

Table des matières

Introduction	iii
1 Rappels théoriques sur les interfaces	1
1.1 Équations 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 Taille finie et effet Casimir critique	11
1.3 Modèles d'interface	13
1.3.1 Paramètre d'ordre non conservé	14
1.3.2 Paramètre d'ordre conservé	15
1.3.3 Interface hors équilibre	15
1.4 Conclusion	17
2 Modèle Solid-On-Solid	19
2.1 Le modèle d'Ising	19
2.2 Hamiltonien	21
2.3 Matrice de Transfert	24
2.4 Stabilité de l'interface	26
2.5 Équivalence des ensembles	28
2.6 Modèle de particules : le modèle POP	30
2.7 Conclusion	31
3 Simulations	33
3.1 Algorithme de Metropolis	33
3.1.1 Ensemble grand-canonique : algorithme de Glauber	35

3.1.2	Ensemble canonique : algorithme de Kasawaki	37
3.1.3	Dynamique hors-équilibre	38
3.1.4	Modèle POP	39
3.2	Hamiltonien de transition	40
3.3	Conclusion	41
4	Résultats pour le modèle SOS	43
4.1	Différences Glauber/Kawasaki	43
4.2	Effet du cisaillement	43
4.2.1	Différences avec le modèle d'Ising	45
4.3	Cisaillement avec deux types de particules	45
4.3.1	Discussion about the Gaussian model	48
4.4	Interpretation	48
5	Champ magnétique h_i	51
5.1	Modèle gaussien	51
5.2	Distribution de l'interface	52
5.3	Fonction de corrélation	56
5.4	Conclusion	58
6	Modèle Particle-Over-Particle	61
6.1	Particules indiscernables	61
6.2	Avec le SOS	61
6.2.1	Modifications de l'algorithme Metropolis	62
6.3	Résultats modèle A	62
6.4	Résultats modèle B	62
6.5	Résultats modèle A+B	62
7	A+B POP model : la totale	63
7.1	Le modèle C=A+B	63
7.2	Effective interface dynamics	66
7.3	A model of active interfaces	71
7.4	Conclusions	73
7.5	Acknowledgements	74
.1	Evaluating Fourier integrals	75
	Conclusion et perspectives	77

Introduction

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

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

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

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

Le manuscrit se décompose de la manière suivante :

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

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

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

Chapitre 1

Rappels théoriques sur les interfaces

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

superficielle) des interfaces entre deux phases coexistantes.

Tandis que l'Hamiltonien d'un système permet d'explorer toutes les configurations d'équilibre possibles, la dynamique du coarsening ne peut être étudiée qu'en construisant un modèle qui explique l'évolution de l'état du système en fonction du temps. Nous verrons tout au long de ce travail comment la conservation (ou non) du paramètre d'ordre influe sur la dynamique. Nous nous référons principalement dans ce chapitre aux références [1, 2, 3, 4].

Une connaissance parfaite de la fonction de partition nécessite de connaître toutes les micro-configurations possibles 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. Concrètement, l'appareil de mesure nous donne un champ - par exemple de densité - $\phi(\mathbf{x}, t)$ de notre système, qui correspond à l'intégration sur un petit volume autour de \mathbf{x} et une petite durée de temps autour de t .

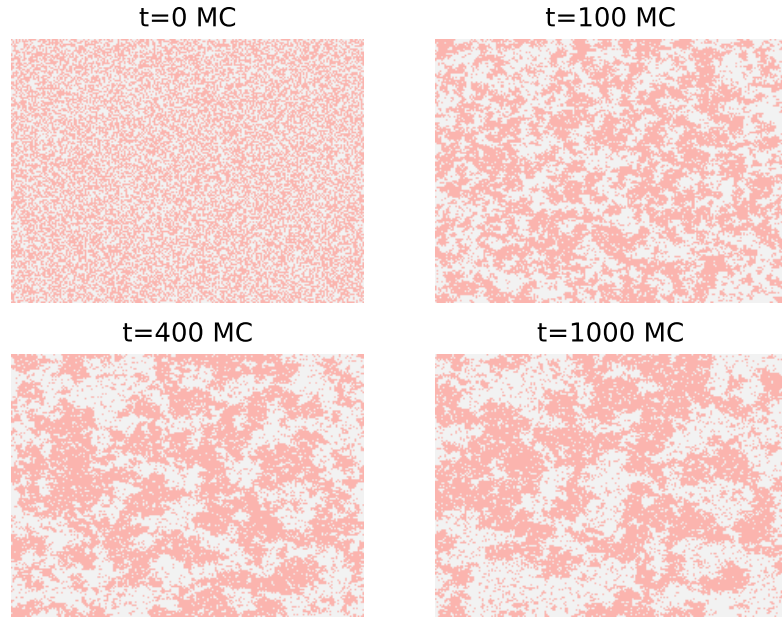


FIGURE 1.1 – Phénomène d'aggrégation à partir d'un refroidissement (*quench*) dans un modèle d'Ising de $T = \infty$ à $T = T_C$ pour différents temps en étapes de Monte Carlo, pour un système 600×600 avec une dynamique non-conservée de Glauber.

1.1 Équations 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

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

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

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

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

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

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

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

Ce champ \mathbf{q}^* est le **champ moyen**, puisqu'il est le champ le plus probable. Dans cette approximation de champ moyen, toute observable est donnée par

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

On considère maintenant l'évolution temporelle du champ \mathbf{q} telle que son équation de Langevin donne la distribution à l'équilibre de Gibbs-Boltzmann :

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

où L_{ij} est un opérateur matriciel à définir et $\eta_i(t)$ un bruit blanc gaussien de fonction

de corrélation

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

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

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

Dans cette limite, l'équation 1.6 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 un minimum local de H , et vers son minimum global en absence de configurations métastables. L'équation de Fokker-Planck de la densité de probabilité de la fonction des degrés de liberté $p(\mathbf{q}, t)$ est

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

ou de manière plus concise

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

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 1.2) et que le courant soit nul, c'est-à-dire

$$\left[-\frac{\beta}{2} \Gamma_{ij} + L_{ij} \right] \frac{\partial H(\mathbf{q})}{\partial q_j} = 0 \quad (1.11)$$

Puisque cette relation est vraie quelque soit l'Hamiltonien considéré, on trouve

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

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

$$Z = \int d[\phi] e^{-\beta H[\phi]} \quad (1.13)$$

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

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

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

$$\frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} = 0 \quad (1.15)$$

Considérons maintenant l'Hamiltonien décrivant les modèles de type Ising

$$H[\phi] = \int d\mathbf{x} \frac{\kappa}{2} [\nabla \phi]^2 + V(\phi) \quad (1.16)$$

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

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = -L \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{x}, t). \quad (1.17)$$

avec la fonction de corrélation du bruit blanc gaussien

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t') \rangle = \delta(t - t') \Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \quad (1.18)$$

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

$$Lf(\mathbf{x}) = \int d\mathbf{x}' L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') f(\mathbf{x}') \quad (1.19)$$

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

$$\Gamma(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = 2k_B T L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') \quad (1.20)$$

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 $L(\mathbf{x}, \mathbf{x}') = \alpha \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}')$

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = -\alpha \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{x}, t) \quad (1.21)$$

de bruit blanc

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t) \rangle = 2T\alpha \delta(t - t') \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}'). \quad (1.22)$$

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. Le second modèle respectant les symétries spatiales est le **modèle B**, et est 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

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = D \nabla^2 \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \eta(\mathbf{x}, t) \quad (1.23)$$

de bruit blanc

$$\langle \eta(\mathbf{x}, t) \eta(\mathbf{x}', t) \rangle = -2TD \delta(t - t') \nabla^2 \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \quad (1.24)$$

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

$$\langle \eta_i(\mathbf{x}, t) \eta_j(\mathbf{x}', t') \rangle = \delta_{ij} \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t'), \quad (1.25)$$

où $\delta_{ij} = 1$ for $i = j$ et 0 sinon, on peut maintenant écrire que

$$\eta(\mathbf{x}, t) = \nabla \cdot \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t) \quad (1.26)$$

L'équation 1.23 devient

$$\frac{\partial \phi(\mathbf{x})}{\partial t} = \nabla \cdot \left[D \nabla \frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} + \boldsymbol{\eta}(\mathbf{x}, t) \right] \quad (1.27)$$

Écrite 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 1.21 et 1.23 s'appellent respectivement les équations Ginzburg-Landau et de Cahn-Hilliard [5, 6, 7] et donnent l'évolution temporelle du champ moyen.

1.1.3 Modèle ϕ^4

Le modèle standard, appelé ϕ^4 est donné par le potentiel en double-puits de Landau-Ginzburg [8, § 45]

$$V(\phi) = \frac{1}{2} m^2 \phi^2 + \frac{\lambda}{4!} \phi^4 \quad (1.28)$$

où $m^2 = T - T_C$. À basse température, ce potentiel symétrique possédant deux minima globaux à $\phi_C = \pm \sqrt{-\frac{3!m^2}{\lambda}}$ décrit la séparation de phase.

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

$$H_1 = - \int d^d x h(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \quad (1.29)$$

qui induit un changement de stabilité entre les phases (voir Fig 1.2). La nouvelle fonction de partition est

$$\mathcal{Z}[h] = \int d[\phi] e^{\beta \left(\int d^d x \left(\frac{\kappa}{2} (\nabla \phi(\mathbf{x}))^2 + V(\phi) \right) - \int d^d x h(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \right)} \quad (1.30)$$

La valeur moyenne de ϕ est alors

$$\langle \phi \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}[h]} \int d[\phi] \phi(\mathbf{x}) e^{\beta \left(\int d^d x \left(\frac{\kappa}{2} (\nabla \phi(\mathbf{x}))^2 + V(\phi) \right) - \int d^d x h(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \right)} \quad (1.31)$$

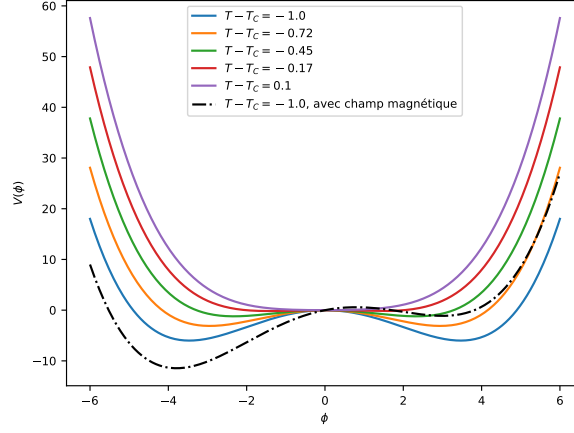


FIGURE 1.2 – Potentiel en double-puits pour $\lambda = 1$ en fonction de la différence entre la température et la température critique. Dans la phase ordonnée, les minima stables sont à $\phi_C = \pm\sqrt{-\frac{3!m^2}{\lambda}}$ et à $\phi_C = 0$ pour la phase désordonnée. En noir, l'ajout d'un champ magnétique uniforme $h(\mathbf{x}) = 1$ rend la phase positive métastable.

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

$$H[\phi] = \frac{1}{2} \int d^d x d^d y \phi(\mathbf{x}) \mathcal{L}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) \phi(\mathbf{y}) - \int d^d x h(\mathbf{x}) \phi(\mathbf{x}) \quad (1.32)$$

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

$$\mathcal{Z}[h] \propto e^{\frac{\beta}{2} \int d^d x d^d y h(\mathbf{x}) \mathcal{L}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) h(\mathbf{y})} \quad (1.33)$$

où \mathcal{L}^{-1} est déterminé par

$$(m^2 - \kappa \nabla_{\mathbf{y}}^2) \mathcal{L}^{-1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \delta(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (1.34)$$

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

$$F[h] = F_0 - \frac{1}{2} \int d^d x d^d y h(\mathbf{x}) \Gamma(\mathbf{x} - \mathbf{y}) h(\mathbf{y}) \quad (1.35)$$

La transformée de Fourier de l'équation de la fonction de Green $(m^2 - \kappa \nabla^2)\Gamma(\mathbf{x}) = \delta(\mathbf{x})$ donne

$$\tilde{\Gamma}(\mathbf{q}) = \frac{1}{\kappa} \frac{1}{\xi^{-2} + q^2} \quad (1.36)$$

puis

$$\Gamma(\mathbf{x}) = \frac{1}{\kappa} \int_{\mathbf{q}} \frac{e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{x}}}{\xi^{-2} + q^2} \quad (1.37)$$

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

$$\langle \phi(x) \rangle = \frac{1}{\mathcal{Z}[h]} \frac{1}{\beta} \frac{\delta \mathcal{Z}[H]}{\delta h(\mathbf{x})} = \frac{\delta(k_B T \ln \mathcal{Z}[h])}{\delta h(\mathbf{x})} = -\frac{\delta F}{\delta h(\mathbf{x})} = \int d^d \mathbf{y} \Gamma(\mathbf{x} - \mathbf{y}) h(\mathbf{y}) \quad (1.38)$$

où l'on a posé que l'énergie libre du système est $F[h] = -k_B T \ln(\mathcal{Z}[h])$. 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

$$C(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \langle \phi(x) \phi(y) \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\delta \langle \phi(\mathbf{x}) \rangle}{\delta h(\mathbf{y})} = \frac{1}{\beta} \Gamma(\mathbf{x} - \mathbf{y}) \quad (1.39)$$

et le facteur de structure

$$S(k) = \langle \tilde{\phi}(k) \tilde{\phi}(q) \rangle = \frac{(2\pi)^d}{\beta} \delta_{k,q} \tilde{\Gamma}(\mathbf{q}) \quad (1.40)$$

Dans la phase désordonnée, où $m^2 < 0$ et $\lambda \neq 0$, l'approximation gaussienne du modèle ϕ^4 donne le même résultat que 1.37 avec le facteur m^2 renormalisé par l'équation auto-consistante

$$m_0^2 = m^2 + \frac{1}{2} \lambda \int_{\mathbf{q}} \frac{1}{m_0^2 + \mathbf{q}^2} \quad (1.41)$$

Pas de biblio ici, c'est un TD de Fournier. Que faire ?

1.1.4 Tension superficielle

La solution de champ moyen minimise l'Hamiltonien 1.16, nous donne

$$\frac{\delta H}{\delta \phi(\mathbf{x})} = -\kappa \nabla^2 \phi(\mathbf{x}) + V'(\phi) \quad (1.42)$$

Puisque le potentiel $V(\phi)$ est supposé symétrique et possédant deux minima globaux en $\pm\phi_C$, en l'absence de contrainte, 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

$$\int d\mathbf{x} \phi(\mathbf{x}) = 0 \quad (1.43)$$

la solution $\phi(\mathbf{x}) = \pm\phi_c$ est impossible. Dans ce cas, le système va se séparer 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 et que la longueur de corrélation ξ est bien plus grande que la taille de l'interface, c'est-à-dire que $\phi(\mathbf{x}) = \phi_K(z)$ (où K désigne un *kink*) et $\lim_{z \rightarrow \infty} \phi_K = -\phi_c$ and $\lim_{z \rightarrow -\infty} \phi_K = \phi_c$, ce qui nous donne d'après 1.42

$$\kappa \phi_K''(z) = V'(\phi_K) \quad (1.44)$$

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

$$H[\phi_K] = A \int dz \phi_K''(z) \quad (1.45)$$

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

$$\sigma = \int dz \phi_K''(z) \quad (1.46)$$

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.

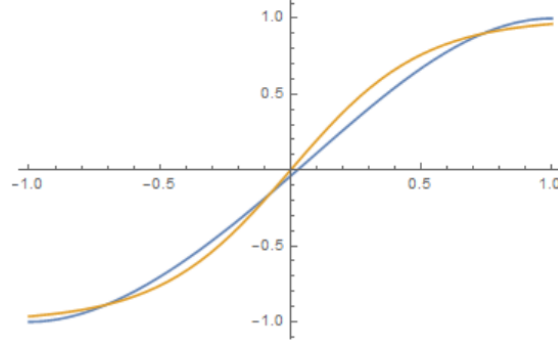


FIGURE 1.3 – Solutions numériques du profil de l’interface pour un paramètre d’ordre non-conservé (bleu) 1.47 et conservé (orange) 1.49 avec $\phi_C = 1$ pour les conditions aux bords à l’infini. [relancer code en résolvant la solution conservée au lieu de \$\tanh\(2x\)\$. Besoin mathematica.](#)

Dans le cas du modèle ϕ^4 définie à l’équation 1.28, l’équation 1.44 devient

$$\kappa \phi_K''(z) = \phi_K(z) \left(m^2 + \frac{\lambda}{3!} \phi_K(z)^2 \right) \quad (1.47)$$

dont la solution est

$$\phi_K(z) = \phi_C \tanh \left(\frac{z}{\sqrt{\frac{-m^2}{2\kappa}}} \right) \quad (1.48)$$

Dans le modèle B, l’interface est solution de

$$\kappa \phi_K^{(4)}(z) = \lambda \phi_K(z) \quad (1.49)$$

avec pour conditions aux limites $\phi_K(\pm\infty) = \pm\phi_C$ et $\phi_K'(\pm\infty) = 0$.

1.2 Taille finie et effet Casimir critique

Sans perte de généralités en 3D, supposons un système 2D de taille $L \times L'$ où $L < L'$. L’énergie libre $F(\beta, L, L') = -\frac{1}{\beta} \ln(Z(\beta, L, L'))$ est une grandeur extensive lorsque la longueur de corrélation est plus petite que la taille du système L . Cette énergie libre peut se décomposer entre l’énergie de chaque phase par unité de volume ω_{bulk} , et l’énergie de tension superficielle à l’interface par unité de surface ω_{surf} [9, 10]. À noter qu’à haute température dans un système complètement homogène, ce dernier terme disparaît.

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

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

En présence d'un champ magnétique h uniforme favorisant une phase par rapport à l'autre, l'énergie libre par unité d'aire d'un tel système se décompose [10, 9] en

$$\frac{\Omega(\beta, L, L', h)}{L'} = L\omega_{bulk}(\beta, h) + \omega_{surf}(\beta, h) + L\omega_{ex}(\beta, L, h) \quad (1.50)$$

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

La force de confinement par unité d'aire est définie par

$$F_{\perp}(\beta, L, h) = -\frac{1}{L'} \frac{\partial \Omega(\beta, L, h)}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} = -k_B T \omega_{bulk}(\beta, h) - k_B T \frac{\partial (L\omega_{ex}(\beta, L, h))}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} \quad (1.51)$$

où le premier terme est la pression exercée par le système, tandis que le second terme est la force de Casimir par unité d'aire [14] en d dimensions

$$f_c(\beta, L, h) = -k_B T \frac{\partial (L\omega_{ex}(\beta, L, h))}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} = k_B T L_{\perp}^{-d} \Theta(u_t, u_h) \quad (1.52)$$

où $u_T = \frac{T-T_C}{T_C} L_{\perp}^{\frac{1}{\nu}}$ et $u_h = \frac{h}{k_B T_C} L_{\perp}^{\frac{\beta+\gamma}{\nu}}$ où les exposants β , γ et ν sont des exposants universels reliés aux amplitudes universelles des longueurs de corrélation du système [15, 14] et $\Theta(u_t, u_h)$ est une fonction universelle propre à chaque modèle. Cette fonction universelle dépend des conditions aux bords du système [16, 17] ainsi que de l'ensemble thermodynamique dans lequel on se place [18, 19].

Afin d'extraire la force de Casimir, il suffit alors de soustraire deux quantités extensives, c'est-à-dire en utilisant deux largeurs différentes L_1 et L_2

$$f_c(\beta, L_1, h) - f_c(\beta, L_2, h) = \frac{1}{L'} \frac{\partial \Omega(\beta, L_2, h)}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} - \frac{1}{L'} \frac{\partial \Omega(\beta, L_1, h)}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} \quad (1.53)$$

Puisque le surplus d'énergie dû au confinement est nul lorsque $L_2 \rightarrow \infty$, on obtient que la force de Casimir est

$$f_c(\beta, L_1, h) \simeq \frac{1}{L'} \frac{\partial \Omega(\beta, L_2, h)}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} - \frac{1}{L'} \frac{\partial \Omega(\beta, L_1, h)}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} \quad (1.54)$$

où en utilisant 1.52, l'approximation est valable dans le cas où $\left(\frac{L_2}{L_1}\right)^{-d} \ll 1$. 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[20].

La détection expérimentale de ce phénomène se fait traditionnellement dans des fluides binaires par *Total Internal Reflection Microscopy* (TIRM) [21, 22, 23, 24]. 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 1.52. À l'inverse, il est possible de mesurer la force de Casimir [13] afin d'étudier les transitions de phases colloïdales.

Le modèle d'Ising appartient à une classe de modèles où il est facilitant l'obtention de résultat analytique [25] comparables aux simulations numériques [26, 27, 9].

Jusqu'à présent nous avons parlé de systèmes à l'équilibre, mais l'effet des fluctuations est également présent en dehors de l'équilibre. L'étude des interfaces nous mène à proposer des modèles de cisaillement qui influencent les propriétés statistiques des systèmes, et ainsi modifier la force de Casimir [28].

1.3 Modèles d'interface

Dans la réalité, la phase désordonnée est extrêmement inhomogène, avec des bulles ou des digitations qui empêchent une description dynamique aisée de l'interface. Si l'on désire étudier l'interface de ces bulles ou digitations, où localement l'interface est bien définie par une fonction d'une seule variable, l'approche du champ moyen suffit. On suppose dans ce cas qu'il n'y a ni digitation ni bulles d'évaporation. Dans cette approximation, l'interface est parfaitement définie en un point et non dans un profil comme dans l'équation 1.48. Tous les points du champ se trouvant en bas de l'interface prennent une unique valeur strictement différente de tous les points du champ au-dessus de l'interface.

Sans perte de généralité, nous pouvons séparer les variables spatiales par x pour toutes les coordonnées parallèles à l'interface et par z la coordonnée transverse. Cela se traduit par

$$\phi(\mathbf{x}) = f(z - h(\mathbf{x})) \quad (1.55)$$

où $f(a > 0) = \phi_1$ et $f(a < 0) = \phi_2$. Notre système est maintenant complètement défini

par l'interface $h(x)$ d'Hamiltonien

$$H = \int d^d x \frac{\sigma}{2} (\nabla h(\mathbf{x}))^2 + V(h) \quad (1.56)$$

où le premier terme est l'analogie au premier terme dans 1.16 représentant la tension superficielle, et le potentiel V fait référence au champ externe 1.29. Une interface se caractérise par sa hauteur moyenne $\langle h(t) \rangle$ de l'interface dans l'espace et par sa fonction de corrélation parallèle à l'interface décrivant les modes de fluctuation de l'interface

$$C_{\parallel}(r, t) = \langle h(\mathbf{x}, t) h(\mathbf{x} + r, t) \rangle_x - \langle h(0, t) \rangle^2 = \sum_i A_i \left(\frac{r}{\xi_i} \right) \quad (1.57)$$

où les A_i sont des fonctions à décroissance exponentielle. Le calcul de ces fonctions sera donnée dans la section 5. L'épaisseur de l'interface est donnée par $\omega(t) = \sqrt{C_{\parallel}(0, t)} = \sqrt{\langle h(t)^2 \rangle - \langle h(t) \rangle^2}$.

1.3.1 Paramètre d'ordre non conservé

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

En partant de 1.21 et en insérant 1.55 avec le changement de variable $u = z - h$, on a [29]

$$\frac{\partial h}{\partial t} f'(u) = D \nabla^2 h f'(u) - V'(f) + \eta(\mathbf{x}, u + h(\mathbf{x}, t), t) \quad (1.58)$$

avec $\eta(x, t)$ un bruit blanc gaussien. En multipliant les deux côtés par $f'(u)$ et en intégrant de $-\infty$ à $+\infty$, puisque le terme $\int_{-\infty}^{\infty} V'(f) f'(u) du = 0$, on obtient l'équation d'Edwards-Wilkinson [30]

$$\frac{\partial h}{\partial t} = \nu + D \nabla^2 h + \tilde{\eta}(\mathbf{x}, t) \quad (1.59)$$

où D est le coefficient de diffusion de l'interface, ν le flux d'aggrégation de particules sur l'interface et $\tilde{\eta}(x, t)$ est un bruit blanc de moyenne nulle défini par

$$\tilde{\eta}(\mathbf{x}, t) = -\frac{1}{\sigma} \int du f'(u) \eta(\mathbf{x}, u + h(\mathbf{x}, t), t) \quad (1.60)$$

avec σ la tension superficielle définie en 1.46 et de corrélation

$$\langle \tilde{\eta}(\mathbf{x}, t) \tilde{\eta}(\mathbf{x}', t') \rangle = \frac{2D}{\sigma} T \delta(\mathbf{x} - \mathbf{x}') \delta(t - t') \quad (1.61)$$

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

$$\frac{\partial h}{\partial t} = D\nabla^2 h + \tilde{\eta}(\mathbf{x}, t) \quad (1.62)$$

1.3.2 Paramètre d'ordre conservé

Si l'on se place dans le référentiel du centre de l'interface, l'équation d'Edwards-Wilkinson 1.62 conserve le paramètre d'ordre en moyenne. Néanmoins, la transformation $h \rightarrow h + Dt$ ne prend pas en compte les fluctuations thermiques qui viennent perturber l'interface, ce qui fait que $h(t) \neq cte$. L'astuce vient ici de [31, 32], où l'on reprend l'équation de Cahn-Hilliard-Cook 1.23 pour les interfaces

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

qui nous donne l'équation Villain-Lai-Das Sarma[33, 34]

$$\frac{\partial h}{\partial t} = -D\nabla^4 h + \lambda \nabla^2 (\nabla h)^2 + \eta(x, t) \quad (1.64)$$

qui a fait l'objet de nombreuses études[35, 36, 37, 38]. L'intérêt d'un tel système est qu'il est contraint à une dynamique locale qui permet d'obtenir un système hors-équilibre.

1.3.3 Interface hors équilibre

Les systèmes à l'équilibre ont la particularité que les états ont une probabilité en accord avec la distribution de Gibbs-Boltzmann 1.2, c'est-à-dire que le courant 1.10 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

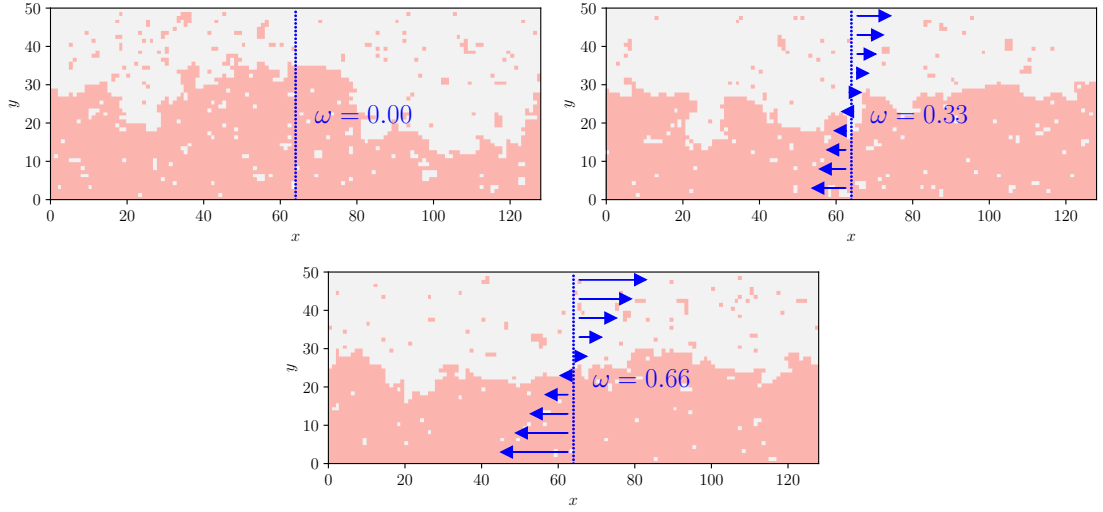


FIGURE 1.4 – Photos d'un système d'Ising 128×50 en fonction d'un cisaillement $f(y) = \omega(\frac{2y}{L} - 1)$.

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[39]. Cette dynamique étant locale, elle ne peut exister que si le paramètre d'ordre est conservé. L'équation générale d'un système d'interface avec un cisaillement est[40, 29]

$$\frac{\partial h}{\partial t} + v \nabla h = \mathcal{L}h + \eta(x, t) \quad (1.65)$$

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

Dans le cas où le champ de vitesse est constant, comme la sédimentation dans un champ gravitationnel, on peut parler d'écoulement. L'équation 1.65 est alors invariante par la transformation galiléenne $x \rightarrow x + vt$.

Néanmoins, de nombreuses expériences[41] et simulations numériques pour le modèle d'Ising [42, 43, 44, 45, 46, 47, 48, 49] ainsi qu'avec des techniques de Dynamique Moléculaire [50] montrent que le cisaillement provoque un confinement de l'interface. Dans les expériences où les effets gravitationnels sont importants, le solvant d'une suspension de colloïdes ne bouge pas, contrairement aux particules en suspension. La brisure d'invariance galiléenne qui en résulte est expliqué en détail au chapitre 7.¹ Pour les simulations

1. Ce chapitre a été publié dans [51].

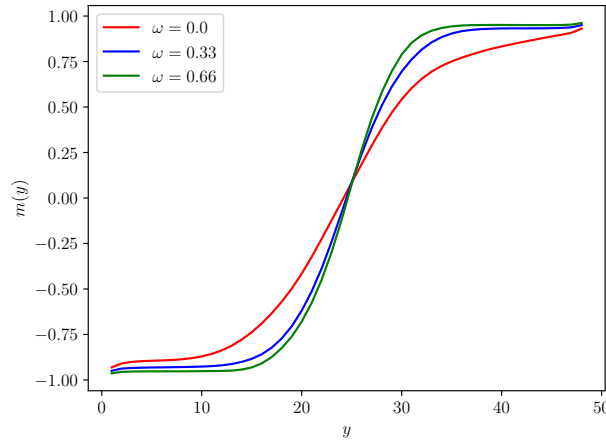


FIGURE 1.5 – Profil de magnétisation d'un système d'Ising 128×50 en fonction du cisaillement de la figure 1.4. Plus le cisaillement est élevé, plus l'interface est confinée.

de Monte Carlo, l'invariance est brisée par la dynamique même du système, puisque les mouvements sont fait séquentiellement et non simultanément.

1.4 Conclusion

Nous avons présenté les modèles standards des transitions de phase et avons étudié l'importance de l'ensemble thermodynamique de ces systèmes. Dans l'ensemble grand-canonique où le paramètre d'ordre n'est pas conservé, les équations dynamiques du modèle A 1.21 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 du champ et rend ainsi les calculs plus simples. Il existe par ailleurs de nombreuses sources contribuant à l'énergie totale du système : l'énergie du volume (*bulk*) du système, l'énergie de l'interface définie par sa tension superficielle 1.46, et une énergie d'excès qui donne naissance à la force de Casimir 1.52. Cette force est due au confinement du système par des conditions aux bords contraignant les fluctuations du champ ϕ selon une direction.

Dans l'ensemble canonique où le paramètre d'ordre est conservé (ou modèle B 1.23), toutes les considérations antérieures se s'appliquent. Il est possible d'appliquer un flux local qui sort le système de l'équilibre. La manière la plus naturelle de le faire est de cisailer l'interface, ce qui modifie également les propriétés statistiques du système.

Nous nous intéressons maintenant aux modèles sur réseaux, qui présentent l'avantage

de la simplicité numérique et analytique et permettent de modifier facilement l'ensemble thermodynamique ainsi que le cisaillement.

Chapitre 2

Modèle Solid-On-Solid

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 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 [52]. et $\beta_{C,3D} \simeq 0.22J$ en trois dimensions [53] (via des simulations de Monte Carlo).

À basse température $T < T_C$, le système tend à créer des domaines de magnétisation moyenne opposées induisant des interfaces. Nous rappelons dans ce chapitre quelques notions essentielles sur le modèle d'Ising, sur la manière d'étudier les interfaces dans ce modèle, et une approximation à très basse température qui ne retient que l'information sur l'interface : le modèle Solid-On-Solid.

2.1 Le modèle d'Ising

Le modèle d'Ising¹ est un modèle de particules sur réseau où l'interaction entre les particules du système se fait uniquement entre les plus proches voisins. Chaque particule au site i possède deux états différents que l'on note $\sigma_i = \pm 1$, analogues aux spins en mécanique quantique. L'Hamiltonien d'un tel modèle s'écrit alors

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j + \frac{V(i) + V(j)}{2} \quad (2.1)$$

1. Pour le lecteur curieux quant à l'histoire du modèle, se référer à [54] et à [55].

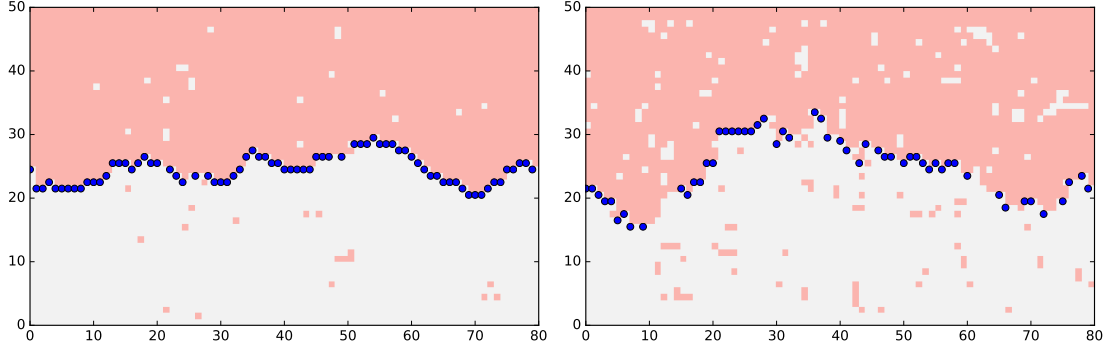


FIGURE 2.1 – Photo d'un modèle d'Ising à deux températures différentes ($T = 0.7T_C$ et $T = 0.95T_C$) avec des conditions périodiques aux bords en X et fixés en Y qui forcent la présence d'une interface entre les phases + (rose) et - (blanc) du système. Plus la température est élevée et plus l'interface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

où $\langle ij \rangle$ dénotent deux premiers voisins, J_{ij} l'énergie d'interaction entre deux sites et $V(i)$ un champ externe. On peut voir ce terme d'interaction comme la discrétisation du terme $(\nabla\phi(\mathbf{x}, t))^2$ où l'on a enlevé les constantes d'énergies, et l'absence du potentiel ϕ^4 puisqu'il est toujours égal à $m^2 + \frac{\lambda}{4!}$ ici.

En faisant la transformation[56] $n_i = \frac{\sigma_i + 1}{2}$ afin que $n_i(\sigma_i = 1) = 1$ et $n_i(\sigma_i = -1) = 0$, on obtient l'Hamiltonien

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (4n_i n_j - 2(n_i + n_j) + 1) + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \frac{V(\sigma_i) + V(\sigma_j)}{2} \quad (2.2)$$

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

$$\mathcal{H}_{LG} = -4 \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} n_i n_j + 2 \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (n_i + n_j) + \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \frac{V(\sigma_i) + V(\sigma_j)}{2} \quad (2.3)$$

Le deuxième terme s'identifie à la présence d'un potentiel chimique pour les particules liquide-gaz. 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.

L'étude de l'interface entre les phases + et - nécessite la brisure de la symétrie

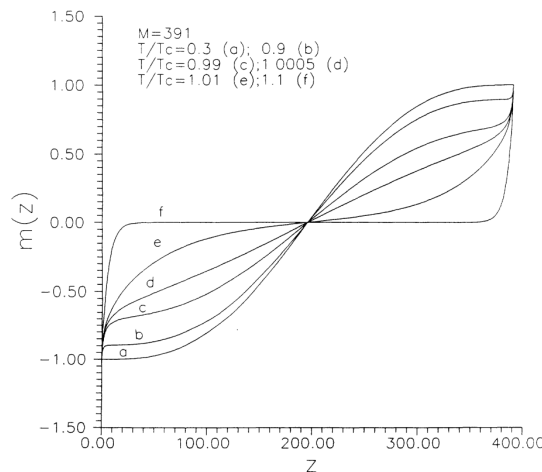


FIGURE 2.2 – Profil de magnétisation $m(z)$ d'une interface en 2D pour différentes températures en unité de T_C via la diagonalisation de la matrice de transfert du modèle d'Ising [57]. Plus la température est faible et plus elle est localisée.

de translation au sein du système. Cela peut se réaliser via des conditions aux bords non-périodiques dans une direction. Dans ce cas par exemple, les spins de la rangée 0 étant positifs et ceux de la rangée L_Y négatifs, des clusters vont se former et créer une interface au milieu. Le profil de magnétisation d'une telle interface est donnée dans la figure 2.2 [57], et sa tension superficielle est égale à [58, 59, 60]

$$\sigma = 2\beta J - \log(\tanh(\beta J)) \quad (2.4)$$

Il est également possible de favoriser une phase par rapport à l'autre grâce à un champ externe assymétrique favorisant l'une des deux phases au-dessus et l'autre en-dessous, comme le potentiel $V(y) = -B|\frac{L_Y}{2} - y|$. Cette séparation modélise quant à elle l'effet d'un champ sur un liquide binaire comme dans les expériences de forçage laser [39], que nous étudierons plus en détail dans la Section 5.

2.2 Hamiltonien

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

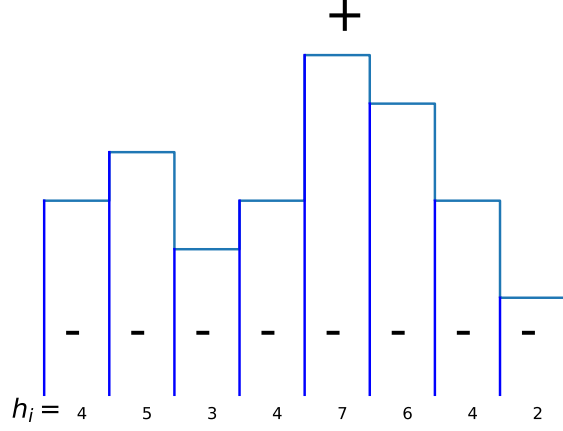


FIGURE 2.3 – Une configuration possible de modèle SOS. Dans la i -ème colonne le bord horizontal de l'interface passe à la hauteur h_i . Toutes les particules au-dessus de l'interface sont des spins positifs et négatifs en dessous. La représentation classique du modèle SOS diffère de ce schéma par l'hypothèse que les particules sont discernables (cf figure 2.9).

mélangé, il est possible de définir la présence d'une phase par rapport à la hauteur h_i de l'interface. Chaque site prend la valeur

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

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 perpendiculaire est prohibitive par rapport aux liaisons parallèles à l'interface $J_{\perp} \gg J_{\parallel}$.

En utilisant les identités $2 \min(a, b) = |a + b| - |a - b|$ et $2 \max(a, b) = |a + b| + |a - b|$, on a

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

Ainsi, pour un système de longueur L_X et de largeur L_Y l'hamiltonien du modèle d'Ising 2.1 en l'absence de potentiel et en évitant de recompter les liens deux fois, se réécrit

comme

$$\mathcal{H} = 2JL_X(1 - L_Y) + 2J \sum_i |h_i - h_{i+1}| \quad (2.5)$$

On peut également calculer directement l'énergie d'un tel système depuis une configuration SOS. 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 $E_x = -JL_XL_Y + 2\sum_i |h_i - h_{i+1}|$. La somme des deux énergies redonne 2.5.

Le terme $|h_i - h_{i+1}|$ représente la surface de contact horizontale entre les deux phases qui dépend directement de la hauteur, tandis que le terme constant représente la surface de contact verticale. En retirant la partie constante de l'énergie et simplifiant $2J = J$ et en retirant l'énergie de volume qui est constante, nous obtenons l'hamiltonien du **modèle Solid-On-Solid (SOS)**

$$\mathcal{H} = J \sum_{i=0}^{L_Y} |h_i - h_{i+1}|^k \quad (2.6)$$

L'exposant k désigne ici tous les types de modèles SOS que l'on peut trouver avec des interactions différentes entre les sites. Par exemple, dans le cas d'un hamiltonien gaussien où $k = 2$, on peut démontrer qu'il existe une relation entre le modèle SOS et le modèle XY [61]. Par la suite nous prendrons $k = 1$ puisque c'est l'exposant qui découle directement de l'approximation du modèle d'Ising.

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 épinglant l'interface (nous y reviendrons au paragraphe 2.4) [62] et d'étudier les statistiques des déviations extrêmes de l'interface [63, 64].

En rajoutant la condition supplémentaire que $|h_i - h_{i+1}| \leq 1$, on obtient que le **modèle Solid-On-Solid Restreint (RSOS)** [65]. Ce modèle est une approximation du modèle SOS à très basse température. Dans ces conditions, l'interface est très lisse puisque l'on suppose que [35, 66]. Dans la figure 2.4, l'énergie du modèle d'Ising, du SOS et du

RSOS sont reliées par l'équation 2.5, et l'on voit que les approximations correspondent pour $T_{SOS} < T_{C,Ising}$ et $T_{RSOS} < T_{C,Ising}$.

Par la suite, puisque nous désirons étudier le modèle SOS et non le comparer avec le modèle d'Ising, nous prendrons, sauf cas contraire explicité, $\beta = \beta_C \simeq 0.44$ et $J = 1$.

2.3 Matrice de Transfert

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

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

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

$$Z = \sum_{h_1=0}^{\infty} \sum_{h_2=0}^{\infty} \dots \sum_{h_L=0}^{\infty} e^{-\beta \sum_i H(h_i, h_{i+1})} = \sum_{h_1 h_2 \dots h_L} \prod_i e^{-\beta H(h_i, h_{i+1})}$$

La matrice

$$T(h_i, h_j) = e^{-\beta H(h_i, h_j)} \quad (2.7)$$

est appelée matrice de transfert. 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 $T(h_L, h_{L+1}) = T(h_L, h_1)$ [67]. Elle est également symétrique, ce qui implique qu'elle est diagonalisable dans la base des vecteurs propres $|\lambda\rangle$ de valeur propre λ . On dénote par λ_0 la plus grande valeur propre de T , par λ_1 la deuxième plus grande valeur propre et ainsi de suite. Ainsi on peut diagonaliser la fonction de partition par la trace de la matrice de transfert [58]

$$Z = \sum_{h_1 h_2 \dots h_L} \prod_i T(h_i, h_{i+1}) = \text{Tr} T^L = \sum_{\lambda} \langle \lambda | T^L | \lambda \rangle = \sum_{\lambda} \lambda^L \quad (2.8)$$

Dans la limite thermodynamique $L \rightarrow \infty$, seuls les plus grands vecteurs propres jouent un rôle. Afin de calculer les observables de notre système, il convient d'introduire les vecteurs de l'espace de Hilbert de $|\lambda\rangle$ qui vont de $|h = -\infty\rangle$ à $|h = +\infty\rangle$. En introduisant également la matrice des hauteurs $\tilde{M}|h\rangle = h|h\rangle$, on trouve

$$T = \begin{bmatrix} \ddots & \vdots & \ddots \\ e^{-\beta H(-1,-1)} & e^{-\beta H(-1,0)} & e^{-\beta H(1,-1)} \\ \ddots & e^{-\beta H(0,0)} & \ddots \\ e^{-\beta H(1,-1)} & e^{-\beta H(1,0)} & e^{-\beta H(1,1)} \\ \ddots & \vdots & \ddots \end{bmatrix} \quad (2.9)$$

FIGURE 2.4 – Matrice de transfert infinie et symétrique 2.7.

— L'énergie libre par site :

$$F = -\frac{1}{L\beta} \ln(Z) \simeq -\frac{1}{L\beta} \ln(\lambda_0) \quad (2.10)$$

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

$$p(h) = \frac{1}{Z} \sum_{\lambda} \lambda^L \langle \lambda | h \rangle^2 \simeq \langle \lambda_0 | h \rangle^2 \quad (2.11)$$

— La magnétisation moyenne :

$$M = \langle h \rangle = \langle \lambda_0 | \tilde{M} | \lambda_0 \rangle \quad (2.12)$$

— La variance des hauteurs :

$$\sigma = \langle (h - \langle h \rangle)^2 \rangle = \langle \lambda_0 | \tilde{M}^2 | \lambda_0 \rangle \quad (2.13)$$

2.4 Stabilité de l'interface

Soit $\psi_{\lambda}(h) = \langle h | \lambda \rangle$ 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. En absence de potentiel[68, 69], l'équation du vecteur propre donne

$$\sum_{h=-\infty}^{\infty} T(h, h') \psi_{\lambda}(h) = \lambda \psi_{\lambda}(h') \quad (2.14)$$

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

$$\frac{\sinh(\beta J)}{\cosh(\beta J) - (\alpha_\lambda + \frac{1}{\alpha_\lambda})} = \lambda \quad (2.15)$$

Dans la limite thermodynamique, la probabilité de présence de l'interface à la hauteur h est $p(h) = \langle \lambda_0 | h \rangle^2 = |\psi_0(h)|^2$. Le système ne possédant aucune brisure de symétrie particulière, la probabilité $p(h)$ se doit d'être bornée pour tout h . Dès lors, l'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

$$\psi_k(h) = e^{ikh} \quad (2.16)$$

$$\lambda = \frac{\sinh(\beta J)}{\cosh(\beta J) - \cos(k)} \quad (2.17)$$

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

$$\lambda = \sum_{h=0}^{\infty} f(h)(\alpha_\lambda^h + \alpha_\lambda^{-h}) - f(0) \quad (2.18)$$

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

Il est à noter qu'à $\beta = 0$, c'est-à-dire pour une température infinie, tous les termes de la matrice de transfert sont égaux à 1, menant à des vecteurs propres nuls. Dans cette limite, l'interface n'existe plus, le modèle SOS n'est donc pas valable. De même, pour une température nulle $\beta = \infty$, la matrice de transfert devient la matrice identité. Les valeurs propres deviennent toutes égales à 1 et les vecteurs propres sont $\psi_i(h) = \delta_{h,i}$ où ici i est l'indice de la i -ème valeur propre $\lambda_i = 1$. La probabilité de trouver l'interface à la hauteur h devient $p(h) = \frac{1}{Z} \sum_i \langle \lambda_i | h \rangle^2 = 1$. La température nulle a pour effet de geler l'interface sur une seule hauteur, mais toutes les hauteurs sont équiprobables. Bien que les micro-états soient extrêmement différents pour une température finie, les propriétés macroscopiques sont identiques à cause du même poids statistique associé à chaque état.

Une manière simple de localiser l'interface est de rajouter un potentiel $V(h) = -B\delta_{h,0}$ [70, 71, 72]. La présence du potentiel n'affecte pas la parité du système mais peut introduire un surplus de particules en 0. La recherche d'un état localisé nous donne un ansatz

de la forme

$$\psi_\lambda(h) = \begin{cases} |\alpha|^h & \text{si } h \neq 0 \\ \psi_{\lambda,0} & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.19)$$

L'équation du vecteur propre devient

$$\sum_{h=-\infty}^{\infty} e^{\beta|h-h'|-\beta B\delta_{h,0}} \psi_\lambda(h) = \lambda \psi_\lambda(h') \quad (2.20)$$

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 $h' < 0$

$$\left(\frac{R}{\alpha}\right)^{\pm h'} \left[\psi_{\lambda,0} + \frac{R\alpha}{1-R\alpha} + \frac{\alpha}{R-\alpha} \right] + \left[\frac{1}{1-R\alpha} - \frac{R}{R-\alpha} \right] = \lambda \quad (2.21)$$

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

$$\psi_{\lambda,0} = -\frac{\alpha}{R-\alpha} - \frac{R\alpha}{1-R\alpha} \quad (2.22)$$

$$\lambda = \frac{1}{1-R\alpha} - \frac{R}{R-\alpha} \quad (2.23)$$

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

$$\psi_{\lambda,0} + 2\frac{R\alpha}{1-R\alpha} = \lambda \psi_{\lambda,0} e^{-\beta B} \quad (2.24)$$

L'existence d'une solution cohérente $\alpha < 1$ autorise la présence d'une interface localisée grâce à l'épinglage [73, 74, 75, 76].

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 [77, 78] (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. Nous utiliserons ici un potentiel du style

$$V(h) = B|h| \quad (2.25)$$

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

2.5 Équivalence des ensembles

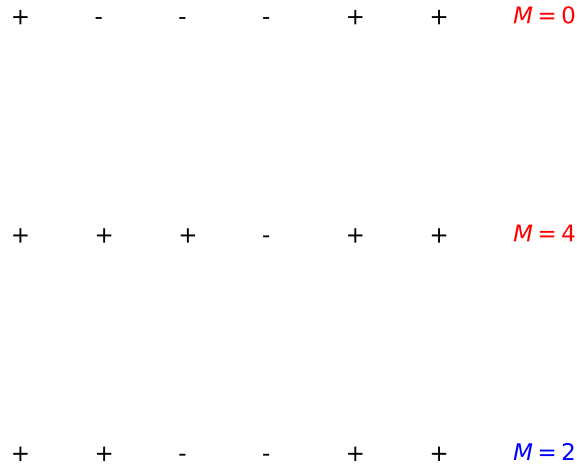


FIGURE 2.5 – Dans un modèle d'Ising à 1D, afin d'avoir une magnétisation moyenne du système à $\langle M \rangle = 2$, tous les états sont acceptés tant qu'il y en a d'autres afin de respecter la moyenne. Dans l'ensemble canonique, on n'a plus $\langle M \rangle = 2$ mais $M = 2$, interdisant les micro-états rouges.

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

$$Z(A) = \sum_{h_1 h_2 \dots h_L} e^{-\beta \sum_i H(h_i, h_{i+1})} \delta\left(\sum_i h_i = A\right) \quad (2.26)$$

La position moyenne de l'interface est maintenant imposée, ce qui interdit beaucoup de microétats, ce qui change les propriétés thermodynamiques de la matrice de transfert comme la distribution des hauteurs de l'interface [79], même si la moyenne reste la même.

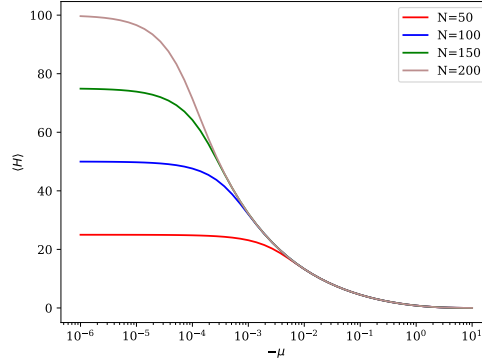


FIGURE 2.6 – Position d'équilibre de l'interface 2.28 en fonction de $-\mu$ via diagonalisation de la matrice de transfert 2.28. Lorsque le potentiel chimique est trop faible, l'interface est délocalisée et se retrouve à la position $\frac{N}{2}$.

Dans la limite thermodynamique, si l'on prend dans l'ensemble canonique pour paramètre d'ordre la valeur moyenne du paramètre d'ordre dans l'ensemble grand canonique, on s'attend à ce que les observables du système se comportent de manière équivalente. 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 2.26 est en relation vis-à-vis de l'ensemble grand-canonique grâce au potentiel chimique μ par

$$\Xi(\mu) = \sum_{A=-\infty}^{\infty} Z(A) e^{\beta\mu A} \quad (2.27)$$

avec pour nouvelle matrice de transfert

$$T(h_i, h_j) = e^{-\beta|h_i - h_j| + \beta\mu \frac{h_i + h_j}{2}} \quad (2.28)$$

2.6 Modèle de particules : le modèle POP

Lorsque nous avons fait l'approximation SOS dans le modèle d'Ising, nous sommes passés d'un système où l'on prenait en compte toutes les interactions entre particules vers

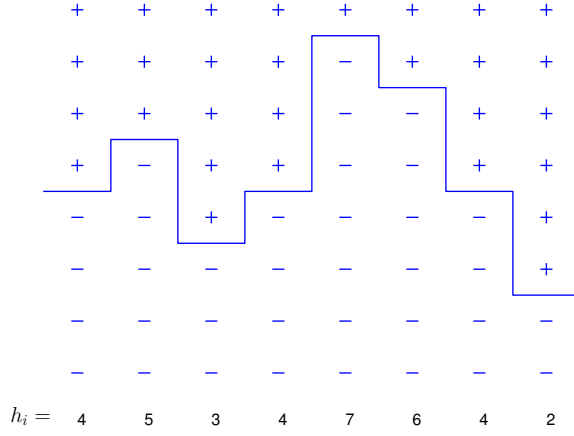


FIGURE 2.7 – Position d'équilibre de l'interface 2.12 en fonction de μ via diagonalisation de la matrice de transfert 2.28.

un modèle d'interface où seul comptent les particules au niveau de l'interface, perdant ainsi l'information sur le bulk. Chaque site i est maintenant défini par la coordonnée de la hauteur de l'interface h_i , dont l'entropie est donnée par les permutations possibles des hauteurs. Nous proposons ici un nouveau modèle, où nous n'avons pas perdu l'information sur la position des particules, que nous nommerons **le modèle Particles-Over-Particles** (POP). Soit $N = \sum_i h_i$ le nombre de spins $+$ dans le système, c'est-à-dire l'aire sous l'interface. La grande fonction de partition devient

$$\Xi(\mu) = \sum_{\mathbf{h}} e^{-\beta J \sum_i |h_i - h_{i+1}| + \beta \mu \sum_i h_i - \sum_i \ln(h_i!)} \quad (2.29)$$

où le second terme provient du fait qu'il y a $N!/\prod_i h_i!$ manières de choisir les configurations spécifiées par les h_i parmi les $N = \sum_i h_i$ particules qui sont indiscernables entre elles. Le potentiel effectif contient le potentiel chimique ainsi que l'effet de l'entropie

$$V_e = \beta \mu \sum_i h_i - \sum_i \ln(h_i!) \quad (2.30)$$

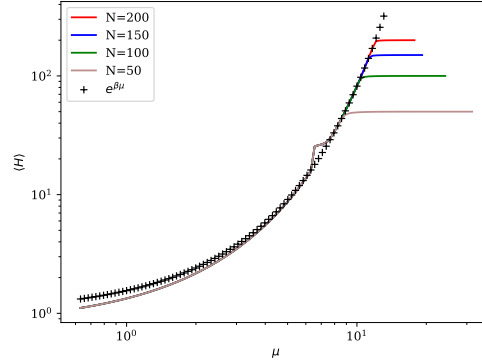


FIGURE 2.8 – Position d’équilibre de l’interface 2.12 en fonction de μ via diagonalisation de la matrice de transfert 2.29. La solution analytique 2.31 (en pointillés) correspond lorsque le potentiel chimique n’est plus négligeable. La bosse à $\mu \simeq 7$ est due à un overflow dans le calcul de la matrice de transfert sous Python.

Grâce à la formule de Stirling pour h_i grand, et en considérant une configuration où l’interface est lisse $h_i = \langle h \rangle$, on a

$$\frac{dV}{d\langle h \rangle} = 0 \rightarrow \langle h \rangle = e^{\beta\mu} + C \quad (2.31)$$

Dans la limite $\mu \rightarrow -\infty$, aucune particule ne peut se déposer dans le système, et donc $C = 0$.

2.7 Conclusion

Bien que le modèle d’Ising soit extrêmement étudié de par sa richesse au niveau de la transition de phase, l’étude des interfaces peut se contenter d’une approximation à basse température où il n’existe pas d’évaporation, bulles ou digitations de la phase + au sein de la phase – et vice-versa. Le modèle Solid-On-Solid suffit à étudier une grande variété de phénomènes ayant lieu à l’interface d’Hamiltonien 2.6. La basse dimensionalité de ce système permet d’utiliser le formalisme des matrices de transfert. Nous avons démontré que l’interface était libre de fluctuer où elle le désirait sauf en présence d’un champ de confinement qui permet d’étudier ses fluctuations autour d’un point central. La prise en compte des permutations possibles des particules ajoute un terme d’entropie à la fonction de partition. Ce nouveau modèle, baptisé POP, possède de nombreuses propriétés nouvelles qui le rapprochent du modèle d’Ising.

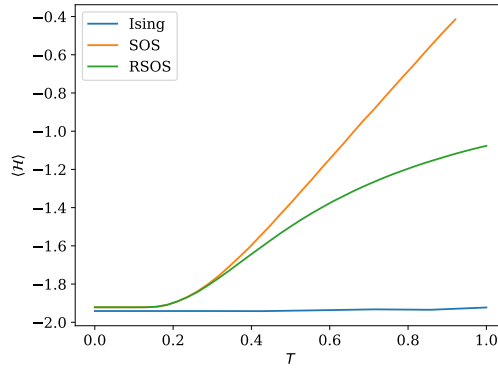


FIGURE 2.9 – Énergie par site entre les modèles d’Ising (2.1) (avec conditions fixes en y), SOS et RSOS (2.6) en fonction de la température via des simulations de Monte Carlo pour $L_X = 64$, $L_Y = 51$ et $J = 1$ avec des conditions périodiques en x . La configuration initiale est la configuration à $T = 0$ d’une interface parfaitement lisse. Énergie Ising ne décolle pas à très basse température. Soit nécessite algo temps continu, soit SOS est une très mauvaise approximation. Rajouter POP, peut-être que la différence vient de là!!

Chapitre 3

Simulations

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

3.1 Algorithme de Metropolis

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

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

où \sum_{μ} désigne la somme sur tous les micro-états μ possibles du système et \sum_E la somme sur toutes les énergies possibles du système associées à leur entropie S . Tandis qu'une diagonalisation de la fonction de partition nécessiterait de connaître tous les micro-états possibles, on observe que certains états sont plus probables que d'autres car d'énergie moindre, et donc contribuent plus aux moyennes statistiques que le reste, tandis qu'à haute température la densité d'états de plus haute énergie donnant l'entropie devient plus importante. Les algorithmes de Metropolis ont pour objectif d'explorer l'espace des phases de manière aléatoire afin de découvrir quelles configurations contribuent le plus

aux observables du système, afin de converger vers la valeur limite $\langle A \rangle(t = \infty) = \langle A \rangle$.

Nous nous basons ici sur [80] afin d'expliquer le fonctionnement d'un tel algorithme.

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

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

qui définit la fonction de partition \mathcal{Z} . Dans un algorithme de Metropolis, on met à jour notre micro-état en prenant un site i au hasard¹ et en le changeant légèrement vers un état ν . Dans un système d'Ising, nous choisissons un spin σ_i au hasard et regardons s'il peut être renversé ou échanger avec 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, 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

$$\frac{p(\mu \rightarrow \nu)}{p(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\Delta E(\nu \rightarrow \mu)} \quad (3.3)$$

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

$$p(\mu \rightarrow \nu) = \min(1, e^{-\beta \Delta E(\mu \rightarrow \nu)}) \quad (3.4)$$

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 [80] ou en prenant en compte les états dont la transition a été refusée [81]. L'erreur obtenue à la fin sur notre observable $\langle A \rangle$ au cours d'une simulation ayant duré t_{max}

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

étapes de Monte Carlo est

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

Cette variance dépend du temps de corrélation τ puisque 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

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

qui se comporte comme une somme d'exponentielles, mais où dans la limite thermodynamique, seul le mode de relaxation le plus long compte[82]. 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'intégrale²

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

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

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

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

3.1.1 Ensemble grand-canonique : algorithme de Glauber

Le dépôt de particules provenant d'un réservoir permet de faire grandir un cristal à partir d'un substrat. Ce genre de systèmes est défini par le potentiel chimique μ des particules, dans le solvant et appartient à l'ensemble grand-canonique. Dans ce cas, on choisit au hasard de manière uniforme une colonne h_i dans laquelle on décide de mettre ou d'enlever une particule selon le flux de particules ν vu dans l'équation d'Edwards-Wilkinson 1.59. 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

2. Je recommande d'intégration de Simpson.

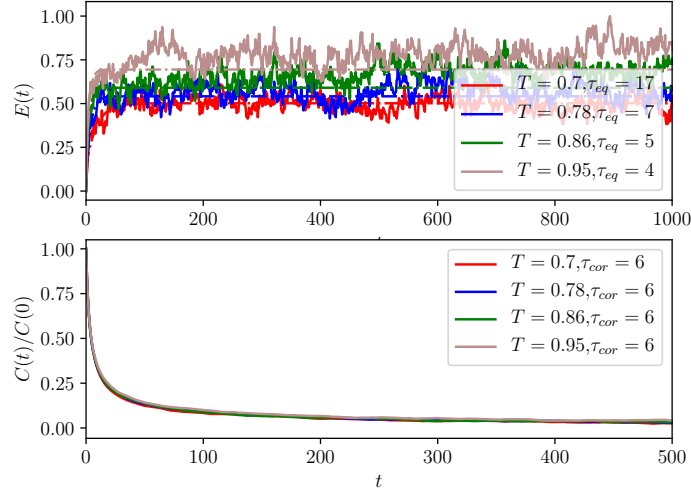


FIGURE 3.1 – Courbe de l'énergie (haut) et fonction d'auto-corrélation (bas) dans avec un **paramètre d'ordre non-conservé** à partir de la condition initiale. Le temps d'équilibration (en étapes de Monte Carlo) diminue avec la température, tandis que le temps de corrélation reste relativement constant. 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.

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

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

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

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

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

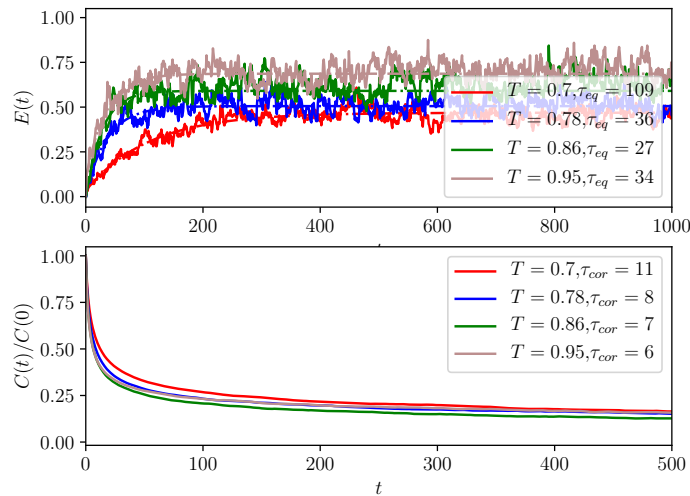


FIGURE 3.2 – Courbe de l'énergie (haut) et fonction d'auto-corrélation (bas) dans avec un **paramètre d'ordre conservé** à partir de la condition initiale. Le temps d'équilibrage (en étapes de Monte Carlo) diminue avec la température, tandis que le temps de corrélation reste relativement constant. Le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

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

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

3.1.2 Ensemble canonique : algorithme de Kasawaki

La diffusion des particules - par exemple un polymère dans un solvant - est une dynamique locale qui conserve le paramètre d'ordre du notre système, nommément la magnétisation m . Dans ce cas, on choisit au hasard de manière uniforme deux colonnes

h_i et h_{i+1} dans lesquelles on va essayer d'échanger une particule entre les deux. Afin de respecter le bilan détaillé, il faut que la probabilité de choisir le mouvement $h_i \rightarrow h_{i+1}$ soit égale à $h_{i+1} \rightarrow h_i$. On peut juste définir à nouveau "l'ajout" d'une colonne vers ou à partir de l'autre via la transformation $h_i \rightarrow h_i + \alpha$ et $h_{i+1} \rightarrow h_{i+1} - \alpha$ (avec $\alpha = \pm 1$), en respectant toujours les conditions aux bords en y . Cette fois-ci il existe trois termes dans l'énergie qui sont modifiées³

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

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

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

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

3.1.3 Dynamique hors-équilibre

L'ensemble grand-canonique ne nous permet d'avoir un système qu'à l'équilibre, puisqu'il est traduit par une dynamique non-locale. Seule une dynamique locale comme la dynamique de Kawasaki peut nous donner un tel résultat. L'implémentation la plus simple est d'introduire un terme de cisaillement dans notre modèle lorsque l'on décide de bouger une particule. Ce cisaillement diminue l'énergie du micro-état lorsque la particule bouge dans un sens et l'augmente sinon, ce qui brise le bilan détaillé. Les systèmes présentant un cisaillement perpendiculaire à l'interface ont tendance à la détruire, puisque l'on introduit un flux qui empêche toute stabilité[]. Néanmoins de nombreux travaux sur les systèmes hors-équilibre dans le modèle d'Ising ont été produits [46] présentant la diminution de la largeur de l'interface lorsque le cisaillement est produit de manière parallèle. On peut définir deux espèces de cisaillement parallèles.. Le cisaillement aux bords dans un liquide non-visqueux ne permet de bouger que les particules aux bords du système : il n'est donc pas adaptable à un système infini ou semi-infini. Pour un système de taille L et pour un module de cisaillement de f , la différence d'énergie supplémentaire est

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

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

Dans le cas d'un fluide permettant un transport visqueux, le cisaillement aux bords entraîne un cisaillement plus faible proportionnel à la distance⁴. En supposant que le cisaillement est nul au niveau de l'interface et que les particules vont à gauche dans la partie basse du système (et à droite dans la partie haute du système), on obtient alors

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

Cependant, pour des raisons de facilité de calcul plus tard afin de comparer les simulations numériques aux résultats analytiques, on utilise un cisaillement uniforme qui pousse les particules dans un sens. Ce genre de système correspond à un flux laminaire, par exemple dû à la gravité face à une interface verticale qui tire les particules vers le bas⁵. La différence d'énergie devient

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

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

3.1.4 Modèle POP

Dans le modèle POP, le modèle n'est plus structuré en fonction des sites i mais bien des particules $\sigma(n) = i$, la hauteur d'un site⁴ devenant alors

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

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

Il est également possible de donner des constantes de diffusion différentes à chaque particule⁵ 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

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

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

conservée est qu'il n'est pas nécessaire de reconstruire une distribution pRNG à chaque étape, même si le constructeur est rapide⁶.

3.2 Hamiltonien de transition

Nous avons vu à l'équation 1.54 que la force de Casimir par unité d'aire se calcule à partir de la variation de l'énergie libre Ω

$$f_c(\beta, L_1, h) \simeq \frac{1}{L'} \frac{\partial \Omega(\beta, L_2, h)}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} - \frac{1}{L'} \frac{\partial \Omega(\beta, L_1, h)}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} \quad (3.19)$$

En suivant [26, 9] pour un système d'Ising carré de taille $L \times L'$, l'idée est de calculer la dérivée continue par rapport à une taille discrète du système L en interpolant le système via l'Hamiltonien de transition

$$\mathcal{H}_{tr}(\lambda) = (1 - \lambda)\mathcal{H}_0 + \lambda\mathcal{H}_1 \quad (3.20)$$

où \mathcal{H}_0 est l'Hamiltonien d'un système de hauteur maximale L , et \mathcal{H}_1 l'Hamiltonien d'un système de hauteur maximale $L - 1$ où on a découpé une couche (voir Figure 3.3). L'énergie libre associée à cet Hamiltonien est

$$\Omega_{tr}(\lambda) = -k_B T \ln \left(\sum_{h_1 \dots h_L} e^{-\beta \mathcal{H}_{tr}(\lambda)} \right) \quad (3.21)$$

De la dérivée de l'énergie libre découle

$$\frac{\Omega_{tr}(\lambda)}{d\lambda} = \langle \mathcal{H}_1 - \mathcal{H}_0 \rangle_{\mathcal{H}_{tr}(\lambda)} \quad (3.22)$$

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

$$\Omega_1 - \Omega_0 = \int_0^1 d\lambda \langle \mathcal{H}_1 - \mathcal{H}_0 \rangle_{\mathcal{H}_{tr}(\lambda)} \quad (3.23)$$

Finalement, dans la limite où l'épaisseur du système est suffisamment grande pour que la

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

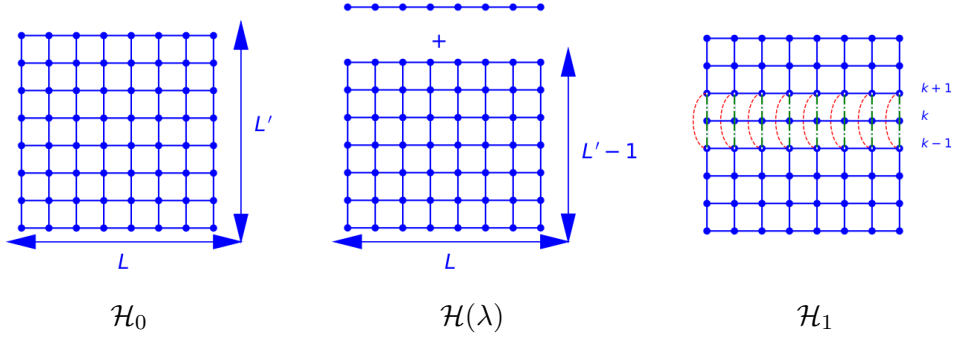


FIGURE 3.3 – Découplage progressif de la k -ième couche du système afin de calculer la variation de l'énergie libre grâce à l'hamiltonien de transition. Les liens en bleu ont une énergie de βJ , les liens en rouge une énergie de $\lambda\beta J$ et les liens en vert une énergie de $(1 - \lambda)\beta J$. Reproduction 2D de [26].

variation d'une couche soit suffisamment petite ($L' \gg 1$), on trouve que

$$-\frac{\partial \Omega(\beta, L, h)}{\partial L} \Big|_{\beta, L'} \simeq \int_0^1 d\lambda \langle \mathcal{H}_1 - \mathcal{H}_0 \rangle_{\mathcal{H}_{tr}(\lambda)} \quad (3.24)$$

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

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{tr, SOS}(\lambda) = \mathcal{H}_{0, SOS} - \\ \frac{\lambda J}{2} \sum_x [\text{sgn}(k - 1 - h(x)) \text{sgn}(k + 1 - h(x)) - \text{sgn}(k - h(x)) (\text{sgn}(k - 1 - h(x)) + \text{sgn}(k + 1 - h(x)))] \end{aligned} \quad (3.25)$$

où le facteur $\frac{1}{2}$ est obtenu afin de prendre en compte le coefficient 2 dans 2.5.

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 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. Nous avons également vu une manière d'obtenir la fonction universelle de la force de Casimir critique via le découplage progressif d'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. Dans le chapitre 4, nous étudions une manière moins générale d'obtenir cette énergie libre par de l'intégration d'une autre variable.

Chapitre 4

Résultats pour le modèle SOS

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

4.1 Différences Glauber/Kawasaki

figure énergie moyenne, sigma, distribution de probabilité via Airy

4.2 Effet du cisaillement

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

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

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

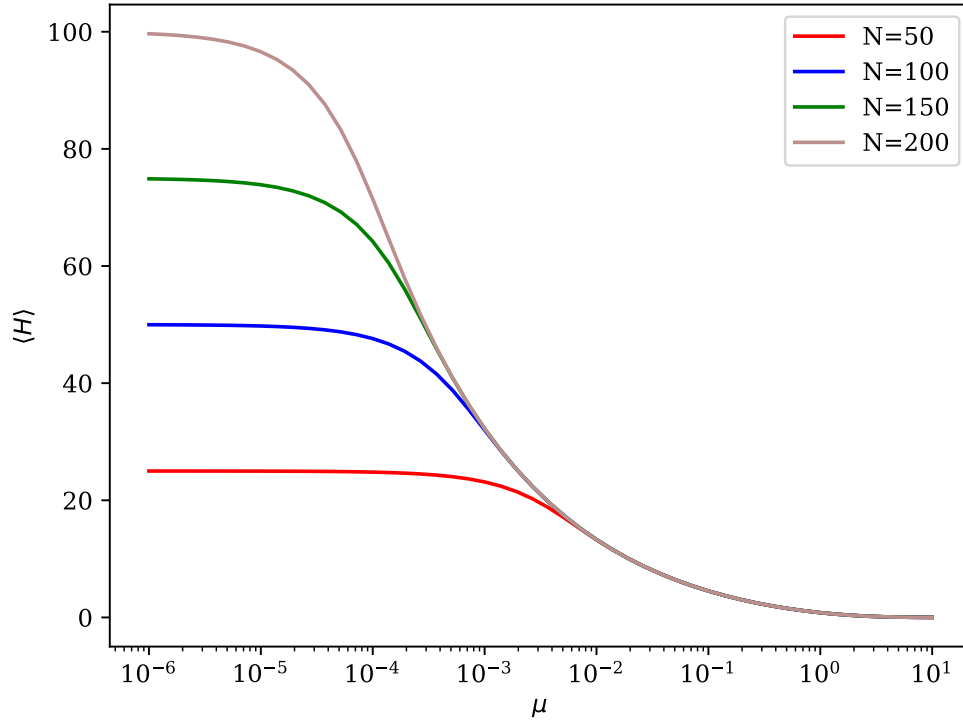


FIGURE 4.1 – Hauteur moyenne de l'hamiltonien $H = \sum_i |h_i - h_{i+1}| + \mu \frac{h_i + h_{i+1}}{2}$ en fonction de μ calculée grâce à la diagonalisation d'une matrice de transfert de taille N . Lorsque le potentiel chimique est trop faible, l'interface est délocalisée et se retrouve à la position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

alors

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

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

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

en remarquant que les valeurs absolues ont les propriétés suivantes

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

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

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

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

4.2.1 Différences avec le modèle d'Ising

Le modèle d'Ising repose sur la perméabilité entre les deux phases, avec des bulles d'une phase dans l'autre. Dans les travaux sur le rôle du cisaillement au niveau de l'interface dans un modèle d'Ising ([45],[46].), le cisaillement s'applique à toutes les particules, ce qui a pour but d'étirer les bulles, les rendant plus fragiles au bain thermique. Cet effet participe à leur évaporation vers l'interface et à la dissipation de l'énergie injectée par le cisaillement.

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

4.3 Cisaillement avec deux types de particules

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

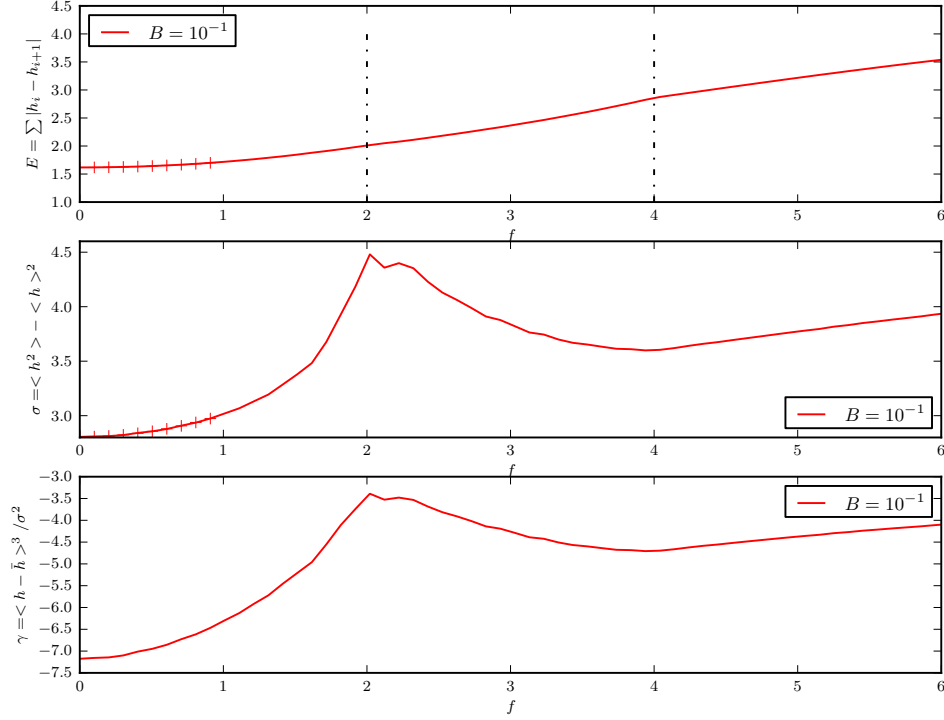


FIGURE 4.2 – Énergie $E = \langle \sum_i |h_i - h_{i+1}| \rangle$ (en pointillé sa dérivée), variance $\sigma = \langle (H - \langle H \rangle)^2 \rangle$ et asymétrie $\gamma = \langle (H - \langle H \rangle)^3 \rangle / \sigma^2$ pour $B^{0.1}$. La magnétisation est constante et égale à $\langle H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

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

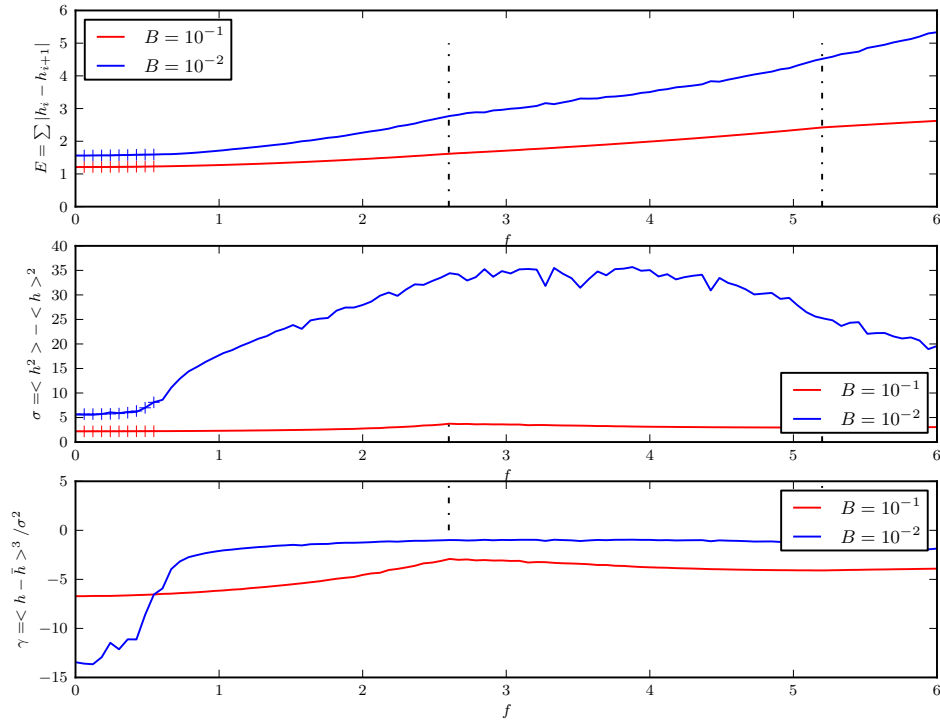


FIGURE 4.3 – Same as before, with $J = 1.3$ We observe a net inflexion in the energy at $2J$ for $B = 0.01$ which corresponds to $\langle H \rangle = 11$. Nevertheless there is not threshold at $4J = 5.2$. My guess is that the system is too far away from the boundary in order to interact strongly with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

] il y a longtemps.

4.3.1 Discussion about the Gaussian model

The Gaussian model has a stronger interaction, been as

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

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

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

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

4.4 Interpretation

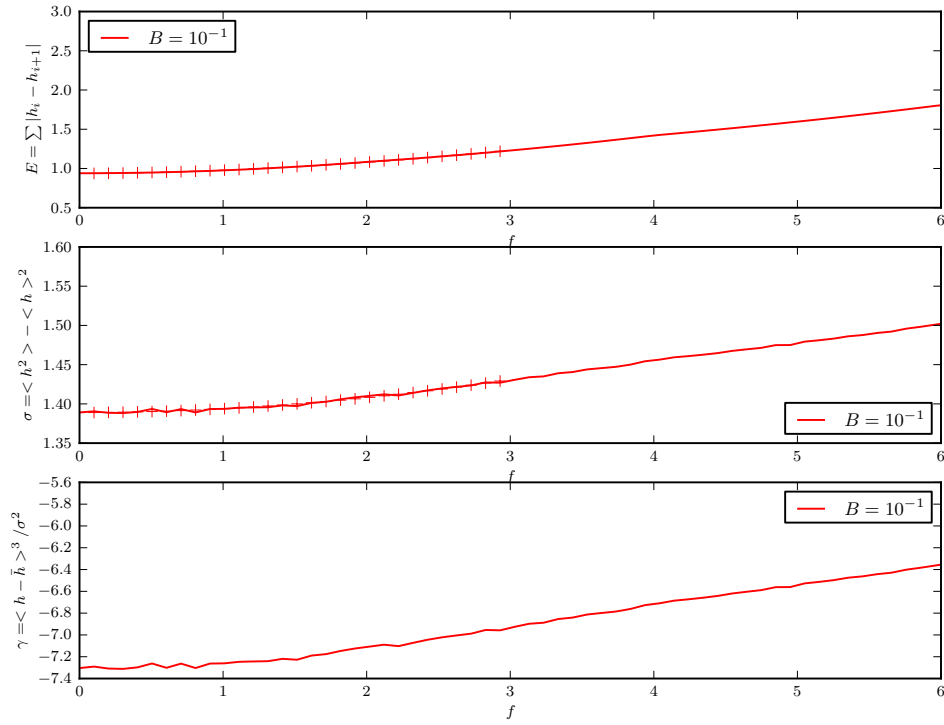


FIGURE 4.4 – Bond energy, thickness (variance) and skewness of the interface for two different magnetic pressures. The magnetisation is constant and is equal to $\langle H \rangle = 2$ for $B = 0.1$. As we are very close to the boundary, we see no threshold with the drive force. Simulations take longer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

Chapitre 5

Champ magnétique $|h_i|$

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

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

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

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

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

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

5.1 Modèle gaussien

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

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

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

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

tandis qu'une version continue du problème est

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

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

5.2 Distribution de l'interface

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

L'état fondamental s'écrit alors

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

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

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

et les états impairs

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

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

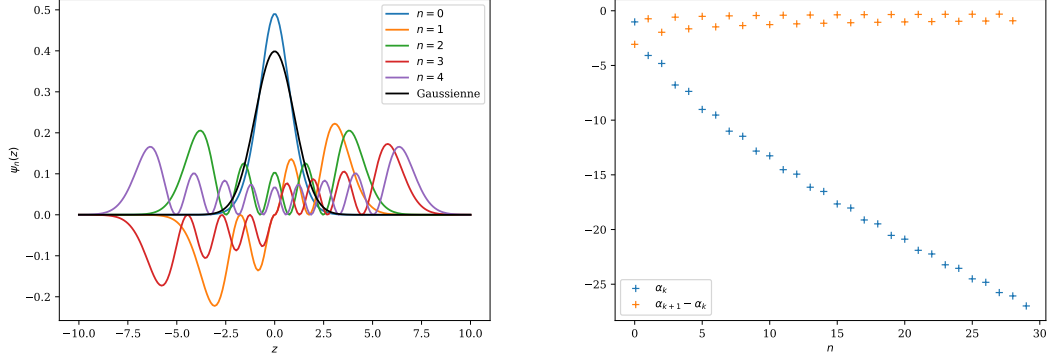


FIGURE 5.1 – À gauche, états propres ψ_n avec en noir, une référence par rapport à la distribution gaussienne. À droite, la série α_n .

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

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

La distribution des hauteurs dans un système infini devient

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

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

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

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

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

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

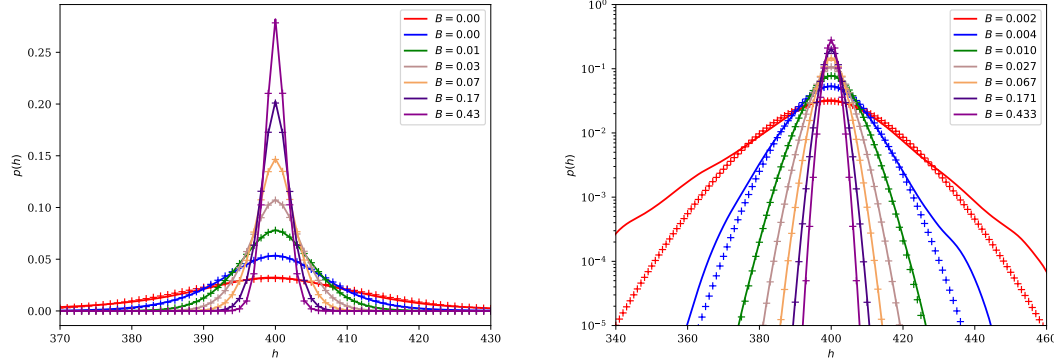


FIGURE 5.2 – Distribution de l'interface à $\beta = \beta_C$ autour d'un système centré à $L_Y = 400$ en ligne et un fit selon la distribution de Airy 5.15¹ en croix en échelle normale (à gauche) et en échelle log (à droite). Les écarts aux grandes fluctuations sont dues à un temps d'échantillonnage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

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

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

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

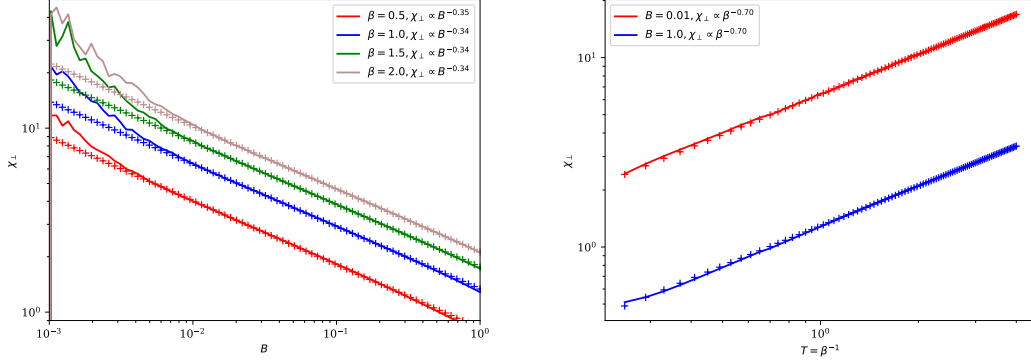


FIGURE 5.3 – ξ_{\perp} calculé via un fit de la distribution numérique par la distribution de Airy après 10^8 MC steps (5.15) en fonction du champ magnétique et à température constante (gauche) ou en fonction de la température et à champ magnétique constant (droite). Les fluctuations pour B petit s'expliquent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

5.3 Fonction de corrélation

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

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

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

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

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

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

En particulier, si

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

on obtient

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

Cela nous donne au final

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

5.4 Conclusion

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

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

Chapitre 6

Modèle Particle-Over-Particle

6.1 Particules indiscernables

Différence dans la fonction de partition en général

6.2 Avec le SOS

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

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

La matrice de transfert symétrisée devient donc

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

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

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

6.2.1 Modifications de l'algorithme Metropolis

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

6.3 Résultats modèle A

comment implémenter modèle A sur POP ? Différences avec SOS ?

6.4 Résultats modèle B

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

6.5 Résultats modèle A+B

certaines particules soumises à A, certaines à B.

Chapitre 7

A+B POP model : la totale

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

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

7.1 Le modèle C=A+B

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

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

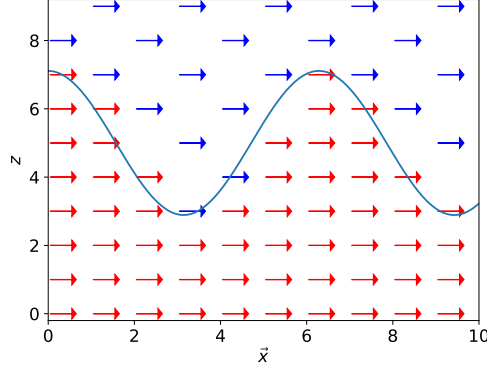


FIGURE 7.1 – Schéma d'un écoulement uniforme parallèle à l'interface dépendant de la phase. Ici, on prend un modèle d'interface ?? avec $\psi(\vec{x}) = \psi_2$ en dessous de l'interface et $\phi(\vec{x}) = \psi_1$ au dessus.

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

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

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

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

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

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

La fonction de partition s'écrit

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

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

La nouvelle fonction de partition est alors

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

explicitly given by

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

and

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

Taking the temporal Fourier transform, defined with the convention

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

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

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

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

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

where

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

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

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

Inverting the temporal Fourier transform then gives the effective evolution equation

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

7.2 Effective interface dynamics

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

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

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

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

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

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

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

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

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

and thus we find

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

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

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

and then integrating over z we obtain

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

The noise term ξ is given by

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

For small q we find

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

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

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

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

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

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

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

with

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

this corresponds to a correlation length

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

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

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

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

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

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

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

7.3 A model of active interfaces

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

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

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

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

Following the same arguments as above we find that

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

The equal time steady state height fluctuations thus have correlation function

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

7.4 Conclusions

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

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

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

formulated in a lattice based systems using the Hamiltonian

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

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

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

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

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

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

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

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

7.5 Acknowledgements

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

.1 Evaluating Fourier integrals

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

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

To evaluate $I(1)$ we now use

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

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

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

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

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

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

Conclusion et perspectives

Bibliographie

- [1] P. C. Hohenberg and B. I. Halperin. Theory of dynamic critical phenomena. *Reviews of Modern Physics*, 49(3) :435–479, July 1977.
- [2] A. J. Bray. Theory of phase-ordering kinetics. *Advances in Physics*, 43(3) :357–459, June 1994.
- [3] Pavel L Krapivsky, Sidney Redner, and Eli Ben-Naim. *A Kinetic View of Statistical Physics*. Cambridge University Press, Leiden, 2010. OCLC : 669127014.
- [4] Timothy Halpin-Healy and Yi-Cheng Zhang. Kinetic roughening phenomena, stochastic growth, directed polymers and all that. Aspects of multidisciplinary statistical mechanics. *Physics Reports*, 254(4-6) :215–414, March 1995.
- [5] John W Cahn and John E Hilliard. Free Energy of a Nonuniform System. I. Interfacial Free Energy. page 11.
- [6] 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.
- [7] 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.
- [8] L. Landau and E. Lifchitz. *Physique théorique - T9 Physique Statistique*. Éditions Mir Moscou. 1990.
- [9] 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.

- [10] 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.
- [11] H. B. G. Casimir. On the attraction between two perfectly conducting plates. *Royal Netherlands Academy of Arts and Sciences*, 51(7) :793–498, 1948.
- [12] Hrvoje Nikolić. Is zero-point energy physical? A toy model for Casimir-like effect. *Annals of Physics*, 383, 2017.
- [13] Van Duc Nguyen, Suzanne Faber, Zhibing Hu, Gerard H. Wegdam, and Peter Schall. Controlling colloidal phase transitions with critical Casimir forces. *Nature Communications*, 4(1), June 2013.
- [14] O. A. Vasilyev and S. Dietrich. Critical Casimir Forces for Films with Bulk Ordering Fields. *EPL (Europhysics Letters)*, 104(6) :60002, December 2013. arXiv : 1309.7302.
- [15] Andrea Pelissetto and Ettore Vicari. Critical Phenomena and Renormalization-Group Theory. *Physics Reports*, 368(6) :549–727, October 2002. arXiv : cond-mat/0012164.
- [16] 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.
- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] 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.

- [20] 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.
- [21] 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.
- [22] C. Hertlein, L. Helden, A. Gambassi, S. Dietrich, and C. Bechinger. Direct measurement of critical Casimir forces. *Nature*, 451(7175) :172–175, January 2008.
- [23] A. Gambassi, A. Maciołek, 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.
- [24] 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.
- [25] Hendrik Hobrecht and Alfred Hucht. Critical Casimir force scaling functions of the two-dimensional Ising model at finite aspect ratios. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2017(2) :024002, February 2017.
- [26] O. Vasilyev, A. Gambassi, A. Maciołek, and S. Dietrich. Monte Carlo simulation results for critical Casimir forces. *EPL (Europhysics Letters)*, 80(6) :60009, 2007.
- [27] O. Vasilyev, A. Gambassi, A. Maciołek, and S. Dietrich. Universal scaling functions of critical Casimir forces obtained by Monte Carlo simulations. *Physical Review E*, 79(4), April 2009.
- [28] David S. Dean and Ajay Gopinathan. Out-of-equilibrium behavior of Casimir-type fluctuation-induced forces for free classical fields. *Physical Review E*, 81(4) :041126, April 2010.
- [29] 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.

- [30] 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.
- [31] Kyozi Kawasaki. Diffusion Constants near the Critical Point for Time-Dependent Ising Models. I. *Physical Review*, 145(1) :224–230, May 1966.
- [32] Kyozi Kawasaki. Correlation-Function Approach to the Transport Coefficients near the Critical Point. I. *Physical Review*, 150(1) :291–306, October 1966.
- [33] J. Villain. Continuum models of crystal growth from atomic beams with and without desorption. *Journal de Physique I*, 1(1) :19–42, January 1991.
- [34] Z.-W. Lai and S. Das Sarma. Kinetic growth with surface relaxation : Continuum versus atomistic models. *Physical Review Letters*, 66(18) :2348–2351, May 1991.
- [35] 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.
- [36] T. A. de Assis and F. D. A. Aarão Reis. Dynamic scaling and temperature effects in thin film roughening. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2015(6) :P06023, 2015.
- [37] T. J. Oliveira and F. D. A. Aarão Reis. Maximal- and minimal-height distributions of fluctuating interfaces. *Physical Review E*, 77(4), April 2008.
- [38] Tapas Singha and Malay K Nandy. A renormalization scheme and skewness of height fluctuations in $(1 + 1)$ -dimensional VLDS dynamics. *Journal of Statistical Mechanics : Theory and Experiment*, 2016(2) :023205, February 2016.
- [39] 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.
- [40] Alan J. Bray, Andrea Cavagna, and Rui D. M. Travasso. Interface fluctuations under shear. *Physical Review E*, 64(1) :012102, June 2001.
- [41] 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.

- [42] 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.
- [43] Per Arne Rikvold and M. Kolesik. Microstructure and velocity of field-driven solid-on-solid interfaces : Analytic approximations and numerical results. *Physical Review E*, 66(6) :066116, December 2002.
- [44] 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.
- [45] Thomas HR Smith. *Driven interfaces in the Ising model*. PhD thesis, University of Bristol, 2010.
- [46] Thomas H R Smith, Oleg Vasilyev, Douglas B Abraham, Anna Maciołek, and Matthias Schmidt. Interfaces in confined Ising models : Kawasaki, Glauber and sheared dynamics. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 20(49) :494237, December 2008.
- [47] 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.
- [48] 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.
- [49] 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.
- [50] Ludovic Berthier and Jean-Louis Barrat. Nonequilibrium dynamics and fluctuation-dissipation relation in a sheared fluid. *The Journal of Chemical Physics*, 116(14) :6228–6242, April 2002.
- [51] David S. Dean, Paul Gersberg, and Peter C. W. Holdsworth. The effect of driving on model C interfaces. *arXiv :2001.04245 [cond-mat]*, January 2020. arXiv : 2001.04245.
- [52] Lars Onsager. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. *Physical Review*, 65(3-4) :117–149, February 1944.
- [53] 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.

- [54] 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.
- [55] 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.
- [56] Nigel Goldenfeld. *Lectures on Phase Transitions and the Renormalization Group*. CRC Press, 1 edition, March 2018.
- [57] 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.
- [58] 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.
- [59] 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.
- [60] 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.
- [61] H. J. F. Knops. Exact Relation between the Solid-on-Solid Model and the \mathcal{M}_{XY} Model. *Physical Review Letters*, 39(12) :766–769, September 1977.
- [62] 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.
- [63] 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.
- [64] 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.
- [65] V. Privman and N. M. Švrakić. Transfer-Matrix Spectrum for Systems with Interfaces. *Physical Review Letters*, 62(6) :633–636, February 1989.

- [66] I. Vaysburd. Critical RSOS models in external fields. *Nuclear Physics B*, 446(3) :387–404, July 1995.
- [67] 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.
- [68] R. A. Guyer. Sine-Gordon chain as a model for a two-dimensional interface. *Physical Review B*, 20(10) :4375–4381, November 1979.
- [69] 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.
- [70] S. T. Chui. Pinning of interfaces by three-dimensional potentials. *Journal of Physics : Condensed Matter*, 11(13) :2719, 1999.
- [71] 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.
- [72] J. T. Chalker. The pinning of an interface by a planar defect. *Journal of Physics A : Mathematical and General*, 15(9) :L481, 1982.
- [73] 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.
- [74] 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.
- [75] D. M. Kroll and R. Lipowsky. Pinning transitions in d -dimensional Ising ferromagnets. *Physical Review B*, 26(9) :5289–5292, November 1982.
- [76] D. M. Kroll and R. Lipowsky. Interface delocalization transitions in semi-infinite systems. *Physical Review B*, 28(11) :6435–6442, December 1983.
- [77] Alexis Casner and Jean-Pierre Delville. Laser-Induced Hydrodynamic Instability of Fluid Interfaces. *Physical Review Letters*, 90(14), April 2003.
- [78] 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.

- [79] 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.
- [80] M. E. J. Newman and G. T. Barkema. *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*. Oxford University Press, Oxford, New York, February 1999.
- [81] 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.
- [82] 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.