusplus.com/reference/random/discrete_distribution/discrete_distribution/

Chapitre 4

Effets de taille finie

disjoining pressure [85] [18] On peut écrire

$$H[h] = \sigma A[h] + \int d\mathbf{x} V(\quad) \quad (4.1)$$

où $A[h]$ est l'aire de l'interface, qui peut se réécrire comme

$$A[h] = \int_A d\mathbf{r} \sqrt{1 + [\nabla h]^2} \quad (4.2)$$

où l'intégrale est fait sur tout le plan perpendiculaire à l'axe z d'aire A . Lorsque les fluctuations de l'interface sont faibles, le développement limité au second ordre nous donne

$$H[h] = A\sigma + \frac{\sigma}{2} \int_A d\mathbf{r} [\nabla h]^2 \quad (4.3)$$

Le premier terme est indépendant de la hauteur. On peut donc réécrire l'Hamiltonien sous la forme d'un Hamiltonien effectif

$$H_{eff}[h] = \frac{\sigma}{2} \int_A d\mathbf{r} [\nabla h]^2 \quad (4.4)$$

Certains dépôts de films nanoscopiques sur des surfaces présentent des fluctuations dont la longueur de corrélation est similaire à celle de la hauteur du film. L'interface entre le dépôt et le substrat présente une énergie libre qui dépend fortement de la taille dudit film[86, 87]. De telles modifications des propriétés thermodynamiques à cause d'un effet de taille finie peut provoquer de fortes instabilités hydrodynamiques pouvant rendre le système thermodynamiquement instable[88]. Ces conditions aux limites entraînent une frustration du système qui finit par causer une force entre les surfaces du système,

appelé force Casimir. Cette force entropique peut se retrouver dans les systèmes critiques et possède alors des propriétés universelles selon la classe d'universalité du système. Plus proche des dépôts de film on retrouve les systèmes de membranes[89] possédant une force non-universelle[90]. Certaines membranes biologiques possèdent même une transition de phase appartenant à la classe d'universalité du modèle d'Ising [91].

Dès lors, quelles propriétés de la force de Casimir peut-on retrouver dans un modèle Solid-On-Solid d'Hamiltonien

$$\mathcal{H} = J \sum_i |h_i - h_{i+1}| + \mu \frac{h_i + h_{i+1}}{2} \quad (4.5)$$

et avec quels outils peut-on l'étudier ?

4.1 Limite thermodynamique

De la densité de probabilité de l'interface découle toutes les propriétés thermodynamiques du système comme la magnétisation moyenne ou l'énergie libre. Lorsque la taille L du système change, les hauteurs supérieures à L ne sont plus disponibles, et on voit un tassement de la distribution. Dans le régime thermodynamique, c'est-à-dire où l'on suppose que la taille L est nettement supérieure à la largeur de la distribution, le mode des fluctuations de plus basse énergie suffit à expliquer les propriétés thermodynamiques¹. Lorsque la taille du système diminue, l'énergie de tous les modes de fluctuations changent, et la puissance dans la fonction de partition pénalise moins fortement les modes suivants.

On considère l'approximation thermodynamique vraie lorsque les propriétés du système sont indépendantes de la taille du système. Le système cesse d'être contraint par les conditions aux bords lorsque $\xi \ll L$. En dehors de cette limite, on peut alors s'attendre à des effets de taille finie, notamment l'effet Casimir.

4.2 Effet Casimir

Dans la section 1.2 nous avons introduit l'effet Casimir comme étant le surplus d'énergie libre causé par le confinement du système, soit

$$f_c(\beta, L, h) = -k_B T \frac{\partial(L\omega_{ex}(\beta, L, h))}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} \quad (4.6)$$

1. Pour rappel, la fonction de partition est calculée par $\mathcal{Z} = \sum_i \lambda_i^L$, avec $\lambda_0 > \lambda_i$ le mode de plus basse énergie (équation 2.37).

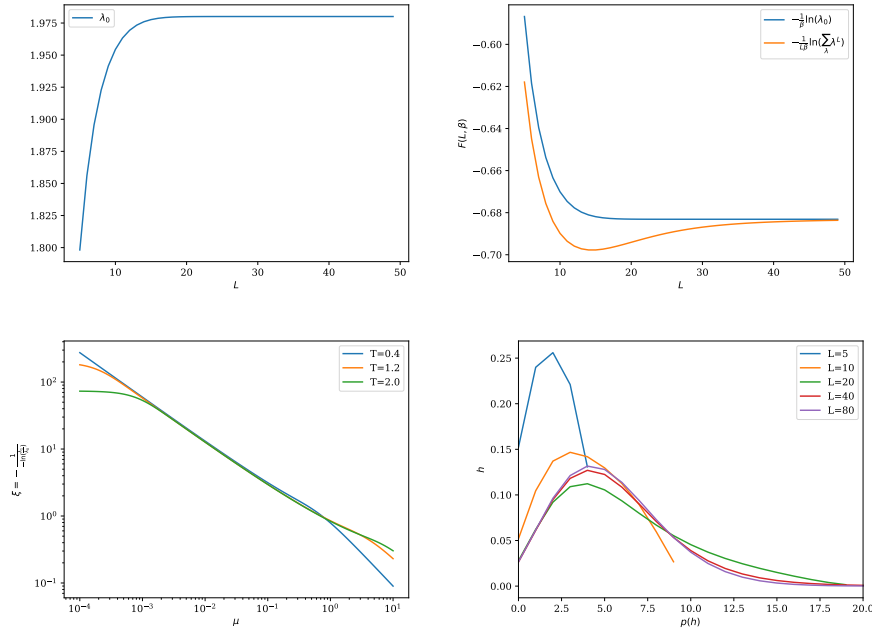


FIGURE 4.1 – Plus grande valeur propre d’une interface libre en fonction de la taille L du système pour $\mu = 0.01$ et $\beta = 1$ (haut gauche); énergie libre par site calculée via l’approximation de la limite thermodynamique 2.40 comparé à la vraie fonction de partition 2.37 en fonction de la taille L du système pour $\mu = 0.01$ et $\beta = 1$ (haut droite); longueur de corrélation à grande distance 2.47 pour une matrice 200×200 en fonction du potentiel chimique μ pour différentes températures (bas gauche); distribution de l’interface pour différentes tailles de la matrice de transfert à $\mu = 0.01$ et $\beta = 1$. Par un fit, la distribution ne suit pas une distribution de Poisson (bas droite) .

où ω_{ex} est l'énergie libre en excès dans le système, et prend une forme universelle proche du point critique. Cet excès d'énergie libre est dû à la frustration du système lorsque la longueur de corrélation est du même ordre de grandeur que la taille du système. Afin d'obtenir cette quantité dans les modèles sur réseau à partir de l'énergie libre totale, il est nécessaire de soustraire l'énergie du bulk au total. Néanmoins, dans les modèles d'interfaces qui nous intéressent, le seul terme extensif contribuant à l'énergie libre est l'énergie de surface, qui disparaît lorsque l'on prend la dérivée par rapport à la taille du système. Il n'est donc pas nécessaire de comparer l'énergie libre à la limite thermodynamique, et on obtient directement la force de Casimir

$$f_c(\beta, L, h) = - \left. \frac{\partial \Omega}{\partial L} \right|_{\beta} = k_B T \frac{\partial \ln Z(\beta, \mu, L)}{\partial L} \quad (4.7)$$

Il est difficile de se faire une vision claire de l'effet Casimir, parce que le modèle Solid-On-Solid n'étant pas critique, il ne possède pas nécessairement de fonction universelle qui permette de réduire la dimensionalité de l'espace des phases (β, μ, L) .

Comment interpréter les résultats de la figure ??, que dire de pertinent à leur sujet ? là on calcule une pression. Manifestation spatiale des effet de taille finie dans un système critique est casimir. Casimir : système de spin critique. Là interface avec un comportement un peu de casimir, en loi de puissance des fois. Casimir : vraie pression thermo intensive en plus pression qui dépend de la taille du système. Colloïdes pression de disjonction. p(l)-pbulk, interaction entre les deux surfaces. **disjoining pressure**.

Pour le modèle Solid-On-Solid, il est possible de calculer la variation d'énergie créée par le découplage directement. Si le découplage s'est créé à la rangée k , on ajoute un lien d'énergie λJ entre les rangées $k - 1$ et $k + 1$ et on retire λJ énergie des rangées $k - 1$ à k et de k à $k + 1$. On obtient

$$\mathcal{H}_{tr,SOS}(\lambda) = \mathcal{H}_{0,SOS} - \frac{\lambda J}{2} \sum_x [\text{sgn}(k - 1 - h(x)) \text{sgn}(k + 1 - h(x)) - \text{sgn}(k - h(x)) (\text{sgn}(k - 1 - h(x)) + \text{sgn}(k + 1 - h(x)))] \quad (4.8)$$

où le facteur $\frac{1}{2}$ est obtenu afin de prendre en compte le coefficient 2 dans 2.24. En faisant un tableau de valeurs, on remarque rapidement que la somme est une constante égale à -1 quel que soit k , puisque contrairement au modèle d'Ising, les modèles d'interface ne possèdent pas d'énergie de bulk. Il faut donc utiliser une autre méthode afin de mesurer l'effet Casimir dans les simulations de Monte Ca

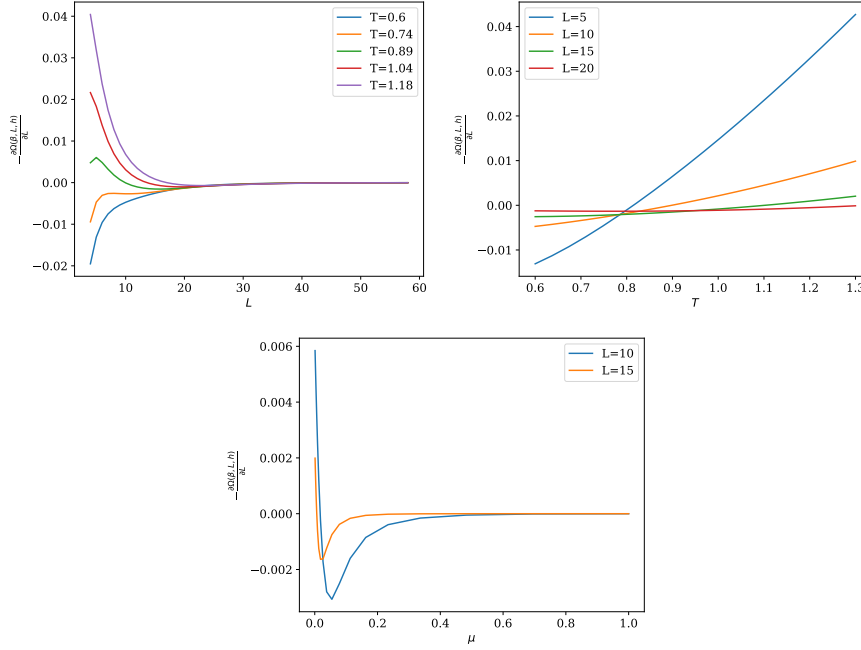


FIGURE 4.2 – Force de Casimir 4.7 en fonction de la distance pour $\mu = 0.01$ à température fixée (gauche) ; force de Casimir en fonction de la température pour $\mu = 0.01$ à taille fixée (droite) ; force de Casimir en fonction du potentiel chimique pour différentes tailles du système à $T = 1$ (bas).

4.3 Hamiltonien de transition

4.4 Intégration sur le potentiel chimique

on saute de potentiel à champ à chaque fois généralisation de la méthode de David pour n'importe quel observable Contexte de David, appliqué au modèle d'Ising, dans son contexte. PUIS traduire dans le contexte -> particule -> moléculaire. Si l'aimantation doit être conservée ça doit être adapté. Utilisation de plusieurs types de champ magnétique, nouveauté. Pour un système d'Hamiltonien

$$\mathcal{H} = J \sum_i |h_i - h_{i+1}| + \mu \frac{V(h_i) + V(h_{i+1})}{2} \quad (4.9)$$

on a la différence d'énergie le long d'une isotherme entre un état de référence (T, μ_0) et

(T, μ) [30]

$$\Omega(\beta, L, \mu) - \Omega(\beta, L, \mu_0) = \int_{\mu_0}^{\mu} d\mu' \langle \sum_i V(h_i) \rangle_{\beta, L, \mu'} \quad (4.10)$$

expliquer un petit peu plus en détail d'où vient l'équation Dans les modèles d'interface SOS, il est assez simple de calculer analytiquement $\Omega(\beta, L, \infty)$ par dénombrement de tous les états possibles. Cela nous permet d'obtenir via les simulations numériques l'énergie libre d'un système soumis à un potentiel quelconque de la forme 4.9 lorsque l'on intègre le système dans la limite $\mu \rightarrow \infty$.

Dans le cas où on a un potentiel chimique normal, c'est-à-dire $V(h_i) = h_i$, alors l'intégration se fait directement sur le paramètre d'ordre $\langle \sum_i h_i \rangle$. Dans ce cas, dans la limite $\mu \rightarrow \infty$, la seule configuration possible est celle où $h_i = 0$ pour tout i , ce qui mène à l'énergie libre $\Omega(\beta, L, \infty) = 0$.

Si l'on désire mesurer l'énergie libre d'un tel système dans le cas d'une dynamique de Kawasaki, cette méthode ne donnera rien puisque par définition, $\langle \sum_i h_i \rangle$ est une constante. L'étude d'un Hamiltonien au chapitre 5 nous a conduit à un champ $V(h_i)$ possédant la même limite à $\mu \rightarrow \infty$. Considérons le champ suivant

$$V(h_i) = -|h_i - \frac{L}{2}| \quad (4.11)$$

Ce champ a tendance à plaquer l'interface loin de $\frac{L}{2}$, c'est-à-dire en $h = 0$ et $h = L$ pour un système de taille $L \times L'$, contrairement à un potentiel chimique classique où l'interface est plaquée en $h = 0$. Proche des limites du système, on observe que les deux champs sont équivalents à une constante près de l'énergie. Il existe donc deux positions d'équilibre stables de l'interface d'énergie équivalente au potentiel classique. Il y a ici une compétition entre l'énergie qui essaie de conserver l'interface lisse, et l'entropie, qui rend l'interface extrêmement rugueuse, comme dans la figure 4.3.

Dans la limite $\mu \rightarrow \infty$, on a donc un système éparpillé à $h = 0$ et $h = L$. On a la matrice de transfert

$$T = e^{\beta\mu\frac{L}{2}} \begin{pmatrix} 1 & e^{-\beta JL} \\ e^{-\beta JL} & 1 \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Les valeurs propres sont $\lambda_{\pm} = e^{\beta\mu\frac{L}{2}} (1 \pm e^{-\beta JL})$, ce qui nous donne dans la limite ther-

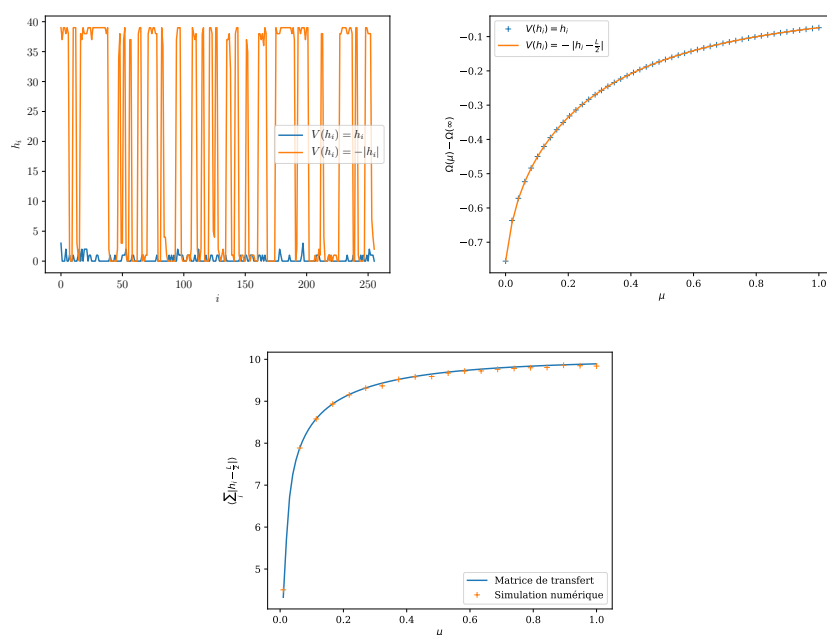


FIGURE 4.3 – Configuration possible du système à $\beta = 1$ et μ élevé ($\mu = 2$) pour les deux types de potentiel (gauche) ; énergie libre en fonction de μ à laquelle on a retiré l'énergie libre de la configuration limite pour les deux types de potentiel (droite) ; comparaison de l'observable $\langle \sum_i |h_i - \frac{L}{2}| \rangle$ en fonction de μ entre la matrice de transfert et une simulation numérique avec $L = 20$ pour 10^7 étapes de Monte Carlo avec une dynamique de Glauber (bas). pas clair, hyper vague. Insister sur la méthode numérique qui marche, proof of concept. Méthode, résultats originaux et proof of concept sont tout mélangés. Séparer

modynamique l'énergie libre

$$\Omega(\mu \rightarrow \infty) = -\mu \frac{L}{2} \quad (4.13)$$

Il est donc aisé de calculer l'énergie libre pour un champ donné grâce à l'intégration

$$\Omega(\beta, L, \mu) = \Omega(\beta, L, \infty) + \int_{\mu}^{\infty} d\mu' \langle \sum_i V(h_i) \rangle_{\beta, L, \mu'} \quad (4.14)$$

Cette méthode d'intégration est particulièrement adaptée aux modèles sur réseau où l'on connaît la limite du système soumis à un potentiel extrême. Dans le cas du modèle SOS, on pourrait avoir envie de diagonaliser directement la matrice de transfert pour $\mu = 0$, et ainsi obtenir

$$\Omega(\beta, L, \mu) = \Omega(\beta, L, 0) + \int_0^{\mu} d\mu' \langle \sum_i V(h_i) \rangle_{\beta, L, \mu'} \quad (4.15)$$

les longueurs de corrélation sont zéro, dans une limite est donnée uniquement par omega bulk+omefa surface. fluctuations divergentes. Le système critique est $\mu \rightarrow 0$ Pour petits champs, cette intégration est certes plus rapide, mais possède une limite divergente à $\mu = 0$, qui correspond à une interface libre dont la magnétisation moyenne est une valeur sans intérêt, ce qui nous oblige à garder la limite $\mu \rightarrow \infty$.

mettre en valeur figure 4.4, ÇA MARCHE avec le numérique, PLUS DE CONTEXTE!!
Besoin MCIA pour faire Casimir Kawasaki, ajouter cisaillement

4.5 Conclusion

Les systèmes statistiques dont la longueur de corrélation est similaire à la taille du système subissent des effets de taille finie qui affectent notablement ses propriétés. L'importance croissante des modes à faible longueur d'onde lorsque l'on réduit la taille du système, ainsi que les modifications des propriétés du mode de plus faible énergie, modifie l'énergie libre du système. Cette modification de l'énergie libre induit une force de Casimir intensive de la forme $f = -k_B T \frac{\partial \ln Z}{\partial L}$. Contrairement aux systèmes critiques, cette force a été très peu étudiée dans le modèle Solid-On-Solid, et n'exhibe aucune universalité simple. Le modèle Solid-On-Solid possède la particularité d'être résoluble par la diagonalisation de la matrice de transfert. Cette méthode ne permet néanmoins que d'étudier l'effet Casimir que dans l'ensemble grand-canonique, puisqu'il n'est pas possible d'instaurer la contrainte $\langle h \rangle = cte$ dans la matrice de transfert. Afin de pallier

à ce problème, une analyse Monte Carlo s'impose. La première méthode consiste à découpler progressivement une couche du système, afin que dans la limite où $L' \gg 1$, ce découplage s'apparente à la dérivée discrète de l'énergie libre. Néanmoins cette méthode a ses limites dans les modèles d'interface, puisqu'elle ne prend pas en compte l'absence d'énergie de bulk dans nos modèles. Une seconde méthode est d'intégrer par rapport au paramètre d'ordre $\langle h \rangle$. Cependant, par définition de la dynamique de Kawasaki, cette méthode est vouée à l'échec. Nous avons développé un modèle possédant un hamiltonien produisant dans l'ensemble grand-canonique des résultats très similaires, que l'on a pu extrapoler pour l'ensemble canonique. **Ajouter résultats avec cisaillement.**

Chapitre 5

Interaction gaussienne avec champ magnétique confinant

Jusqu'à présent nous avons développé le modèle Solid-On-Solid et étudié ses propriétés pour des modèles d'interface en présence d'un champ magnétique uniforme, le potentiel chimique. Dans ce chapitre, nous étudions les propriétés d'un champ magnétique non-uniforme en analogie à certaines expériences effectuées au Laboratoire Onde Matière d'Aquitaine par l'équipe de Jean-Pierre Delville. Dans ces expériences, un liquide quaternaire composé de toluène, sodium dodecyl sulfate, n-butanol et eau possède proche du point critique deux phases miscellaires séparées avec une tension de surface de $\sigma \simeq 10^{-7} N/m$ pour $T - T_C = 1.5 K$ [79, 80, 32]. À cela s'ajoute un laser qui par pression de radiation pousse une phase dans l'autre.

Dans un système de taille $L' \times L$, avec $y \in [-\frac{L}{2}, \frac{L}{2}]$. Nous nous proposons d'étudier les propriétés statistiques d'une telle interface grâce à la présence d'un champ magnétique de la forme

$$V(\sigma_{x,y}) = B \operatorname{sgn}(y) \quad (5.1)$$

qui se traduit dans le formalisme SOS par

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

similaire à l'équation 4.11, où cette fois le champ magnétique confine l'interface au voisinage de 0.

0. Lorsqu'il s'agit de diagonaliser la matrice de transfert, il suffit de faire la translation $y \rightarrow y + \frac{L}{2}$

Dans ce chapitre, nous étudions analytiquement la distribution de l'interface, le spectre d'énergie et la fonction de corrélation de ce système, qui nous permet de trouver une dépendance entre la tension superficielle avec la température et l'intensité B du champ magnétique. Puisque le système expérimental possède un régime hors-équilibre, nous étudions également l'effet d'un écoulement uniforme au niveau de l'interface.

5.1 Interface statique

5.1.1 Distribution de probabilité de l'interface

Grâce au potentiel 5.2, l'interface est localisée autour de $h = 0$, et possède une distribution symétrique. La méthode décrite à la section 2.2.4 pour trouver la forme de la distribution nécessite au préalable un ansatz de la solution. Nous proposons ici une méthode plus puissante qui repose sur des équations continues. Dans le cas où la largeur de l'interface est grande par rapport à l'unité, on s'attend à ce que la description possède les mêmes propriétés que le système discontinu qu'est le modèle Solid-On-Solid.

Une manière de se représenter une configuration de l'interface est de le comparer à la trajectoire d'un marcheur brownien commençant au point h_0 et se déplaçant sur L' pas de temps discontinus, jusqu'à arriver à sa position finale h_L , avec une trajectoire périodique de période L' . La fonction de partition se comprend maintenant comme la somme des trajectoires du marcheur brownien au lieu de la somme des configurations de l'interface. On associe à la trajectoire l'énergie $E = \sigma \mathcal{L}$, où σ est la tension superficielle de notre interface et \mathcal{L} la distance totale parcourue par la particule brownienne. D'un point de vue continu, la distance effectuée pour de petits déplacements est $d\mathcal{L} = \sqrt{1 + \frac{dh^2}{dx^2}} dx \simeq h'^2 dx$. L'Hamiltonien discret correspondant devient gaussien

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

tandis qu'une version continue du problème est

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

Dans tout ce qui suit, peut-on juste mettre $\sigma \rightarrow 2\sigma$ et enlever le facteur 2 de partout dans les équations? Ça allège toutes les notations.

La fonction de partition de toutes les trajectoires $h(x)$ possibles de notre particule

telles que $h(0) = h(L') = h^*$ est alors donné par

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

avec la condition initiale $\mathcal{Z}(h, h', 0) = \delta(h - h')$. 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, comme dans l'équation 2.52. En décomposant la fonction de partition dans la base des solutions stationnaires ψ_E correspondant aux énergies propres E

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

on obtient l'équation aux états propres

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

où l'équation a été adimensionalisée par $\epsilon = E\beta\sigma$ et $\lambda = \beta^2\sigma B$. À nouveau, dans la limite thermodynamique, seul l'état fondamental E_0 contribue à la distribution des hauteurs $p(h) = \psi_{E_0}^2(h)$. Les solutions sont données par les fonctions d'ondes symétriques par rapport à $h = 0$

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

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 (voir figure 5.1). L'état fondamental est donné par le plus petit zéro de la fonction $\alpha_0 \simeq 1.0187$ et a une énergie de

$$E_0 = \frac{\epsilon_0}{\beta\sigma} = 2^{-\frac{1}{3}} \alpha_0 \beta^{\frac{1}{3}} \sigma^{\frac{1}{3}} B^{\frac{2}{3}} \quad (5.10)$$

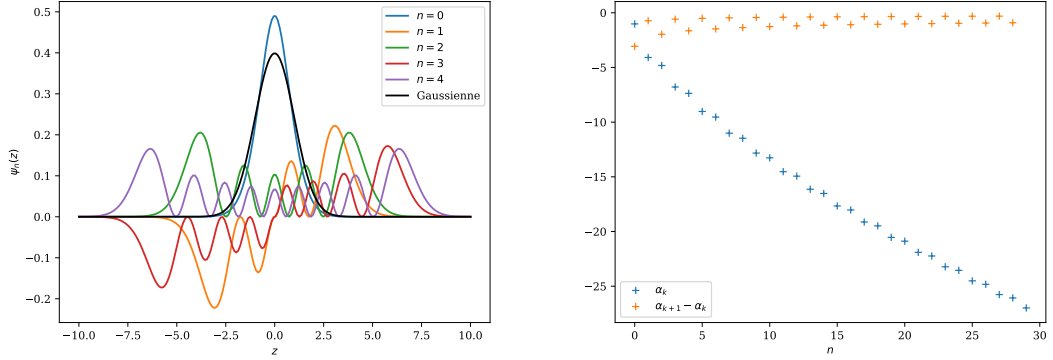


FIGURE 5.1 – À gauche, états propres ψ_n avec en noir, une référence par rapport à la distribution gaussienne. À droite, la série α_n .

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 dénominateur 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 $E_n = E_0 \frac{\alpha_n}{\alpha_0}$.

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

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

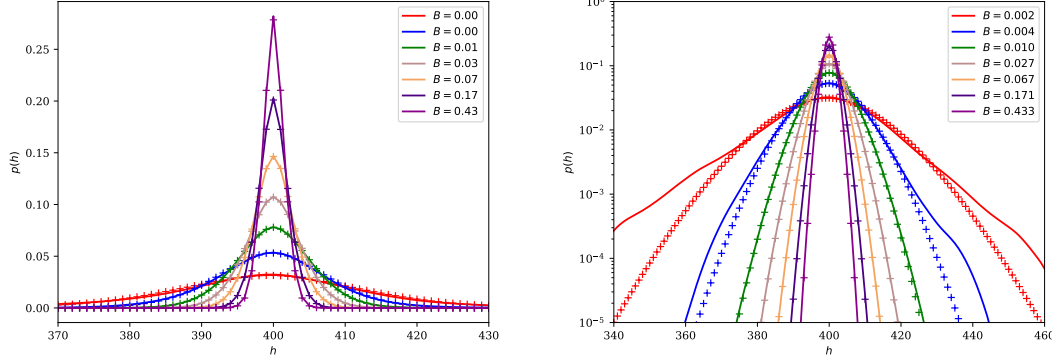


FIGURE 5.2 – Distribution de l’interface à $\beta = \beta_C$ autour d’un système centré à $L_Y = 400$ en trait plein avec le fit selon la distribution de Airy 5.15 en échelle normale (à gauche) et en échelle log (à droite). Les écarts aux grandes fluctuations sont dues à un temps d’échantillonnage trop faible (10^8 MC steps) par rapport au temps de corrélation ($T_{cor} \simeq 100$), ce qui ne donne qu’environ 10^6 états décorrés. Par comparaison, à haut champ magnétique, le temps de corrélation est $T_{cor} \simeq 2$.

Dans la limite thermodynamique, la distribution des hauteurs devient

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

Lorsque le paramètre d’ordre est conservé, la contrainte des modes de fluctuations dans la fonction de partition change radicalement les propriétés de l’interface. Dans la figure 5.3, on constate la disparité à température et champ magnétique donné entre les ensembles statistiques, dans la limite thermodynamique. **Il semble que l’équivalence des ensembles thermodynamiques ne soit pas vérifiée dans ce système.** Il est possible de trouver une correspondance avec une température et un champ magnétique effectifs différents, mais les propriétés de décroissance à grande distance ne respectent cependant pas la distribution 5.15.

5.1.2 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 différence d’énergie entre deux états

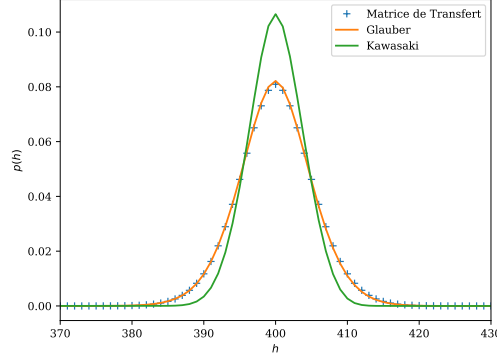


FIGURE 5.3 – Comparaison de la distribution de l'interface entre une dynamique de Glauber et une dynamique de Kawasaki avec conditions aux bords périodiques en x et une géométrie infinie en y , avec $L_X = 5142$ (la longueur de corrélation parallèle à l'interface est de $\xi_{\parallel} = 37$ via diagonalisation de la matrice de transfert) pour $T = 3$ et $B = 0.01$.

consécutifs nous donne l'inverse de La longueur de corrélation parallèle à l'interface

$$\xi_{\parallel} = \frac{1}{\Delta E} \simeq 2^{\frac{1}{3}} \beta^{-\frac{1}{3}} \sigma^{\frac{1}{3}} B^{-\frac{2}{3}} \quad (5.16)$$

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

$$C_f(r) = \langle f(h(0))f(h(r)) \rangle - \langle f(h(0)) \rangle \langle f(h(r)) \rangle \quad (5.17)$$

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

$$C_f(r) = \sum_{n \neq 0} \left[\int_{-\infty}^{\infty} dh f(h) \psi_n(h) \psi_0(h) \right]^2 e^{-(E_n - E_0)r} \quad (5.18)$$

avec $E_n - E_0 = \frac{\alpha_n - \alpha_0}{\xi_{\parallel}}$. En particulier, si

$$f(h) = \text{sign}(h - y) \quad (5.19)$$

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

$$\int_{-\infty}^{\infty} dh f(h) \psi_n(h) \psi_0(h) = 2 \int_y^{\infty} dh \psi_n(h) \psi_0(h) \quad (5.20)$$

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

$$\begin{aligned} I(n, y) &= \int_y^{\infty} dh \psi_n(h) \psi_0(h) \\ &= \frac{1}{2} \frac{\psi_0(x) \psi'_n(y) - \psi_n(x) \psi'_0(y)}{\epsilon_n - \epsilon_0} \end{aligned} \quad (5.21)$$

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

$$C(z, r) = \sum_{n \neq 0} \frac{[Ai(|z| - \alpha_0) Ai'(|z| - \alpha_n) - Ai(|z| - \alpha_n) Ai'(|z| - \alpha_0)]^2}{\int_0^{\infty} dz Ai^2(z - \alpha_0) 2 \int_0^{\infty} dz Ai^2(z - \alpha_n) (\alpha_n - \alpha_0)^2} e^{-[\alpha_n - \alpha_0] \frac{r}{\xi_{\parallel}}} \quad (5.22)$$

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

$$N_n = \int_0^{\infty} dz Ai^2(z - \alpha_n) = [z Ai^2(z - \alpha_n)]_0^{\infty} - 2 \int_0^{\infty} dz z Ai(z - \alpha_n) Ai'(z - \alpha_n) \quad (5.23)$$

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

$$Ai''(z) - z Ai(z) = 0 \implies z Ai(z - \alpha_n) = Ai''(z - \alpha_n) + \alpha_n Ai(z - \alpha_n) \quad (5.24)$$

on obtient

$$\begin{aligned} N_n &= -2 \int_0^{\infty} dz [Ai''(z - \alpha_n) + \alpha_n Ai(z - \alpha_n)] Ai'(z - \alpha_n) \\ &= Ai'^2(-\alpha_n) + \alpha_n Ai^2(-\alpha_n). \end{aligned} \quad (5.25)$$

où l'on rappelle qu'à cause de les modes pairs et impairs, on a posé $Ai(-\alpha_{2n+1}) = 0$ et $Ai'(-\alpha_{2n}) = 0$. Cela nous donne au final

$$C(z, r) = \frac{1}{\alpha_0 Ai^2(-\alpha_0)} \sum_n \frac{[Ai(|z| - \alpha_0) Ai'(|z| - \alpha_n) - Ai(|z| - \alpha_n) Ai'(|z| - \alpha_0)]^2}{(Ai'^2(-\alpha_n) + \alpha_n Ai^2(-\alpha_n)) (\alpha_n - \alpha_0)^2} e^{-[\alpha_n - \alpha_0] \frac{r}{\xi_{\parallel}}} \quad (5.26)$$

De plus, puisque $C(0,0) = 1$, on démontre l'identité suivante entre les zéros de la fonction de Airy (et non de la dérivée)

$$\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{(\alpha_{2n+1} - \alpha_0)^2 \alpha_0} = 1. \quad (5.27)$$

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

$$C(z, r) \approx \frac{1}{\alpha_0 Ai^2(-\alpha_0)} \frac{\left[Ai(\frac{|z|}{\xi_{\perp}} - \alpha_0) Ai'(\frac{|z|}{\xi_{\perp}} - \alpha_1) - Ai(\frac{|z|}{\xi_{\perp}} - \alpha_1) Ai'(\frac{|z|}{\xi_{\perp}} - \alpha_0) \right]^2}{Ai'^2(-\alpha_1)(\alpha_1 - \alpha_0)^2} \exp(-[\alpha_1 - \alpha_0] \frac{r}{\xi_{\parallel}}). \quad (5.28)$$

La fonction de corrélation possède donc une décroissance de la forme

$$C(z, r) \approx A(\frac{z}{\xi_{\perp}}) \exp(-[\alpha_1 - \alpha_0] \frac{r}{\xi_{\parallel}}) \quad (5.29)$$

où $A(x)$ est une amplitude dépendante de la hauteur z par rapport à la hauteur moyenne de l'interface, avec une longueur de corrélation ξ_{\parallel} à grande distance indépendante de la hauteur. Qui plus est, cette longueur de corrélation peut se calculer via les plus grandes valeurs propres de la matrice de transfert $T_{ij} = J(h_i - h_j)^2 + B \frac{|h_i - \frac{L'}{2}| + |h_j - \frac{L'}{2}|}{2}$ grâce à l'équation 2.47, ce qui nous donne à très grande distance la relation

$$\xi_{\parallel} = -\frac{1}{(\alpha_1 - \alpha_0) \ln\left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0}\right)} = 2^{\frac{1}{3}} \beta^{-\frac{1}{3}} \sigma^{\frac{1}{3}} B^{-\frac{2}{3}} \quad (5.30)$$

5.1.3 Tension superficielle effective

Dans les sections précédentes, nous avons démontré l'existence de deux longueurs de corrélation. La première, ξ_{\perp} , est définie comme la largeur de la distribution d'Airy de l'interface 5.15. La deuxième, ξ_{\parallel} , est définie comme l'inverse de l'écart typique d'énergie entre deux états. En inversant les équations 5.14 et 5.30 on obtient

$$\sigma = \frac{1}{2\beta^2 B \xi_{\perp}^3} \quad (5.31)$$

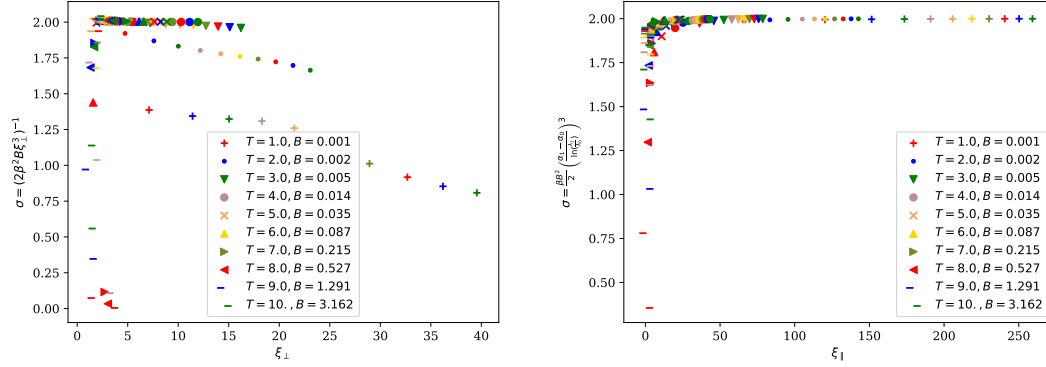


FIGURE 5.4 – Vérification des équations 5.14 (gauche) et 5.30 (droite) en montrant la tension superficielle σ par rapport aux longueurs caractéristiques, calculées grâce à l’Hamiltonien gaussien 5.3, pour différentes températures et champs magnétiques, pour une matrice de transfert de taille $L = 400$. Chaque couleur correspond à une température, chaque symbole correspond à une intensité du champ magnétique.

et

$$\sigma = \frac{\beta B^2 (\alpha_1 - \alpha_0)^3 \xi_{\parallel}^3}{2} = \frac{\beta B^2 (\alpha_1 - \alpha_0)^3}{2 \ln \left(\frac{\lambda_1}{\lambda_0} \right)} \quad (5.32)$$

où λ_0 est la plus grande valeur propre de la matrice de transfert, et λ_1 la seconde plus grande valeur propre. Ces deux expressions permettent de croiser les résultats afin de mesurer la tension superficielle effective. Dans la figure 5.4, calcule la valeur de σ des deux manières. Afin d’obtenir une meilleure précision sur le fit de la distribution, puisque celle-ci est extrêmement piquée autour de la moyenne, il convient de faire le fit sur le logarithme de la distribution afin de donner plus de poids aux valeurs éloignées. On remarque également que pour les températures trop faibles ou des champs trop élevés, la largeur de la distribution devient comparable à l’unité, loin de la limite de l’approximation continue $\xi_{\perp} \gg 1$. Dans le cas où le champ magnétique est trop faible, l’interface est trop faiblement confinée et ne respecte pas non plus la distribution d’Airy. Le plateau que l’on voit sur la figure correspond donc au domaine de validité de l’approximation de la limite continue, où $\sigma = 2J$. Cette valeur de la tension superficielle est corroborée par l’étude de ξ_{\parallel} , qui offre une plus grande robustesse numérique mais demande plus de temps de calcul si l’on désire faire des simulations de Monte Carlo.

5.2 Interface hors-équilibre

La présence d'une force de radiation dans les liquides binaires présentés en introduction induisent un écoulement local des liquides. Cet écoulement est analogue à la décantation de particules dans un solvant, et a pour propriété d'être uniforme. Dans le cas où les deux phases sont séparées et que l'une n'est pas impactée par l'écoulement, on peut considérer un cisaillement que nous définirons plus tard. Plusieurs études convergent pour dire que la largeur de l'interface d'un tel système diminue avec l'intensité du cisaillement dans les modèles d'Ising [40, 92].

Nous avons dans la figure 4.3 que la dynamique de Kawasaki ne peut pas être directement comparée à la dynamique de Glauber pour trouver une tension superficielle directement. Cependant, on peut extraire grâce à l'énergie le comportement global de l'interface vis-à-vis du cisaillement.

Nous nous intéressons au cas d'un écoulement uniforme d'un fluide. L'énergie associée à un écoulement vers la droite du site i au site j est

$$\Delta E_{ec} = f \operatorname{sgn}(i - j) \quad (5.33)$$

Ce genre de cas se retrouve lorsque le vent est en contact avec les vagues ou des nuages, créant une instabilité de Kelvin-Helmoltz augmentant la largeur moyenne de l'interface. Puisque le mouvement induit par l'écoulement peut aller de gauche à droite ou de droite à gauche sans que cela n'affecte l'énergie totale du système, on s'attend à ce que l'énergie soit une fonction paire en fonction de f , c'est-à-dire

$$E(f) = E_{eq} + \frac{f^2}{2} E''(f) + \frac{f^4}{4!} E^{(4)}(f) + \dots \quad (5.34)$$

Dans la figure 5.5, on remarque qu'un fit en puissance carrée de dérivée seconde positive explique le comportement général en fonction du cisaillement. On remarque que l'injection d'énergie via l'écoulement vient augmenter l'énergie totale du système, et donc la largeur de l'interface. Contrairement au modèle d'Ising, il n'existe ici aucun mécanisme de dissipation de l'énergie. On peut imaginer que dans le modèle d'Ising, la raison pour laquelle le cisaillement diminue la largeur de l'interface [40], c'est-à-dire diminue la température effective du système [43, 93], est que le cisaillement accélère l'évaporation des cluster. Ici, l'énergie est injectée directement au niveau de l'interface et non au bulk, ce qui a tendance, comme avec les vagues, à augmenter la rugosité.

Si l'on désire instaurer dans nos simulations un écoulement de Couette ou cisaillement, c'est-à-dire une force ΔE_{sh} qui dépend de la hauteur à laquelle s'effectue le mouvement, il

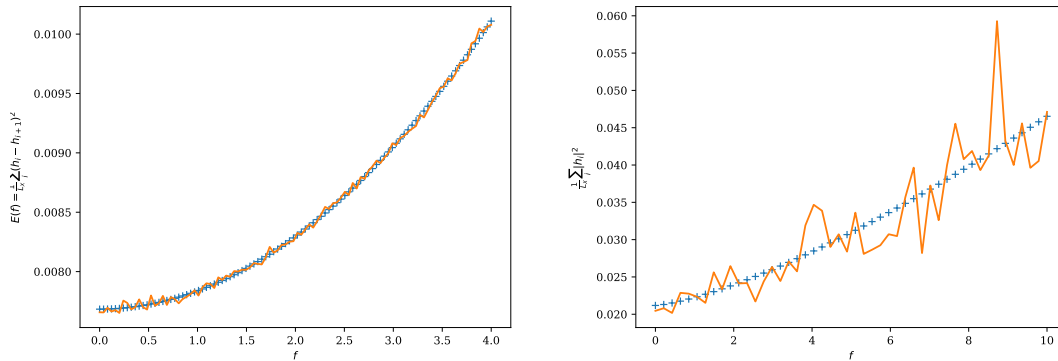


FIGURE 5.5 – Énergie par site du modèle gaussien dans une dynamique de Kawasaki pour $T = 4$ et $B = 0.01$ en fonction de la force 5.33 -en pointillé un fit avec une puissance carrée (gauche). Largeur de l'interface par site $\frac{1}{L_X} \sum_i |h_i|^2$ en fonction de l'écoulement (droite). **Besoin MCIA pour propre, Chip/AiryDrive**

faut insérer dans le modèle une notion de bulk absente des modèles SOS. Nous proposons au prochain chapitre un nouveau modèle capable de prendre en compte différents types de cisaillement.

5.3 Conclusion

L'interface d'un système défini par un Hamiltonien Solid-On-Solid est une approximation directe du modèle d'Ising, mais décrit mal les systèmes macroscopiques. Afin d'étudier les systèmes continus, nous avons utilisé un Hamiltonien gaussien dont l'intégration est facilement faisable. En utilisant un champ magnétique confinant analogue à l'action d'un laser forçant une phase dans une autre dans les expériences menées au LOMA [32], nous avons trouvé que les propriétés de l'interface dans l'ensemble grand-canonique étaient définies par une superposition de modes de Airy. Grâce aux deux longueurs caractéristiques du système étudié, nous avons vérifié l'équivalence entre le modèle continu et le modèle discret puisque $\sigma = 2J$ dans une grande plage de température et de champ magnétique. Les cas où la correspondance n'est plus valable correspondent aux cas où les longueurs caractéristiques sont proches de l'unité, c'est-à-dire que le système est sensible à la discrétisation du système. De plus, les systèmes dans l'ensemble canonique, étudiés grâce à la dynamique de Kawasaki, présentent des propriétés très différentes de celles de l'ensemble grand-canonique. Il peut être intéressant d'explorer la raison pour laquelle l'équivalence des ensembles thermodynamiques est brisée dans

ce contexte. L'ajout d'un écoulement uniforme augmente l'énergie et la largeur de l'interface, contrairement aux études sur les modèles d'Ising. Il serait intéressant de vérifier l'hypothèse selon laquelle la diminution de la largeur de l'interface dans les modèles d'Ising est due à l'évaporation accélérée des clusters du bulk.

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] Lars Onsager. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. *Physical Review*, 65(3-4) :117–149, February 1944.
- [6] John W Cahn and John E Hilliard. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. page 11.
- [7] 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.
- [8] 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.
- [9] L. Landau and E. Lifchitz. *Physique théorique - T9 Physique Statistique*. Éditions Mir Moscou. 1990.
- [10] Michel Le Bellac, Fabrice Mortessagne, and G George Batrouni. *Equilibrium and Non-Equilibrium Statistical Thermodynamics*. Cambridge University Press, 2004.

- [11] Y. Hennequin, D. G. A. L. Aarts, J. H. van der Wiel, G. Wegdam, J. Eggers, H. N. W. Lekkerkerker, and Daniel Bonn. Drop Formation by Thermal Fluctuations at an Ultralow Surface Tension. *Physical Review Letters*, 97(24), December 2006.
- [12] Javier Atencia and David J. Beebe. Controlled microfluidic interfaces. *Nature*, 437(7059) :648–655, September 2005.
- [13] D. J. Amit and Victor Martin Mayor. *Field theory, the renormalization group, and critical phenomena : graphs to computers*. World Scientific, Singapore ; New Jersey, 3rd ed edition, 2005.
- [14] H. B. G. Casimir. On the attraction between two perfectly conducting plates. *Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences*, 51(7) :793–498, 1948.
- [15] Andrea Gambassi. The Casimir effect : From quantum to critical fluctuations. *Journal of Physics : Conference Series*, 161 :012037, April 2009.
- [16] A. Gambassi, A. Maciolek, C. Hertlein, U. Nellen, L. Helden, C. Bechinger, and S. Dietrich. Critical Casimir effect in classical binary liquid mixtures. *Physical Review E*, 80(6), December 2009.
- [17] 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.
- [18] Cosima Stubenrauch and Regine von Klitzing. Disjoining pressure in thin liquid foam and emulsion films—new concepts and perspectives. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 15(27) :R1197–R1232, July 2003.
- [19] Anne-Florence Bitbol, Paul G. Dommersnes, and Jean-Baptiste Fournier. Fluctuations of the Casimir-like force between two membrane inclusions. *Physical Review E*, 81(5), May 2010.
- [20] O. Vasilyev, A. Gambassi, A. Maciolek, and S. Dietrich. Universal scaling functions of critical Casimir forces obtained by Monte Carlo simulations. *Physical Review E*, 79(4), April 2009.
- [21] Daniel Dantchev, Vassil Vassilev, and Peter Djondjorov. Casimir Force in a Model with Strongly Adsorbing Competing Walls : Exact Results. *arXiv :1704.08986 [cond-mat]*, April 2017. arXiv : 1704.08986.

- [22] Daniel M. Dantchev, Vassil M. Vassilev, and Peter A. Djondjorov. Exact results for the behavior of the thermodynamic Casimir force in a model with a strong adsorption. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2016(9) :093209, 2016.
- [23] Markus Gross, Oleg Vasilyev, Andrea Gambassi, and S. Dietrich. Critical adsorption and critical Casimir forces in the canonical ensemble. *Physical Review E*, 94(2) :022103, August 2016.
- [24] Christian M. Rohwer, Mehran Kardar, and Matthias Krüger. Transient Casimir Forces from Quenches in Thermal and Active Matter. *Physical Review Letters*, 118(1), January 2017.
- [25] Sathyanarayana Paladugu, Agnese Callegari, Yazgan Tuna, Lukas Barth, Siegfried Dietrich, Andrea Gambassi, and Giovanni Volpe. Nonadditivity of critical Casimir forces. *Nature Communications*, 7 :11403, April 2016.
- [26] Masafumi Fukuto, Yohko F. Yano, and Peter S. Pershan. Critical Casimir Effect in Three-Dimensional Ising Systems : Measurements on Binary Wetting Films. *Physical Review Letters*, 94(13), April 2005.
- [27] C. Hertlein, L. Helden, A. Gambassi, S. Dietrich, and C. Bechinger. Direct measurement of critical Casimir forces. *Nature*, 451(7175) :172–175, January 2008.
- [28] John R. Edison, Nikos Tasios, Simone Belli, Robert Evans, René van Roij, and Marjolein Dijkstra. Critical Casimir Forces and Colloidal Phase Transitions in a Near-Critical Solvent : A Simple Model Reveals a Rich Phase Diagram. *Physical Review Letters*, 114(3), January 2015.
- [29] 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.
- [30] David Lopes Cardozo, Hugo Jacquin, and Peter C. W. Holdsworth. Critical Casimir forces in a magnetic system : An experimental protocol. *Physical Review B*, 90(18), November 2014.
- [31] 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.

- [32] A. Girot, J. Petit, R. Saiseau, T. Guérin, H. Chraïbi, U. Delabre, and J. P. Delville. Conical Interfaces between Two Immiscible Fluids Induced by an Optical Laser Beam. *Physical Review Letters*, 122(17), May 2019.
- [33] Alan J. Bray, Andrea Cavagna, and Rui D. M. Travasso. Interface fluctuations under shear. *Physical Review E*, 64(1) :012102, June 2001.
- [34] 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.
- [35] 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.
- [36] 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.
- [37] Alan J Bray and Andrea Cavagna. Coarsening dynamics of a nonconserved field advected by a uniform shear flow. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 33(33) :L305–L311, August 2000.
- [38] 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.
- [39] Thomas HR Smith. *Driven interfaces in the Ising model*. PhD thesis, University of Bristol, 2010.
- [40] Thomas H R Smith, Oleg Vasilyev, Douglas B Abraham, Anna Maciolek, and Matthias Schmidt. Interfaces in confined Ising models : Kawasaki, Glauber and sheared dynamics. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 20(49) :494237, December 2008.
- [41] 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.
- [42] 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.

- [43] E. N. M. Cirillo, G. Gonnella, and G. P. Saracco. Monte Carlo results for the Ising model with shear. *Physical Review E*, 72(2) :026139, August 2005.
- [44] A L Talapov and H W J Blöte. The magnetization of the 3D Ising model. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 29(17) :5727–5733, September 1996.
- [45] Martin Niss. History of the Lenz-Ising Model 1920–1950 : From Ferromagnetic to Cooperative Phenomena. *Archive for History of Exact Sciences*, 59(3) :267–318, March 2005.
- [46] Martin Niss. History of the Lenz–Ising Model 1950–1965 : from irrelevance to relevance. *Archive for History of Exact Sciences*, 63(3) :243, May 2009.
- [47] L.J. de Jongh and A.R. Miedema. Experiments on simple magnetic model systems. *Advances in Physics*, 23(1) :1–260, January 1974.
- [48] W.P. Wold. The Ising Model and Real Magnetic Materials. *Brazilian Journal of Physics*, 30(4) :794–810, December 2000.
- [49] Hironobu Ikeda and Kinshiro Hirakawa. NEUTRON SCATTERING STUDY OF TWO-DIMENSIONAL ISING NATURE OF K₂CoF₄. 14 :4.
- [50] Tobias Preis, Peter Virnau, Wolfgang Paul, and Johannes J. Schneider. GPU accelerated Monte Carlo simulation of the 2D and 3D Ising model. *Journal of Computational Physics*, 228(12) :4468–4477, July 2009.
- [51] Nigel Goldenfeld. *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*. CRC Press, 1 edition, March 2018.
- [52] J. Stecki, A. Maciol/ek, and K. Olaussen. Magnetization profiles of the planar fluctuating interface in a d=2 Ising strip. *Physical Review B*, 49(2) :1092–1103, January 1994.
- [53] D. B. Abraham and A. Martin-Löf. The transfer matrix for a pure phase in the two-dimensional Ising model. *Communications in Mathematical Physics*, 32(3) :245–268, September 1973.
- [54] D. B. Abraham and P. Reed. Interface profile of the Ising ferromagnet in two dimensions. *Communications in Mathematical Physics*, 49(1) :35–46, February 1976.

- [55] Howard L. Richards, M. A. Novotny, and Per Arne Rikvold. Numerical transfer-matrix study of surface-tension anisotropy in Ising models on square and cubic lattices. *Physical Review B*, 48(19) :14584–14598, November 1993.
- [56] O. Vasilyev, A. Gambassi, A. Maciolek, and S. Dietrich. Monte Carlo simulation results for critical Casimir forces. *EPL (Europhysics Letters)*, 80(6) :60009, 2007.
- [57] G. H. Gilmer and P. Bennema. Simulation of Crystal Growth with Surface Diffusion. *Journal of Applied Physics*, 43(4) :1347–1360, April 1972.
- [58] M. Elwenspoek and J. P. van der Eerden. Kinetic roughening and step free energy in the solid-on-solid model and on naphthalene crystals. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 20(3) :669, 1987.
- [59] M. R. Wilby, D. D. Vvedensky, and A. Zangwill. Scaling in a solid-on-solid model of epitaxial growth. *Physical Review B*, 46(19) :12896–12898, November 1992.
- [60] G Gompper and D. M Kroll. Steric Interactions in Multimembrane Systems : A Monte Carlo Study. *Europhysics Letters (EPL)*, 9(1) :59–64, May 1989.
- [61] V. Privman and N. M. Švrakić. Transfer-Matrix Spectrum for Systems with Interfaces. *Physical Review Letters*, 62(6) :633–636, February 1989.
- [62] 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.
- [63] I. Vaysburd. Critical RSOS models in external fields. *Nuclear Physics B*, 446(3) :387–404, July 1995.
- [64] H. J. F. Knops. Exact Relation between the Solid-on-Solid Model and the \mathcal{XY} Model. *Physical Review Letters*, 39(12) :766–769, September 1977.
- [65] Aleksander L. Owczarek and Thomas Prellberg. Exact solution of the discrete (1+1)-dimensional SOS model with field and surface interactions. *Journal of Statistical Physics*, 70(5-6) :1175–1194, March 1993.
- [66] 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.

- [67] Grégory Schehr and Satya N. Majumdar. Universal asymptotic statistics of maximal relative height in one-dimensional solid-on-solid models. *Physical Review E*, 73(5) :056103, May 2006.
- [68] Martin Siegert and Michael Plischke. Scaling behavior of driven solid-on-solid models with diffusion. *Journal de Physique I*, 3(6) :1371–1376, June 1993.
- [69] Paul A Pearce and Katherine A Seaton. Exact solution of cyclic solid-on-solid lattice models. *Annals of Physics*, 193(2) :326–366, August 1989.
- [70] R. A. Guyer. Sine-Gordon chain as a model for a two-dimensional interface. *Physical Review B*, 20(10) :4375–4381, November 1979.
- [71] S. T. Chui and John D. Weeks. Pinning and roughening of one-dimensional models of interfaces and steps. *Physical Review B*, 23(5) :2438–2441, March 1981.
- [72] S. T. Chui. Pinning of interfaces by three-dimensional potentials. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 11(13) :2719, 1999.
- [73] J. T. Chalker. The pinning of a domain wall by weakened bonds in two dimensions. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 14(9) :2431, 1981.
- [74] J. T. Chalker. The pinning of an interface by a planar defect. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 15(9) :L481, 1982.
- [75] T. W. Burkhardt. Localisation-delocalisation transition in a solid-on-solid model with a pinning potential. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 14(3) :L63, 1981.
- [76] D. M. Kroll. Solid-on-solid model for the interface pinning transition in Ising ferromagnets. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 41(4) :345–348, December 1981.
- [77] D. M. Kroll and R. Lipowsky. Pinning transitions in d -dimensional Ising ferromagnets. *Physical Review B*, 26(9) :5289–5292, November 1982.
- [78] D. M. Kroll and R. Lipowsky. Interface delocalization transitions in semi-infinite systems. *Physical Review B*, 28(11) :6435–6442, December 1983.
- [79] Alexis Casner and Jean-Pierre Delville. Laser-Induced Hydrodynamic Instability of Fluid Interfaces. *Physical Review Letters*, 90(14), April 2003.

- [80] Jean-Pierre Delville, Matthieu Robert de Saint Vincent, Robert D Schroll, Hamza Chraïbi, Bruno Issenmann, Régis Wunenburger, Didier Lasseux, Wendy W Zhang, and Etienne Brasselet. Laser microfluidics : fluid actuation by light. *Journal of Optics A : Pure and Applied Optics*, 11(3) :034015, March 2009.
- [81] Nicholas Metropolis and S. Ulam. The Monte Carlo Method. *Journal of the American Statistical Association*, 44(247) :335–341, September 1949.
- [82] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, Oxford, New York, February 1999.
- [83] D. Frenkel. Speed-up of Monte Carlo simulations by sampling of rejected states. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, 101(51) :17571–17575, December 2004.
- [84] S. Wansleben and D. P. Landau. Monte Carlo investigation of critical dynamics in the three-dimensional Ising model. *Physical Review B*, 43(7) :6006–6014, March 1991.
- [85] Vance Bergeron. Forces and structure in thin liquid soap films. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 11(19) :R215–R238, May 1999.
- [86] G. Ouyang, L. H. Liang, C. X. Wang, and G. W. Yang. Size-dependent interface energy. *Applied Physics Letters*, 88(9) :091914, February 2006.
- [87] Q. Jiang and H.M. Lu. Size dependent interface energy and its applications. *Surface Science Reports*, 63(10) :427–464, October 2008.
- [88] Jian-Ning Ding, Shi-Zhu Wen, and Yong-Gang Meng. Theoretical study of the sticking of a membrane strip in MEMS under the Casimir effect. *Journal of Micro-mechanics and Microengineering*, 11(3) :202–208, May 2001.
- [89] David R. Nelson, Tsvi Piran, and Steven Weinberg, editors. *Statistical mechanics of membranes and surfaces*. World Scientific Pub, River Edge, N.J, 2nd ed edition, 2004. OCLC : ocm56720001.
- [90] K El Hasnaoui, Y Madmoune, H Kaidi, M Chahid, and M Benhamou. Casimir force in confined biomembranes. 8 :15, 2010.
- [91] Benjamin B. Machta, Sarah L. Veatch, and James P. Sethna. Critical Casimir Forces in Cellular Membranes. *Physical Review Letters*, 109(13), September 2012.

- [92] Thomas H. R. Smith, Oleg Vasilyev, Douglas B. Abraham, Anna Maciolek, and Matthias Schmidt. Interfaces in Driven Ising Models : Shear Enhances Confinement. *Physical Review Letters*, 101(6) :067203, August 2008.
- [93] D. Winter, P. Virnau, J. Horbach, and K. Binder. Finite-size scaling analysis of the anisotropic critical behavior of the two-dimensional Ising model under shear. *EPL (Europhysics Letters)*, 91(6) :60002, 2010.