



**HAL**  
open science

# Instabilités et dynamiques de particules en interaction dans un système quasi-unidimensionnel.

Tommy Dessup

► **To cite this version:**

Tommy Dessup. Instabilités et dynamiques de particules en interaction dans un système quasi-unidimensionnel.. Physique [physics]. Université Paris 7 - Denis Diderot, 2016. Français. NNT: . tel-01404418

**HAL Id: tel-01404418**

**<https://u-paris.hal.science/tel-01404418>**

Submitted on 28 Nov 2016

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Public Domain



UNIVERSITÉ SORBONNE PARIS CITÉ  
UNIVERSITÉ PARIS DIDEROT (PARIS 7) - U.F.R. DE PHYSIQUE  
Laboratoire Matière et Systèmes Complexes  
École Doctorale Physique en Île-de-France (ED564)



## THÈSE DE DOCTORAT DE L'UNIVERSITÉ PARIS 7

Spécialité : Physique Théorique

en vue de l'obtention du diplôme de Docteur en physique

présentée par

Tommy DESSUP

sous la direction de Christophe COSTE et Michel SAINT JEAN

# Instabilités et dynamiques de particules en interaction dans un système quasi-unidimensionnel.

Jury composé de :

M. Gonzague AGEZ	Université Toulouse III	Examineur
M. Christophe COSTE	Université Paris 7	Co-Directeur de thèse
M. Thierry DAUXOIS	CNRS - ENS Lyon	Rapporteur
M. Francois PEETERS	Université d'Anvers - Belgique	Rapporteur
M. Michel SAINT JEAN	CNRS - Université Paris 7	Co-Directeur de thèse
M. Alessandro TALONI	Université de Milan - Italie	Examineur
M. Frédéric VAN WIJLAND	Université Paris 7	Examineur

Thèse soutenue le 22 novembre 2016



# Résumé

Dans cette thèse nous présentons une description théorique et numérique détaillée des instabilités et des dynamiques observées dans des systèmes quasi-unidimensionnels de particules en interaction répulsive soumises à un bain thermique.

Lorsque le confinement transverse décroît, ces systèmes présentent une transition structurelle les faisant passer d'une configuration en ligne à une configuration en zigzag, homogène ou inhomogène. Nous avons mis en évidence et expliqué le changement de caractère de cette bifurcation qui passe de sur-critique à sous-critique. La description quantitative de configurations d'équilibre stables, appelées « bulles », a été réalisée, celles-ci correspondent à une coexistence de domaines en ligne et en zigzag.

La dynamique des « bulles » a été ensuite étudiée à l'aide d'un modèle de particule effective diffusant dans un potentiel périodique induit par le caractère discret du système. Lorsque plusieurs « bulles » coexistent, elles interagissent et se réorganisent pour former une configuration stable à une seule « bulle » selon des mécanismes de coalescence ou de collapse. Nous avons montré que la topologie de la configuration peut induire des effets de frustration conduisant à une interaction attractive ou répulsive selon les cas.

Enfin, nous avons montré que les fluctuations transverses des particules divergent à l'approche des seuils de transition et expliqué ces comportements par l'apparition de modes mous dans le spectre de vibration. Cette description en modes propres nous a permis par ailleurs de comprendre l'augmentation observée de la diffusion d'une chaîne de particules dans un potentiel périodique asymétrique par rapport à une chaîne libre.

**Mots clés :** Théorie des bifurcations, Instabilités non-linéaires, Systèmes unidimensionnels, Ondes solitaires, Diffusion



# Remerciements

Je tiens tout particulièrement à remercier mes deux directeurs de thèse Michel et Christophe pour leur soutien inconditionnel tout au long de cette thèse, notamment pendant la rédaction de ce manuscrit.

Je tiens également à exprimer toute ma gratitude à Thierry Dauxois et François Peeters pour avoir accepté d'être les rapporteurs. Je voudrais spécifiquement remercier Thierry Dauxois pour sa relecture minutieuse, qui a permis la correction de diverses coquilles. Mes remerciements vont également aux examinateurs Gonzague Agez, Alessandro Taloni et Frédéric van Wijland pour avoir accepté cette tâche et en particulier pour avoir facilité l'organisation de la soutenance de thèse.

Je tiens également à remercier chaleureusement Alexandre Lantheaume et Yann Le Goas pour leur aide précieuse dans le montage de nouvelles cellules adaptées au dispositif expérimental. J'adresse un grand merci à tous les personnels BIATOSS, notamment Nadine Beyer, Lucie Bouchu, Carole Philippe-Barache, Marlène Hanoomie, Jean Hubert sans qui le travail au laboratoire ne serait pas possible.

Je remercie également tous les membres du laboratoire m'ayant permis de travailler dans une ambiance détendue et studieuse favorable à l'épanouissement de chacun. En particulier je souhaiterais remercier Cyprien Gay pour son aide précieuse à la création d'une page web dédiée à ce travail.

Mes remerciements vont également aux anciens doctorants de Michel et Christophe, Jean Baptiste Delfau et Gwennou Coupier pour avoir facilité la prise en main des simulations numériques et du dispositif expérimental. Je souhaite aussi remercier Julien Moukhtar pour son aide concernant les simulations numériques, ses discussions physiques très intéressantes et ses continuel encouragements.

Ces trois ans de thèses ont été l'occasion de découvrir l'ambiance de la 777 et la cohabitation avec un grand nombre de générations de doctorants. Je tiens à remercier Stéphanie pour ses passages peu nombreux mais toujours chaleureux, Paul pour des discussions théâtrales sur le théâtre, Stéphane pour ses quelques échanges de volley-ball et ses précieuses heures de « manip' » en compagnie de Yves Couder, Alexis pour les nombreuses discussions politique et autres, ses conseils et sa passion

pour l'huile silicone qui fait couiner les chaussures, Matthieu pour ses discussions scientifiques et ses articles toujours pertinents, Maxime pour son enthousiasme de tous les jours et sa persévérance sans faille. Mes remerciements vont également aux nouveaux doctorants arrivés pour prolonger la vie de la 777, Marc, Nicolas, Menghua, Antoine, Rémy O., Rémy H., Riccardo et Amir. Je tiens tout particulièrement à remercier Manghua pour les nombreux échanges que nous avons pu avoir sur l'actualité et pour m'avoir permis d'apprendre énormément de choses sur la Chine.

En plus des doctorants je remercie les permanents « piliers » de la 777, Chi-Tuong toujours adossé sur son pull bleu clair disposé sur sa chaise le jour de l'installation et à veiller au bon fonctionnement de la sacro-sainte machine à café, Philippe et Julien Dervaux toujours partants pour étudier le mouvement des algues vertes sous toutes leurs formes, Adrien pour son infernale machine à lancer les dés intarissable source de déconcentration mais également d'étonnement, et Alexis Peaucelle toujours en alternance entre l'Angleterre et la France.

Ces trois années de thèse ont également été l'occasion de s'épanouir en dehors du cadre du laboratoire. Je tiens pour cela à remercier tout particulièrement mes colocataires Antoine, Bruno, Camille, Camille, Marie, Marion, Nelly et Thibault, et tous les invités de passages plus ou moins long Andreas, Angeline, Martin, Mirène et Peter. Je remercie particulièrement Marion pour ses très importantes relectures et son soutien inconditionnel qui m'a permis de garder confiance tous les jours. Je souhaiterais dire un grand merci à Big-Joe, Benoit, Kevin, Matthieu, Sophie et tous mes amis du Touvet pour leur soutien et l'extraordinaire intérêt qu'ils ont porté à mon sujet de thèse toujours un peu trop long à expliquer. Je voudrais remercier tout particulièrement Achille pour tous les moments que l'on a vécu ensemble depuis le berceau chez la nourrice. Et enfin je tiens à dédier ce travail en particulier à Régis, à tous les membres de ma famille et à mes parents pour l'extraordinaire liberté qu'ils m'ont laissé dans la direction de mes études et pour leur implication et leur support quotidien.

# Table des matières

<b>Introduction</b>	<b>13</b>
<b>I Transition zigzag, sous-criticalité et structures localisées</b>	<b>21</b>
<b>1 Transition zigzag : instabilité d'une chaîne rectiligne de particules</b>	<b>23</b>
1.1 Introduction . . . . .	23
1.2 À propos de la transition zigzag . . . . .	24
1.3 Mode mou de la configuration en ligne au voisinage de la transition . . . . .	25
1.4 Conclusion . . . . .	28
<b>2 Stabilité de la configuration zigzag : analyse linéaire</b>	<b>31</b>
2.1 Introduction . . . . .	31
2.2 Fréquences propres de vibration de la configuration zigzag . . . . .	32
2.3 Domaine de stabilité de la configuration zigzag . . . . .	37
2.3.1 Analyse générale de la perte de stabilité du zigzag . . . . .	38
2.3.2 Cas des interactions de type loi de puissance . . . . .	40
2.3.3 Cas des interactions de portée finie . . . . .	43
2.3.4 Influence du nombre de particules . . . . .	45
2.4 Seuils de perte de stabilité du zigzag . . . . .	46
2.5 Conclusion . . . . .	48
<b>3 Modèle non linéaire de la transition zigzag</b>	<b>51</b>
3.1 Introduction . . . . .	51
3.2 Configuration zigzag inhomogène dans la zone instable . . . . .	52
3.2.1 Configurations et coexistence de phases à l'intérieur du domaine d'instabilité	53
3.2.2 Un modèle simple de la coexistence de phases . . . . .	55
3.3 Comportement hystérétique de la bifurcation zigzag . . . . .	57
3.4 Modèle non linéaire de la transition zigzag dans la limite thermodynamique . . . . .	60
3.4.1 Invariance par translation et couplage avec le mode de phase . . . . .	60
3.4.2 Validation du choix des lois d'échelle . . . . .	62
3.4.3 Caractère sous-critique de la bifurcation . . . . .	64
3.4.4 Estimations numériques de $\alpha$ . . . . .	67
3.5 Conclusion . . . . .	69

<b>4</b>	<b>Influence de la température sur la bifurcation sous-critique</b>	<b>71</b>
4.1	Introduction . . . . .	71
4.2	Caractérisation des configurations à température non nulle . . . . .	73
4.2.1	Stabilité des bulles à température non nulle . . . . .	73
4.2.2	Paramètre d'ordre en présence de bruit thermique . . . . .	73
4.3	Comportement du système en présence de température . . . . .	76
4.3.1	Distinction entre régime hystérétique et intermittence . . . . .	76
4.3.2	Évolution des diagrammes d'hystérésis avec la température . . . . .	77
4.4	Régime d'hystérésis : évolution des seuils d'hystérésis ( $T < T_C$ ) . . . . .	80
4.5	Régime d'intermittence et paysage énergétique ( $T > T_C$ ) . . . . .	82
4.5.1	Temps de résidence et paysage énergétique . . . . .	82
4.5.2	Reconstruction du cycle d'hystérésis à $T=0$ K . . . . .	84
4.6	Conclusion . . . . .	86
<b>5</b>	<b>Configurations stationnaires inhomogènes</b>	<b>87</b>
5.1	Introduction . . . . .	87
5.2	Configurations stationnaires en système infini . . . . .	88
5.2.1	Solutions « Parois » . . . . .	89
5.2.2	Solutions « Bulles » . . . . .	90
5.2.3	Solutions « Zigzag modulés » . . . . .	92
5.3	Solution pour les systèmes ayant un nombre fini de particules . . . . .	94
5.3.1	Bulles dans les systèmes de taille finie . . . . .	94
5.3.2	Structure en zigzag modulé . . . . .	97
5.4	Comparaison énergétique des configurations . . . . .	100
5.5	Conclusion . . . . .	102
<b>II</b>	<b>Dynamique des structures localisées dans un système quasi-1D discret de particules</b>	<b>103</b>
<b>6</b>	<b>Diffusion des bulles</b>	<b>105</b>
6.1	Introduction . . . . .	105
6.2	Caractéristiques dynamiques d'une bulle en mouvement . . . . .	107
6.2.1	« Masse » des bulles . . . . .	107
6.2.2	Modulation de l'énergie potentielle du système . . . . .	108
6.3	Détermination de la position d'une bulle en mouvement . . . . .	111
6.4	Diffusion libre des bulles à haute température . . . . .	112
6.4.1	Déplacement quadratique moyen des bulles . . . . .	112
6.4.2	Diffusion libre des bulles à temps long . . . . .	113
6.4.3	Comportement à temps court des bulles . . . . .	116
6.5	Piégeage et mouvement activé des bulles à basse température . . . . .	117
6.5.1	Piégeage et mouvement activé . . . . .	117
6.5.2	Diffusion libre pour des valeurs spécifiques du confinement . . . . .	119

6.6	Conclusion	122
<b>7</b>	<b>Interaction entre bulles</b>	<b>125</b>
7.1	Introduction	125
7.2	Interaction entre bulles	127
7.2.1	Configurations Non Frustrées et Frustrées de paires de bulles	127
7.2.2	Interaction entre bulles dans le modèle continu	128
7.2.3	Modulation de l'énergie potentielle d'interaction	133
7.3	Mouvements des bulles à température nulle	133
7.3.1	Mouvement de bulles dans des systèmes-NF	133
7.3.2	Mouvement de bulles dans des systèmes-F	136
7.4	Réorganisation vers une configuration d'équilibre	138
7.4.1	Les deux chemins vers un état d'équilibre stable	138
7.4.2	Le processus de coalescence	139
7.4.3	Le processus de collapse	141
7.4.4	Configuration finale	143
7.5	Conclusion	144
<b>III</b>	<b>Diffusion de deux chaînes couplées</b>	<b>145</b>
<b>8</b>	<b>Comportement diffusif d'une chaîne de particules en zigzag</b>	<b>147</b>
8.1	Introduction	147
8.2	Méthode de reconstruction des DQM à partir de la description en modes de vibration	148
8.3	Méthode de reconstruction des DQM pour la configuration zigzag	152
8.4	Divergence du DQM transverse et transition zigzag	156
8.4.1	Passage de la configuration en ligne à la configuration en zigzag	157
8.4.2	Passage de la configuration en zigzag à la configuration en ligne	159
8.5	Modification du DQM et déstabilisation du zigzag vers les configurations inhomogènes	162
8.5.1	Évolution de la variance transverse à la transition homogène/inhomogène	162
8.5.2	Évolution de la variance longitudinale à la transition homogène/inhomogène	165
8.6	Conclusion	167
<b>9</b>	<b>Diffusion d'une chaîne dans un potentiel périodique</b>	<b>169</b>
9.1	Introduction	169
9.2	Quelques résultats antérieurs	171
9.3	Mouvement d'une chaîne dans un potentiel statique : influence de la commensurabilité	172
9.3.1	Présentation d'un modèle à deux particules par période	173
9.3.2	Validation du modèle par comparaison avec des simulations	179
9.3.3	Interprétation des observations en îlot de Wigner	181
9.4	Mouvement d'une chaîne dans un potentiel fluctuant	183
9.4.1	Rôle des fluctuations sur le mouvement de la chaîne de particule et configuration zigzag	184

9.4.2 Mécanismes de transmission des fluctuations . . . . .	185
9.5 Conclusion . . . . .	191
<b>Conclusion</b>	<b>195</b>
<b>Annexes</b>	<b>203</b>
<b>A Détails sur les simulations</b>	<b>203</b>
A.1 Description générale des simulations . . . . .	203
A.1.1 Système en général . . . . .	203
A.1.2 Algorithme de Verlet . . . . .	204
A.2 Simulations « Analyse de stabilité linéaire » . . . . .	205
A.3 Simulations « Modèle non linéaire » . . . . .	206
A.4 Simulations « Influence de la température » . . . . .	206
A.5 Simulations « Diffusion des bulles » . . . . .	207
A.6 Simulations « Interaction entre bulles » . . . . .	207
A.7 Simulations « Chaîne dans un potentiel périodique » . . . . .	208
<b>B Détails sur les expériences</b>	<b>209</b>
B.1 Principe de l'expérience . . . . .	210
B.1.1 Vue d'ensemble du montage . . . . .	210
B.1.2 Description des interactions entre billes . . . . .	211
B.1.3 Détermination de la température effective . . . . .	212
B.2 Confinement quasi-uni dimensionnel annulaire des particules . . . . .	213
B.2.1 Cellules à confinement solide . . . . .	213
B.2.2 Cellules à confinement électrostatique . . . . .	215
<b>Bibliographie</b>	<b>219</b>

# Introduction



Un très grand nombre de systèmes physiques ou biologiques sont constitués de particules en interaction répulsive confinées dans des canaux étroits leur interdisant tout croisement, les obligeant ainsi à se déplacer de manière quasi-unidimensionnelle. On observe par exemple cette organisation dans des systèmes d'ions confinés par laser dans des pièges de Paul [95, 96, 28, 83], de particules colloïdales paramagnétiques confinées optiquement [79], de poussières confinées électrostatiquement à l'intérieur de plasmas chauds [79, 82, 98, 97] ou bien dans des systèmes de billes millimétriques en interaction électrostatique [20, 32, 35]. On la retrouve également au niveau de la cellule où des ions ou des molécules s'alignent les uns à la suite des autres pour traverser la membrane dans de très fins canaux [68].

Les premiers travaux, tant expérimentaux que théoriques, consacrés à ces systèmes concernent leurs configurations d'équilibre. Elles varient d'un système à l'autre selon le type d'interaction entre les particules, l'intensité du confinement transverse, la densité de particules ou la taille des systèmes. Ainsi dans des systèmes de particules en interaction à longue portée, la configuration d'équilibre à fort confinement correspond à des particules toutes alignées le long de l'axe caractérisant le minimum du potentiel de confinement. Lorsque le confinement est réduit, cette configuration en ligne se déstabilise, le système s'organisant alors selon une configuration homogène appelée *zigzag* dans laquelle les particules sont toutes distribuées en quinconce pour former un système de deux chaînes couplées. Ces résultats ont été prouvés analytiquement pour un système de particules en interaction coulombienne [52, 56, 89, 88] puis confirmés par des études expérimentales sur des chaînes d'ions confinés dans une géométrie annulaire par des pièges de Paul [12, 13] ou par des pièges magnétiques [91, 57]. La taille du système intervient également tout comme le nombre de particules. Pour des systèmes de taille finie et avec des conditions aux bords cycliques, la configuration en zigzag homogène n'est observée que pour un nombre pair de particules. Dans le cas contraire il a été montré [99] qu'une transition structurale existe tout de même mais que les configurations d'équilibre prises par le système après la transition sont inhomogènes, des particules en quinconce et en ligne coexistant à l'intérieur d'un même système. Ces mêmes configurations inhomogènes ont été également observées plus récemment pour des systèmes de particules confinées dans un canal rectiligne de longueur finie, les particules en quinconce étant dans ce cas localisées au centre de la cellule.

Lorsque les interactions entre particules sont de courte portée, le système, quelle que soit sa taille, présente d'autres transitions que cette seule transition zigzag. En effet nous montrerons que dans ce cas lorsque la force de confinement est réduite, la structure en double chaîne ne reste stable que pour un domaine restreint de confinement proche de la transition zigzag puis devient à son tour instable. Le système présente alors une structure inhomogène. Il ne retrouve une configuration en quinconce stable qu'à très faible confinement, loin de la transition zigzag. Par exemple, des configurations stables avec une structure en zigzag localisée et entourée de particules en ligne ont été observées pour des poussières chargées dans des plasmas chauds confinées dans une cellule annulaire, par Sheridan *et al.* [98, 97]. Les mêmes configurations d'équilibre inhomogènes ont été également

observées dans des expériences de colloïdes piégés [103] ou des systèmes de billes métalliques en interaction électrostatique [30, 35, 34, 37].

Dans toute la suite du manuscrit nous nous restreindrons, sauf mention explicite, à des systèmes dans lesquels les particules sont en interaction à courte portée, c'est-à-dire ne dépassant pas quelques fois la distances entre particules<sup>1</sup>. Nous considérerons des systèmes infinis ou des systèmes ayant un nombre pair de particules et une cellule de confinement qui pourra être annulaire ou rectiligne avec des conditions aux bords périodiques. Nos résultats seront obtenus soit grâce à des modèles analytiques soit par des simulations numériques dont les détails sont fournis en annexes.

Dans la première partie de cette thèse il s'agira d'étudier ces transitions structurales et leur nature, d'identifier les différents domaines d'existence et la forme de chacune des structures d'équilibre observées. Tous ces systèmes peuvent être modélisés par des particules ponctuelles en interaction répulsive confinées transversalement par un potentiel harmonique de raideur  $\beta$  (l'influence de l'anharmonicité du confinement a été étudiée dans la référence [69]). La *transition zigzag* peut être facilement décrite dans ce cadre. La configuration d'équilibre est caractérisée par un unique paramètre  $h$ , appelé la *hauteur du zigzag*, qui définit la distance transverse des particules à l'axe de confinement. Deux énergies sont en compétition pour établir la configuration d'équilibre : l'énergie d'interaction répulsive entre les particules qui tend à éloigner les particules et l'énergie de confinement transverse qui tend à les aligner. L'énergie totale de ces systèmes homogènes ne dépend que de la hauteur  $h$ . Le paysage énergétique du système de part et d'autre de ce seuil est présenté figure 1. Il existe une valeur critique  $\beta_{ZZ}$  caractérisant le seuil de la transition. Pour un confinement  $\beta > \beta_{ZZ}$ , le minimum d'énergie est obtenu pour  $h = 0$  et le système présente une configuration d'équilibre en ligne. À l'inverse pour  $\beta < \beta_{ZZ}$ , la solution  $h = 0$  devient un maximum local d'énergie tandis qu'apparaissent deux minima de l'énergie symétriques à  $\pm h$  ( $h > 0$ ), le système adopte alors une configuration zigzag ou zagzig. Ce changement de conformation s'explique par le fait que le coût énergétique pour les particules qui doivent « monter » le long du potentiel de confinement est contrebalancé par une diminution de l'énergie d'interaction entre particules due à leur plus grand éloignement les unes des autres.

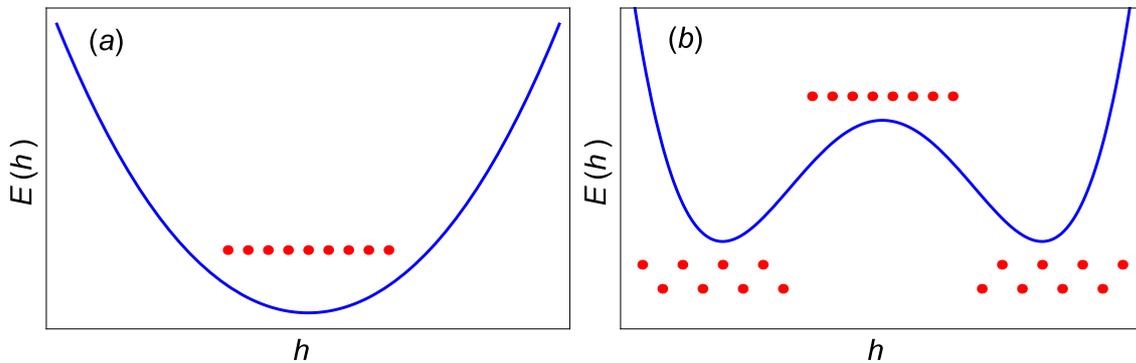


FIGURE 1 – Représentation schématique de l'énergie  $E(h)$  d'une configuration homogène en fonction de la hauteur de zigzag  $h$ , en (a) pour  $\beta > \beta_{ZZ}$  et en (b) pour  $\beta < \beta_{ZZ}$ , avec un schéma des configurations associées aux extrema d'énergie.

1. Les notions de courte et longue portée sont précisées aux chapitres 2 et 3.

En considérant l'intensité du confinement comme un paramètre de contrôle et la hauteur du zigzag  $h$  comme un paramètre d'ordre, on retrouve ici les caractéristiques d'une bifurcation fourche sur-critique équivalent dans le formalisme des transitions de phases à une transition du second ordre de Ginzburg-Landau [89, 56, 52, 100]. Le caractère sur-critique de cette transition zigzag a été confirmé dans de nombreux systèmes expérimentaux notamment dans des cellules rectilignes finies pour lesquelles le zigzag est inhomogène, le paramètre d'ordre étant alors défini comme la position transverse de la particule la plus éloignée de l'axe du confinement.

Le premier chapitre rappellera les principaux résultats concernant cette transition zigzag [30]. Nous présenterons en particulier l'évolution de l'énergie du système avec le confinement et l'expression de la valeur du confinement seuil  $\beta_{ZZ}$ . Nous reviendrons également sur le calcul des modes propres de vibration de la chaîne rectiligne pour montrer comment la décroissance de la fréquence de l'un d'eux lorsque le confinement décroît annonce la transition zigzag, la transition ayant lieu lorsque la fréquence de ce « mode mou » s'annule.

Le second chapitre sera consacré à l'étude de la stabilité de la configuration zigzag proprement dite. À notre connaissance les conditions qui rendent cette configuration instable n'avaient encore jamais été caractérisées. Pour les identifier, le calcul des modes propres de vibration de la configuration zigzag a été réalisé pour une interaction quelconque entre particules. Nous avons ainsi mis en évidence l'existence de modes dont la fréquence devient imaginaire pure lorsque le confinement décroît et avons pu déterminer les conditions pour lesquelles cette signature de l'instabilité du zigzag apparaît. Le rôle majeur de la portée  $\lambda_0$  de l'interaction a pu notamment être mis en évidence. La stabilité des zigzag formés à partir de particules en interaction coulombienne, tels que les ions piégés [52, 28, 56, 100] a été ainsi expliquée tout comme nous avons pu justifier que la configuration en zigzag devient instable pour des interactions dipolaires telles qu'entre particules colloïdales [8, 103], pour des interactions de portée finie telles qu'entre poussières dans les plasmas [82, 98, 97] ou entre des billes en interaction électrostatique écrantée [30, 39, 37]. Des critères généraux de stabilité ont pu être analytiquement établis. Nous montrerons ainsi que pour un rapport  $\lambda_0/d$  donné, il existe un domaine de hauteurs de zigzag, caractérisé par deux hauteurs seuils  $hc_1$  et  $hc_2$ , entre lesquelles cette configuration ne peut être stable. Ces critères expliqueront aussi pourquoi, tout paramètre étant identique par ailleurs, de petits systèmes peuvent être stables alors que de plus grands ne le sont pas.

Reste à comprendre la nature et la forme des configurations observées lorsque le zigzag homogène est instable. Le chapitre 3 y sera consacré. Après avoir décrit les configurations observées dans le domaine d'instabilité du zigzag et les cycles d'hystérésis associés aux changements de configurations lorsque le confinement croît puis décroît lentement dans le temps, un modèle simple de coexistence de phases sera présenté. S'il permet de rendre compte correctement de la forme des configurations observées, il n'explique ni le mécanisme physique à l'origine de ces structures inhomogènes ni les cycles d'hystérésis observés. Les résultats de la littérature suggéraient que dans certaines conditions la bifurcation puisse être sous-critique plutôt que sur-critique. L'origine de ce changement de caractère de la bifurcation zigzag est en fait une question générale et se retrouve dans le cadre plus vaste de la théorie des bifurcations. En effet il a déjà été mentionné de nombreux problèmes d'instabilité de systèmes pour lesquels un tel phénomène a été observé comme par exemple l'apparition de rouleaux de convection [73, 11, 85, 10], d'ondes de surface [41], ou de fronts

de solidification [71, 47, 90] dans des géométries étendues ou annulaires. Dans tous ces systèmes, une bifurcation fourche sur-critique était attendue, cependant les expériences dans des cellules périodiques ont montré des comportements sous-critiques. Aussi avons-nous développé un modèle non linéaire de transition zigzag couplant les champs de déplacement longitudinal et transverse des particules et ainsi construit analytiquement la forme normale de la bifurcation. Les équations dynamiques de ces deux champs ont été établies pour ensuite en calculer les solutions stationnaires. Nous montrerons qu'à cause de l'invariance par translation ou par rotation des systèmes considérés et du couplage induit par les non-linéarités entre le mode de Goldstone associé à cette invariance et le mode mou lié à l'instabilité, la bifurcation peut devenir sous-critique [49, 18, 48]. Les conditions pour lesquelles la bifurcation change de caractère seront également précisées. Soulignons que dans la description de ce mécanisme présentée dans la référence [18], les termes de la forme normale de la bifurcation sont déduits uniquement à partir d'arguments de symétrie mais les valeurs numériques des coefficients ne sont pas directement données par l'analyse. Dans notre approche, la dynamique microscopique sous-jacente à la transition zigzag est au contraire connue à partir des équations dynamiques du système, ce qui offre l'opportunité de déterminer explicitement et non plus phénoménologiquement la forme normale et ainsi de connaître l'expression de ses coefficients en fonction des paramètres du problème.

Ce modèle a été développé à température nulle. Pour pouvoir l'utiliser pour interpréter les phénomènes observés dans la littérature ou dans nos simulations à température non nulle, il nous a fallu étudier la robustesse de ses conclusions en présence d'un bruit thermique. C'est pourquoi, après avoir montré que les structures inhomogènes restent stables dans une large gamme de température, le chapitre 4 sera consacré à l'influence d'un bruit thermique sur la bifurcation fourche sous-critique, l'accent étant mis sur l'évolution des cycles d'hystérésis avec la température. Deux régimes seront identifiés selon la température. Un régime dit « d'hystérésis » observé à basse température pour lequel les deux états de la boucle restent distinguables et les boucles d'hystérésis bien discernables et un régime dit « d'intermittence » dans lequel l'agitation thermique est suffisante pour que le système bascule d'une configuration à l'autre durant la mesure à confinement donné, « floutant » puis effaçant progressivement les boucles d'hystérésis. Nous montrerons toutefois que paradoxalement l'étude des temps de résidences du système dans chacun des états dans ce régime à haute température permet de reconstruire le diagramme d'hystérésis observable à basse température. Soulignons que dans ce chapitre nous traiterons uniquement du rôle de la température sur la transition structurelle du système, les comportements dynamiques des structures liés à l'agitation thermique seront traités dans la partie II suivante.

Enfin nous présenterons dans le chapitre 5 la détermination complète des formes des configurations inhomogènes prises par le système. Ces formes seront calculées à partir du modèle non linéaire présenté au chapitre 3. Dans ce cadre, elles apparaissent comme des solutions stationnaires des équations de mouvement issues du modèle non linéaire. Deux formes particulières seront détaillées. L'une correspondant à une onde solitaire, c'est-à-dire à une solution localisée d'amplitude non nulle qui sera appelée *bulle*, et l'autre qui n'est qu'une simple modulation de la hauteur du zigzag sur toute l'étendue du système. Les formes prédites seront comparées quantitativement aux configurations inhomogènes observées en simulation, un très bon accord étant trouvé et ce jusque dans les détails des configurations. Notons que ces résultats constituent la première validation quantitative précise

du mécanisme de couplage de modes au seuil d'une bifurcation sous-critique.

Après avoir exploré les propriétés structurales de ces systèmes, nous nous sommes intéressés à leurs dynamiques sous l'influence d'un bain thermique. Les propriétés dites « Single File Diffusion » d'une chaîne linéaire de particules sont connues depuis longtemps pour une interaction de type cœur dur [64, 76, 104] et plus récemment pour une interaction à plus longue portée [72, 31, 32]. En particulier, il a été montré dans ce dernier cas que les propriétés dynamiques des particules pouvaient être déterminées en calculant et superposant les diffusions des coordonnées normales associées aux modes propres de vibration du système [30]. Ce modèle de reconstruction sera rappelé au chapitre 8. En revanche peu d'études existent dans la littérature concernant la dynamique de ces systèmes au-delà du seuil de transition zigzag. Nous nous sommes donc intéressés à deux de ces aspects, à chaque fois pour leur intérêt intrinsèque mais aussi parce que les systèmes étudiés peuvent être considérés comme des systèmes modèles, ces études permettant alors de répondre à des questions d'ordre plus général.

Le premier de ces sujets constituera la deuxième partie de ce mémoire et concerne les mouvements des structures inhomogènes et leurs interactions. Le mouvement d'une seule bulle sera décrit au chapitre 6. En effet, si elles sont stables sur une large gamme de température, les bulles ne restent pas statiques mais se déplacent sans déformation de leur enveloppe sur de longues distances sous l'influence du bruit thermique. Ce déplacement ne correspond pas à un mouvement longitudinal d'ensemble des particules constituant la bulle, mais est celui de l'enveloppe de la bulle par rapport à la chaîne de particules qui, elles, se déplacent relativement peu. Ce mouvement de l'onde solitaire induit un renouvellement permanent et complet des particules participant à la forme de bulle et leur réorganisation le long de l'enveloppe. Ceci conduit à ce que l'énergie potentielle du système dépende de la position de la bulle. Cette énergie présente ainsi une modulation périodique avec comme période la distance moyenne entre particules et une amplitude de modulation  $\Delta E$  qui change avec la raideur du confinement transverse. Nous montrerons que le mouvement de la bulle à haute température ( $k_B T > \Delta E$ ) est un processus diffusif décrit comme la diffusion libre d'une particule effective de masse  $M_B$  ayant un coefficient de diffusion  $D_B = k_B T / M_B \gamma$ , où  $T$  et  $\gamma$  sont respectivement la température et le coefficient de dissipation du système. La « masse »  $M_B$  de la bulle sera calculée à l'aide du modèle non linéaire développé précédemment et nous verrons qu'elle ne dépend que de la forme de l'enveloppe. En revanche, à basse température ( $k_B T \lesssim \Delta E$ ), le mouvement de la bulle n'est plus libre mais se trouve au contraire dominé par la modulation de l'énergie potentielle qu'il induit, la bulle pouvant même rester immobile à très basse température. Nous montrerons que les mouvements observés correspondent à ceux de la particule effective diffusant sur un potentiel périodique dont l'amplitude de modulation est égale à  $\Delta E$ .

Lorsque le confinement est à l'intérieur de la zone d'instabilité du zigzag, le système de particules peut présenter des configurations métastables faites de plusieurs bulles identiques. Dans les systèmes de grandes tailles, leur durée de vie est suffisante pour que l'on puisse observer leurs interactions et étudier la façon dont elles se réorganisent pour ne former finalement qu'une seule bulle correspondant à l'état d'équilibre. Nous montrerons dans le chapitre 7 que l'interaction entre bulles dépend crucialement du nombre de particules entre les bulles. Si ce nombre permet que les distributions en quinconce des particules des deux bulles soient compatibles et autorise la formation d'une

bulle unique sans contrainte, leur interaction est *attractive*. À l'inverse, si les positions relatives des particules dans les deux bulles interdit cette réorganisation sans défaut topologique, l'interaction sera répulsive. L'ensemble des deux bulles sera dit *Non-Frustré* dans le premier cas et *Frustré* dans le second. Soulignons qu'il s'agit là de comportements intrinsèquement liés au caractère discret du système, cette distinction n'ayant pas de sens pour des systèmes continus pour lesquels l'interaction serait toujours attractive. Après avoir donné une interprétation simple de cette différence de comportement basée sur le déphasage des champs de déplacement transverse de chaque bulle, nous détaillerons un calcul perturbatif issu de notre modèle non linéaire rendant compte des principales caractéristiques de l'interaction entre structures localisées. Par ailleurs, deux processus de réorganisation vers un état à une seule bulle ont été identifiés et seront détaillés. Le premier correspond au rapprochement et à la fusion des deux bulles. Ce processus dit de *coalescence* est uniquement possible pour les configurations Non-Frustrées pour lesquelles les bulles peuvent s'attirer. Le second correspond à la disparition d'une bulle, qui semble se vider au profit de la seconde. Ce processus appelé *collapse* est activé thermiquement et est dominant à haute température. Ce processus ne nécessitant pas la mise en contact des bulles, il peut intervenir à la fois pour les systèmes Frustrés et Non-Frustrés, la configuration finale atteinte étant la même dans les deux cas. Au-delà de ces résultats concernant les structures localisées proprement dites, soulignons que ces études nous éclairent aussi sur le problème plus général de la dynamique des ondes solitaires en présence d'un bain thermique dans le cas d'un système discret, la majeure partie des résultats existants se limitant à des systèmes continus.

La dernière partie de cette thèse sera consacrée à la dynamique, non plus des structures collectives du système, mais à celle des particules elles-mêmes. Notre intérêt s'est porté tout d'abord sur le cas des particules appartenant à des configurations homogènes. Nous verrons, dans le chapitre 8, que l'étude des *Déplacements Quadratiques Moyen* (DQM) de ces particules permet notamment d'identifier avec précision les valeurs seuils des confinements pour lesquelles apparaissent les transitions de phases configurationnelles décrites précédemment. En effet, comme nous l'avons déjà mentionné les DQM transverses des particules peuvent être reconstruits à partir de la superposition de ceux des coordonnées normales associées aux modes propres de vibration du système, chacun d'eux saturant pour une valeur inversement proportionnelle au carré de sa fréquence propre. Une divergence de ces DQM est ainsi observée à chaque transition structurale puisque chacune d'elle est associée à un mode mou dont la fréquence devient nulle à la transition. Dans un premier temps on considèrera le cas de la transition zigzag. Celle-ci avait été étudiée lorsque le confinement transverse décroît, à partir de la configuration d'équilibre en ligne. Nous l'étudions ici à confinement transverse croissant, lorsque la configuration d'équilibre est un zigzag. Après avoir calculé les modes propres de vibration d'une double chaîne homogène et le DQM transverse correspondant, l'évolution de sa divergence à l'approche de la transition zigzag sera déterminée et comparée aux résultats obtenus par simulation. Nous constaterons que, malgré les nombreuses transitions entre les configurations zigzag et zagzig, au voisinage du seuil la variation du DQM transverse avec la hauteur du zigzag à confinement transverse croissant est identique à celle calculée à confinement transverse décroissant. On étendra ensuite l'analyse des DQM aux seuils de transitions faisant passer le système d'une configuration en zigzag à une configuration bulle. Nous montrerons en particulier que l'exposant

critique caractérisant la divergence du DQM à l'approche de la transition diffère de celui observé au seuil de transition zigzag. Par ailleurs, nous verrons que le couplage entre les déplacements longitudinaux et transverse entraîne une modification simultanée de leurs DQMs au seuil de la transition zigzag vers bulle, contrairement à la transition zigzag dont la signature n'est visible que sur le DQM transverse.

Par ailleurs la configuration zigzag homogène peut être considérée comme un système de deux chaînes identiques couplées, chacune se déplaçant dans le potentiel créé par l'autre. Cette opportunité nous permettra d'exploiter dans le chapitre 9 l'étude de la dynamique de leurs particules pour mieux comprendre la diffusion (dans la limite de déplacements inférieurs à la période du potentiel) d'une chaîne sur un potentiel périodique fluctuant pour laquelle peu de résultats existent dans la littérature. Nous examinerons tout d'abord le cas d'un potentiel statique. Dans le cas d'une chaîne ayant le même nombre de particules que le potentiel a de puits, nous montrerons que l'on retrouve le comportement des DQM longitudinaux des particules d'une chaîne libre ou piégée selon la hauteur de barrière du potentiel qui, dans la représentation initiale, rend compte de la distance entre chaînes. Les fluctuations de position du potentiel seront ensuite prises en compte, l'hypothèse étant faite qu'il puisse exister un transfert de fluctuations entre le potentiel et les particules de la chaîne. Pour ce faire, les notions de température effective et de potentiel moyen seront définies. Dans le cas de deux chaînes identiques, nous retrouverons ainsi les valeurs des DQM obtenues directement pour la configuration zigzag à partir de l'étude des modes propres de vibration, accord qui valide la procédure proposée pour décrire cette dynamique. Le résultat le plus surprenant est obtenu dans le cas d'un système dans lequel chaque période du potentiel contient plusieurs particules de la chaîne, c'est à dire deux chaînes couplées mais ayant un nombre différent de particules, leurs nombres restant néanmoins commensurables. De telles configurations ne peuvent bien entendu pas exister dans une géométrie en zigzag linéaire cependant elles correspondent aux figures d'équilibre observées dans les îlots de Wigner, systèmes de particules en interaction répulsives confinées dans un disque qui s'organisent en couronnes concentriques ayant chacune un nombre spécifique de particules<sup>2</sup>. En nous appuyant sur un modèle analytique décrivant le mouvement de particules localisées au maximum et au minimum du potentiel, nous montrerons que lorsque les courbures du potentiel à ces extrema sont différentes, les DQM longitudinaux de la chaîne soumise au potentiel peuvent être supérieurs à ceux de la chaîne libre. Nous discuterons en détails l'origine de cette surprenante augmentation de la mobilité des particules et verrons qu'elle peut être quantitativement attribuée à l'ouverture d'une bande interdite dans le spectre de vibration de la chaîne due à la perturbation créée par le potentiel sous-jacent. Nous montrerons que ce mécanisme rend compte qualitativement d'un phénomène qui avait été observé dans les îlots de Wigner mais qui n'avait pas été expliqué [26]. Une généralisation au cas de plus de deux particules par période sera ensuite discutée.

Tous ces résultats théoriques et obtenus par simulation ont été réalisés avec des particules ponctuelles cependant dans de nombreux systèmes physiques les particules sont de taille finie. Pour vérifier que l'on retrouve bien les résultats que nous présentons dans de tels systèmes, nous avons

---

2. Par exemple un îlot de 19 particules est constitué de trois couronnes portant respectivement (1/6/12) particules tandis qu'un îlot de 9 particules n'aura que deux couronnes avec (3/6) particules [24, 26, 23].

réalisé des expériences à l'aide de billes métalliques en interaction électrostatique. La description du montage ainsi que les modifications que nous avons réalisées afin de pouvoir faire varier le confinement des billes sont présentées dans l'annexe **B** et quelques résultats sont présentés sur le site internet [\[1\]](#).

## Première partie

# Transition zigzag, sous-criticalité et structures localisées



# Chapitre 1

## Transition zigzag : instabilité d'une chaîne rectiligne de particules

### Sommaire

---

<b>1.1 Introduction</b> . . . . .	<b>23</b>
<b>1.2 À propos de la transition zigzag</b> . . . . .	<b>24</b>
<b>1.3 Mode mou de la configuration en ligne au voisinage de la transition</b> . .	<b>25</b>
<b>1.4 Conclusion</b> . . . . .	<b>28</b>

---

### 1.1 Introduction

Ce chapitre est consacré à l'évolution de systèmes de particules en interaction répulsive confinées en ligne droite par un potentiel transverse, lorsque ce potentiel décroît ou lorsque la densité de particules augmente. En nous concentrant uniquement sur le changement de configurations dans de tels systèmes, nous montrerons que si une configuration en ligne est privilégiée pour un fort confinement (respectivement une faible densité), il existe une valeur de confinement seuil  $\beta_{ZZ}$  en dessous de laquelle il devient favorable pour le système de s'organiser en deux chaînes disposées en quinconce. Nous discuterons rapidement la description de cette transition zigzag à partir d'une analyse énergétique et nous définirons ainsi la valeur de confinement seuil pour laquelle la configuration du système change. Ensuite, nous présenterons en détails l'analyse de stabilité linéaire de la configuration en ligne à l'aide de ses modes propres de vibration et nous retrouverons ainsi le confinement seuil.

Afin d'introduire la description de la transition zigzag à laquelle nous allons nous intéresser, nous rappellerons dans ce chapitre quelques résultats obtenus et présentés dans la thèse de Jean-Baptiste Delfau [30].

## 1.2 À propos de la transition zigzag

La transition zigzag a été abondamment étudiée, à la fois analytiquement et expérimentalement pour une grande quantité de systèmes différents [89, 56, 52, 100].

On peut comprendre simplement cette transition à partir d'une étude rapide de l'énergie d'un système de  $2N$  particules placées dans une cellule périodique de longueur  $L$ , la distance moyenne entre particules étant donc  $d = L/2N$ . Le long de la direction longitudinale (direction  $x$ ) on considère des conditions aux bords périodiques et dans la direction transverse (direction  $y$ ) les particules sont confinées par un potentiel harmonique de raideur  $\beta$ . Les particules interagissent avec un potentiel d'interaction répulsif quelconque caractérisé par une échelle d'énergie  $U_0$  et une portée caractéristique  $\lambda_0$ . On laisse également la possibilité aux particules de se déplacer de façon alternée et homogène sur une distance  $h$  dans la direction transverse. Cette distance correspond à la hauteur du zigzag, autrement dit la valeur absolue de la position transverse des particules. Pour un tel système l'énergie de chaque particule est identique et l'énergie du système s'écrit simplement :

$$E = 2N \left[ \sum_{j=1}^N U \left( \sqrt{d_j^2 + 4h^2} \right) + \sum_{j=1}^{N-1} U(2jd) + \frac{\beta}{2} h^2 \right] = 2N E_0, \quad (1.1)$$

avec  $d_j = (2j - 1)d$ . Ici le premier terme correspond à l'interaction avec les particules voisines éloignées d'un indice impair (ces particules sont nécessairement situées sur la chaîne opposée du zigzag) et le second terme correspond à l'interaction avec les particules voisines éloignées d'un indice pair (celles-ci se trouvent dans la même chaîne que la particule considérée). Enfin le troisième terme correspond à l'énergie de confinement.

On cherche la valeur de hauteur  $h$  pour laquelle l'énergie du système est minimale. Pour cela on peut considérer que proche du seuil de transition zigzag, l'amplitude  $h$  est faible, et on développe cette énergie au quatrième ordre en  $h$ . On trouve alors que l'énergie de chaque particule,  $E_0$  s'écrit :

$$E_0 \approx \sum_{j=1}^N U(d_j) + \sum_{j=1}^{N-1} U(2jd) + h^2 \underbrace{\left( \frac{\beta}{2} + \sum_{j=1}^N \frac{2U'(d_j)}{d_j} \right)}_{a_2} + h^4 \underbrace{\sum_{j=1}^N \left( \frac{2U''(d_j)}{d_j^2} - \frac{2U'(d_j)}{d_j^3} \right)}_{a_4} + \mathcal{O}(h^6) \quad (1.2)$$

où  $U'(\cdot) = dU(\cdot)/dx$ . Les deux premiers termes du développement correspondent simplement à l'énergie associée à la configuration en ligne, et les termes suivant correspondent au développement de l'énergie en puissance de  $h$ .

À partir de la minimisation de l'énergie  $E_0$  par rapport à  $h$  on peut déterminer les configurations d'équilibre. On note que le coefficient du développement d'ordre quatre en  $h$ ,  $a_4$ , est positif. On distingue donc deux types de configurations d'équilibre séparées par la valeur de confinement seuil :

$$\beta_{ZZ} = 4 \sum_{j=1}^N \frac{F(d_j)}{d_j}. \quad (1.3)$$

avec  $F(\cdot) = -U'(\cdot)$ <sup>1</sup>. Tant que  $\beta \geq \beta_{ZZ}$ , le coefficient  $a_2$  est positif de telle sorte que seule la

1. À titre d'ordre de grandeur, pour une interaction en fonction de Bessel modifiée[voir équation (2.32)] et  $d/\lambda_0 = 3.91$ , nous trouvons  $\beta_{ZZ} = 5.82 \times 10^{-4}$  N/m, ce qui correspond à une énergie de  $\beta_{ZZ} d^2/k_B = 1.5 \times 10^{14}$  K et une fréquence de  $\sqrt{\beta_{ZZ}/m} = 16.5$  s<sup>-1</sup>.

hauteur  $h = 0$  minimise l'énergie. Lorsque  $\beta < \beta_{ZZ}$ , le coefficient  $a_2$  devient négatif et il existe alors trois valeurs de hauteur minimisant l'énergie,  $h = 0$  et  $h = \pm\sqrt{-a_2/a_4}$ . La solution  $h = 0$  correspond à une solution stable pour  $\beta \geq \beta_{ZZ}$  et instable pour  $\beta < \beta_{ZZ}$ , alors que les solutions  $h = \pm\sqrt{-a_2/a_4}$  sont stables dans leur domaine d'existence,  $\beta < \beta_{ZZ}$ .

La transition zigzag correspond ainsi à une bifurcation fourche surcritique avec comme paramètre de contrôle l'intensité du confinement et comme paramètre d'ordre la hauteur du zigzag. Le diagramme de bifurcation pour une telle transition est présenté figure 1.1, les deux branches de la bifurcation correspondent à l'existence de deux configurations en quinconce symétriques, appelées configuration zigzag et *zagzig*, caractérisées par un même paramètre d'ordre et une même énergie. Ces deux configurations sont présentées schématiquement en insert de la figure 1 (b) représentant schématiquement le paysage énergétique pour  $\beta < \beta_{ZZ}$ .

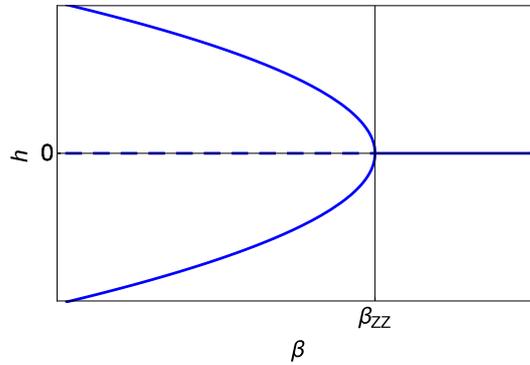


FIGURE 1.1 – Évolution de la hauteur d'équilibre théorique en fonction de la raideur du confinement  $\beta$ . Les courbes bleues en traits pleins représentent les solutions d'équilibre stables et les courbes en tirets les solutions d'équilibre instables.

Dans cette analyse les particules de la ligne se déplacent uniquement transversalement, la distance longitudinale entre particules restant identique et égale à  $L/2N$ . C'est pourquoi nous allons dans la section 1.3 procéder à l'analyse de stabilité linéaire complète de la configuration en ligne en laissant libre les déplacements longitudinaux et transverses dans le système.

### 1.3 Mode mou de la configuration en ligne au voisinage de la transition

Décrivons les modes propres de vibration d'une chaîne de particules en interaction, et plus particulièrement leur comportement à l'approche du seuil de transition zigzag  $\beta_{ZZ}$ , lorsque  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^+$ .

On considère initialement le système placé dans une configuration en ligne<sup>2</sup> ( $\beta \geq \beta_{ZZ}$ ). Les positions d'équilibre des particules sont donc données par  $\{pd, 0\}$  où  $p$  correspond à l'indice de la  $p^{\text{ème}}$  particule. On suppose alors de faibles déplacements  $\{x_p(t), y_p(t)\}$  des particules autour de leurs positions d'équilibre, tels que  $A_p = \{pd + x_p(t), y_p(t)\}$ , où les amplitudes des déplacements  $|x_p|$  et  $|y_p|$  sont beaucoup plus petites que la longueur caractéristique du système  $d$ .

Afin de garder le même formalisme pour traiter tout type de potentiels d'interaction, nous prendrons en compte toutes les interactions entre particules. Bien entendu, pour des interactions à courte portée, il serait possible de considérer uniquement un nombre fini de particules voisines : par exemple il a été montré que dans le cadre d'interaction en fonction de Bessel modifiée<sup>3</sup>, qu'il est suffisant de considérer l'interaction avec les seconds plus proches voisins pour obtenir les fréquences propres d'une configuration linéaire avec une bonne précision [32, 35].

L'énergie potentielle d'un tel système s'écrit :

$$E = \sum_{p=1}^{2N} \sum_{j=1}^{2N} U(\sqrt{(x_{p+j} - x_p + jd)^2 + (y_{p+j} - y_p)^2}) + \frac{\beta}{2} \sum_{p=1}^{2N} y_p^2, \quad (1.4)$$

où les conditions aux bords périodiques impliquent que les indices des particules qui sont congruents modulo  $2N$  correspondent à la même particule. En développant l'expression de l'énergie au second ordre en puissance des petits déplacements, et en utilisant les équations d'Euler-Lagrange on obtient les équations linéarisées du mouvement pour chaque particule  $p$  :

$$m\ddot{x}_p = \sum_{j=1}^{2N} U''(jd) (x_{p-j} + x_{p+j} - 2x_p) \quad (1.5)$$

$$m\ddot{y}_p = \sum_{j=1}^{2N} \frac{U'(jd)}{jd} (y_{p-j} + y_{p+j} - 2y_p) - \beta y_p \quad (1.6)$$

Nous voyons donc que, lorsque la configuration de base est rectiligne, les mouvements longitudinaux et transverses sont découplés [30].

En raison des conditions aux bords périodiques, ces déplacements peuvent être projetés sur les modes de Fourier. On peut écrire que  $x_{p+2N} = x_p$  et par suite :

$$\tilde{x}(s, t) = \frac{1}{2N} \sum_{j=1}^{2N} x_j(t) e^{-i\frac{2\pi}{2N}sj} \quad \text{et} \quad x_j(t) = \sum_{s=1}^{2N} \tilde{x}(s, t) e^{i\frac{2\pi}{2N}sj}. \quad (1.7)$$

En appliquant cette projection aux équations (1.5) et (1.6), et en notant  $q(s) = 2\pi s/(2N)$ , on obtient le système d'équations suivant :

$$m\ddot{\tilde{x}}(s, t) = \sum_{j=1}^{2N} 4U''(jd) \sin^2\left(\frac{q(s)}{2}j\right) \tilde{x}(s, t) \quad (1.8)$$

2. Cette configuration en ligne est stable uniquement pour les forts confinements, c'est pourquoi on se place dans cette analyse nécessairement dans le domaine de confinement  $\beta \geq \beta_{ZZ}$ .

3. Ce type d'interaction entre particules est utilisé à titre de comparaison avec les systèmes de particules millimétriques en interaction électrostatique, comme présenté en Annexe B.

$$m\ddot{\tilde{y}}(s,t) = \left( \sum_{j=1}^{2N} 4 \frac{U'(jd)}{jd} \sin^2 \left( \frac{q(s)}{2} j \right) - \beta \right) \tilde{y}(s,t) \quad (1.9)$$

Ce système d'équations découplées se caractérise par une matrice dynamique déjà diagonale, dont les valeurs propres correspondent directement aux modes propres de vibration longitudinaux et transverses du système.

Les relations de dispersion respectives s'écrivent :

$$m(\omega_L(s))^2 = \sum_{j=1}^{2N} 4U''(jd) \sin^2 \left( \frac{q(s)}{2} j \right), \quad (\text{Longitudinal}) \quad (1.10)$$

$$m(\omega_T(s))^2 = \sum_{j=1}^{2N} 4 \frac{U'(jd)}{jd} \sin^2 \left( \frac{q(s)}{2} j \right) - \beta, \quad (\text{Transverse}) \quad (1.11)$$

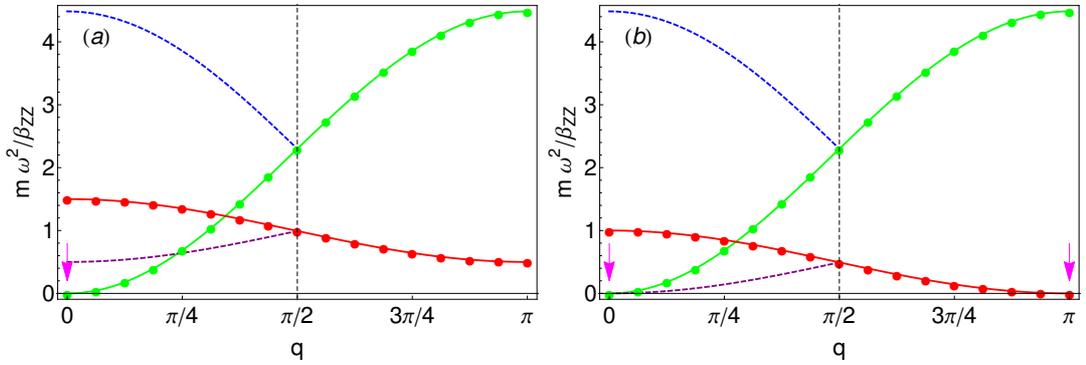


FIGURE 1.2 – Relation de dispersion adimensionnée  $m\omega^2/\beta_{ZZ}$  pour les modes transverses (en rouge) et longitudinaux (en vert) en fonction du nombre d'onde sans dimension  $q$ . Le potentiel d'interaction correspond à une fonction de Bessel modifiée, avec pour portée  $\lambda_0 = 0.48$  mm et  $d = 1.875$  mm ( $d/\lambda_0 = 3.91$ ) d'où  $\beta_{ZZ} = 5.82 \cdot 10^{-4}$  N/m. (a)  $\beta = 1.5\beta_{ZZ}$  et (b)  $\beta = \beta_{ZZ}$ . Les points correspondent aux modes accessibles pour un système de 32 particules. Les courbes en tirets violets et bleus correspondent au repliement des branches transverses et longitudinales dans la demie zone de Brillouin et les flèches magenta indiquent les modes de fréquence nulle.

La figure 1.2 représente les relations de dispersion transverse et longitudinale pour  $\beta = 1.5\beta_{ZZ}$  (a) et pour  $\beta = \beta_{ZZ}$  (b). Sur la figure 1.2 (a), lorsque  $\beta > \beta_{ZZ}$  on observe qu'il n'existe qu'un seul mode de fréquence nulle. Ce mode  $\omega_L^2(q=0) = 0$  est associé à l'invariance par translation du système. Il est également appelé « mode de Goldstone » dans le cadre de la théorie des brisures spontanées de symétrie [84, 60]. Cependant lorsque le confinement diminue jusqu'à atteindre la valeur seuil  $\beta_{ZZ}$ , on observe l'apparition d'un second mode de fréquence nulle<sup>4</sup>,  $\omega_T^2(q=\pi) = 0$ . [voir figure 1.2 (b)]. On retrouve en réécrivant l'équation (1.11) la valeur du seuil  $\beta_{ZZ}$  défini précédemment par l'analyse énergétique [voir équation (1.3)], qui a pour expression :

$$\beta_{ZZ} = -4 \sum_{j=1}^N \frac{U'((2j-1)d)}{(2j-1)d}. \quad (1.12)$$

Et on remarque que ce seuil de bifurcation zigzag ne dépend que de l'interaction avec les  $N$  particules distantes d'un multiple impair de  $d$  de la particule considérée. Le mode de fréquence nulle

4. La valeur de confinement seuil a été définie pour cela dans l'équation (1.12).

correspondant est associé au nombre d'onde le plus élevé du système et a pour vecteur propre de vibration le déplacement en quinconce des particules [voir figure 1.3]. Lorsque le système est proche de la transition, ce mode mou domine totalement le comportement des particules. En effet à la transition, la fréquence de ce mode est nulle, les déplacements associés deviennent alors statiques et la configuration d'équilibre adopte une forme de zigzag. La figure 1.3 compare les déplacements associés au mode mou aux positions d'équilibre pour  $\beta < \beta_{ZZ}$  et  $|\beta - \beta_{ZZ}| \ll 1$ , c'est-à-dire juste après le seuil de transition zigzag. La configuration d'équilibre a bien la même forme que le mode mou à la transition.

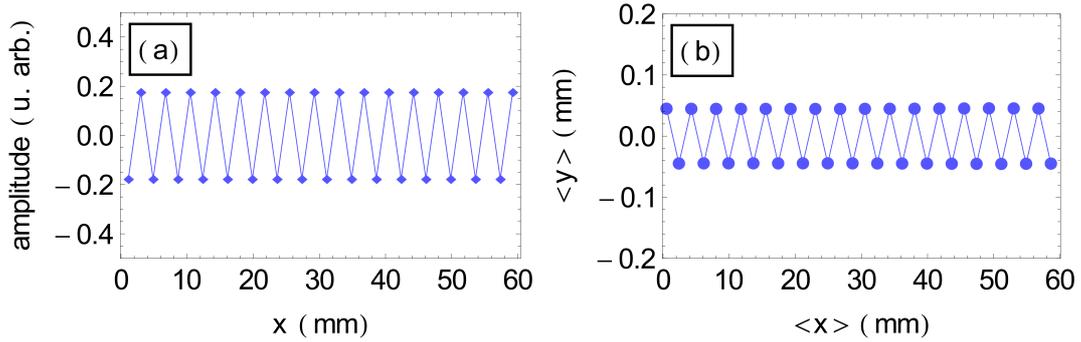


FIGURE 1.3 – (a) : forme de mode mou en fonction de la position de la particule  $x$  en mm. (b) : positions d'équilibre des particules  $\{x, y\}$  en mm pour un système périodique de 32 particules de longueur  $L = 60$  mm. (Figure V.23 de la Thèse de J-B. Delfau[30])

Cette analyse linéaire décrit bien la perte de stabilité de la configuration en ligne au profit d'une configuration zigzag. Cette configuration correspond à un mode mou apparaissant dans la relation de dispersion transverse pour un confinement seuil  $\beta_{ZZ}$  défini par l'équation (1.12), qui est identique à la définition du seuil obtenue par l'analyse énergétique [voir équation (1.3)]. Cependant comme nous l'avons indiqué cette analyse est valable uniquement dans la limite où la configuration en ligne est stable, autrement dit pour  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^+$  par valeur supérieure. Dans le prochain chapitre nous nous intéresserons à ce qui se passe au delà de la transition, c'est à dire pour  $\beta < \beta_{ZZ}$ . Nous étudierons la stabilité linéaire et les modes propres de la configuration zigzag elle-même.

## 1.4 Conclusion

Les systèmes de particules en interaction confinées par un potentiel transverse présentent une transition configurationnelle lorsque le confinement transverse diminue. Cette transition voit la configuration d'équilibre du système passer d'une structure en simple chaîne, où les particules sont alignées au fond du potentiel de confinement, à une structure en double chaînes dite en *zigzag* pour laquelle les particules se distribuent en quinconce de part et d'autre du minimum de confinement.

Nous avons montré dans ce chapitre que cette transition zigzag peut être décrite à l'aide d'un modèle énergétique simple permettant de montrer que la transition zigzag correspond à une bifurcation fourche surcritique. Cependant ce modèle énergétique reste très rudimentaire et ne considère que le déplacement transverse et uniforme (en valeur absolue) des particules dans le système.

C'est pourquoi nous avons ensuite présenté le calcul des modes et fréquences propres de la

---

chaîne de particules en ligne. La transition zigzag dans ce cadre est caractérisée par l'apparition d'un mode mou de fréquence nulle au seuil de confinement  $\beta_{ZZ}$ . Ce mode mou correspond au mode transverse de nombre d'onde  $q(s) = \pi$ , et les déplacements associés à ce mode propre induisent une configuration « gelée » identique à la structure zigzag.



## Chapitre 2

# Stabilité de la configuration zigzag : analyse linéaire

### Sommaire

---

<b>2.1 Introduction</b>	<b>31</b>
<b>2.2 Fréquences propres de vibration de la configuration zigzag</b>	<b>32</b>
<b>2.3 Domaine de stabilité de la configuration zigzag</b>	<b>37</b>
2.3.1 Analyse générale de la perte de stabilité du zigzag	38
2.3.2 Cas des interactions de type loi de puissance	40
2.3.3 Cas des interactions de portée finie	43
2.3.4 Influence du nombre de particules	45
<b>2.4 Seuils de perte de stabilité du zigzag</b>	<b>46</b>
<b>2.5 Conclusion</b>	<b>48</b>

---

## 2.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons nous intéresser à la stabilité linéaire de la configuration en zigzag. Nous décrirons les modes propres de la configuration zigzag [voir section 2.2] et nous montrerons notamment que l'on retrouve, dans la limite où  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^-$ , les relations de dispersion calculées au chapitre précédent pour  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^+$ . Nous verrons ensuite que pour certaines hauteurs de zigzag la relation de dispersion du mode acoustique transverse présente des fréquences imaginaires pures correspondant à des configurations zigzag instables. Nous déterminerons alors les caractéristiques des systèmes dans lesquels ces fréquences imaginaires apparaissent (section 2.3). Enfin nous montrerons que cette analyse nous permet d'obtenir les hauteurs seuils de configuration zigzag pour lesquelles cette configuration devient instable. Dans la section 2.4 nous comparerons ces hauteurs seuils obtenues par l'analyse linéaire aux observations de structures d'équilibre du système obtenues en simulation.

L'ensemble de ces résultats a fait l'objet d'une publication, *Linear instability of a zigzag pattern*, *Phys. Rev. E* [39].

## 2.2 Fréquences propres de vibration de la configuration zigzag

Nous considérons maintenant une configuration en zigzag de  $2N$  particules ponctuelles de masse  $m$  placées le long d'une cellule de longueur  $L$  et contenues dans un plan  $xOy$ . Comme précédemment les conditions aux bords sont cycliques (direction  $x$ ) et les particules sont confinées dans la direction transverse (direction  $y$ ) par un potentiel harmonique de raideur  $\beta$ . Ce système correspond à  $N$  cellules. Chacune de ces cellules contient deux particules de coordonnées d'équilibre  $\{A_p^0, B_p^0\}$  symbolisées par l'indice  $^0$  [voir figure 2.1] et de coordonnées respectives  $\{2pd, -h\}$  et  $\{(2p+1)d, +h\}$  où  $d$  est la distance longitudinale entre particules  $L/(2N)$  et où  $h$  est la hauteur du zigzag<sup>1</sup>. Par commodité afin qu'il existe des modes propres en bords de zone de Brillouin, nous nous restreindrons à des systèmes avec un nombre  $N$  pair de cellules<sup>2</sup>. Comme précédemment les interactions entre toutes les particules seront prises en compte afin de ne pas limiter le développement aux interactions à courte portée.

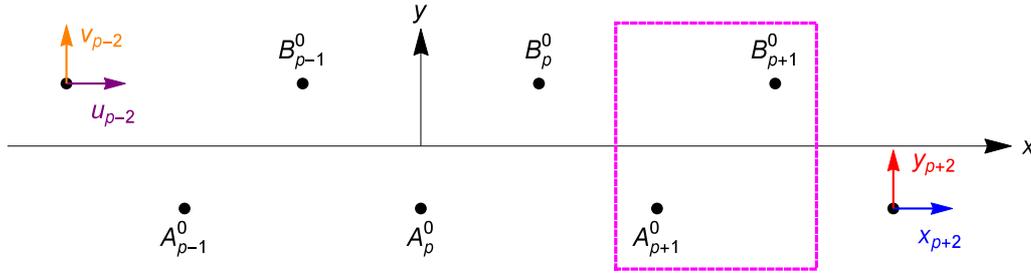


FIGURE 2.1 – Schéma d'une configuration zigzag, sur laquelle une maille est mise en avant (boite en pointillés mauves). Les déplacements infinitésimaux des particules  $A_{p+2}$  et  $B_{p-2}$  par rapport à leurs positions d'équilibre sont représentés par des flèches de couleurs.

Pour un confinement  $\beta < \beta_{ZZ}$  et une distance entre particules  $d$  donnée, nous avons vu au chapitre 1 que la hauteur  $h$  du zigzag est implicitement reliée à la raideur du confinement  $\beta$  par la relation univoque :

$$\beta = 4 \sum_{j=1}^N \frac{F\left(\sqrt{d_j^2 + 4h^2}\right)}{\sqrt{d_j^2 + 4h^2}}. \quad (2.1)$$

Nous allons calculer les modes propres de vibration de la configuration zigzag dans l'approximation linéaire. On testera la cohérence de notre développement en retrouvant les modes propres de la configuration en ligne dans la limite  $h \rightarrow 0$  ( $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^+$ ). On montrera également que la base des vecteurs propres de la configuration en ligne permet une écriture simplifiée de la matrice dynamique de la configuration zigzag.

1. Par la suite nous considérerons une distance entre particules constante  $d = 1.875$  mm, de telle sorte qu'un système constitué de  $N = 16$  cellules aura pour taille  $L = 60$  mm. Cette valeur spécifique a été choisie pour être cohérente avec la dimension des systèmes expérimentaux de billes métalliques en interaction électrostatique [20, 32, 98, 97].

2. Cette restriction ne change rien aux résultats que nous allons présenter ici.

On suppose de faibles déplacements des particules autour de leurs positions d'équilibre, tels que  $A_p = \{2pd + x_p(t), -h + y_p(t)\}$  et  $B_p = \{(2p + 1)d + u_p(t), +h + v_p(t)\}$  où  $|x_p|$ ,  $|y_p|$ ,  $|u_p|$  et  $|v_p|$  sont des déplacements beaucoup plus petits que les longueurs caractéristiques  $d$  ou  $h$  [voir figure 2.1].

L'énergie potentielle du système s'écrit alors :

$$E = \sum_{p=1}^N \left\{ \sum_{j=1}^N [U(A_p B_{p+j-1}) + U(B_p A_{p+j})] + \sum_{j=1}^{N-1} [U(A_p A_{p+j}) + U(B_p B_{p+j})] \right\} + \frac{\beta}{2} \sum_{p=1}^N [(y_p - h)^2 + (v_p + h)^2], \quad (2.2)$$

où, comme au chapitre précédent, les conditions aux bords périodiques impliquent que les indices des particules qui sont congruents modulo  $N$  correspondent à la même particule. En développant l'énergie au second ordre, et en utilisant les équations d'Euler-Lagrange on obtient les équations linéarisées du mouvement :

$$m\ddot{x}_p = \sum_{j=1}^N [K_{xx}(j)(u_{p-j} + u_{p+j-1} - 2x_p) + K_{xy}(j)(v_{p-j} - v_{p+j-1})] + \sum_{j=1}^{N-1} K(2jd)(x_{p+j} + x_{p-j} - 2x_p) \quad (2.3)$$

$$m\ddot{y}_p = \sum_{j=1}^N [K_{yy}(j)(v_{p-j} + v_{p+j-1} - 2y_p) + K_{xy}(j)(u_{p-j} - u_{p+j-1})] + \sum_{j=1}^{N-1} \frac{F(2jd)}{2jd}(y_{p+j} + y_{p-j} - 2y_p) - \beta y_p \quad (2.4)$$

$$m\ddot{u}_p = \sum_{j=1}^N [K_{xx}(j)(x_{p+j} + x_{p-j+1} - 2u_p) + K_{xy}(j)(y_{p+j} - y_{p-j+1})] + \sum_{j=1}^{N-1} K(2jd)(u_{p+j} + u_{p-j} - 2u_p) \quad (2.5)$$

$$m\ddot{v}_p = \sum_{j=1}^N [K_{yy}(j)(y_{p+j} + y_{p-j+1} - 2v_p) + K_{xy}(j)(x_{p+j} - x_{p-j+1})] + \sum_{j=1}^{N-1} \frac{F(2jd)}{2jd}(v_{p+j} + v_{p-j} - 2v_p) - \beta v_p \quad (2.6)$$

avec

$$K_{xx}(j) = \frac{(2j-1)^2 d^2}{r_j^2} K(r_j) - \frac{4h^2}{r_j^3} F(r_j) \quad (2.7)$$

$$K_{yy}(j) = \frac{4h^2}{r_j^2} K(r_j) - \frac{(2j-1)^2 d^2}{r_j^3} F(r_j) \quad (2.8)$$

$$K_{xy}(j) = \frac{2(2j-1)dh}{r_j^2} \left[ K(r_j) + \frac{F(r_j)}{r_j} \right] \quad (2.9)$$

$$r_j \equiv \sqrt{(2j-1)^2 d^2 + 4h^2}, \quad F(r_j) = -\left. \frac{\partial U}{\partial r} \right|_{r_j}, \quad K(r_j) = \left. \frac{\partial^2 U}{\partial r^2} \right|_{r_j}. \quad (2.10)$$

Ici les coefficients  $K_{lm}(j)$  correspondent aux « raideurs » associées à l'interaction entre particules séparées par une distance  $r_j$ , quand les déplacements sont pour la première particule dans la direction  $l$  ( $l = x$  ou  $y$ ) et dans la direction  $m$  pour la seconde. Il est intéressant de remarquer que le coefficient  $K_{xy}$ , qui corrèle les déplacements transverses et longitudinaux, est directement proportionnel à  $h$ .

Comme précédemment, on tire avantage des conditions aux bords périodiques et on projette les déplacements sur les modes de Fourier discrets du système :

$$\tilde{x}(s, t) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j(t) e^{-i\frac{2\pi}{N}sj} \quad \text{et} \quad x_j(t) = \sum_{s=1}^N \tilde{x}(s, t) e^{i\frac{2\pi}{N}sj}. \quad (2.11)$$

À partir des équations (2.3) à (2.6) nous obtenons la matrice dynamique  $\mathbb{M}(h)$ , dont les valeurs propres correspondent aux fréquences propres de vibration du système :

$$\mathbb{M}(h) \equiv \begin{pmatrix} -2C_{xx}(s) & 2e^{-iq(s)}C_{xu}(s) & 0 & 2ie^{-iq(s)}C_{xv}(s) \\ 2e^{iq(s)}C_{xu}(s) & -2C_{xx}(s) & -2e^{iq(s)}C_{xv}(s) & 0 \\ 0 & 2ie^{-iq(s)} - C_{xv}(s) & \beta - 2C_{yy}(s) & 2e^{-iq(s)}C_{yv}(s) \\ -2ie^{iq(s)}C_{xv}(s) & 0 & 2e^{iq(s)}C_{yv}(s) & \beta - 2C_{yy}(s) \end{pmatrix}, \quad (2.12)$$

avec

$$\begin{aligned} C_{xx}(s) &= \sum_{j=1}^N K_{xx}(j) + 2 \sum_{j=1}^{N-1} K(2jd) \sin^2(jq(s)), \\ C_{xu}(s) &= \sum_{j=1}^N K_{xx}(j) \cos[(2j-1)q(s)], \\ C_{xv}(s) &= \sum_{j=1}^N K_{xy}(j) \sin[(2j-1)q(s)], \\ C_{yy}(s) &= \sum_{j=1}^N K_{yy}(j) + \sum_{j=1}^{N-1} \frac{F(2jd)}{jd} \sin^2(jq(s)), \\ C_{yv}(s) &= \sum_{j=1}^N K_{yy}(j) \cos[(2j-1)q(s)]. \end{aligned} \quad (2.13)$$

(2.14)

et où on pose comme précédemment  $q(s) = 2\pi s/(2N)$  comme nombre d'onde sans dimension.

On remarque que lorsque  $h = 0$  (soit pour  $\beta \geq \beta_{ZZ}$ ) on retrouve le développement modal réalisé au chapitre précédent. En effet pour  $h = 0$  tous les coefficients  $K_{xy}(j)$  s'annulent de telle sorte que  $C_{xv}(s) = 0$ , et alors la matrice dynamique  $\mathbb{M}(h = 0)$  devient diagonale par blocs :

$$\mathbb{M}(h = 0) \equiv \begin{pmatrix} -2C_{xx}(s) & 2e^{-iq(s)}C_{xu}(s) & 0 & 0 \\ 2e^{iq(s)}C_{xu}(s) & -2C_{xx}(s) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \beta - 2C_{yy}(s) & 2e^{-iq(s)}C_{yv}(s) \\ 0 & 0 & 2e^{iq(s)}C_{yv}(s) & \beta - 2C_{yy}(s) \end{pmatrix} \quad (2.15)$$

Cette structure en blocs reflète le fait que les vibrations longitudinales (bloc en haut à gauche) sont indépendantes des vibrations transverses (bloc en bas à droite) pour une chaîne linéaire comme on vient de le rappeler chapitre 1.

En diagonalisant  $\mathbb{M}(h = 0)$ , on obtient une relation de dispersion avec quatre branches et avec des modes propres indexés par les nombres d'onde  $q(s) = 2\pi s/(2N)$  avec  $-N/2 \leq s \leq N/2$ <sup>3</sup>.

Les fréquences propres au carré  $\omega^2(s)$  de la matrice  $\mathbb{M}(h = 0)$  correspondent bien à celles de la chaîne linéaire de particules et sont données par :

$$\begin{aligned} m(\omega_{AL}^0)^2 &= 2[C_{xu}(s) - C_{xx}(s)] = \sum_{j=1}^{2N} -4K(jd) \sin^2(j \frac{q(s)}{2}), \quad (\text{Acoustique Longitudinal}) \\ m(\omega_{OL}^0)^2 &= -2[C_{xx}(s) + C_{xu}(s)] = \sum_{j=1}^{2N} -4K(jd) \sin^2(j \frac{q(s)}{2} + \pi), \quad (\text{Optique Longitudinal}) \quad (2.16) \\ m(\omega_{AT}^0)^2 &= \beta - 2C_{yy}(s) - 2C_{yv}(s) = \beta - \sum_{j=1}^{2N} -4 \frac{F(jd)}{jd} \sin^2(j \frac{q(s)}{2}), \quad (\text{Acoustique Transverse}) \\ m(\omega_{OT}^0)^2 &= \beta - 2C_{yy}(s) + 2C_{yv}(s) = \beta - \sum_{j=1}^{2N} -4 \frac{F(jd)}{jd} \sin^2(j \frac{q(s)}{2} + \pi), \quad (\text{Optique Transverse}) \end{aligned}$$

avec les vecteurs propres correspondant  $[\mathbf{V}_{AL}^0, \mathbf{V}_{OL}^0, \mathbf{V}_{AT}^0, \mathbf{V}_{OT}^0]$ . Ces vecteurs propres ont déjà été calculés dans les références [32] et [35] et restent valables tant que  $\beta \geq \beta_{ZZ}$ .

Ces fréquences propres au carré sont présentées dans la figure 2.2 (a) pour  $\beta > \beta_{ZZ}$  et dans la figure 2.2 (b) pour  $\beta = \beta_{ZZ}$ . On note que par commodité nous avons décrit le système avec un modèle de deux particules par maille et ce, même pour le cas considéré ici d'une configuration en ligne. Les relations de dispersion correspondant aux fréquences propres de vibration dans une chaîne quasi-unidimensionnelle de particules, que l'on a rappelées chapitre 1, sont donc retrouvées après le repliement de la zone de Brillouin avec une dégénérescence des modes  $q(s = N/2)$  de la branche acoustique et de la branche optique pour des polarisations longitudinales et transverses. Dans chaque cas, la branche acoustique longitudinale présente un mode de fréquence nulle pour  $q = 0$ , lié à l'invariance par translation du problème, et une dépendance parabolique  $\omega^2 \propto q^2$  pour les petits nombres d'ondes  $q$ . Comme dans le cadre de la configuration en ligne on trouve que pour  $\beta = \beta_{ZZ}$ , un second mode de fréquence nulle apparaît sur la branche acoustique transverse [voir figure 2.2 (b)]<sup>4</sup>. Ce mode de fréquence nulle, qui apparaît uniquement au seuil de transition zigzag, correspond au mode mou attendu à la transition pour le nombre d'onde  $q = \pm\pi$  dans la zone de Brillouin étendue [voir section 1.3].

Revenons maintenant au cas  $\beta < \beta_{ZZ}$ . La hauteur  $h$  est différente de zéro et  $K_{xy}$  n'est plus nulle. La matrice dynamique complète  $\mathbb{M}(h)$  présente une forme simplifiée dans la base des vecteurs propres obtenus pour  $h = 0$ . Elle est alors donnée par  $\hat{\mathbb{M}}(h) = \mathbb{B}_0^{-1} \cdot \mathbb{M}(h) \cdot \mathbb{B}_0$  où  $\mathbb{B}_0$  correspond à la matrice carrée construite à partir des vecteur propres  $[\mathbf{V}_{OL}^0, \mathbf{V}_{OT}^0, \mathbf{V}_{AL}^0, \mathbf{V}_{AT}^0]$  écrits dans la base

3. Les modes sur les bords de zone  $\pm N/2$ , correspondent aux mêmes déplacements, leur poids respectif sera par convention pris comme 1/2, de telle sorte qu'il y a exactement  $N$  modes.

4. Dans cette description le mode de fréquence nulle apparaissant à la transition correspond à une nombre d'onde  $q = 0$  à cause du repliement des relations de dispersion dans la demie-zone de Brillouin.

des déplacements  $(x, u, y, v)$  :

$$\mathbb{B}_0 = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} -e^{-iq(s)} & 0 & e^{-iq(s)} & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & e^{-iq(s)} & 0 & -e^{-iq(s)} \\ 0 & 1 & 0 & 1 \end{pmatrix} \quad (2.17)$$

Dans cette nouvelle base la matrice  $\hat{\mathbb{M}}(h)$  prend de nouveau une structure diagonale par blocs :

$$\begin{pmatrix} -2(C_{xu} + C_{xx}) & -2iC_{xv} & 0 & 0 \\ 2iC_{xv} & 2\left(C_{yv} - C_{yy} + \frac{\beta}{2}\right) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2(C_{xu} - C_{xx}) & 2iC_{xv} \\ 0 & 0 & -2iC_{xv} & 2\left(-C_{yy} - C_{yv} + \frac{\beta}{2}\right) \end{pmatrix} \quad (2.18)$$

Puisque le bloc supérieur gauche relie les deux modes optiques obtenus pour  $h = 0$ , on choisira d'appeler les modes propres correspondants « modes optiques » même s'ils ne le sont pas réellement. De la même façon la matrice bloc inférieur droite sera associée aux « modes acoustiques ». Les valeurs propres de la matrice dynamique sont alors données par :

$$m\omega_{OL}^2 = T_{O-} + \sqrt{4C_{xv}^2 + T_{O+}^2}, \quad m\omega_{OT}^2 = T_{O-} - \sqrt{4C_{xv}^2 + T_{O+}^2} \quad (2.19)$$

$$m\omega_{AL}^2 = T_{A-} + \sqrt{4C_{xv}^2 + T_{A+}^2}, \quad m\omega_{AT}^2 = T_{A-} - \sqrt{4C_{xv}^2 + T_{A+}^2} \quad (2.20)$$

avec

$$T_{O\pm}(s) = \frac{\beta}{2} - C_{yy}(s) + C_{yv}(s) \pm [C_{xx}(s) + C_{xu}(s)], \quad (2.21)$$

$$T_{A\pm}(s) = \frac{\beta}{2} - C_{yy}(s) - C_{yv}(s) \pm [C_{xx}(s) - C_{xu}(s)], \quad (2.22)$$

L'évolution des équations de dispersion (2.19) et (2.20) pour  $\beta < \beta_{ZZ}$  (soit  $h \neq 0$ ) est représentée figures 2.2 (c) et (d). On retrouve les quatre branches attendues et leurs formes sont fortement modifiées par rapport à celles obtenues pour  $h = 0$ . En particulier, la dégénérescence à  $q(0) = 0$  des deux « modes acoustiques », observée pour  $\beta = \beta_{ZZ}$ , a maintenant disparu. Cet effet est lié au couplage entre modes longitudinaux et transverses car  $C_{xy} \neq 0$ . Dans ce cas, seul le « mode acoustique transverse » reste un véritable mode acoustique avec une dépendance parabolique de  $\omega_{AT}^2$  pour les petits  $q$  [voir figures 2.2 (c) et (d)]. Cette fréquence, nulle pour  $q(0) = 0$ , est liée à l'invariance par translation qui reste une symétrie de la configuration zigzag comme pour la configuration en ligne avec des conditions aux bords périodiques. Les équations (2.19) et (2.20) montrent que le couplage entre modes acoustiques (respectivement optiques) provoque une répulsion des branches correspondantes. Cet effet d'« anti-crossing » peut être suffisamment important pour déplacer les fréquences propres acoustiques transverses au carré vers les valeurs négatives pour les faibles  $q > 0$ . Ceci implique l'apparition de modes de fréquences propres imaginaires pures qui sont instables dans la configuration zigzag. L'apparition de ces modes dans la relation de dispersion est mise en évidence dans l'insert de la figure 2.2 (c) et sera présentée plus en détail dans la figure 2.3 (c).

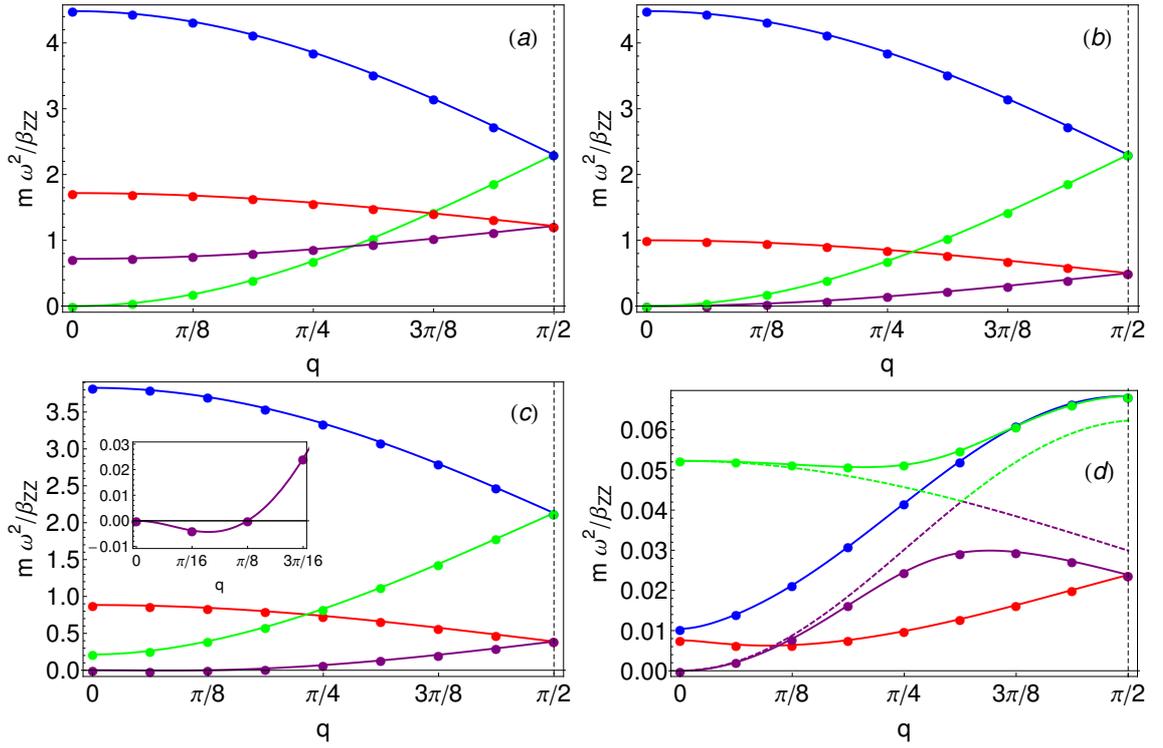


FIGURE 2.2 – Fréquences propres au carré sans dimension  $m\omega^2/\beta_{ZZ}$  pour les modes acoustiques transverse (violet) et longitudinal (vert) et pour les modes optiques transverse (rouge) et longitudinal (bleu) en fonction du nombre d'onde sans dimension  $q$  pour un système infini. Le potentiel d'interaction correspond à une fonction de Bessel modifiée, avec  $d/\lambda_0 = 3.91$  d'où  $\beta_{ZZ} = 5.82 \cdot 10^{-4} \text{ N/m}$ . (a)  $\beta = 10^{-3} \text{ N/m}$  (ligne droite,  $h = 0$ ); (b) juste au seuil  $\beta = \beta_{ZZ}$ ; (c)  $\beta = 5.15 \cdot 10^{-4} \text{ N/m}$  [soit une configuration zigzag de hauteur  $h = 0.2 \text{ mm}$ , voir équation (2.1)]. L'insert est un zoom sur le mode acoustique transverse; (d)  $\beta = 4.41 \cdot 10^{-6} \text{ N/m}$  [soit une configuration zigzag de hauteur  $h = 1.6 \text{ mm}$ , voir équation (2.1)]. Les courbes en tirets et en pointillés montrent les fréquences propres au carré lorsque les termes non diagonaux de la matrice dynamique (2.18) ne sont pas pris en compte.

### 2.3 Domaine de stabilité de la configuration zigzag

Dans cette section nous allons nous concentrer uniquement sur le mode acoustique transverse,  $\omega_{AT}^2(q)$ , que l'on notera pour la suite  $\omega^2(q)$ .

Ce mode est particulièrement intéressant car  $\omega^2(q)$  peut, selon le type d'interaction entre particules, présenter des valeurs négatives, correspondant à des fréquences imaginaires pures qui traduisent l'instabilité de la structure en zigzag. Nous allons ici déterminer ces conditions d'instabilité.

La figure 2.3 montre l'évolution de  $\omega^2$  avec  $q$  calculée pour trois types d'interaction différents : pour une interaction Coulombienne à trois dimensions en (a), pour une interaction de type fonction de Bessel modifiée [voir équation (2.32)] avec une longue portée d'interaction en (b) et une faible portée en (c). Sur chaque figure les relations de dispersion  $\omega^2(q)$  sont tracées pour deux valeurs de hauteurs différentes, et en se concentrant sur le comportement à très faible nombre d'onde  $q$ . Comme nous allons le démontrer plus loin, on observe que pour une interaction Coulombienne,  $\omega^2(q)$  est toujours positive ou nulle, ce qui signifie que la configuration zigzag est linéairement toujours

stable. Ce résultat était attendu au regard des résultats connus sur la transition zigzag dans les systèmes Coulombiens [52]. Cependant un comportement différent est observé pour des potentiels d'interaction à portée finie, comme l'interaction de type Bessel modifiée [voir équation (2.32)]. En effet on remarque que suivant la portée de l'interaction considérée,  $\omega^2(q)$  peut ne prendre aucune valeur négative, voir figure 2.3 (b), ou bien prendre des valeurs négatives pour certaines valeurs de paramètres  $h$  et  $q$ , comme présenté figure 2.3 (c).

Nous allons nous intéresser aux conditions pour lesquelles  $\omega^2(q)$  prend des valeurs négatives. Dans un premier temps (sous-section 2.3.1) nous développerons l'expression générale du mode  $\omega^2(q)$  pour déterminer les comportements caractéristiques de la relation de dispersion aux faibles nombres d'onde et obtenir une expression compacte pour la stabilité de la configuration zigzag. Dans un second temps nous développerons le rôle spécifique du potentiel d'interaction pour des interactions de type loi de puissance (sous-section 2.3.2) et pour des interactions de portée finie (sous-section 2.3.3), pour lesquelles nous regarderons le rôle spécifique de la portée de l'interaction sur la perte de stabilité du zigzag. Et enfin nous mettrons en avant (sous-section 2.3.4) la prise en compte du caractère discret dans cette analyse et nous déterminerons les expressions des hauteurs pour lesquelles un zigzag constitué d'un nombre fini de particules devient instable.

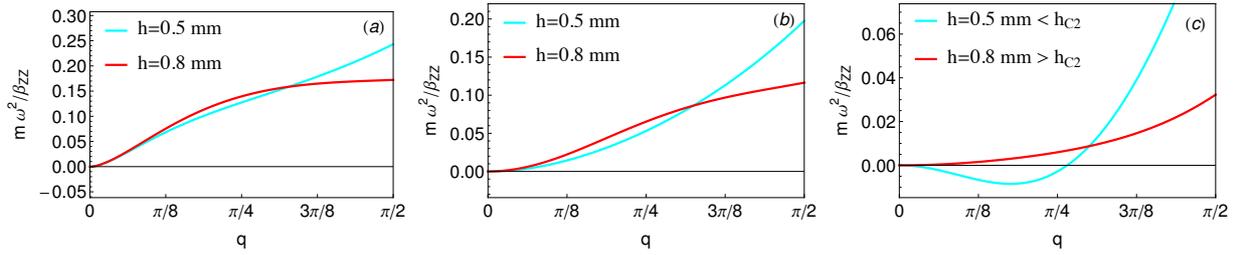


FIGURE 2.3 – Relation de dispersion adimensionnée  $m\omega^2/\beta_{ZZ}$  pour le mode acoustique transverse en fonction du nombre d'onde sans dimension  $q$  pour un système infini. Les potentiels d'interaction sont : (a) Coulombien à trois dimensions ( $\beta_{ZZ} = 1.40 \cdot 10^{-4} \text{ N/m}$ ,  $\beta = 9.80 \cdot 10^{-5} \text{ N/m}$  pour  $h = 0.5 \text{ mm}$  et  $\beta = 6.48 \cdot 10^{-5} \text{ N/m}$  pour  $h = 0.8 \text{ mm}$ ); (b) fonction de Bessel modifiée longue portée d'interaction  $\lambda_0 = 0.96 \text{ mm}$  ( $d/\lambda_0 = 3.91$  et  $\beta_{ZZ} = 3.13 \cdot 10^{-3} \text{ N/m}$ ,  $\beta = 1.97 \cdot 10^{-3} \text{ N/m}$  pour  $h = 0.5 \text{ mm}$  et  $\beta = 1.09 \cdot 10^{-3} \text{ N/m}$  pour  $h = 0.8 \text{ mm}$ ); (c) fonction de Bessel modifiée courte portée d'interaction  $\lambda_0 = 0.48 \text{ mm}$  ( $d/\lambda_0 = 1.95$  et  $\beta_{ZZ} = 5.82 \cdot 10^{-4} \text{ N/m}$ ,  $\beta = 2.84 \cdot 10^{-4} \text{ N/m}$  pour  $h = 0.5 \text{ mm}$  et  $\beta = 1.11 \cdot 10^{-4} \text{ N/m}$  pour  $h = 0.8 \text{ mm}$ ). Les échelles d'énergie sont telles que les interactions entre plus proches voisins pour  $h = 0$  sont identiques pour les trois potentiels. Le seuil critique de hauteur  $h_{C2}$  est défini dans l'équation (2.38).

### 2.3.1 Analyse générale de la perte de stabilité du zigzag

Comme on vient de le voir la perte de stabilité de la configuration zigzag est caractérisée par l'existence de fréquences  $\omega^2(q) < 0$  pour de très faibles valeurs de  $q$ . Pour ces valeurs, l'évolution de la relation de dispersion est donnée par la courbure pour  $q \rightarrow 0$ . Si celle-ci est positive alors la relation de dispersion le sera aussi. En revanche si la courbe est négative, ceci implique qu'il peut exister des modes  $\omega^2(q) < 0$  qui rendent la configuration instable. Proche de  $q = 0$  l'expression de

la relation de dispersion équation (2.20) s'écrit  $m\omega^2 = -S(h)q^2$  où  $S(h)$  est donnée par :

$$S(h) = \sum_{j=1}^{N-1} (2j)^2 K(2jd) + \sum_{j=1}^N (2j-1)^2 K_{xx}(j) + \frac{\left( \sum_{j=1}^N (2j-1) K_{xy}(j) \right)^2}{\left| \sum_{j=1}^N \left( K_{yy}(j) - \frac{F(r_j)}{r_j} \right) \right|} \quad (2.23)$$

Le zigzag sera donc instable si  $S(h)$  est positif.

Si on se restreint aux interactions entre plus proches voisins le calcul direct de  $S(h)$  donne :

$$S(h) = \frac{F(r_1)}{4r_1}, \quad (2.24)$$

$S(h)$  est alors toujours positif pour des interactions répulsives quelle que soit l'amplitude du zigzag  $h$ . Ainsi si seules les interactions entre plus proches voisins sont prises en compte, n'importe quelle forme de zigzag est instable vis-à-vis de perturbation à grande longueur d'onde ( $q \rightarrow 0$ ). Cette valeur limite est représentée par la ligne noire dans les figures 2.4. Il est donc nécessaire de prendre en compte au minimum les interactions avec les seconds voisins pour décrire la stabilité de la configuration zigzag<sup>5</sup>.

Nous allons développer l'expression de la courbure de la relation de dispersion à l'origine, pour des faibles hauteurs de zigzag  $h$ . La symétrie  $h \leftrightarrow -h$  du problème, impose que ce développement s'écrive :

$$S(h) = S_0 + S_2 h^2 + \mathcal{O}(h^4). \quad (2.25)$$

Pour de faibles hauteurs  $h$ , on peut déterminer une valeur de hauteur  $h$  de limite de stabilité. Cette hauteur correspond à l'existence d'une racine réelle  $\sqrt{-S_0/S_2}$ , et elle sépare les hauteurs des configurations zigzag stable ou non. Un calcul long mais direct nous permet d'obtenir les expressions complètes de ces coefficients en prenant en compte l'interaction avec toutes les particules du système :

$$S_0 = \sum_{j=1}^N [(2j)^2 K(2jd) + (2j-1)^2 K(d_j)] + \frac{\left[ \sum_{j=1}^N \left( K(d_j) - \frac{F(d_j)}{d_j} \right) \right]^2}{\left| \sum_{j=1}^N \left( \frac{K(d_j)}{d_j^2} - \frac{F(d_j)}{d_j^3} \right) \right|}, \quad (2.26)$$

---

5. Ce sont les interactions entre seconds voisins qui maintiennent la structure en zigzag stable, car elles contrebalancent le confinement exercé sur le système.

et

$$\begin{aligned}
S_2 = & 4 \sum_{j=1}^N (2j-1)^2 \left[ \frac{F(d_j)}{d_j^3} + \frac{K'(d_j)}{2d_j} - \frac{K(d_j)}{d_j^2} \right] + \\
& + 4 \frac{\sum_{j=1}^N \left( K(d_j) - \frac{F(d_j)}{d_j} \right)}{\left[ \sum_{j=1}^N \left( \frac{K(d_j)}{d_j^2} - \frac{F(d_j)}{d_j^3} \right) \right]} \sum_{j=1}^N \left( \frac{3F(d_j)}{d_j^3} + \frac{K'(d_j)}{d_j} - \frac{3K(d_j)}{d_j^2} \right) + \\
& + \frac{\sum_{j=1}^N \left( \frac{6F(d_j)}{d_j^5} + \frac{2K'(d_j)}{d_j^3} - \frac{6K(d_j)}{d_j^4} \right) \left[ \sum_{j=1}^N \left( K(d_j) - \frac{F(d_j)}{d_j} \right) \right]^2}{\left[ \sum_{j=1}^N \left( \frac{K(d_j)}{d_j^2} - \frac{F(d_j)}{d_j^3} \right) \right]^2}, \tag{2.27}
\end{aligned}$$

Ces expressions complètes sont formelles et nous seront utiles pour déterminer les conditions précises de stabilité du zigzag pour tout type d'interaction. Cependant dans la section 2.3.4 nous présenterons des développements asymptotiques de ces expressions pour obtenir une estimation rapide des seuils de conditions de stabilité du zigzag.

### 2.3.2 Cas des interactions de type loi de puissance

En étudiant les fréquences propres  $\omega_{AT}^2(q)$  pour différents potentiels nous avons mis en évidence l'influence de la portée de l'interaction entre particules sur la stabilité de la configuration zigzag. Nous revenons sur cet aspect dans cette section pour nous concentrer sur les résultats obtenus pour des potentiels d'interaction entre particules de type loi de puissance, de la forme :

$$U_\alpha(r) = U_0 \left( \frac{\lambda}{r} \right)^\alpha \tag{2.28}$$

#### § Influence de l'exposant de la loi

Aucun domaine instable n'est observé pour des interactions en loi de puissance avec  $\alpha = 1$  et  $\alpha = 2$ . Les courbes de limite de stabilité  $\omega^2 = 0$  dans le plan  $(h/d, q)$  pour différentes valeurs d'exposant supérieures  $\alpha$  de loi de puissance sont présentées figure 2.4 (a). À l'intérieur du domaine fermé défini par l'axe  $h/d$  et la courbe de limite de stabilité, on a  $\omega^2(h/d, q) \leq 0$ . Pour de telles interactions, la configuration en zigzag est alors toujours linéairement stable. Ceci est cohérent avec les relations de dispersion discutées précédemment [voir figure 2.3 (a)] et avec les résultats montrant que pour des interactions de type Coulombienne à trois dimensions la configuration zigzag est toujours stable [52].

On trouve cependant que pour une interaction en loi de puissance avec  $\alpha = 3$ , correspondant à une interaction dipolaire à trois dimensions entre les particules, et pour des puissances plus élevées il existe un domaine de hauteurs à l'intérieur duquel la configuration zigzag est instable

[voir figure 2.4 (a)]. On remarque également que la surface de la zone instable augmente avec  $\alpha$ . On déterminera par la suite la valeur de la puissance exacte à partir de laquelle le domaine d'instabilité apparaît.

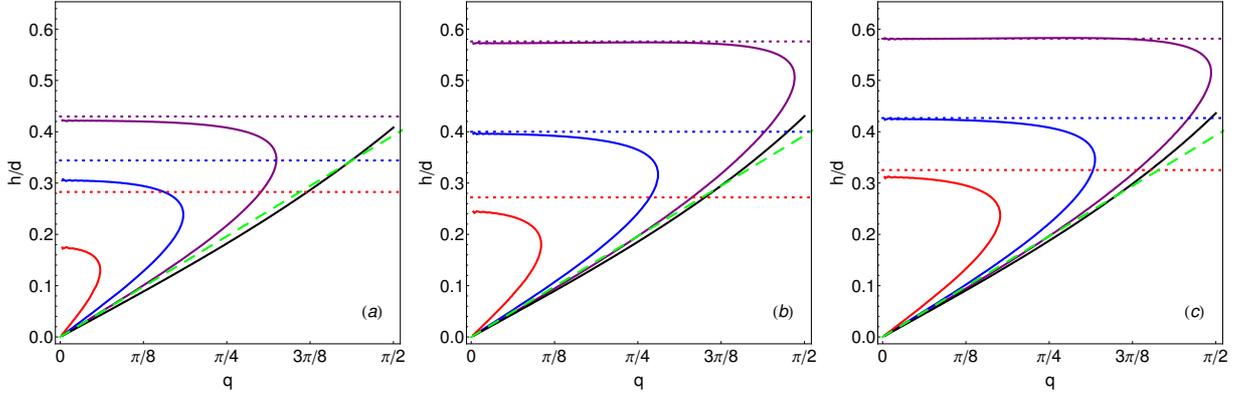


FIGURE 2.4 – Ligne de limite de stabilité  $\omega^2(h/d, q) = 0$  dans le plan  $(h/d, q)$ . Les potentiels d'interaction sont : (a) interaction de type loi de puissance ; (b) fonction de Bessel modifiée ; (c) Yukawa. Pour la figure (a) les couleurs correspondent à  $\alpha = 3$  (en rouge),  $\alpha = 4$  (en bleu) et  $\alpha = 5$  (en violet). Et pour les figures (b) et (c), les couleurs correspondent à différentes portées d'interaction,  $d/\lambda_0 = 2.60$  (en rouge), 3.91 (en bleu) et 7.81 (en violet). La courbe en trait plein noir correspond aux valeurs de limite de stabilités quand seulement l'interaction entre plus proches voisins est prise en compte [voir équation (2.24)]. La droite en tiret vert correspond au seuil  $h_{C1}$  présenté équation (2.37) et les lignes colorées pointillées aux seuils  $h_{C2}$  présentés équation (2.38).

### § Influence de la taille du système

Considérons maintenant la courbe de limite de stabilité présentée cette fois-ci dans le plan  $(h/d, \alpha)$  pour différentes tailles de systèmes,  $2N = 8$ ,  $2N = 16$ ,  $2N = 32$  et  $2N = 64$  particules [voir figure 2.5 (a)]. La configuration zigzag est instable à l'intérieur de la zone entourée par la courbe de limite de stabilité (partie droite). On remarque cette fois-ci que la surface de la zone instable augmente avec la taille du système (du violet au vert), et que la surface de cette zone tend vers celle déterminée à partir de l'équation (2.23) obtenue pour un système infini dans la limite des petits  $q$ . À noter également que pour des systèmes de taille finie, si l'on augmente progressivement la hauteur du zigzag, comme on le ferait en diminuant le confinement, le système présente tout d'abord une configuration en zigzag stable pour les très petites hauteurs, puis cette configuration se déstabilise à l'arrivée dans le domaine instable, avant que le système ne retrouve une configuration en zigzag stable pour de très grandes valeurs de  $h$ .

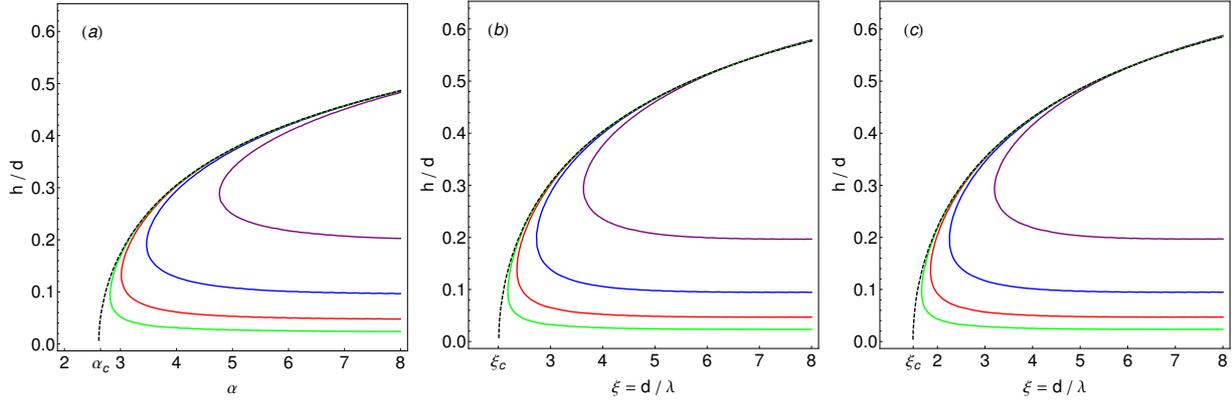


FIGURE 2.5 – Courbes de limite de stabilité  $\omega^2 = 0$  dans le plan  $(h/d, \alpha)$  pour (a) et dans le plan  $(h/d, \xi = d/\lambda)$  pour (b)–(c). Les potentiels d’interaction sont : (a) interaction en loi de puissance d’exposant  $\alpha$  ; (b) fonction de Bessel modifiée ; (c) Yukawa. Pour chacune des figures, les couleurs correspondent à différentes tailles de systèmes,  $2N = 8$  (en violet),  $2N = 16$  (en bleu),  $2N = 32$  (en rouge) et  $2N = 64$  (en vert). La courbe en tirets noirs correspond aux valeurs de hauteurs limites au delà desquelles le zigzag est stable pour un système infini, voir équation (2.23).

### § Valeurs critiques de puissance

Une expression analytique pour la courbe de limite de stabilité délimitant le domaine d’instabilité est difficile à obtenir, mais il est toutefois possible de trouver une expression approchée pour les petites valeurs de hauteurs  $h$ , à partir des équations (2.26) et (2.27). Pour une interaction entre particules en loi de puissance, comme présentée équation (2.28), on peut alors écrire :

$$S_0(\alpha) = -\alpha(\alpha + 1)\zeta(\alpha) + \frac{\alpha(\alpha + 2) \left(1 - \frac{1}{2^{\alpha+2}}\right)^2 \zeta(\alpha + 2)^2}{\left(1 - \frac{1}{2^{\alpha+4}}\right) \zeta(\alpha + 4)} \quad (2.29)$$

$$S_2(\alpha) = 2\alpha(\alpha + 2) \left(1 - \frac{1}{2^{\alpha+2}}\right)^2 \zeta(\alpha + 2)^2 \left[ \frac{(\alpha + 4) \left(1 - \frac{1}{2^{\alpha+6}}\right) \zeta(\alpha + 6)}{\left(1 - \frac{1}{2^{\alpha+4}}\right)^2 \zeta(\alpha + 4)^2} - \frac{(\alpha + 5)}{\left(1 - \frac{1}{2^{\alpha+2}}\right) \zeta(\alpha + 2)} \right] \quad (2.30)$$

où les expressions ont pu être écrites de façon plus compactes à l’aide des fonctions Zeta de Riemann  $\zeta(s)$ , telles que :

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^s} \equiv \zeta(s), \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n)^s} \equiv \frac{1}{2^s} \zeta(s), \quad \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(2n-1)^s} \equiv \left(1 - \frac{1}{2^s}\right) \zeta(s). \quad (2.31)$$

$S(h)$  a été exprimé ici et dans la suite en unité de  $U_0/d^2$ .

On trouve ainsi que  $S_2(\alpha) < 0$  pour toutes valeurs de  $\alpha$ , tandis que  $S_0(\alpha) \leq 0$  pour  $\alpha \leq 2.645$  [voir figure 2.6 (a)]. Ceci signifie que la configuration zigzag est linéairement stable tant que la puissance de l’interaction entre particules est inférieure à la puissance seuil  $\alpha_c = 2.645$ . On retrouve alors que pour une interaction Coulombienne à trois dimensions ( $\alpha = 1$ ) un système infini est toujours stable, car toutes les fréquences propres sont positives. Comme nous l’avons précisé précédemment ce résultat confirme les conclusions des références [52]. À l’inverse pour une

interaction de type dipolaire ( $\alpha = 3$ ) on trouve qu'un système infini est instable, car il existe des racines réelles  $\sqrt{-S_0/S_2}$ .

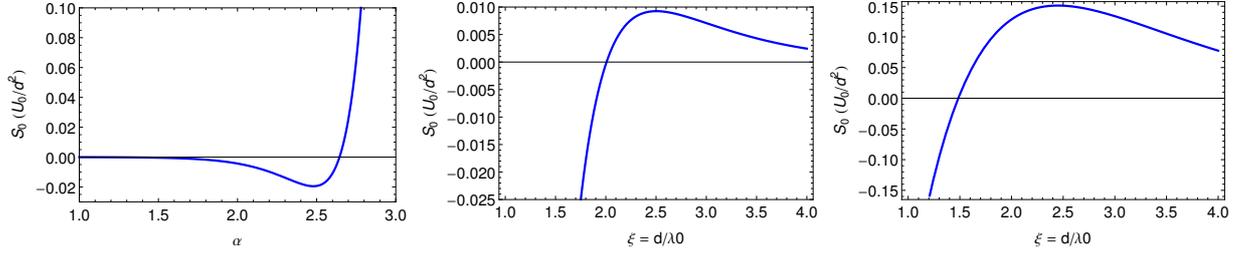


FIGURE 2.6 – (a) Évolution de  $S_0$  en fonction de  $\alpha$  pour une interaction en loi de puissance du type  $U_\alpha(r) = U_0 \frac{d^\alpha}{r^\alpha}$ ; (b) et (c) Évolutions de  $S_0$  en fonction de  $\xi$  pour des interactions respectivement en fonction de Bessel modifiée et de type Yukawa. Dans toutes les figures nous avons utilisé l'unité  $U_0/d^2$  pour  $S_0$ .

### 2.3.3 Cas des interactions de portée finie

Dans cette sous-section nous nous intéressons à deux types de potentiels d'interaction entre particules de portée finie. Le premier varie comme une fonction de Bessel modifiée :

$$U(r) = U_0 K_0 \left( \frac{r}{\lambda} \right) \quad (2.32)$$

Il correspond à l'interaction entre particules métalliques placées dans un condensateur comme dans nos expériences [55, 24, 31] ou entre vortex dans les supraconducteurs [29]. Le second type de potentiel correspond au potentiel de type Yukawa :

$$U(r) = U_0 \left( \frac{\lambda e^{-\frac{r}{\lambda}}}{r} \right) \quad (2.33)$$

Il caractérise des interactions électrostatiques écrantées comme par exemple entre particules chargées dans les plasmas chauds [98, 97, 108, 74]. Ces deux types d'interaction sont caractérisés par leur portée  $\lambda_0$  qu'il est intéressant de comparer à la distance moyenne entre particules  $d$ . On notera ainsi  $\xi = d/\lambda_0$  l'inverse de la portée de l'interaction adimensionnée par la distance entre particules.

#### § Influence de la portée

De manière similaire à l'analyse des interactions en loi de puissance, nous allons commencer par nous intéresser à l'influence de la portée sur l'existence et l'extension du domaine d'instabilité dans le plan  $(h/d, q)$ . Les figures 2.4 (b)–(c) présentent les courbes de limite de stabilité  $\omega^2 = 0$  dans ce plan pour différentes valeurs de portées d'interaction.

La figure 2.4 (b) montre le domaine d'instabilité pour une interaction de type fonction de Bessel modifiée, et pour différentes portées d'interaction tout en gardant une échelle d'énergie constante  $U_0$ . Nous voyons que l'extension du domaine instable diminue quand la portée de l'interaction augmente. Le même comportement est observable pour une interaction de type Yukawa, comme le montre la

figure 2.4 (c). Et pour les deux types d'interactions on observe qu'au delà d'une valeur critique de portée, le domaine instable disparaît laissant place à un système dans lequel la configuration zigzag est toujours stable. Cette stabilisation du zigzag lorsque la portée de l'interaction devient très grande est en bon accord avec le résultat montré à la section précédente sur la stabilité inconditionnelle du zigzag dans le cas d'interaction Coulombienne. En revanche, dans la limite des très courtes portées, réduisant les interactions uniquement aux plus proches voisins, la structure en zigzag présente une instabilité de grande longueur d'onde ( $q \ll 1$ ) pour toutes les hauteurs  $h$  [voir lignes noires figures. 2.4 (b) et (c)]. On retrouve ici le résultat présenté équation (2.24), sur la perte de stabilité de la configuration en zigzag quand seules les interactions avec les plus proches voisins sont prises en compte.

### § Influence de la taille du système

Afin de mieux visualiser le rôle de la portée de l'interaction, on s'intéresse à la courbe de limite de stabilité dans le plan ( $h/d, \xi = d/\lambda_0$ ). Les figures 2.5 (b)–(c) montrent l'évolution de cette courbe de limite de stabilité pour des systèmes de différentes tailles,  $2N = 8, 2N = 16, 2N = 32$  et  $2N = 64$  particules. Les domaines délimités par les courbes de limite de stabilité correspondent aux hauteurs pour lesquelles le zigzag est instable. L'extension de la zone instable augmente avec la taille du système pour une interaction de type Bessel modifiée comme pour une interaction de type Yukawa. L'extension de la zone instable dans la limite d'un système infini tend vers le domaine délimité par la courbe hachurée en noire, cette courbe correspond valeurs pour lesquelles le développement de  $S(h)$  présenté équation (2.23) s'annule. Pour des systèmes de taille finie il existe toujours un domaine correspondant à des faibles hauteurs de zigzag pour lesquelles la configuration zigzag est stable. Ce domaine de stabilité du zigzag à faible hauteur diminue avec la taille du système.

### § Valeurs critiques de la portée

Il est également possible d'obtenir pour ces interactions de portée finie, les valeurs critiques de portées à partir desquelles la configuration zigzag est toujours stable (aucun mode de fréquence propre nulle n'apparaît). Nous utilisons pour cela le développement de  $S(h)$  pour les petites valeurs de  $h$  en fonction de  $S_0$  et  $S_2$ , équations (2.26) et (2.27). Comme précédemment on trouve numériquement que la fonction  $S_2(\xi)$  est strictement négative pour tout  $\xi$ , et il ne reste plus qu'à nous concentrer sur l'expression de  $S_0(\xi)$ . Pour une interaction en Bessel modifiée  $K_0(\cdot)$  on trouve :

$$S_0(\xi) = \frac{\left[ \sum_{p=1}^{\infty} \left( 2 \frac{K_1((2p-1)\xi)}{(2p-1)\xi} + K_0((2p-1)\xi) \right) \right]^2}{\sum_{p=1}^{\infty} \left( 2 \frac{K_1((2p-1)\xi)}{(2p-1)^3\xi} + \frac{K_0((2p-1)\xi)}{(2p-1)^2} \right)} - \sum_{p=1}^{\infty} \left[ \frac{pK_1(p\xi)}{\xi} + p^2 K_0(p\xi) \right], \quad (2.34)$$

où  $K_1(\cdot)$  est la fonction de Bessel modifiée d'ordre 1. Pour une interaction de type Yukawa on a :

$$S_0(\xi) = \frac{\left[ \sum_{p=1}^{\infty} \frac{e^{-(2p-1)\xi}}{(2p-1)^3} \left[ \xi^2(2p-1)^2 + 3\xi(2p-1) + 3 \right] \right]^2}{\sum_{p=1}^{\infty} \frac{e^{-(2p-1)\xi}}{(2p-1)^3} \left( \xi^2(2p-1)^2 + 3\xi(2p-1) + 3 \right)} - \sum_{p=1}^{\infty} \frac{e^{-p\xi}}{p} (p^2\xi^2 + 2p\xi + 2). \quad (2.35)$$

Les figures 2.6 (b) et (c) montrent l'estimation numérique des expressions (2.34) et (2.35). Elles permettent d'obtenir les valeurs de portée d'interaction critique à partir desquelles un zigzag infini serait instable,  $d/\lambda_0 > \xi_c = 2.04$  pour un potentiel de type fonction de Bessel modifiée et  $d/\lambda_0 > \xi_c = 1.49$  pour un potentiel de type Yukawa. Ces valeurs critiques sont représentées figures 2.5 (b)–(c). On remarque que ce résultat est cohérent avec la limite de portée infinie ( $\lambda_0 \rightarrow \infty$ ) pour une interaction de type Yukawa qui tend vers l'interaction Coulombienne, et dans la limite opposée on trouve que pour  $\lambda_0 \rightarrow 0$  la condition  $d/\lambda_0 > \xi_c$  est toujours vérifiée ce qui signifie que le système est toujours instable.

### 2.3.4 Influence du nombre de particules

On s'intéresse dans cette sous-section à l'influence du nombre de particules sur la stabilité de la configuration zigzag. En effet nous allons voir qu'il est possible d'avoir, pour un système de paramètres physiques identiques, avec la même distance entre particules et la même raideur transverse, une configuration en zigzag qui sera instable pour un système avec un grand nombre de particules mais stable pour un système avec un nombre plus réduit de particules.

La figure 2.7 montre à titre d'exemple les fréquences des modes propres au carré pour des systèmes de 32, 64 et 128 particules dans le cas où une telle situation peut arriver. Avec un nombre fini de particules, le nombre de modes accessibles au système est lui aussi fini, de telle sorte que pour un système de  $2N$  particules, la plus petite valeur de nombre d'onde  $q$  non nulle accessible au système est  $\pi/N$ . Les valeurs discrètes de fréquences accessibles au système sont distribuées le long de la courbe générique obtenue pour un système infini. Cependant on observe que tous les carrés des fréquences sont positifs pour un système de 32 particules alors que les plus petits nombres d'ondes pour des systèmes plus grands (64 ou 128 particules) correspondent à des valeurs négatives [voir figure 2.7].

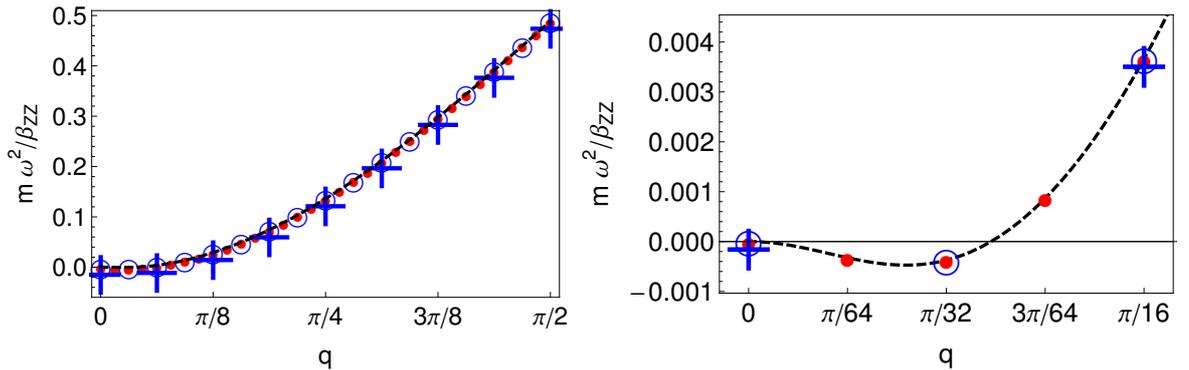


FIGURE 2.7 – Illustration des effets de taille finie. La ligne en pointillés noirs est l'évolution de la fréquence propre au carré adimensionné  $m\omega^2/\beta_{ZZ}$  en fonction du nombre d'onde sans dimension  $q$  pour un système infini, pour une interaction en fonction de Bessel modifiée,  $d/\lambda_0 = 3.91$  et  $h = 0.06$  mm ( $\beta = 5.76 \cdot 10^{-4}$  N/m). Les modes discrets sont présentés pour 32 particules (croix bleues), 64 particules (cercles bleus) et 128 particules (points rouges). La figure de droite correspond à un zoom pour les petits nombres d'ondes.

On retrouve l'influence du nombre fini de particules dans la compréhension du diagramme de phase ( $h/d, q$ ). Celui-ci permet de définir les valeurs de hauteurs à partir desquelles la configuration

zigzag est instable. En effet si l'on considère une configuration zigzag d'amplitude  $h_0$  pour un système de  $2N$  particules alors la position du point  $(h_0/d, \pi/N)$  dans le plan  $(h/d, q)$  détermine la stabilité de la structure en zigzag. Si ce point se trouve à l'intérieur du domaine d'instabilité alors cette configuration zigzag sera instable, alors que si ce point se trouve à l'extérieur du domaine la configuration zigzag sera stable.

## 2.4 Seuils de perte de stabilité du zigzag

### § Expression des seuils de stabilité

Pour un système fini donné la configuration zigzag est instable si la hauteur du zigzag est comprise entre  $h_{C1} < h_0 < h_{C2}$  [voir figure 2.8]. Nous allons présenter une estimation de ces hauteurs seuils afin d'obtenir des critères semi-quantitatifs d'instabilité.

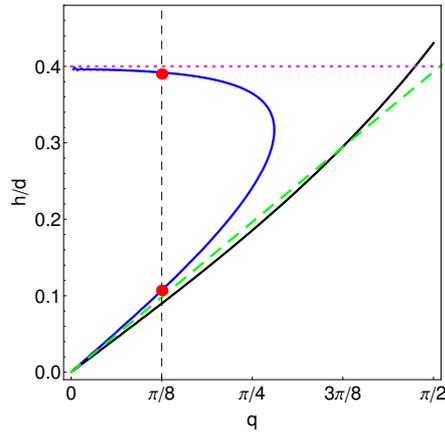


FIGURE 2.8 – Courbe de limite de stabilité  $\omega^2(h/d, q) = 0$  dans le plan  $(h/d, q)$ , en bleu. Pour un potentiel d'interaction en fonction de Bessel modifiée avec  $d/\lambda_0 = 3.91$ . La courbe en trait plein noir correspond aux valeurs de limite de stabilité lorsque seule l'interaction entre plus proches voisins est prise en compte, voir équation (2.24). La courbe en tirets verts correspond au seuil  $h_{C1}$  [voir équation (2.37)] et la ligne en pointillés magentas aux seuils  $h_{C2}$  [voir équation (2.38)]. Les points rouges correspondent aux hauteurs seuils pour lesquelles une configuration zigzag de 16 particules se déstabilise, pour un tel système le plus petit nombre d'onde accessible vaut  $q = \pi/8$ .

À partir des équations (2.20) et (2.22), on peut re-écrire la condition de limite de stabilité,  $\omega_{AT}^2 = 0$ , comme :

$$\left(\frac{\beta}{2} - C_{yy}(s) - C_{yv}(s)\right) \left(C_{xx}(s) - C_{xu}(s)\right) = C_{xv}(s)^2, \quad (2.36)$$

où  $\beta$  est donné comme une fonction de  $h$  à partir de l'équation (2.1).

Pour déterminer la valeur de hauteur seuil  $h_{C1}$  on tire avantage de la faible valeur de  $h$  et de  $q$ . La courbe de  $\omega^2(h, q) = 0$  calculée uniquement à partir des premiers plus proches voisins est très proche de la courbe de limite de stabilité [voir figures 2.4 (a)–(c)]. Il est donc suffisant

de prendre l'interaction entre plus proches voisins pour estimer la valeur de  $h_{C1}$ , en développant l'expression (2.36) pour les petites hauteurs  $h$  on trouve pour valeur seuil  $h_{C1}$  :

$$\frac{h_{C1}}{d} \approx \frac{\pi s}{4N} \sqrt{\frac{K(d_1)}{K(d_1) + F(d_1)/d_1}} \approx \frac{\pi s}{4N} = \frac{q}{2}, \quad (2.37)$$

puisque  $F(d_1)/d_1$  est beaucoup plus petit que  $K(d_1)$ .

Les figures 2.4 (a)–(c) nous permettent de voir que la valeur de hauteur seuil  $h_{C2}$  est presque indépendante de  $q$ . On peut donc développer l'expression (2.36) pour les petites valeurs de  $q$ , en prenant simplement en compte les interactions avec les seconds plus proches voisins car elles sont nécessaires pour que la condition  $h_{C2}$  existe. On trouve alors que  $h_{C2}$  vérifie la condition :

$$\frac{F(\sqrt{d^2 + 4h_{C2}^2})}{\sqrt{d^2 + 4h_{C2}^2}} + 4K(2d) \approx 0 \quad (2.38)$$

Sur les figures 2.4 on observe le très bon accord entre ces estimations et les lignes de contour  $\omega^2(h/d, q) = 0$ . Les désaccords sur la valeur de  $h_{C2}$  apparaissent pour les potentiels avec les plus longues portées, ce qui est cohérent avec notre analyse puisque nous avons uniquement pris en compte les interactions avec les seconds plus proches voisins.

### § Comparaison avec les simulations

Les résultats obtenus par l'analyse linéaire des modes propres de la configuration zigzag sont validés par nos simulations de dynamique moléculaire effectuées sur des systèmes de particules ayant pour interaction des fonctions de Bessel modifiées ou des lois de puissance caractérisées par un exposant  $\alpha$  [voir équation (2.28)]. On s'intéresse maintenant aux configurations d'équilibre prises par un système avec  $2N$  particules en fonction du confinement transverse appliqué. La raideur du confinement varie sur une large gamme faisant ainsi évoluer de manière importante les hauteurs de zigzag attendues à partir de la relation présentée équation (2.1).

L'étude des configurations prises par le système nous permet de définir tout un intervalle de hauteurs pour lesquelles la configuration du système ne correspond pas à un zigzag homogène stable [voir figure 3.1]. De cette manière on détermine la hauteur  $h_{C1}$  au delà de laquelle la configuration prise par le système n'est plus un zigzag homogène stable et de façon complémentaire la hauteur  $h_{C2}$  pour laquelle le système présente de nouveau une configuration zigzag.

Sur la figure 2.9 nous présentons les mesures systématiques des valeurs de hauteurs  $h_{C1}$  et  $h_{C2}$ . Dans ces simulations, seul le nombre de particules dans le système varie (autrement dit la taille du système), la distance entre particules et le potentiel d'interaction eux restent constants, une cellule cyclique étant prise de longueur  $L = 2Nd$  pour un système de  $2N$  particules ( $2N = 8, 16, 32, 64$ ). Les mesures des seuils de hauteurs critique  $h_{C1}$  et  $h_{C2}$  sont comparées aux solutions de l'équation (2.36) pour un système infini. Comme le montre la figure 2.9, les valeurs mesurées en simulation sont en très bon accord avec les seuils calculés à l'aide de la courbe de limite de stabilité.

De manière similaire il est possible de comparer les seuils critiques de hauteurs  $h_{C1}$  et  $h_{C2}$  délimitant la zone dans laquelle le zigzag est instable obtenus à partir des simulations pour différentes

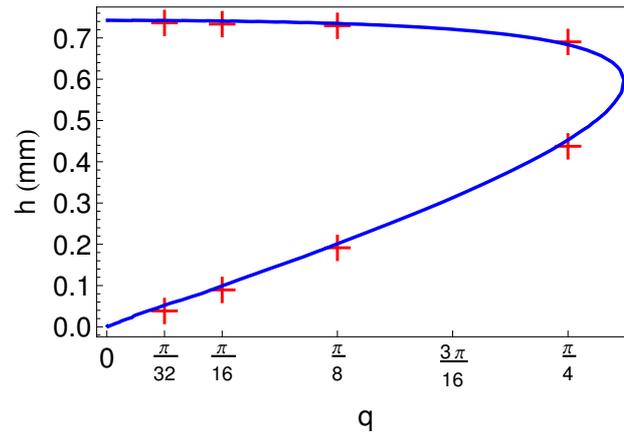


FIGURE 2.9 – La courbe bleue représente les valeurs de limite stabilité  $\omega^2 = 0$ , dans le plan  $(q, h)$ , comme déjà représenté dans la figure 2.4 (b). Les croix rouges correspondent aux hauteurs seuils  $h_{C1}$  et  $h_{C2}$  mesurées à partir de simulations pour différents nombres de particules,  $N = 32, 16, 8$  et  $4$  de gauche à droite (pour la valeur de nombres d'onde sans dimension,  $q = \pi/32, \pi/16, \pi/8$  et  $\pi/4$ ).

tailles de systèmes et pour différentes portées d'interaction. Cette comparaison est présentée dans la figure 2.10 pour deux types d'interactions. Dans la figure 2.10 (a) l'interaction est de type fonction de Bessel modifiée et on fait varier la portée  $\lambda_0$  de l'interaction alors que dans la figure 2.10 (b) l'interaction est en loi de puissance et on fait varier l'exposant  $\alpha$  de l'interaction. Dans les deux cas on observe un excellent accord entre la simulation et la courbe de limite de stabilité obtenue à partir de l'analyse de stabilité linéaire. Cet accord confirme la pertinence de l'analyse linéaire et justifie son utilisation quantitative pour une grande diversité d'interaction.

## 2.5 Conclusion

Nous avons réalisé ici une analyse de stabilité linéaire de la configuration en zigzag en calculant les modes propres de cette configuration. L'étude de l'évolution des modes propres en fonction des paramètres du problème, comme la hauteur du zigzag, le potentiel d'interaction entre particules ou le nombre de particules, nous a permis de mettre en évidence l'existence de modes propres de fréquence imaginaire pure rendant la configuration considérée instable.

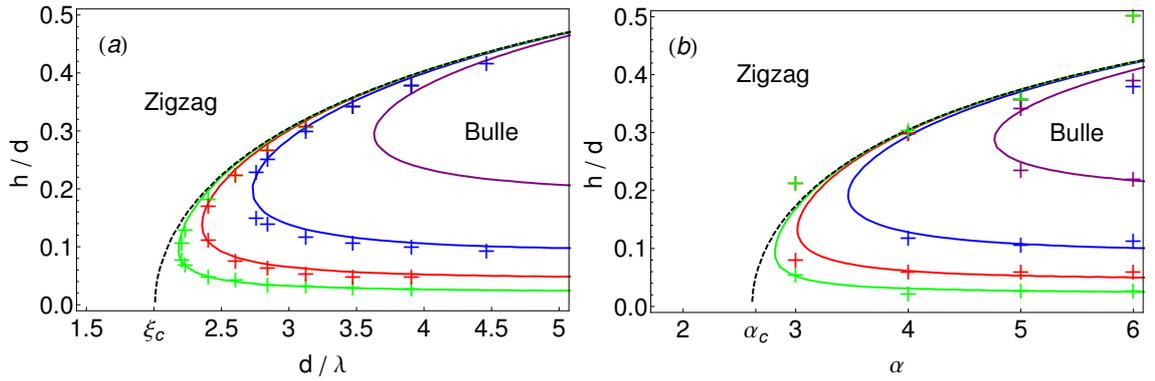


FIGURE 2.10 – Courbes de limite de stabilité  $\omega^2 = 0$ , (a) pour une interaction de type Bessel modifiée dans le plan  $(d/\lambda, h/d)$  et (b) pour une interaction de type loi de puissance dans le plan  $(\alpha, h/d)$ , comme déjà présenté dans les figures 2.5. Les croix de couleurs correspondent aux hauteurs seuils  $h_{C1}$  et  $h_{C2}$  mesurées à partir de simulations pour différents nombres de particules,  $2N = 64, 32, 16$  et  $8$ , respectivement en vert, rouge, bleu et violet ; et pour différentes valeurs de portées  $\lambda$  pour la figure (a) et différentes valeurs d'exposants  $\alpha$  figure (b).

Pour des systèmes infinis, l'étude des modes propres acoustiques transverses montre que la structure en forme de zigzag est toujours stable pour des particules en interaction Coulombienne. Pour des interactions de portée finie, le zigzag peut en revanche être instable. Ceci est caractérisé par l'existence d'un domaine d'instabilité dans le plan  $(h/d, q)$  où  $h$  correspond à la hauteur du zigzag et  $q$  au nombre d'onde. Pour une distance inter-particules donnée, l'extension du domaine instable augmente avec la diminution de la portée de l'interaction.

Nous avons ensuite considéré des systèmes de taille finie cycliques pour lesquels la situation est légèrement plus complexe. À cause du nombre discret de modes de vibration accessibles au système, il est possible, pour les systèmes avec un faible nombre de particules, que toutes les fréquences propres soient positive alors que la relation de dispersion continue est négative aux très faibles nombres d'ondes. Les valeurs des hauteurs de zigzag seuils pour lesquelles le système devient instable ont été déterminées en fonction du nombre de particules  $N$  et de la portée  $\lambda_0$  dans les équations (2.37) et (2.38). La comparaison de ces résultats analytiques à ceux obtenus par simulation a validé la description des hauteurs de zigzag seuils obtenues par l'analyse des modes propres de la configurations zigzag.

Nous allons maintenant étudier le devenir de la structure zigzag lorsqu'elle est instable. Pour cela, nous allons voir dans les chapitres 3,4 et 5 qu'il est nécessaire de développer une analyse non linéaire de la transition. Ces chapitres présenteront notamment l'étude précise des formes des structures observées à l'intérieur du domaine instable.



## Chapitre 3

# Modèle non linéaire de la transition zigzag

### Sommaire

---

<b>3.1 Introduction</b>	<b>51</b>
<b>3.2 Configuration zigzag inhomogène dans la zone instable</b>	<b>52</b>
3.2.1 Configurations et coexistence de phases à l'intérieur du domaine d'instabilité	53
3.2.2 Un modèle simple de la coexistence de phases	55
<b>3.3 Comportement hystérétique de la bifurcation zigzag</b>	<b>57</b>
<b>3.4 Modèle non linéaire de la transition zigzag dans la limite thermodynamique</b>	<b>60</b>
3.4.1 Invariance par translation et couplage avec le mode de phase	60
3.4.2 Validation du choix des lois d'échelle	62
3.4.3 Caractère sous-critique de la bifurcation	64
3.4.4 Estimations numériques de $\alpha$	67
<b>3.5 Conclusion</b>	<b>69</b>

---

### 3.1 Introduction

Comme nous venons de le voir, la configuration zigzag peut présenter une instabilité lorsque l'interaction entre particules est de courte portée. Pour des systèmes avec un nombre fini de particules, cette instabilité se caractérise par l'existence d'un intervalle de hauteur de zigzag à l'intérieur duquel le système adopte une autre configuration que la configuration homogène.

Nous commencerons ce chapitre en décrivant qualitativement les configurations prises par le système dans cette zone d'instabilité [voir section 3.2]. Ces configurations correspondent à une coexistence de phases entre particules en zigzag et particules en ligne, que nous décrivons qualitativement avec un modèle énergétique simple.

Nous verrons ensuite dans la section 3.3 que les observations des structures d'équilibre prises par le système lorsque le confinement augmente ou diminue mettent en évidence un comportement

hystérétique du système. L'influence de la taille du système et de la portée de l'interaction sur cet hystérésis sera également discutée.

Ces observations de coexistence de phase et de comportement hystérétique suggèrent une transition décrite par une bifurcation sous-critique. Nous chercherons à développer une description non linéaire de la transition afin de capturer ces comportements sous-critiques.

Plus généralement, ce changement de caractère de la bifurcation zigzag dans des systèmes périodiques par rapport aux systèmes finis avec des conditions aux bords répulsives s'inscrit dans un contexte plus large au sein de la théorie des bifurcations. Comme nous l'avons évoqué en introduction, dans le cadre de problèmes d'instabilité en géométries étendues ou annulaires pour lesquels une bifurcation fourche surcritique était attendue, des expériences dans des cellules périodiques ou étendues ont montré néanmoins des comportements sous-critiques.

L'explication du phénomène réside dans le couplage entre un mode associé à l'invariance par translation ou à l'invariance par rotation dans ces systèmes et le mode mou lié à l'instabilité. Ce couplage peut entraîner le changement de caractère de la bifurcation qui devient alors sous-critique [49, 18, 48].

Dans la description de ce mécanisme proposé référence [18], les termes de la forme normale de la bifurcation sont déduits uniquement à partir d'arguments de symétrie. Nous pouvons au contraire, dans notre système, déterminer les coefficients numériques de la forme normale à partir de la dynamique microscopique sous-jacente. Nous serons ainsi capables de vérifier quantitativement le changement de caractère de la bifurcation en le comparant avec les simulations. Le très bon accord trouvé constitue une des premières validations quantitatives du mécanisme de couplage entre modes mous au seuil de bifurcation.

La construction perturbative de la forme normale proche du seuil de bifurcation à la limite thermodynamique sera explicitée dans la section 3.4. Nous identifierons alors les types d'interaction et les paramètres pour lesquels la transition est effectivement sous-critique.

Ces travaux reprennent les résultats de la publication, *Subcriticality of the zigzag transition : A nonlinear bifurcation analysis*, *Phys. Rev. E* [37].

## 3.2 Configuration zigzag inhomogène dans la zone instable

Dans cette section les configurations prises par le système à l'intérieur de la zone où le zigzag homogène est instable seront décrites qualitativement. Ces configurations ont été observées dans un système de 32 particules en cellule cyclique par J. B. Delfau [30]. Nous reprendrons ici une partie de sa description en présentant tout d'abord les configurations prises par le système lorsque l'on fait varier la hauteur de la configuration zigzag en changeant le potentiel de confinement, comme suggéré équation 2.1. Pour une large gamme de confinement le système présente des configurations inhomogènes avec coexistence entre particules en ligne et particules en zigzag. Nous verrons que l'analyse linéaire effectuée dans le chapitre 2 permet de mieux comprendre la séquence des structures observées et de décrire qualitativement les configurations du système.

### 3.2.1 Configurations et coexistence de phases à l'intérieur du domaine d'instabilité

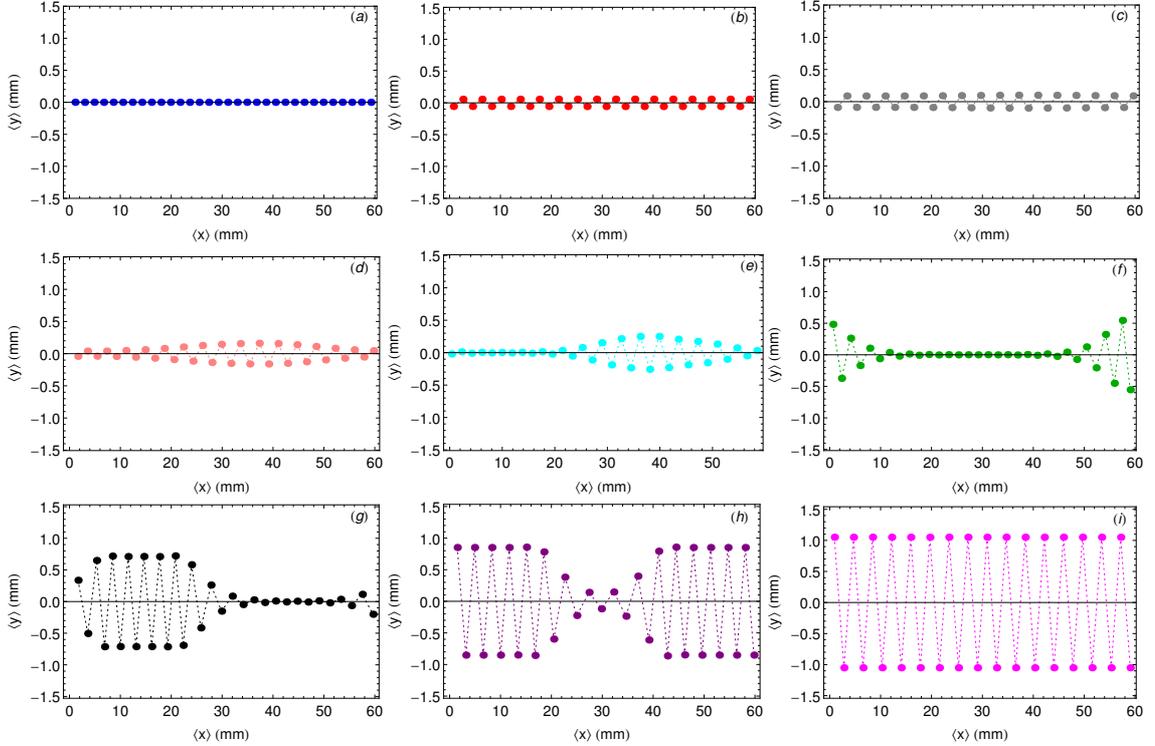


FIGURE 3.1 – Positions d'équilibre  $\langle y \rangle$  en fonction de  $\langle x \rangle$  en mm pour un système périodique de 32 particules, une cellule de longueur  $L = 60$  mm et une température de  $T = 10^9$  K. Le potentiel d'interaction entre particules est une fonction de Bessel modifiée, et  $\beta_{ZZ} = 5.82 \cdot 10^{-4}$  N/m. Les valeurs numériques de raideur appliquée  $\beta/\beta_{ZZ}$  sont les suivantes : (a) 1.004, (b) 0.98, (c) 0.96, (d) 0.95, (e) 0.93, (f) 0.89, (g) 0.52, (h) 0.22 et (i) 0.07. Pour des hauteurs de zigzag attendues [voir équation (2.1)] de (a) 0.00 mm, (b) 0.05 mm, (c) 0.09 mm, (d) 0.11 mm (e) 0.14 mm, (f) 0.19 mm, (g) 0.47, (h) 0.75 et (i) 1.06 mm, à comparer aux valeurs  $h_{C1} = 0.1$  mm et  $h_{C2} = 0.74$  mm. (Figure V.5 de la Thèse de J. B. Delfau [30])

La figure 3.1 nous montre les configurations d'équilibre obtenues lorsque la raideur du confinement  $\beta$  varie pour un système de 32 particules confinées dans un canal de  $L = 60$  mm de longueur, la raideur du confinement décroissant de haut en bas et de gauche à droite. L'analyse des modes propres de la configuration zigzag développée au chapitre 2 rend parfaitement compte des domaines d'existence des configurations hétérogènes. Pour un confinement fort  $\beta > \beta_{ZZ}$ , les particules sont alignées le long de l'axe  $x$  [voir figure 3.1 (a)]. Puis lorsque  $\beta$  diminue en dessous de  $\beta_{ZZ}$  et tant que  $h(\beta)$  est inférieur à la valeur  $h_{C1}(\pi/16) = 0.1$  mm<sup>1</sup>, la configuration stable du système est une structure en zigzag [voir figure 3.1 (b,c)]. Lorsque  $\beta$  atteint la valeur critique telle que  $h(\beta) = h_{C1}(\pi/16)$ , la structure en zigzag devient instable. On observe alors la formation d'un zigzag modulé spatialement comme sur la figure 3.1 (d). La hauteur du zigzag est alors uniquement locale et dépend de la position de la particule le long de l'axe longitudinal  $x$ . Quand

1. Dans un tel système de taille finie périodique, le nombre d'onde non nul le plus petit accessible au système est  $\pi/16$ .

$\beta$  continue à décroître, on observe qu'une partie des particules s'organise en zigzag alors que les autres restent en ligne le long de l'axe  $x$ . On appelle cette structure localisée une « bulle ». En poursuivant la diminution du confinement, on observe l'augmentation progressive du nombre de particules mises en jeu dans la structure localisée en zigzag, son amplitude n'augmentant que très peu [voir figure 3.1 (e,f,g,h)]. Enfin, lorsque le confinement devient tel que la hauteur  $h(\beta)$  atteint et dépasse la valeur de  $h_{C2}(\pi/16) = 0.74$  mm, toutes les particules se retrouvent de nouveau à la même hauteur et une structure en zigzag homogène de large amplitude est récupérée [voir figure 3.1 (i)].

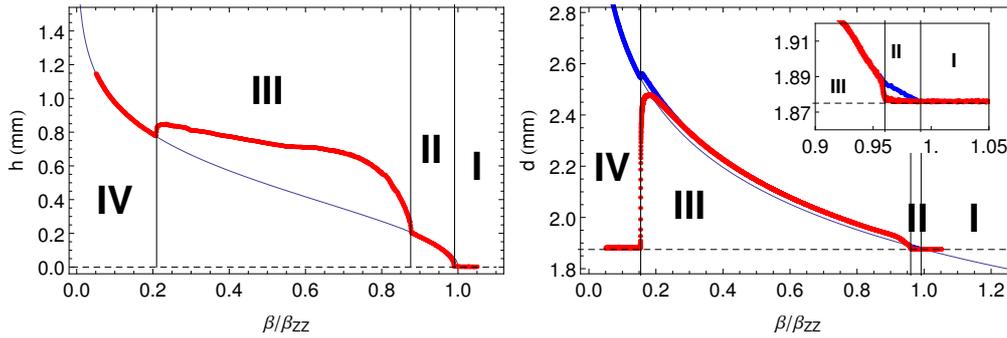


FIGURE 3.2 – (a) La fine courbe pleine bleue correspond à la hauteur du zigzag  $h$  pour un zigzag homogène, en fonction de la raideur du confinement  $\beta/\beta_{ZZ}$  normalisée par  $\beta_{ZZ} = 5.82 \cdot 10^{-4}$  N/m. La courbe épaisse rouge en pointillés représente la plus grande valeur de hauteur  $h$  mesurée au cours de simulations réalisées pour des systèmes de 16 particules. (b) La fine courbe pleine bleue correspond à  $l^*(\beta)$  défini dans l'équation (3.1), Les courbes épaisses rouge et bleu en pointillés représentent respectivement la distance longitudinale maximale et la distance inter-particules AB maximale en fonction du confinement normalisé pour un système de 32 particules. Pour les deux figures l'interaction est en fonction de Bessel modifiée, avec  $d/\lambda_0 = 3.91$ .

L'évolution de ces configurations est présentée figure 3.2 (a), dans laquelle la hauteur maximale du zigzag  $h$  évolue en fonction de la raideur du confinement adimensionnée  $\beta/\beta_{ZZ}$ . La zone I correspond aux paramètres  $\beta/\beta_{ZZ} > 1$ , donc à une configuration de particules alignées au fond du potentiel soit  $h = 0$  [voir figure 3.1 (a)]. La zone II correspond aux configurations zigzag de faible amplitude telles que  $h < h_{C1}$  [voir figure 3.1 (b,c)]. La zone III correspond à la zone où la configuration zigzag est instable. À l'intérieur de cette zone pour les plus forts confinements le système présente une configuration en zigzag modulé [voir figure 3.1 (d)] qui se transforme rapidement avec la diminution du confinement en une configuration hétérogène avec une coexistence de partie en zigzag et partie en ligne, pour  $h_{C1} \leq h \leq h_{C2}$  [voir figure 3.1 (e,f,g,h)]. Enfin, la zone IV correspond au retour vers un zigzag de grande amplitude, pour  $h > h_{C2}$  [voir figure 3.1 (i)].

On compare également dans la figure 3.2 (a) la hauteur maximale mesurée dans le système avec la valeur attendue pour une configuration zigzag homogène, donnée par l'équation (2.1). L'accord entre les deux valeurs est excellent lorsque le système se trouve dans une configuration de zigzag homogène (zone I, II and IV). On remarque en particulier que l'accord reste très bon même très loin du seuil lorsque le système se trouve en configuration zigzag de grande amplitude (zone IV). En revanche, dans la zone III où des structures hétérogènes sont observées, la valeur de  $h$  mesurée est plus grande que celle attendue pour un zigzag homogène. Ce comportement pourrait sembler

étrange car il correspond à une augmentation de l'énergie de confinement associée aux particules dans la structure de bulle, mais ce coût énergétique est compensé par une diminution de l'énergie d'interaction pour toutes les autres particules en configuration en ligne qui s'éloignent légèrement les unes des autres. En effet quand on compare les configurations en bulle aux configurations en zigzag attendues, on remarque que les particules à l'intérieur de la bulle sont plus éloignées de leurs voisines. Cependant, comme nous allons le voir ceci est aussi vrai pour toutes les particules en dehors de la bulle qui se trouvent en ligne. Cette organisation permet donc au système de réduire l'énergie d'interaction entre toutes les particules.

### 3.2.2 Un modèle simple de la coexistence de phases

La coexistence et l'évolution de la forme des bulles dans la zone instable peut se décrire à l'aide d'un modèle biphasique simple.

Pour que ces phases en ligne et en zigzag coexistent il faut qu'elles soient toutes les deux à l'équilibre pour le confinement transverse appliqué au système. Le confinement transverse doit donc exactement correspondre à la valeur du seuil de transition zigzag. Les particules doivent alors être séparées par un distance  $l^*$ , la distance  $l^*$  vérifiant pour chaque configuration l'équation d'équilibre :

$$\beta = 4 \frac{F(l^*)}{l^*}. \quad (3.1)$$

où l'équation (2.1) a été simplifiée en gardant simplement les interactions avec les seconds plus proches voisins.

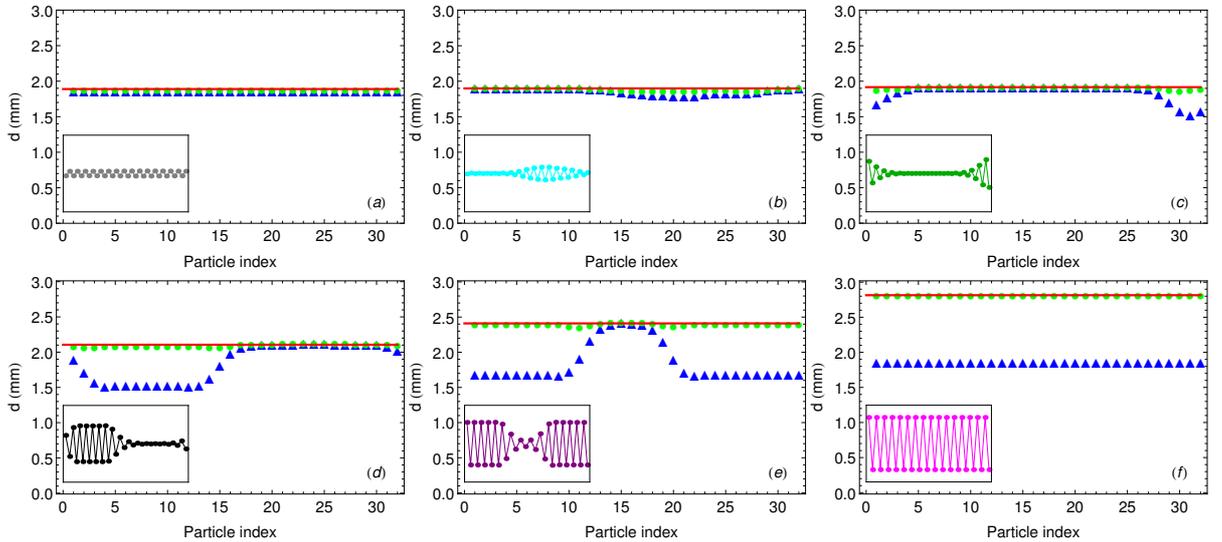


FIGURE 3.3 – Évolution de la distance  $d$  (en mm) en fonction de l'indice des particules. En points verts  $d$  est la distance  $AB$  entre particules voisines et en triangles bleus  $d$  est la projection de cette distance le long de l'axe longitudinal  $x$ , pour les différentes simulations présentées figure 3.1. L'insert indique la configuration correspondante du système. La raideur du potentiel de confinement,  $\beta$ , diminue de haut en bas et de gauche à droite; prenant les valeurs  $\beta/\beta_{ZZ} = 0.96, 0.95, 0.93, 0.89, 0.22$ , et  $0.07$ . La ligne pleine rouge montre la valeur de la distance  $l^*(\beta)$  définie à partir de l'équation. (3.1).

C'est ce qui est observé, l'évolution de ces distances en fonction des dispositions des particules est présentée figures 3.3 pour les différentes configurations précédemment décrites figures 3.1. Lorsque les configurations d'équilibre sont inhomogènes, on observe que les distances longitudinales entre particules sont plus grandes pour les particules dans la ligne que pour les particules faisant partie de la bulle. Cet effet est dû à la réduction géométrique de la distance longitudinale entre particules dans la bulle, causée par leur montée le long du potentiel dans la direction transverse, ce qui libère de la place pour que les particules en ligne s'éloignent les unes des autres. En revanche la distance  $l^*$  entre particules reste approximativement constante, que les particules soient dans la bulle ou dans la ligne. Notons que  $l^*$  augmente lorsque le confinement diminue et que le nombre de particules mises en jeu à l'intérieur de la bulle augmente [voir figure 3.3]. Cette adaptation de la distance entre particules  $l^*$  permet d'interpréter dans une première approximation les structures de zigzag hétérogènes comme une coexistence entre une phase en ligne, pour laquelle toutes les particules sont alignées le long de l'axe  $x$ , et une phase localisée en forme de zigzag (la bulle). Cette analyse est validée par la comparaison, dans les figures 3.3, de la distance  $l^*$  obtenue comme solution  $l^*(\beta)$  de l'équation (3.1) (ligne rouge) avec la valeur de  $l^*$  obtenue à partir des simulations qui montrent un excellent accord.

Les distance  $l^*$  et leurs projections longitudinales sont présentées en fonction de la raideur transverse adimensionnée  $\beta/\beta_{ZZ}$  dans la figure 3.2 (b), pour un système de 32 particules. Quand les particules sont alignées (zone I) ou dans une configuration de zigzag homogène (zone II et IV), la distance longitudinale est égale à la distance moyenne entre particules  $d$ . Alors que pour les configurations en zigzag inhomogènes (zone III) la distance longitudinale entre particules en dehors de la bulle (dans la phase en ligne) et la distance entre particules  $AB$  à l'intérieur de la bulle sont égales, et en très bon accord avec la distance  $l^*(\beta)$ . Cette distance augmente régulièrement quand le confinement décroît, et aucun comportement particulier n'est visible pour les valeurs de confinement auxquelles une configuration en zigzag modulée apparaît et prend la forme de structures localisées en bulle [voir comparaison figures 3.1 (d) et (e)].

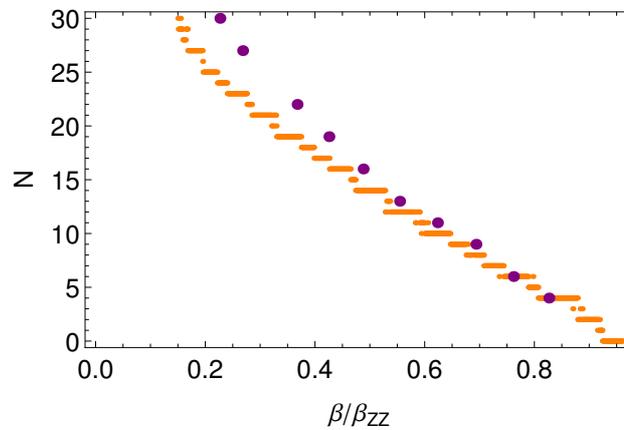


FIGURE 3.4 – Évolution en orange du nombre de particules  $N$  impliquées dans la bulle, en fonction de la raideur du confinement transverse  $\beta/\beta_{ZZ}$ , pour une simulation avec 32 particules dans un canal de longueur  $L = 60$  mm. Les points violets correspondent aux valeurs de  $N_{ZZ}$  estimée à partir de la minimisation de l'énergie présentée équation (3.2).

La forme particulière de ces structures dépend des interactions non linéaires entre particules, et ne peut donc pas être décrite dans l'approximation linéaire utilisée. Cette question des formes sera traitée dans le chapitre 5. Cependant un modèle simple de leur évolution peut être obtenu. Nous pouvons en effet décrire une configuration en bulle par un nombre  $N_L$  de particules en configuration en ligne et un nombre  $N_{ZZ}$  de particules en zigzag, avec la condition  $N_L + N_{ZZ} = 2N$  (nous négligeons ici en première approximation la variation de hauteur  $h$  pour les particules appartenant aux bords de la bulle). La distance entre particules sera prise comme  $l^*(\beta)$ . L'énergie associée à une telle configuration peut être estimée en ne prenant en compte que les interactions avec les premiers et seconds voisins, ce qui suffit pour empêcher l'effondrement de la bulle. Cette énergie s'écrit :

$$E_{\text{bulle}} \sim N_L[U(l^*) + U(2l^*)] + N_{ZZ}[U(l^*) + U(2d_{ZZ})] + N_{ZZ} \frac{\beta(l^{*2} - d_{ZZ}^2)}{8}, \quad (3.2)$$

avec  $d_{ZZ}$  la distance longitudinale locale entre particules à l'intérieur de la bulle, calculée de telle sorte que la hauteur de la bulle soit  $(l^{*2} - d_{ZZ}^2)/4$ . Dans ce modèle simple, la distance  $d_{ZZ}$  est telle que :

$$N_{ZZ}d_{ZZ} = L - (N_L - N_{ZZ})l^*. \quad (3.3)$$

La minimisation de l'énergie  $E_{\text{bulle}}$ , en prenant en compte les contraintes évoquées, et pour un confinement  $\beta$  constant<sup>2</sup> permet d'obtenir une estimation du nombre  $N_{ZZ}$  de particules impliquées dans la bulle. Sur la figure 3.4, l'évolution de  $N_{ZZ}$  en fonction de la raideur du confinement  $\beta$  obtenue par simulation est comparée à celle obtenue par ce modèle simple. Malgré l'aspect rudimentaire de notre analyse, la comparaison est satisfaisante, le faible écart entre les deux évolutions pouvant être attribué à l'erreur commise sur la prise en compte des bords de la bulle.

### 3.3 Comportement hystérétique de la bifurcation zigzag

Même si la description de la structure non linéaire en bulle par un modèle de coexistence de phases permet de décrire l'extension des différentes phases, cette description n'est pas suffisante pour expliquer complètement tous les comportements observés dans de tels systèmes. En effet l'observation de ces structures inhomogènes indique la *coexistence* entre une phase bifurquée ( $h \neq 0$ ) et une phase non-bifurquée ( $h = 0$ ), ce qui ne peut avoir lieu dans le cadre du modèle de Landau des transitions de phase que pour une transition du premier ordre et non pour une transition du second ordre. Pour renforcer cette idée, nous allons montrer dans cette section que le système présente également un comportement hystérétique caractéristique des transitions du premier ordre, cette hystérésis étant plus marquée pour les systèmes de grande taille et pour des interactions entre particules à courte portée.

---

2. Donc une distance entre particules  $l^*$  constante.

### § Influence du confinement

Sur la figure 3.5, on présente la hauteur maximale de la bulle dans le système  $h$  en fonction du rapport  $\beta/\beta_{ZZ}$ , pour des raideurs de confinement croissantes et décroissantes, et pour différentes tailles de systèmes. Dans un premier temps on s'intéresse à des systèmes pour lesquels la portée des interactions est gardée constante. L'évolution de la hauteur maximale présente un comportement hystérétique évident. Lorsque la raideur du confinement  $\beta$  décroît, la transition entre une configuration en ligne  $h = 0$  et une configuration bulle, en zigzag localisé, apparaît toujours pour la même valeur de confinement  $\beta_{\text{down}}$ . Alors que lorsque  $\beta$  augmente, la transition d'une structure localisée vers une configuration en ligne  $h = 0$  a lieu pour une valeur  $\beta_{\text{up}} > \beta_{\text{down}}$ . De plus on remarque que plus la taille du système est grande plus la différence  $\beta_{\text{up}} - \beta_{\text{down}} > 0$  est importante.

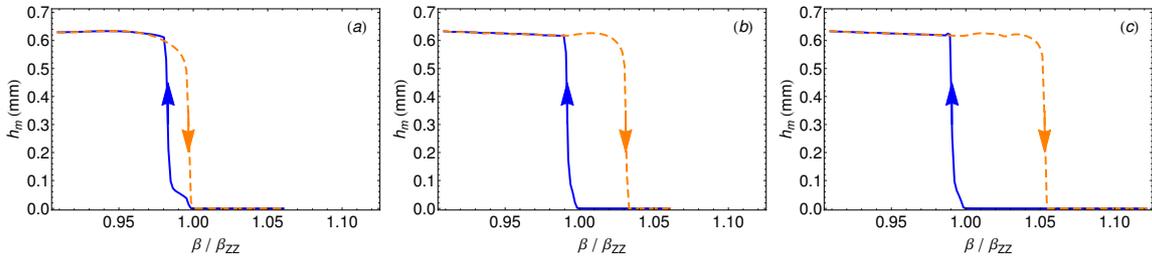


FIGURE 3.5 – Évolution de la hauteur du zigzag  $h$  (en mm) pour des valeurs croissantes (orange, voir flèches) et décroissantes (bleue, voir flèches) de confinement  $\beta/\beta_{ZZ}$ . Les différentes figures correspondent à des systèmes avec (a)  $N = 64$ , (b)  $N = 128$  et (c)  $N = 512$  particules, la distance moyenne entre particules et la portée des interactions étant gardées identiques pour tous les systèmes,  $d = 1.875$  mm et  $d/\lambda_0 = 3.906$ .

La figure 3.6 présente l'évolution des rapports  $\beta_{\text{down}}/\beta_{ZZ}$  et  $\beta_{\text{up}}/\beta_{ZZ}$  en fonction du nombre de particules  $N$  dans le système. Ceci confirme que  $\beta_{\text{down}}$  est essentiellement indépendant de  $N$ . Et au contraire  $\beta_{\text{up}}$  augmente avec la taille du système et tend vers une valeur limite  $\beta_{\text{up}}^\infty$  avec un comportement en  $\beta_{\text{up}}^\infty - \beta_{\text{up}}^N \propto 1/N^3$ .

### § Influence de la portée de l'interaction

Si maintenant on s'intéresse à l'influence de la portée de l'interaction, on remarque que l'extension du domaine d'hystérésis, défini par la différence  $\beta_{\text{up}} - \beta_{\text{down}} > 0$ , varie en fonction de la portée de l'interaction [voir figure 3.7]. Pour une taille de système donnée on trouve que plus la portée diminue plus l'extension de l'hystérésis augmente.

Par ailleurs, pour une portée d'interaction donnée, on constate que l'amplitude du cycle d'hystérésis est accentué pour les systèmes de grande taille et pour des interactions entre particules à courte portée.

3. Ces mesures d'hystérésis ont été faites pour deux températures différentes très faibles, et aucune différence majeure n'a été observée entre les deux jeux de données. Les détails concernant la mise en place des simulations numériques pour observer ces comportements hystérétiques sont développés dans l'annexe A.3.

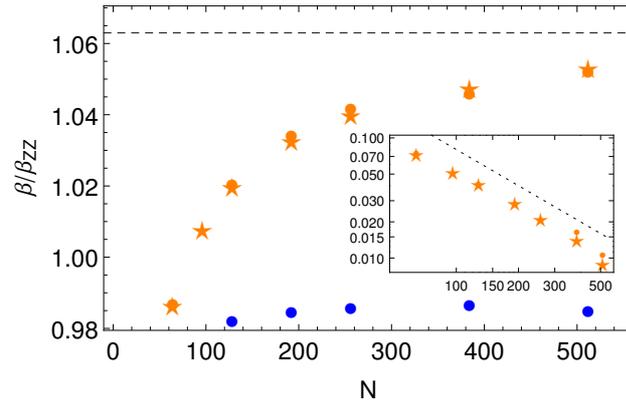


FIGURE 3.6 – Raideurs de confinement réduites  $\beta/\beta_{ZZ}$  pour lesquelles une transition entre configuration en ligne et configuration en zigzag localisé a lieu en fonction du nombre de particules  $N$  et pour une distance moyenne entre particules constante  $d$ . Les points bleus sont les valeurs mesurées pour un confinement  $\beta$  décroissant  $\beta_{\text{down}}$ . Les points et les étoiles oranges correspondent aux mesures de  $\beta_{\text{up}}$  faites à confinement croissant. Les températures dans les simulations (voir Annexe A.3) sont telles que  $U(d)/k_B T = 10^{-2}$  (points) et  $U(d)/k_B T = 10^{-4}$  (étoiles). La ligne pointillée correspond à l’extension maximale attendue pour la zone d’hystérésis calculée à partir de la forme normale, voir équation (3.25). L’insert montre en échelle Log-Log l’évolution de l’écart à cette valeur maximale en fonction de  $N$ . La ligne pointillée est de pente  $-1$ .

Si on retranscrit l’analyse de Landau lié au modèle de coexistence au cadre de la théorie des bifurcations, ceci indique un comportement *sous-critique* pour la bifurcation fourche dans les systèmes étendus. De même l’observation de cycle d’hystérésis dans l’évolution de la hauteur maximale des configurations d’équilibre lorsque le confinement varie est une caractéristique d’une bifurcation fourche sous-critique.

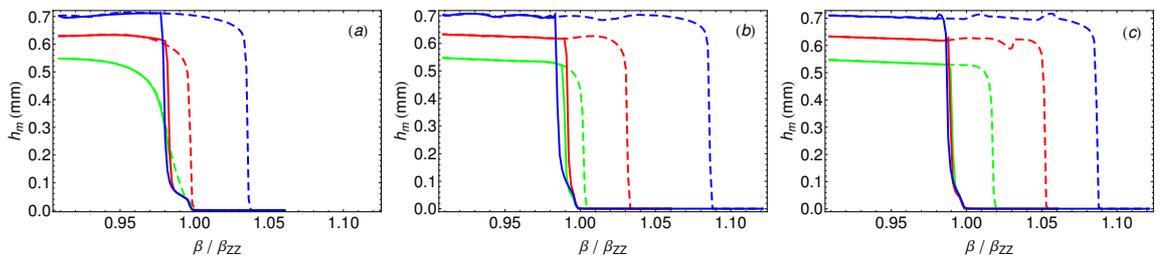


FIGURE 3.7 – Évolution de la hauteur du zigzag  $h$  (en mm) pour des valeurs croissantes (traits tireté) et décroissantes (traits plein) de confinement  $\beta/\beta_{ZZ}$ . Chaque figure correspond à un nombre différent de particules (a)  $N = 64$ , (b)  $N = 128$  et (c)  $N = 256$ , à densité constante  $L/N = 1.875$  mm. Pour chaque taille de système les trois couleurs représentent trois portées d’interaction différentes en vert  $d/\lambda_0 = 3.125$ , en rouge  $d/\lambda_0 = 3.906$  et en bleu  $d/\lambda_0 = 5.208$ .

### 3.4 Modèle non linéaire de la transition zigzag dans la limite thermodynamique

Comme on vient de le voir le domaine de stabilité des structures inhomogènes [voir figure 3.2] et l'amplitude du cycle d'hystérésis [voir figures 3.5 et 3.6]) augmentent avec la taille du système, ce qui implique que les effets de taille finie doivent être pris en compte. Ceci montre aussi que les propriétés sous-critiques sont accentuées dans les systèmes étendus. C'est pourquoi il est intéressant pour comprendre ces phénomènes de se placer à la limite thermodynamique, pour laquelle l'utilisation d'une description continue du système en terme d'équations aux dérivées partielles est justifiée. Dans cette limite nous allons réaliser un développement non linéaire couplant les déplacements longitudinaux et transverses, couplage qui sera à l'origine du changement de caractère de la bifurcation fourche [voir sous-section 3.4.3]. En partie basé sur les outils développés pour les instabilités dans les systèmes étendus [18], ce développement sera réalisé proche du seuil de transition zigzag de telle sorte que l'on pourra considérer les variables utilisées comme variant lentement en espace et en temps [voir sous-section 3.4.1]. La pertinence de l'ensemble sera assurée en retrouvant les dépendances du seuil de transition zigzag en fonction de la distance entre particules et les relations de dispersion des modes de vibration dans la limite de validité du développement [voir sous-section 3.4.2]. Enfin nous discuterons, dans la sous-section 3.4.4, des conditions pour lesquelles il est possible d'observer le caractère sous-critique de la transition zigzag.

#### 3.4.1 Invariance par translation et couplage avec le mode de phase

Dans cette section nous allons identifier l'existence d'un mécanisme permettant d'expliquer le caractère sous-critique de la transition zigzag pour des systèmes infinis invariants par translation et avec des interactions entre particules à courte portée. Le phénomène clef derrière ce changement de caractère correspond au couplage non linéaire entre le mode mou apparaissant à la transition zigzag et le mode de phase lié à l'invariance par translation du système.

La structure en zigzag est invariante selon toute translation  $x \rightarrow (x + \phi)$  avec  $\phi$  une constante réelle. On s'attend alors à ce que dans la limite des grandes longueurs d'onde et des basses fréquences, le coût énergétique nécessaire à une translation, dépendant du temps et de l'espace  $\phi(x, t)$ , devienne négligeable. Le champs  $\phi(x, t)$  correspond dans cette limite au mode de Goldstone associé à la brisure de symétrie à la transition zigzag. De plus, très proche du seuil de bifurcation fourche, il existe également un mode mou associé à la bifurcation elle-même. Ce mode correspond à une modulation de la hauteur  $h(x, t)$  de la configuration zigzag, variant lentement dans l'espace et dans le temps et se gelant à la transition. Comme on l'a évoqué, il a été montré dans la littérature [18] que la forme normale de la bifurcation sous-critique résultait du couplage non linéaire entre ces deux modes mous.

C'est pourquoi nous nous plaçons proche du seuil de transition zigzag,  $|\epsilon| \ll 1$  où  $h$  varie comme la racine carrée de l'écart au seuil  $\epsilon^{1/2}$ . On définit alors le petit paramètre du développement asymptotique  $\delta$  comme étant proportionnel à l'écart au seuil,  $\delta \propto \epsilon$ . Nous pouvons alors écrire  $h = \delta^{1/2} H$  avec  $\delta \ll 1$ . Puis les décompositions des variables lentes, en temps et en espace, sont choisies afin de retrouver les modes acoustiques calculés au chapitre 2 dans la limite des faibles

fréquences et des grandes longueurs d'onde [voir section 3.4.2]. Nous prenons pour cela  $T = \delta^{1/2}t$  et  $X = \delta^{1/2}x$ . L'échelle de variation spatiale définit alors le champs de déplacement longitudinal  $\phi = \delta^{1/2}\Phi$ . Enfin les champs  $H$  et  $\Phi$  dépendent des variables lentes d'espace et du temps,  $X$  et  $T$ . Bien qu'il soit homogène à une distance, par abus de langage nous appellerons  $\Phi(X, T)$  le *champ de phase*<sup>4</sup>.

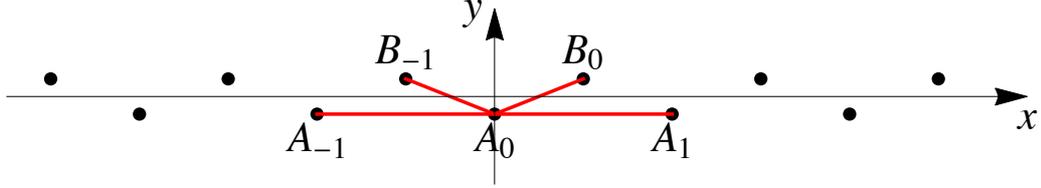


FIGURE 3.8 – Illustration schématique d'une configuration. Les lignes pleines rouges indiquent les interactions prises en compte dans la description théorique.

Comme le montre le schéma figure 3.8, on considère uniquement les interactions entre premiers et seconds plus proches voisins, ce qui est cohérent avec le fait que ces structures inhomogènes sont observées pour des interactions courte portée<sup>5</sup>. Il est toutefois nécessaire de prendre en compte l'interaction avec les seconds voisins car la prise en compte uniquement des plus proches voisins n'est pas suffisante pour stabiliser la configuration zigzag [voir section 2.3.1]. À partir de ces hypothèses et des lois d'échelles choisies précédemment, les distances entre particules s'écrivent :

$$A_0B_0 = \sqrt{[d + \delta^{1/2}\Phi(X + \delta^{1/2}d) - \delta^{1/2}\Phi(X)]^2 + \delta [H(X + \delta^{1/2}d) + H(X)]^2}, \quad (3.4)$$

$$A_0A_1 = \sqrt{[2d + \delta^{1/2}\Phi(X + \delta^{1/2}2d) - \delta^{1/2}\Phi(X)]^2 + \delta [H(X + \delta^{1/2}2d) - H(X)]^2}. \quad (3.5)$$

En développant l'énergie d'interaction  $U(A_0B_0) + U(A_0A_1)$  jusqu'à l'ordre  $\delta^2$ , et en notant  $\partial\Phi/\partial X \equiv \Phi_X$ <sup>6</sup>, on trouve :

$$\begin{aligned} \tilde{E} \approx & U(d) + U(2d) + \delta H^2 \left( \frac{\beta}{2} + \frac{2U'(d)}{d} \right) + \delta^2 \left\{ \left[ U''(d) - \frac{U'(d)}{d} \right] \left( \frac{2H^4}{d^2} + 2H^2\Phi_X \right) + \right. \\ & \left. + HH_{XX}dU'(d) + \Phi_X^2 \frac{d^2}{2} [U''(d) + 4U''(2d)] + H_X^2 \frac{d}{2} [U'(d) + 2U'(2d)] \right\}. \end{aligned} \quad (3.6)$$

L'énergie d'interaction  $\tilde{E}$  permet de définir la densité de Lagrangien  $\mathcal{L} = m\delta^2(\Phi_T^2 + H_T^2)/2 - \tilde{E}$ <sup>7</sup>. Il est important de remarquer que nous avons volontairement omis un terme proportionnel à  $\Phi_X$  à

4. Pour un système annulaire ou périodique,  $\Phi$  est une distance modulo la taille du système, ce qui justifie notre dénomination.

5. La prise en compte de l'interaction entre toutes les particules ne change rien au mécanisme que nous présentons ici. Le développement avec la prise en compte de toutes les interactions a été réalisé. Toutefois afin de simplifier la présentation nous avons choisi de présenter uniquement le développement pour les interactions avec les seconds plus proches voisins.

6. De manière équivalente on note  $\Phi_{XX} = \partial^2\Phi/\partial X^2$ .

7. Formellement,  $\tilde{E}$  correspond à une énergie et non à une densité d'énergie. Cependant, il s'agit de l'énergie d'une particule dans le système, il est donc nécessaire de sommer sur toutes les particules pour obtenir l'énergie totale du système. L'expression  $\mathcal{L}$  correspond bien à une densité Lagrangienne de champs. On reviendra plus en détails sur le calcul de l'énergie des différentes configurations du système dans le chapitre 5.

l'ordre  $\delta$ , et les deux termes suivant :

$$\begin{aligned} \delta^{3/2} \left[ 2HH_X U'(d) + \frac{d^2}{2} \left( U'(d) + 4U'(2d) \right) \Phi_{XX} \right] = \\ = \delta^{3/2} \frac{\partial}{\partial X} \left[ H^2 U'(d) + \frac{d^2}{2} \left( U'(d) + 4U'(2d) \right) \Phi_X \right], \end{aligned} \quad (3.7)$$

et

$$\delta^2 \Phi_{XXX} \frac{d^3}{6} \left( U'(d) + 8U'(2d) \right) = \delta^2 \frac{\partial}{\partial X} \left[ \Phi_{XX} \frac{d^3}{6} \left( U'(d) + 8U'(2d) \right) \right], \quad (3.8)$$

car ils correspondent à des dérivées exactes en  $X$  et ne contribueront alors pas dans les équations de Lagrange [59]. Les équations de Lagrange pour les champs  $\Phi(X, T)$  et  $H(X, T)$  s'écrivent donc<sup>8</sup> :

$$m\Phi_{TT} = d^2 [U''(d) + 4U''(2d)] \Phi_{XX} + 4 \left[ U''(d) - \frac{U'(d)}{d} \right] HH_X. \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} mH_{TT} = -\epsilon \frac{4U'(d)}{d} H - \left[ U''(d) - \frac{U'(d)}{d} \right] \left( \frac{8}{d^2} H^3 + 4H\Phi_X \right) - \\ - H_{XX} d [U'(d) - 2U'(2d)], \end{aligned} \quad (3.10)$$

Ce système d'équations décrit le couplage entre le mode mou associé à la transition zigzag  $H(X, T)$  lié à la proximité avec le seuil de bifurcation fourche [35, 39] et le mode de phase  $\Phi(X, T)$  lié à l'invariance par translation.

Remarquons que les termes des équations (3.10) et (3.9) respectent toutes les symétries requises par le système [21, 41, 22, 18, 48]. L'invariance par translation  $x \rightarrow x + \Phi_0$  est préservée puisque seules les dérivées par rapport à  $X$  de  $\Phi$  apparaissent. Le fait que tous les termes dans l'équation (3.10) soient des fonctions impaires de  $H$  tandis que les termes de l'équation (3.9) soient des fonctions paires de  $H$  reflète l'invariance de la configuration zigzag sous la transformation  $(H, \Phi) \rightarrow (-H, \Phi)$ . Il est également facile de vérifier que les équations sont invariantes selon la symétrie de parité de  $X$ ,  $(H, X, \Phi) \rightarrow (H, -X, -\Phi)$ .

### 3.4.2 Validation du choix des lois d'échelle

Pour valider la cohérence du choix de lois d'échelle qui a été fait, nous avons utilisé les expressions développées dans les équations des champs  $\Phi$  et  $H$  pour retrouver deux grandeurs précédemment obtenues par une voie directe : le spectre de vibration acoustique de la chaîne linéaire dans la limite des grandes longueurs d'onde et l'évolution du seuil de bifurcation zigzag lors d'un changement de distance entre particules.

---

8. Tous les termes du développement étant de manière consistante proportionnels à  $\delta^2$ , celui-ci a pu être simplifié dans l'expression de la densité de Lagrangien. Le coefficient devant le terme linéaire en  $H$ , peut se ré-écrire en fonction de l'écart au seuil  $\epsilon$ , qui a été défini comme proportionnel à  $\delta$ .

### § Calcul des modes acoustiques

Nous allons montrer que les équations (3.10) et (3.9) décrivent correctement les modes acoustiques de la chaîne de particules. Nous retrouvons bien entendu seulement les expressions calculées au chapitre 2 dans la limite des grandes longueurs d'onde, car le calcul section 3.4.1 postule une variation spatiale lente.

En prenant  $H = 0$ , et en linéarisant l'équation (3.9), on obtient la vitesse du son :

$$mc_{//}^2 = d^2 [U''(d) + 4U''(2d)] \quad (3.11)$$

dans la direction longitudinale de la chaîne lorsque seules les interactions avec les seconds plus proches voisins sont prises en compte [voir section 1.3]. En prenant maintenant  $\Phi = \text{Cste}$ , et en linéarisant l'équation (3.10) pour  $\beta = \beta_{ZZ}$ , on trouve la vitesse du son transverse :

$$mc_{\perp}^2 = d [2U'(2d) - U'(d)] \quad (3.12)$$

dans la chaîne. Ces expressions pour les vitesses des ondes transverses et longitudinales sont à comparer à celles obtenues linéarisant les relations de dispersion pour la configuration en ligne présentées équations (1.8) et (1.9) dans la limite  $q \rightarrow 0$  et en ne prenant compte que les interactions avec les seconds plus proches voisins.

Dans le cas général, on linéarise les équations autour d'une configuration homogène bifurquée  $H_0$  qui, à partir de l'équation (1.2), correspond à  $H_0^2 = \beta_{ZZ}d^2 / \left(8 \left[U''(d) - \frac{U'(d)}{d}\right]\right)$ . En supposant  $H(X, T) = H_0 + \eta(X, T)$  avec  $|\eta| \ll H_0$ , et  $|\Phi_X| \ll 1$ , on obtient à partir des équations (3.9) et (3.10) :

$$\begin{aligned} m\eta_{TT} &= -2\beta_{ZZ}\eta - d[U'(d) - 2U'(2d)]\eta_{XX} - 4 \left[U''(d) - \frac{U'(d)}{d}\right] H_0\Phi_X, \\ m\Phi_{TT} &= d^2 [U''(d) + 4U''(2d)] \Phi_{XX} + 4 \left[U''(d) - \frac{U'(d)}{d}\right] H_0\eta_X. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Si l'on s'intéresse aux solutions de la forme  $(\eta, \Phi) = (\eta_0, \Phi_0)e^{i(qX - \omega T)}$ , on trouve les fréquences propres à partir des valeurs propres de la matrice :

$$\frac{1}{m} \begin{pmatrix} 2\beta_{ZZ} - d[U'(d) - 2U'(2d)]q^2 & 4iq \left[U''(d) - \frac{U'(d)}{d}\right] H_0 \\ -4iq \left[U''(d) - \frac{U'(d)}{d}\right] H_0 & d^2 [U''(d) + 4U''(2d)] q^2 \end{pmatrix} \quad (3.14)$$

Ces valeurs propres sont à comparer avec les calculs effectués dans la section 2.2 [voir équation (2.18)], en se restreignant aux seconds voisins, dans la limite  $q \rightarrow 0$ , et en linéarisant tous les coefficients au premier ordre en  $h$ . On retrouve alors un spectre acoustique cohérent avec celui calculé ici.

La variation de hauteur étant imposée par la bifurcation fourche sous-critique comme proportionnelle à l'écart au seuil (et avec  $\epsilon \propto \delta$ ) on a  $h = H\delta^{1/2}$ . Comme on vient de le voir, les modes acoustiques sont parfaitement retrouvés si  $\omega^2$ ,  $q^2$  et  $h_0^2$  sont tous d'ordre  $\delta$ , ce qui restreint les variations des variables lentes telles que  $T = \delta^{1/2}t$  et  $X = \delta^{1/2}x$  comme choisi au début de la section 3.4.1.

### § Détermination du seuil de bifurcation

Nous avons également vérifié que celles-ci permettent de retrouver la dépendance du seuil de transition en fonction de la distance moyenne entre particules de la configuration zigzag. En effet on remarque que l'équation (3.10) admet des solutions spécifiques  $\Phi_X = \Phi_X^0 = \text{Cste}$  et  $H_X = 0$ , qui correspondent ainsi à une configuration zigzag homogène avec une renormalisation de la distance moyenne entre particules qui devient  $d_{\text{eff}} = d + \epsilon\Phi_X^0 d$ . En considérant uniquement les termes de l'équation (3.10) proportionnels à  $H$ , on trouve :

$$H_{TT} = -\epsilon \frac{4U'(d)}{d} H - 4\Phi_X^0 \delta^2 \left[ U''(d) - \frac{U'(d)}{d} \right] H + O(H^2). \quad (3.15)$$

où le membre de droite correspond exactement au développement limité :

$$\beta_{ZZ}(d_{\text{eff}}) = -\frac{4U'(d + \delta\Phi_X^0 d)}{d + \delta\Phi_X^0 d} = -\frac{4U'(d)}{d} - 4\delta\Phi_X^0 \left[ U''(d) - \frac{U'(d)}{d} \right] + O(\delta^2). \quad (3.16)$$

Nous voyons alors que les solutions  $\Phi_X = \Phi_X^0 = \text{Cste}$  et  $H_X = 0$ , correspondent bien à un décalage du seuil d'instabilité zigzag développé au deuxième ordre en  $\delta$ .

Ces deux vérifications valident les lois d'échelle choisies pour le développement asymptotique, ainsi que les équations obtenues à partir de celles-ci pour les champs  $\Phi$  et  $H$ .

### 3.4.3 Caractère sous-critique de la bifurcation

Pour simplifier l'expression du développement de la forme normale de la bifurcation, les distances  $x$ ,  $\phi$  (resp.  $\Phi$ ) et  $h$  (resp.  $H$ ) seront exprimées en unités adimensionnées par la distance moyenne  $d$  entre particules. Le temps  $t$  (resp.  $T$ ) sera exprimé en unité de  $d/c_\perp$  où  $c_\perp$  est la vitesse des ondes linéaires transverses dans la limite de grande longueur d'onde définie équation (3.12). Enfin, le développement asymptotique terminé, il est préférable pour alléger les notations, de revenir à une notation plus commune en minuscules ( $\phi$ ,  $h$ ,  $x$  et  $t$ ).

De cette manière la densité de Lagrangien devient :

$$\mathcal{L} = \frac{1}{2} \left( \frac{\partial h}{\partial t} \right)^2 + \frac{1}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial t} \right)^2 + \frac{\epsilon\beta_{ZZ}}{2} h^2 - \frac{a_3}{2} \left( h^4 + h^2 \frac{\partial \phi}{\partial x} \right) - \frac{1}{2} \left( \frac{\partial h}{\partial x} \right)^2 - \frac{b_3}{2} \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \right)^2, \quad (3.17)$$

où les coefficients s'expriment directement en fonction du potentiel d'interaction et de ses dérivées comme :

$$\beta_{ZZ} = \frac{-4d U'}{mc_\perp^2}, \quad a_3 = \frac{4d(d U'' - U')}{mc_\perp^2}, \quad b_3 = \left( \frac{c_{//}}{c_\perp} \right)^2, \quad (3.18)$$

où les dérivées du potentiel sont prises à la distance  $r = d$ , et où les coefficients  $\beta_{ZZ}$ ,  $a_3$  et  $b_3$  sont tous positifs.

Les équations de Lagrange pour les champs  $\phi(x, t)$  et  $h(x, t)$  sont :

$$\phi_{tt} = a_3 h h_x + b_3 \phi_{xx}, \quad (3.19)$$

$$h_{tt} = \epsilon\beta_{ZZ} h - a_3 (2h^3 + h\phi_x) + h_{xx}. \quad (3.20)$$

Ces équations (3.19) et (3.20) peuvent expliquer le mécanisme non linéaire responsable du changement de caractère de la bifurcation. En effet si l'on s'intéresse aux solutions stationnaires  $\phi_t = 0$ ,  $h_t = 0$ , on remarque directement que l'équation (3.19) peut se re-écrire sous la forme :

$$\phi_{xx} = -\frac{a_3}{2b_3} (h^2)_x \quad (3.21)$$

Il est important maintenant de distinguer les solutions de cette équation sous deux formes. Tout d'abord nous allons présenter rapidement le comportement des solutions de champs de déplacement transverse homogène  $h_x = 0$ , avant de discuter plus en détails des solutions inhomogènes de la forme  $h_x \neq 0$ .

### § Solutions homogènes

Si l'on considère une solution homogène de la forme  $h_x = 0$ , on trouve directement que  $\phi_{xx} = 0$ . Ce qui donne après intégration  $\phi(x) = A$  avec  $A$  une constante d'intégration. Comme nous l'avons évoqué dans la sous-section 3.4.2,  $\phi_x$  correspond physiquement à une modification de la distance entre particules. Or, pour un système infini, ce changement de distance entre particules doit s'appliquer à tout le système ce qui nécessite donc une énergie infinie qui n'est pas autorisée. La seule solution possible physiquement est de poser  $A = 0$ . De même, pour les systèmes finis et cycliques on trouve que  $A = 0$ <sup>9</sup>. Cette solution revient donc à avoir  $\phi = \text{Cste}$  ce qui correspond à une simple translation du système. De plus comme  $\phi(x) = 0$ , l'équation (3.20) pour le champs  $h$  se re-écrit :

$$0 = \epsilon\beta_{ZZ}h - 2a_3h^3 \quad (3.22)$$

Cette équation se résout trivialement, et elle correspond exactement au développement de l'équation pour la hauteur du zigzag homogène développée pour décrire la transition surcritique lorsque l'on prend en compte uniquement les interactions avec les seconds plus proches voisins. On en déduit donc que le système présente nécessairement un comportement surcritique si l'on considère uniquement les solutions homogènes. Cependant nous allons voir maintenant que le caractère de la bifurcation peut changer lorsque qu'on lève cette restriction.

### § Solutions inhomogènes

On s'intéresse maintenant à des solutions inhomogènes avec  $h_x \neq 0$ , dans ce cas là il est possible d'intégrer directement l'équation (3.21) :

$$\phi_x = -\frac{a_3}{2b_3}h^2 \equiv -\alpha h^2 \quad \text{avec} \quad \alpha > 0. \quad (3.23)$$

---

9. Il est important de remarquer que le mode de Goldstone lié à l'invariance par translation des systèmes infinis nécessaire au mécanisme de couplage se retrouve également dans les systèmes *finis et cycliques*, à travers l'invariance par rotation. On s'attend donc à ce que la description faite ici dans la limite thermodynamique reste qualitativement valable pour ces systèmes. La taille finie du système impose alors que la distance longitudinale entre toutes les particules ne puisse pas augmenter, on trouve donc de nouveau que  $A = 0$ .

On trouve alors que l'équation pour le champs de déplacement transverse inhomogène s'écrit :

$$h_{xx} = h [-\epsilon\beta_{ZZ} + a_3(2 - \alpha)h^2]. \quad (3.24)$$

Sans le couplage avec le champs de phase  $\phi$ , on a  $\alpha = 0$  et on retrouve alors la bifurcation fourche surcritique que nous avons déduit de l'équation (1.2). Cependant lorsque le couplage est pris en compte, le coefficient  $(2 - \alpha)$  peut devenir négatif, de telle sorte que la bifurcation fourche devient sous-critique.

Ceci arrive lorsque le potentiel d'interaction est de courte portée. On discutera plus en détails le comportement de  $\alpha$  et l'existence de cette sous-criticalité dans la section 3.4.4. On montrera que pour une interaction Coulombienne le coefficient  $\alpha$  est inférieur ou égal à deux, ce qui est cohérent avec l'observation de la stabilité inconditionnelle de la configuration zigzag pour les systèmes avec interaction de Coulomb [52, 39]. Cependant pour des interactions de type fonction de Bessel modifiées, comme utilisées dans nos simulations, on trouve  $(2 - \alpha) < 0$  quand  $d/\lambda_0 > 1.58$ <sup>10</sup>. Les simulations étant réalisées avec  $d/\lambda_0 \approx 3.92$  [voir section 3.2 et l'annexe A.3 pour les détails sur les simulations], il est possible d'observer l'influence du changement de caractère de la bifurcation induit par le couplage avec le champs de phase dans les simulations comme nous le verrons section 5.3.

Lorsque  $(2 - \alpha) < 0$ , la bifurcation est sous-critique, il devient alors nécessaire de calculer les termes à l'ordre suivant de l'équation (3.20) afin d'obtenir des solutions stables au delà du seuil de bifurcation et donc de « saturer l'instabilité ». Nous allons donc étendre le développement de l'énergie, présenté équation (3.6) aux termes d'ordres suivants. On trouve alors un terme à l'ordre  $\delta^{5/2}$  qui correspond à une dérivée totale en  $x$ , et qui peut alors être oublié<sup>11</sup>. Le calcul du terme d'ordre suivant  $\delta^3$  devient plus lourd, c'est pourquoi on gardera uniquement les termes en  $h^5$ ,  $h^3\phi_x$  et  $h\phi_x^2$ , en négligeant les dérivées supérieures de  $h$  uniquement dans le but de simplifier les expressions. Cependant nous verrons par la suite que cette approximation non contrôlée se trouve être numériquement excellente.

Finalement lorsque l'on regroupe les termes à l'aide de l'équation (3.23), ils donnent lieu à un unique terme en  $h^5$ . La forme normale de la bifurcation s'écrit alors :

$$h_{tt} = \epsilon\beta_{ZZ}h - a_3(2 - \alpha)h^3 - a_5h^5 + h_{xx}, \quad (3.25)$$

où le nouveau coefficient  $a_5$  est défini comme :

$$a_5 \equiv \frac{2d}{mc_{\perp}^2} [2(6 - 6\alpha + \alpha^2) (U'(d) - dU''(d)) + (2 - \alpha)^2 d^2 U'''(d)] > 0. \quad (3.26)$$

10. Cette valeur est différente de celle calculée au chapitre précédent [voir section 2.3.3] car ici uniquement les interactions avec les seconds plus proches voisins sont prises en compte, si on restreint l'analyse faite section 2.3.3 à cette approximation on trouve  $\xi_c = d/\lambda_0 = 1.58$  comme valeur critique d'apparition d'une zone instable.

11. À partir des équations (3.4) et (3.5), on note que les puissances impaires de  $\delta^{1/2}$  apparaissent dans le développement comme des fonctions de dérivées paires de  $\phi$  et impaire de  $h$ . Dans le développement de l'énergie, les puissances impaires de  $\delta^{1/2}$  contiennent nécessairement ces termes à la puissance impaire, et ils changent donc de signe dans une transformation de parité. Or comme l'équation attendue doit être invariante sous cette symétrie de parité, on s'attend à ce que les termes de puissance impaire de  $\delta^{1/2}$  dans la densité de Lagrangien soient nécessairement en facteur de dérivées exacts de  $x$ , comme nous l'avons vu pour le terme d'ordre  $\delta^{3/2}$  dans l'équation (3.7).

Les signes des coefficients jouent un rôle majeur dans la description de la bifurcation, on trouve que les coefficients  $\beta_{ZZ}$ ,  $a_3$ ,  $a_3$ ,  $\alpha$  et également  $a_5$  sont tous positifs. La question qui reste à déterminer pour connaître le caractère de la bifurcation correspond au signe du coefficient  $(2 - \alpha)$ . Si sa valeur est positive, la forme normale (3.25) décrit une *bifurcation fourche sous-critique*, alors que si sa valeur est négative, la forme normale décrit une bifurcation fourche surcritique. Dans la prochaine sous-section nous allons nous intéresser à la valeur de ce coefficient en fonction de l'interaction entre particules.

#### 3.4.4 Estimations numériques de $\alpha$

Nous discutons, maintenant en fonction de l'interaction entre particules, les valeurs prises par le coefficient  $(2 - \alpha)$ , défini équation (3.23), puisqu'il détermine le caractère sous-critique ou surcritique de la bifurcation fourche.

Ce coefficient est directement relié à l'analyse linéaire des modes de la configuration zigzag. En effet, le développement de la relation de dispersion aux faibles nombres d'onde (section 2.3.1), qui indique l'existence d'un système instable, est directement relié au signe du coefficient  $S_0$  décrivant la courbure de l'équation de dispersion pour de grandes longueurs d'onde [voir l'équation (2.26)]. Or, si on exprime ce coefficient en prenant uniquement en compte les interactions second plus proches voisins, on trouve que :

$$\begin{aligned} S_0 &= [4U''(2d) + U''(d)] - \left( U''(d) - \frac{U'(d)}{d} \right) \\ &= \left[ 2U''(2d) + \frac{1}{2}U''(d) \right] (2 - \alpha) \end{aligned} \quad (3.27)$$

Le changement de caractère de la bifurcation en fonction de  $(2 - \alpha)$  est donc directement relié à l'apparition de fréquences instables dans la relation de dispersion des modes propres de la configuration zigzag.

Il est également possible de reprendre l'analyse du signe du coefficient  $(2 - \alpha)$  en fonction du type d'interaction considéré entre les particules, pour des potentiels de portée finie, comme la fonction de Bessel modifiée utilisée en simulation (voir Appendix A) ou comme le potentiel de Yukawa. Pour un potentiel en Bessel modifié, on a :

$$\alpha(\xi) = \frac{2\xi [K_0(\xi) + K_2(\xi)] + 4K_1(\xi)}{\xi [K_0(\xi) + K_2(\xi) + 4(K_0(2\xi) + K_2(2\xi))]} \quad (3.28)$$

où l'on rappelle la définition de  $\xi \equiv d/\lambda_0$  avec  $\lambda_0$  qui correspond à la portée de l'interaction. Comme  $K_n(\xi) \sim e^{-\xi}/\sqrt{2\pi\xi}$  pour les grandes valeurs de  $\xi$ , on trouve facilement que  $\lim_{\xi \rightarrow \infty} \alpha(\xi) = 2$ . La fonction  $\alpha(\xi)$  est représentée dans la figure 3.9 : on trouve  $\alpha \geq 2$  pour  $d/\lambda_0 \geq 1.58$ , et la valeur maximale de  $\alpha$  est 2.33.

Pour un potentiel de type Yukawa, on trouve :

$$\alpha(\xi) = \frac{2(\xi^2 + 3\xi + 3)}{\xi^2 + 2\xi + 2 + e^{-\xi}(2\xi^2 + 2\xi + 1)}, \quad (3.29)$$

ce qui donne de nouveau  $\lim_{\xi \rightarrow \infty} \alpha(\xi) = 2$ . La fonction  $\alpha(u)$  est également représentée figure 3.9. On mesure cette fois-ci  $\alpha \geq 2$  pour  $d/\lambda_0 \geq 0.61$ , et la valeur maximale de  $\alpha$  est 2.32.

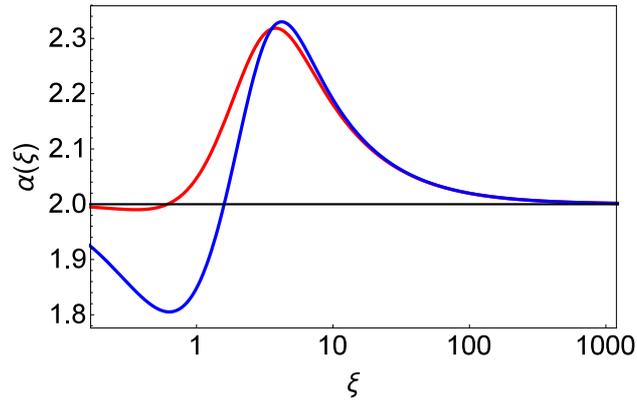


FIGURE 3.9 – Évolution de  $\alpha(\xi)$  (échelle linéaire) en fonction de  $\xi$  (en échelle Log) pour un potentiel d'interaction en fonction de Bessel modifiée (courbe bleue) et pour un potentiel d'interaction de type Yukawa (courbe rouge).

Pour les potentiels d'interaction à longue portée, il est nécessaire d'étendre le calcul non linéaire à la prise en compte des interactions entre toutes les particules dans le système. Si nous prenons en compte la  $n^{\text{ème}}$  cellule après celle indiquée en rouge figure 3.8, il suffit de développer les distances  $A_0B_n$  et  $A_0A_n$  en fonction du petit paramètre  $\delta$ . Cela revient à remplacer  $d$  dans l'équation (3.4) par  $(2n + 1)d$ , et  $2d$  dans l'équation (3.5) par  $(2nd)$  et de sommer sur toutes les particules en interaction. Le développement en puissance de  $\delta$  est cohérent si  $n\delta \ll 1$ , ce qui exclut les systèmes infinis. Si on considère un système fini périodique de  $N_{\max}$  cellules ( $2N_{\max}$  particules), le coefficient  $\alpha$  s'écrit alors :

$$\alpha = \frac{2 \sum_{j=1}^{N_{\max}} \left( d^2 \frac{U''(d_j)}{(2j-1)^2} - d \frac{U'(d_j)}{(2j-1)^3} \right)}{\sum_{j=1}^{N_{\max}} \left( d_j^2 U''(d_j) + 4(dj)^2 U''(2dj) \right)}. \quad (3.30)$$

Pour un potentiel de Coulomb,  $U(r) \propto 1/r$ , la somme au numérateur converge rapidement lorsque  $N_{\max}$  est grand tandis que la somme au dénominateur diverge. Par conséquent  $\alpha \leq 2$  (avec égalité pour  $N_{\max} = 1$ ) et la bifurcation fourche est alors toujours surcritique, ce qui est cohérent avec l'analyse de stabilité linéaire de la configuration zigzag présentée chapitre 2.

On a donc bien montré l'existence d'un mécanisme permettant d'expliquer le caractère sous-critique de la transition zigzag pour des systèmes infinis invariants par translation et avec des interactions entre particules à courte portée. Le phénomène clef derrière ce changement de caractère de la bifurcation correspond au couplage non linéaire entre le mode mou apparaissant à la transition zigzag et le mode de phase lié à l'invariance par translation. Mais ce mode de phase existe aussi dans des systèmes de taille finie avec des conditions aux bords périodiques, entraînant alors une invariance par rotation. Le caractère sous-critique de la bifurcation reste donc pertinent pour les systèmes périodiques avec des interactions de courte portée. Cette description sous-critique est cohérente avec les observations sur les simulations présentées section 3.3. Mais au delà, l'accord semble aussi quantitatif, car nous montrerons par exemple dans le chapitre 5 que l'extension des cycles d'hystérésis présentés figure 3.6 tend dans la limite des grands systèmes,  $N \rightarrow \infty$ , vers la valeur décrite par le modèle non linéaire,  $\epsilon_{\text{coex}}(d)\beta_{ZZ}(d)$  [voir section 5.2].

## 3.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons discuté la nature de la transition zigzag dans les systèmes de particules en interaction répulsive à courte portée qui sont soit des systèmes infinis soit des systèmes aux conditions aux bords périodiques. À partir de simulations numériques, nous avons montré que les configurations d'équilibre adoptées par le système pouvaient être inhomogènes. Nous avons également montré que ces configurations inhomogènes pouvaient être décrites par un modèle simple de coexistence de phase en zigzag et de phase en ligne. De plus nous avons vu que pour les systèmes suffisamment grands, la transition zigzag présentait un comportement hystérétique, caractéristique d'une transition configurationnelle du premier ordre. Le mécanisme responsable de ce changement de caractère de la bifurcation a été identifié : il s'agit du couplage non linéaire entre le mode mou lié à la transition zigzag et le mode de Goldstone lié à l'invariance par translation ou par rotation du système.

Dans le contexte plus général des instabilités en systèmes étendus, la forme normale sous-critique d'une telle bifurcation avait été obtenue phénoménologiquement à partir d'arguments de symétrie. Nous sommes allés plus loin ici dans le cadre de la transition zigzag. En effet, la connaissance de la dynamique sous-jacente du problème nous a permis d'obtenir la forme normale de la bifurcation de façon constructive, par un calcul direct s'appuyant sur une approche asymptotique dans la limite thermodynamique et proche du seuil de bifurcation. Nous avons développé de cette manière une expression analytique pour la forme normale de la bifurcation et ses coefficients. Ces derniers nous permettent de mettre en évidence le caractère sous-critique de la bifurcation fourche. Enfin, nous avons pu relier le changement de caractère de la bifurcation à l'apparition de modes instables dans l'analyse de stabilité linéaire de la configuration zigzag réalisée au chapitre 2. Nous avons pu alors retrouver les valeurs de portée d'interaction ou d'exposant d'interaction en loi de puissance pour lesquels la transition change de caractère.



# Chapitre 4

## Influence de la température sur la bifurcation sous-critique

### Sommaire

---

<b>4.1 Introduction</b>	<b>71</b>
<b>4.2 Caractérisation des configurations à température non nulle</b>	<b>73</b>
4.2.1 Stabilité des bulles à température non nulle	73
4.2.2 Paramètre d'ordre en présence de bruit thermique	73
<b>4.3 Comportement du système en présence de température</b>	<b>76</b>
4.3.1 Distinction entre régime hystérétique et intermittence	76
4.3.2 Évolution des diagrammes d'hystérésis avec la température	77
<b>4.4 Régime d'hystérésis : évolution des seuils d'hystérésis (<math>T &lt; T_C</math>)</b>	<b>80</b>
<b>4.5 Régime d'intermittence et paysage énergétique (<math>T &gt; T_C</math>)</b>	<b>82</b>
4.5.1 Temps de résidence et paysage énergétique	82
4.5.2 Reconstruction du cycle d'hystérésis à $T=0$ K	84
<b>4.6 Conclusion</b>	<b>86</b>

---

### 4.1 Introduction

Dans le chapitre précédent, nous avons montré que les systèmes cycliques de particules en interaction courte portée présentent une transition structurale décrite par une bifurcation sous-critique. Ainsi pour une gamme intermédiaire de confinement transverse, ce système présente une coexistence de phases avec une structure localisée en zigzag entourée de particules en ligne. De plus nous avons vu que ces systèmes présentent un comportement hystérétique où l'on observe que la configuration du système passe d'une configuration en ligne à une bulle (confinement décroissant) à une valeur de confinement plus faible que celle pour laquelle le système passe d'une configuration en bulle à une configuration en ligne (confinement croissant).

Jusqu'ici nous nous sommes intéressés uniquement à l'observation de cette transition structurale à température nulle. Il est intéressant de se demander dans quelle limite notre description reste valide lorsque le système est soumis à un bain thermique et comment les structures que nous venons de

décrire résistent à l'agitation thermique. Au cours de ce chapitre nous allons donc étudier l'influence d'un bruit thermique sur ces structures localisées, et particulièrement son influence directe sur la structure de la bifurcation sous-critique elle-même. Cependant dans ce chapitre nous traiterons uniquement du rôle de la température sur la transition structurale du système, laissant de côté les comportements dynamiques des structures liés à la température, qui seront traités dans la partie II.

Nous profiterons du caractère modèle de notre système pour appréhender de façon plus générale l'influence des fluctuations thermiques sur les bifurcations sous-critiques, pour lesquelles peu de résultats existent. En effet, plusieurs études ont été réalisées concernant le rôle des effets thermiques sur une bifurcation fourche surcritique [5, 3]. Ces résultats se sont avérés en très bon accord avec les études numériques menées sur des systèmes confinés longitudinalement [34]. Ce n'est que récemment que des systèmes présentant des transitions sous-critiques ont été considérés. Il a notamment été montré que la température affectait de manière majeure le cycle d'hystérésis observé lors de telles transitions [4]. Cependant, les expressions présentées dans cette étude se trouvent être essentiellement formelles et assez rarement comparées à des systèmes physiques. Nous nous proposons donc d'utiliser ici la bifurcation observée sur la transition zigzag pour étudier l'influence des fluctuations thermiques sur la transition zigzag sous-critique observée en système cyclique.

Dans une première section 4.2 nous discuterons la stabilité des bulles en présence d'un bain thermique ainsi que leur description à partir du modèle non linéaire développé au chapitre 3. Notons que la gamme de températures à laquelle on va s'intéresser est minorée en pratique par les températures en deçà desquelles aucun effet n'est décelable. D'autre part elle est majorée par les températures au delà desquelles l'amplitude des fluctuations thermiques deviendrait comparable à l'amplitude transverse de la bulle, compromettant ainsi la possibilité de définir une quelconque structure localisée. Dans une seconde section 4.3 nous nous intéresserons à la difficulté qu'il y a à définir un cycle d'hystérésis en présence de bruit thermique. Nous introduirons alors une distinction entre régimes dits d'« hystérésis » et d'« intermittence ». L'influence de la température sur les seuils du cycle d'hystérésis sera présentée plus quantitativement dans la section 4.4. Enfin nous montrerons, dans la section 4.5, que l'on peut extraire un grand nombre d'informations sur le paysage énergétique du système à partir de l'étude du régime d'intermittence.

Comme précédemment les résultats présentés dans ce chapitre ont été obtenus à l'aide de simulations de dynamique moléculaire à faible coefficient de dissipation dans le but d'accentuer l'influence du bruit thermique. Les détails de simulation spécifiques concernant ce chapitre sont développés dans une partie dédiée annexe A.4.

Ces résultats ont fait l'objet d'une publication, *Hysteretic and intermittent regimes in the sub-critical bifurcation of a quasi-one-dimensional system of interacting particles*, *Phys. Rev. E* [36].

## 4.2 Caractérisation des configurations à température non nulle

Les formes des bulles à  $T = 0$  K seront décrites en détails au chapitre 5. Nous décrirons pour chaque valeur de confinement  $\epsilon$  une forme continue de bulle, sur laquelle les particules s'organisent en zigzag formant une unique configuration d'équilibre. Nous anticiperons ici ces résultats et comparerons les formes de bulles observées à température non nulle avec ces formes théoriques pour étudier la stabilité des bulles en présence d'un bruit thermique.

L'échelle de température que nous considérons ici, qui peut apparaître comme très élevée au regard des températures usuelles, est déterminée par le choix de l'amplitude d'énergie d'interaction  $U_0$ . Nous avons choisi arbitrairement de fixer cette échelle d'énergie à une énergie proche de celles observées dans notre système expérimental de billes métalliques millimétriques chargées en interaction<sup>1</sup> [20, 31]. Pour un tel système il a été montré que l'énergie d'interaction entre particules correspond à une fonction de Bessel modifiée [voir équation (2.32)] [55]. Si on considère une distance typique entre particules de  $d = 1.875$  mm, on trouve alors que l'énergie d'interaction entre particule vaut  $U(d) \approx 0.117$  nJ soit  $U(d)/k_B \approx 8.46 \cdot 10^{12}$  K. Le domaine de température auquel on s'intéresse est alors compris entre une valeur nulle et une valeur comparable à cette énergie d'interaction, typiquement  $T \sim 10^{12}$  K.

### 4.2.1 Stabilité des bulles à température non nulle

Les figures 4.1 (a)–(c) présentent différentes configurations instantanées prises par le système pour un même confinement mais pour une température croissante. Chaque figure montre une structure localisée de bulle et chaque structure est bien décrite par la même forme continue, ceci pour toutes les températures considérées. Les structures localisées de bulles deviennent de plus en plus bruitées lorsque la température augmente, mais elles ne sont pas détruites par les fluctuations thermiques pour de telles températures. La robustesse de ces structures avec la température est confirmée par les figures 4.1 (d)–(f) qui montrent la superposition des positions prises par les particules pendant un temps typique de 90 s. Pour  $T = 10^9$  K et  $T = 10^{10}$  K [voir figures 4.1 (d)–(e)], la forme des bulles est simplement conservée durant toute la simulation. Les bulles étant des solutions d'équilibre stables, les fluctuations thermiques entraînent uniquement des déplacements aléatoires des particules autour de leurs positions d'équilibre, l'amplitude de ces déplacements augmente avec la température. À plus haute température [ $T = 10^{11}$  K, voir figure 4.1 (f)] la forme de la bulle est plus difficilement reconnaissable, elle apparaît floutée à cause de l'amplitude des fluctuations.

### 4.2.2 Paramètre d'ordre en présence de bruit thermique

Afin de décrire la transition du système avec la variation du confinement il nous faut définir un paramètre d'ordre  $h_m(\epsilon)$  qui caractérise sans ambiguïté la configuration prise par le système pour chaque confinement  $\epsilon$ . La définition de ce paramètre d'ordre pour une bulle soumise à un bain thermique n'est pas évidente et demande une procédure adaptée que nous allons présenter ici.

On pourrait imaginer associer ce paramètre d'ordre à l'amplitude  $h_m(\epsilon)$ , la distance maximale entre les particules et l'axe longitudinal, mesurée sur une configuration moyenne. Même si

1. Une description plus précise du système expérimental est présentée dans l'annexe B.

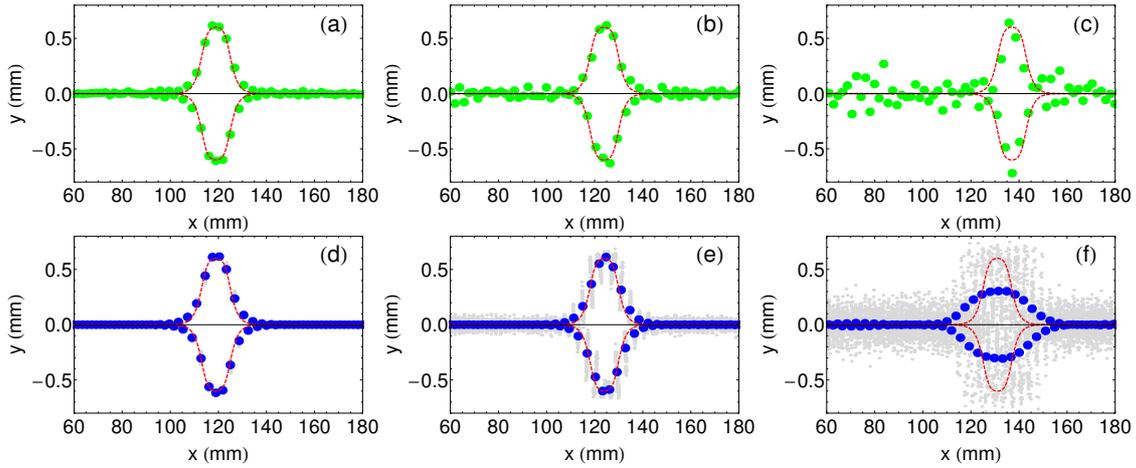


FIGURE 4.1 – Positions des particules  $(x_i, y_i)$  (mm) pour un système de 128 particules présentant une bulle ( $\epsilon = 0.02$  et  $d = 1.875$  mm), avec pour températures  $T = 10^9$ ,  $10^{10}$  et  $10^{11}$  K de gauche à droite. Les points verts sur les figures du haut correspondent aux positions instantanées. Les points bleus sur les figures du bas montrent les positions moyennes des particules et les points grisés la superposition de toutes les configurations instantanées enregistrées pendant un temps typique de 90 s. Dans toutes les figures la ligne pointillée rouge correspond à la forme analytique de bulle associée à ce confinement.

cette procédure semble fonctionner à basse température elle introduit des erreurs importantes à haute température. En effet, à basse température on observe sur les figures 4.1 (d) et (e) que la configuration moyenne est très semblable aux configurations instantanées et à la forme continue [voir figures 4.1 (a) et (b)]. Cependant à haute température la configuration moyenne présentée figure 4.1 (f) ne ressemble plus du tout à la configuration instantanée prise par le système<sup>2</sup> [voir figure 4.1 (c)]. Cet important désaccord nous empêche alors de définir  $h_m(\epsilon)$  à partir des configurations moyennes.

Nous proposons donc de déterminer  $h_m(\epsilon)$  d'une manière alternative plus pertinente pour chaque température. Afin de tirer parti du grand nombre de réalisations du système durant toute la simulation et d'éviter les artifices liés aux moyennes, nous avons défini  $h_m(\epsilon)$  à partir de la densité de probabilité de la distance maximale entre les particules et l'axe de la cellule  $h_m(t)$  déterminée à chaque instant  $t$ . De telles distributions de hauteurs maximales typiques sont présentées figure 4.2 pour deux températures différentes et pour des valeurs de confinement  $\epsilon$  autour du seuil  $\epsilon = 0$ .

La valeur pour laquelle cette distribution des hauteurs est maximale a toutes les caractéristiques d'un paramètre d'ordre et peut être utilisée comme tel.

Ainsi, si l'on considère tout d'abord un fort confinement  $\epsilon$  tel que les particules se trouvent en configuration en ligne à température nulle, alors  $h_m(\epsilon, T = 0, t) = 0$  et la densité de probabilité est une distribution de Dirac  $\delta(h)$  centrée sur zéro. Pour une température non nulle, la valeur instantanée de  $h_m(\epsilon, T > 0, t)$  est par définition positive ou nulle et sa valeur augmente avec la température. La distribution des hauteurs maximales est alors décalée par rapport au zéro et légèrement étalée autour de sa valeur la plus probable  $h_m(\epsilon, T > 0)$ , comme le montre la figure 4.2 (a).

2. Nous verrons plus en détail au chapitre 9 que ce désaccord est lié à la dynamique des bulles avec la température, et le mouvement diffusif des bulles à cause du bain thermique.

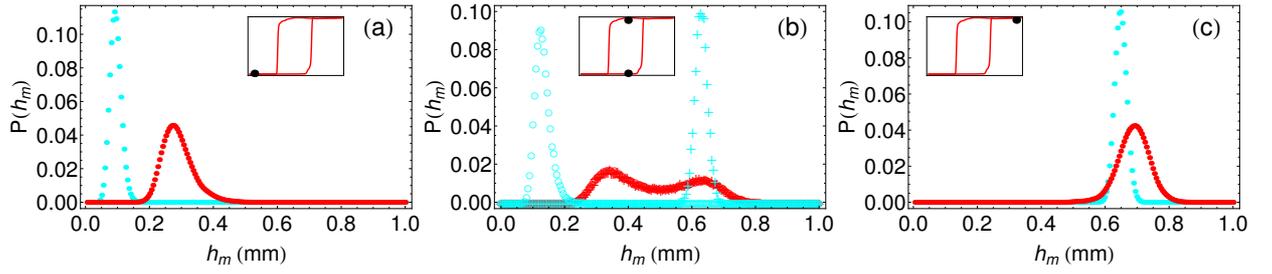


FIGURE 4.2 – Distribution des hauteurs  $h_m(\epsilon, T, t)$  (en mm) pour un système de 128 particules, et pour trois confinements différents : (a)  $\epsilon = -0.05$  ; (b)  $\epsilon = 0.001$  ; (c)  $\epsilon = +0.05$ . Les symboles rouges et cyans correspondent respectivement à des températures de  $T = 10^{10}$  K et  $T = 10^{11}$  K. Les figures en insert permettent de situer  $\epsilon$  par rapport au cycle d’hystérésis obtenu à très basse température,  $T = 10^7$  K. Dans la figure (b) les cercles ouverts correspondent à un système initialement dans une configuration en ligne et les croix à un système initialement dans une configuration en bulle.

Pour un confinement tel que la configuration d’équilibre à  $T = 0$  K est une structure localisée en bulle, la densité de probabilité correspond à une distribution de Dirac centrée sur la valeur de l’amplitude maximale de cette forme de bulle. Tandis que pour une température non nulle, la densité de probabilité se décale légèrement vers des valeurs supérieures et est élargie comme pour la configuration en ligne [voir figure 4.2 (c)]. Cette configuration est cependant très facilement distinguable de la configuration en ligne car la valeur la plus probable de  $h_m(\epsilon, T > 0)$  pour la configuration en bulle reste toujours beaucoup plus grande que celle de la configuration en ligne.

Finalement, pour un confinement  $\epsilon$  à l’intérieur du cycle d’hystérésis à  $T = 0$  K, en l’absence de température, la distribution des  $h_m(\epsilon, T = 0, t)$  correspond à une fonction  $\delta$  de Dirac centrée autour de  $h_m = 0$  si le système est initialement en ligne, ou centrée autour de  $h_m > 0$  si le système est initialement dans une configuration présentant une bulle. Les distributions de position pour une température non nulle sont présentées figures 4.2 (b). À basse température ( $T = 10^{10}$  K, symboles en cyan) telle qu’aucun saut entre les deux configurations n’est observé, le système garde simplement en mémoire sa configuration initiale et explore l’espace des configurations autour d’un seul attracteur ; selon les conditions initiales, la densité de probabilité est centrée soit autour d’une faible valeur de  $h_m$  pour une configuration en ligne [cercles cyan, figure 4.2 (b)], soit autour d’une grande valeur de  $h_m$  pour une configuration en bulle [croix cyan, figure 4.2 (b)]. À plus haute température, ( $T = 10^{11}$  K, symboles rouges) des sauts entre configuration en ligne et configuration en bulle sont visibles. Dans ce régime de température, la mémoire de la configuration initiale du système est rapidement perdue. La distribution des hauteurs présente alors deux maxima locaux. Le premier maximum correspond aux fluctuations autour de la configuration en ligne et le second aux fluctuations autour de la configuration en bulle. Chaque maximum est de largeur finie et il est possible d’observer le système dans un état intermédiaire différent de celui en ligne ou de celui en structure localisée en bulle.

### 4.3 Comportement du système en présence de température

#### 4.3.1 Distinction entre régime hystérétique et intermittence

À l'intérieur du cycle d'hystérésis, chacune des configurations du système correspond à un minimum local d'énergie noté  $E_L(\epsilon)$  pour un système en ligne et  $E_B(\epsilon)$  pour un système en bulle. Il est alors possible que les fluctuations thermiques fassent passer le système d'une configuration à l'autre, par un processus activé thermiquement permettant au système de franchir le maximum d'énergie  $E_M(\epsilon)$  séparant les deux configurations. Bien entendu la valeur de cette barrière énergétique à franchir n'est pas contenue dans le modèle non linéaire décrivant la forme des bulles, car la connaissance complète du paysage énergétique nécessiterait la résolution des équations du mouvement pour toutes les particules dans tout l'espace des phases, mais nous verrons section 4.5 qu'il est possible malgré tout de remonter à certaines informations clés sur le paysage énergétique.

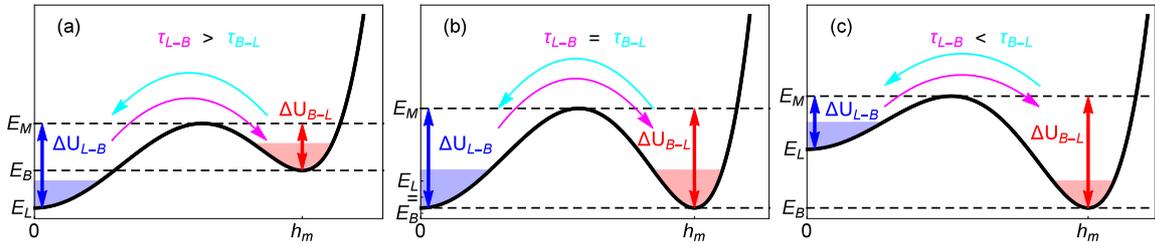


FIGURE 4.3 – Représentation schématique du paysage énergétique pour trois confinements  $\epsilon$  différents tels que (a)  $\tau_{L-B} > \tau_{B-L}$ , (b)  $\tau_{L-B} = \tau_{B-L}$  et (c)  $\tau_{L-B} < \tau_{B-L}$ . Les flèches bleues et rouges indiquent respectivement les hauteurs de barrières énergétiques  $\Delta U_{L-B}$  et  $\Delta U_{B-L}$ , et les flèches cyans et magentas indiquent les directions de sauts respectivement de bulle vers ligne et inversement.

On considère tout d'abord un système à température nulle et on s'intéresse à l'évolution de sa configuration quand  $\epsilon$  augmente, lorsqu'il est préparé initialement en configuration en ligne à fort confinement ( $\epsilon \ll 0$ ). Le système reste dans cette configuration tant que l'énergie  $E_L(\epsilon)$  correspond à un minimum local. Quand  $\epsilon$  atteint la valeur seuil  $\epsilon_{\text{up}}(T = 0)$ , l'énergie  $E_L(\epsilon_{\text{up}})$  ne correspond plus à un minimum local et le maximum  $E_M(\epsilon_{\text{up}})$  existant entre les deux configurations disparaît. Le système transite alors vers une configuration présentant une bulle dont l'énergie  $E_B(\epsilon_{\text{up}})$  est plus faible. De manière similaire, en considérant un système initialement en bulle et en diminuant  $\epsilon$  on peut définir  $\epsilon_{\text{down}}(T = 0)$ , pour lequel le système passe cette fois-ci de la bulle à la ligne. Ces deux seuils caractérisent la largeur du cycle d'hystérésis à température nulle comme  $\epsilon_{\text{up}}(T = 0) - \epsilon_{\text{down}}(T = 0)$ .

À  $T \neq 0$  K, des sauts entre configurations peuvent être activés thermiquement. Le saut d'une configuration en ligne vers une configuration en bulle peut être caractérisé par un temps d'activation de Kramers  $\tau_{L-B}(\epsilon, T) \propto \exp(\Delta U_{L-B}(\epsilon)/k_B T)$  avec  $\Delta U_{L-B}(\epsilon) = E_M(\epsilon) - E_L(\epsilon)$ , alors que le saut d'une configuration en bulle vers une configuration en ligne est caractérisé par  $\tau_{B-L}(\epsilon, T) \propto \exp(\Delta U_{B-L}(\epsilon)/k_B T)$  avec  $\Delta U_{B-L}(\epsilon) = E_M(\epsilon) - E_B(\epsilon)$ . La probabilité de passer d'une configuration d'équilibre à l'autre dépend alors à la fois du confinement  $\epsilon$  et de la température  $T$ .

À cause de l'existence de ces temps de Kramers, la description du cycle d'hystérésis à température non nulle dépend du temps d'observation,  $\tau_{\text{obs}}$ . Si l'on considère  $\tau_{\text{obs}} \rightarrow \infty$ , alors pour n'importe quelle valeur de  $\epsilon$  à l'intérieur du cycle d'hystérésis les temps de Kramers sont nécessairement plus petits que la durée d'observation et les deux configurations peuvent être observées, indépendamment de la configuration initiale du système. Il est alors impossible de définir un seuil de transition entre configurations comme à  $T = 0$  K et le cycle d'hystérésis devient dénué de sens. De manière générale quand les temps caractéristiques pour passer d'une configuration à l'autre sont tous les deux plus petits que  $\tau_{\text{obs}}$ , les deux configurations peuvent être vues pendant le temps d'observation indépendamment de la configuration initiale du système. La mémoire de la configuration du système n'est alors pas conservée de telle sorte qu'on ne peut plus définir de cycle d'hystérésis. On parlera dans ce contexte là de *régime d'intermittence*. Cependant, en pratique n'importe quelle observation numérique ou expérimentale implique une durée d'observation  $\tau_{\text{obs}}$  finie. Les seuils d'hystérésis ont alors besoin d'être redéfinis. On se propose de définir le seuil comme la première valeur de confinement pour laquelle un saut depuis la configuration initiale du système vers l'autre configuration se produit durant le temps d'observation tandis que le saut inverse n'a pas le temps de se produire. Sous ces conditions on pourra alors observer un cycle d'hystérésis dépendant de la température, il s'agit donc du *régime d'hystérésis*.

Finalement pour un temps d'observation  $\tau_{\text{obs}}$  fixé, la distinction entre les deux régimes est simplement pilotée par la température. Il est alors possible de définir une température critique pour laquelle le temps moyen de saut d'une configuration à l'autre et inversement sont identiques, cette température est notée  $T_c$  et elle marque la distinction entre le régime d'hystérésis à basse température et le régime d'intermittence à haute température.

### 4.3.2 Évolution des diagrammes d'hystérésis avec la température

Pour un temps d'observation donné l'influence de la température sur le diagramme d'hystérésis peut être étudiée en suivant l'évolution de la distribution des hauteurs  $h_m(\epsilon, T, t)$  avec le confinement  $\epsilon$  pour différentes températures. La figure 4.4 présente le diagramme d'hystérésis reconstruit à partir des distributions de hauteurs maximales pour chaque confinement  $\epsilon$ .

À basse température, l'énergie thermique n'est pas suffisante pour induire des comportements d'intermittence pendant chaque pas en  $\epsilon$  de durée  $\tau_{\text{obs}}$ . Un cycle d'hystérésis est alors encore observé, et le diagramme de bifurcation n'est que légèrement modifié par rapport à celui à  $T = 0$  K ou à très basse température ( $T = 10^7$  K). La comparaison entre les diagrammes d'hystérésis à  $T = 10^9$  K et  $T = 10^{10}$  K (respectivement figures 4.4 (a) et 4.4 (b)) montre cependant que l'extension du cycle d'hystérésis diminue avec la température. Cette diminution sera discutée en détails dans la section 4.4.

À plus haute température, le comportement d'intermittence modifie largement le diagramme de transition, comme le montrent les figures 4.4 (c) et (d). Pour de telles températures, des sauts activés thermiquement d'une configuration en ligne vers une configuration en bulle et inversement se produisent pour des confinements  $\epsilon_{\text{down}}(T = 0) < \epsilon < \epsilon_{\text{up}}(T = 0)$ . Comme on le voit pour les températures  $T = 10^{11}$  K et  $T = 2 \times 10^{11}$  K, le système perd la mémoire de son état initial à  $\epsilon$  constant et on n'observe plus de cycle d'hystérésis.

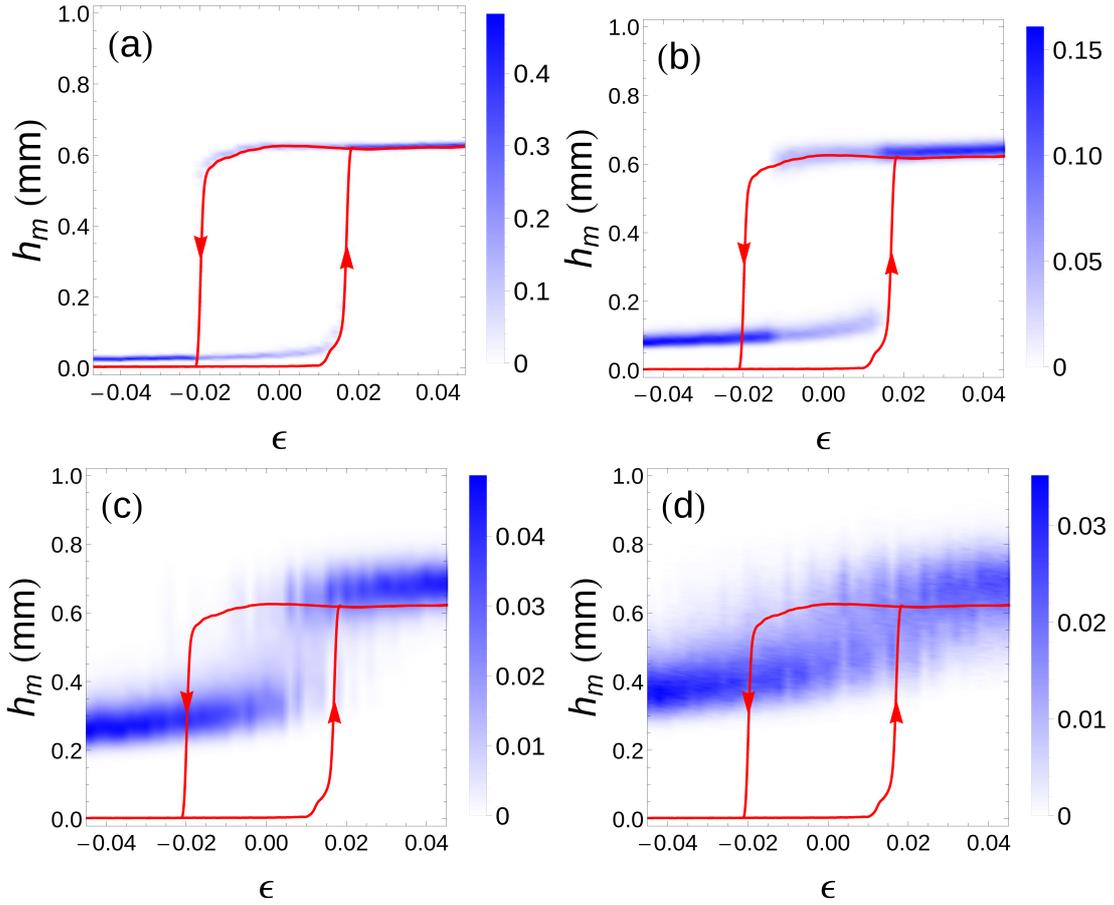


FIGURE 4.4 – Diagrammes d’hystérésis reconstruits à partir des distributions de hauteurs  $h_m(\epsilon, T, t)$ , pour différentes températures  $T = 10^9$  K (a),  $T = 10^{10}$  K (b),  $T = 10^{11}$  K (c) et  $T = 2 \times 10^{11}$  K (d). Les courbes en traits plein rouges correspondent au cycle d’hystérésis obtenu à très faible température  $T = 10^7$  K. Les distributions de hauteurs sont représentées en échelles de bleus sur la droite pour chaque  $\epsilon$ . Pour  $T = 10^9$  K et  $T = 10^{10}$  K le système garde en mémoire sa condition initiale et le sens d’évolution de  $\epsilon$  correspond aux flèches rouges. Pour  $T = 10^{11}$  K et  $T = 2 \times 10^{11}$  K le système perd toute mémoire de ses conditions initiales et le diagramme ne dépend plus du sens d’évolution du confinement  $\epsilon$ .

Qualitativement ces diagrammes d’hystérésis s’interprètent à partir d’un modèle décrit uniquement à partir des termes homogènes de la forme normale équation (3.25). Dans ce modèle, l’énergie du système s’écrit :

$$E(\epsilon, h) = -\frac{\epsilon\beta_{ZZ}}{2}h^2 + \frac{a_3(2-\alpha)}{4}h^4 + \frac{a_5}{6}h^6 \quad (4.1)$$

avec  $\epsilon$  pour paramètre de contrôle et  $h$  pour observable<sup>3</sup>. La boucle d’hystérésis à température nulle est alors simplement caractérisée par l’existence de deux minima locaux d’énergie, un pour  $h = 0$  d’énergie  $E_0(\epsilon)$  et un pour  $h \neq 0$  d’énergie  $E_1(\epsilon)$ .

3.  $\beta_{ZZ}$  et les  $a_i$  sont des constantes positives correspondant aux coefficients de la forme normale (3.25), notons que le coefficient du terme proportionnel à  $h^4$  est bien négatif puisque pour des interactions entre particules à courte portée  $(2 - \alpha) < 0$ , voir section 3.4.4.

À température non nulle l'agitation thermique permet au système d'explorer le paysage énergétique au voisinage des minima. L'élargissement de la distribution des hauteurs maximales  $h_m(\epsilon, T, t)$  résulte de cette exploration. Nous ne connaissons pas le paysage énergétique complet du système, toutefois nous pouvons tout de même avoir une estimation sommaire de la distribution des  $h_m(\epsilon, T, t)$  au voisinage de  $E_L(\epsilon)$  et  $E_B(\epsilon)$ .

L'élargissement des valeurs de hauteurs de la distribution peut être assimilée à l'extension de  $h$  atteinte par le système grâce aux fluctuations thermiques. On extrait alors numériquement la valeur de  $h$  satisfaisant  $E(\epsilon, h) = E_0(\epsilon) + k_B T$  et qui est la plus proche de la solution  $h(T = 0) = 0$  et celles satisfaisant  $E(\epsilon, h) = E_1(\epsilon) + k_B T$  et qui sont les plus proches de la solution  $h(T = 0) \neq 0$ . Ces valeurs définissent l'extension maximale des valeurs pouvant être prises par  $h$  lorsque la température est non nulle. Les domaines ainsi explorés par le paramètre  $h$  sont présentés figure 4.5, pour un système dans lequel un cycle d'hystérésis est observable, basses températures [figure 4.5 (a)], et pour un système présentant un régime d'intermittence, hautes températures [figure 4.5 (b)]. Ces diagrammes présentent des comportements comparables à ceux obtenus par simulation pour des configurations inhomogènes plus complexes [voir figure 4.4].

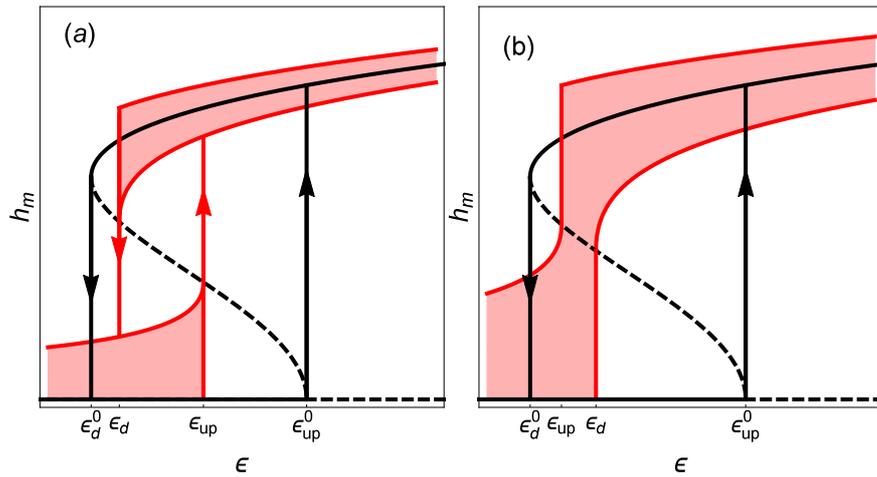


FIGURE 4.5 – Estimation qualitative de l'influence de la température sur le diagramme de transition. Pour chaque confinement  $\epsilon$  la largeur de la zone ombrée en rouge décrit le domaine de valeurs de  $h$  que le système peut visiter. Les traits noirs plein correspondent aux équilibres stables et les traits tirets noirs aux équilibres instables. Les flèches noires décrivent le cycle d'hystérésis à  $T = 0$  K. (a) : À basse température, les deux régions thermiquement explorées par le système autour des états d'équilibre stable sont toujours distinctes et un cycle d'hystérésis reste descriptible comme le montrent les flèches rouges. Cette figure est à comparer aux figures 4.4 (a) et (b). (b) : À haute température, les deux régions explorées thermiquement fusionnent et le cycle d'hystérésis est alors complètement flouté. Cette seconde figure est à comparer aux figures 4.4 (c) et (d).

#### 4.4 Régime d'hystérésis : évolution des seuils d'hystérésis ( $T < T_C$ )

Examinons maintenant plus en détails l'influence du bruit thermique sur les seuils d'hystérésis déterminés pour un temps d'observation  $\tau_{\text{obs}}$  donné durant lequel le confinement  $\epsilon$  est gardé constant.

À température nulle les seuils  $\epsilon_{\text{down}}(T = 0)$  et  $\epsilon_{\text{up}}(T = 0)$  dépendent uniquement de la stabilité des configurations d'équilibre. À température non nulle, les seuils  $\epsilon_{\text{down}}(T, \tau_{\text{obs}})$  et  $\epsilon_{\text{up}}(T, \tau_{\text{obs}})$  dépendent de la température mais aussi du temps d'observation considéré.

Nous considérons dans un premier temps un système initialement dans une configuration linéaire et nous augmentons  $\epsilon$  par pas successifs de durée  $\tau_{\text{obs}}$ . Pour le  $i^{\text{ème}}$  pas,  $\epsilon = \epsilon_i$ , le système reste en configuration en ligne tant que le temps de Kramers  $\tau_{L-B}(\epsilon_i, T) > \tau_{\text{obs}}$  puisque la configuration initiale à l'étape  $(i - 1)$  est en ligne et le temps  $\tau_{\text{obs}}$  est insuffisant pour observer une transition vers la configuration en bulle. Cette transition ne sera possible dans notre système que lorsque  $\tau_{L-B}(\epsilon_i, T) \sim \tau_{\text{obs}}$ , la probabilité d'observer un saut vers une configuration en bulle en un temps  $\tau_{\text{obs}}$  étant alors plus probable. Une fois la transition réalisée, le système restera dans une configuration en bulle uniquement si  $\tau_{B-L}(\epsilon_i, T) > \tau_{\text{obs}}$ , dans le cas contraire, il aura la possibilité de revenir dans la configuration en ligne. Ces deux conditions nous permettent donc de définir un seuil d'hystérésis  $\epsilon_{\text{up}}(T, \tau_{\text{obs}})$  à température non nulle, ce seuil est défini par  $\tau_{L-B}(\epsilon_{\text{up}}, T) \sim \tau_{\text{obs}}$  et à condition que  $\tau_{B-L}(\epsilon_{\text{up}}, T) > \tau_{\text{obs}}$ , pour la température  $T$  considérée. Notons que puisque  $\tau_{L-B}(\epsilon, T) \propto \exp(\Delta U_{L-B}(\epsilon)/k_B T)$  décroît avec la température, la condition  $\tau_{L-B}(T, \epsilon_{\text{up}}) \sim \tau_{\text{obs}}$  implique que  $\epsilon_{\text{up}}(T, \tau_{\text{obs}})$  soit une fonction décroissante de la température. De la même façon en suivant l'évolution d'un système initialement dans une configuration en bulle avec cette fois-ci un confinement  $\epsilon$  qui diminue, on peut définir le seuil  $\epsilon_{\text{down}}(T, \tau_{\text{obs}})$  (avec pour conditions  $\tau_{B-L}(\epsilon_{\text{down}}, T) \sim \tau_{\text{obs}}$  et  $\tau_{L-B}(\epsilon_{\text{down}}, T) > \tau_{\text{obs}}$ ). Contrairement au cas précédent  $\epsilon_{\text{down}}(T, \tau_{\text{obs}})$  est une fonction croissante de la température.

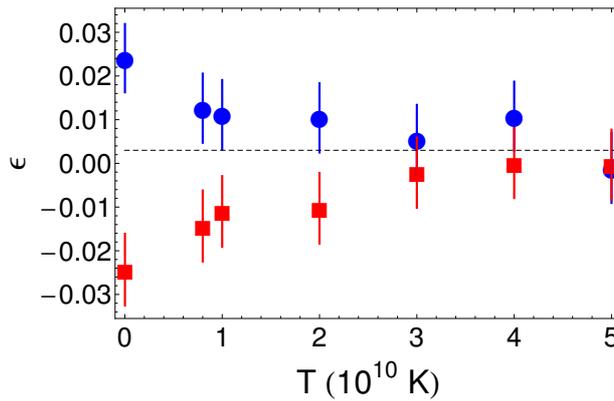


FIGURE 4.6 – Évolution des seuils d'hystérésis  $\epsilon_{\text{up}}(T, \tau_{\text{obs}})$  (points bleus) et  $\epsilon_{\text{down}}(T, \tau_{\text{obs}})$  (carrés rouges) avec la température.

La figure 4.6 représente  $\epsilon_{\text{down}}(T, \tau_{\text{obs}})$  et  $\epsilon_{\text{up}}(T, \tau_{\text{obs}})$  en fonction de  $T$  obtenus à partir des données de simulation. Les évolutions de  $\epsilon_{\text{down}}(T, \tau_{\text{obs}})$  et  $\epsilon_{\text{up}}(T, \tau_{\text{obs}})$  avec la température sont en accord avec la discussion précédente. L'extension du cycle hystérésis ;  $\epsilon_{\text{up}}(T, \tau_{\text{obs}}) - \epsilon_{\text{down}}(T, \tau_{\text{obs}})$ , finit par s'annuler pour une température critique  $T_c(\tau_{\text{obs}})$ .

Cette température peut être définie par  $\tau_{L-B}(\epsilon_{\text{down}}, T_c) \sim \tau_{B-L}(\epsilon_{\text{up}}, T_c) \sim \tau_{\text{obs}}$ . Comme on l'a vu cette température marque la fin de la possibilité de définir un cycle d'hystérésis, elle correspond donc à la température distinguant le régime d'hystérésis (à basse température) du régime d'intermittence (à haute température).

On cherche comme précédemment à comprendre qualitativement la variation de  $T_c$  avec  $\tau_{\text{obs}}$ . Comme nous l'avons déjà discuté, pour un temps d'observation infini le système se trouve nécessairement dans le régime d'intermittence, de telle sorte qu'aucun cycle d'hystérésis ne peut être défini à température non nulle et on peut considérer que  $T_c(\tau_{\text{obs}} \rightarrow \infty) \rightarrow 0$ . Pour comprendre l'évolution de  $T_c(\tau_{\text{obs}})$  pour des temps d'observation finis, on s'intéresse à l'évolution de  $\epsilon_{\text{down}}(T, \tau_{\text{obs}})$  et  $\epsilon_{\text{up}}(T, \tau_{\text{obs}})$  à partir du jeu d'équation suivant :

$$k_B T \ln \left( \frac{\tau_{\text{obs}}}{\tau_0} \right) = \Delta U_{L-B}(\epsilon_{\text{up}}), \quad (4.2)$$

$$k_B T \ln \left( \frac{\tau_{\text{obs}}}{\tau_0} \right) = \Delta U_{B-L}(\epsilon_{\text{down}}), \quad (4.3)$$

où pour simplifier le temps caractéristique  $\tau_0$  introduit par Kramers [107] est considéré indépendant de l'évolution du confinement  $\epsilon$ .

Ces équations sont uniquement formelles car nous ne connaissons pas la barrière d'énergie à franchir. Cependant comme précédemment, nous pouvons obtenir une interprétation qualitative en considérant l'énergie du système décrite par l'équation (4.1). La figure 4.7 montre les évolutions de  $\epsilon_{\text{up}}(T, \tau_{\text{obs}})$  et  $\epsilon_{\text{down}}(T, \tau_{\text{obs}})$  calculées pour trois rapports différents de  $\tau_{\text{obs}}/\tau_0$ . Ces courbes sont obtenues en résolvant directement les équations (4.2) et (4.3) où les hauteurs de barrières énergétiques inconnues  $\Delta U_{L-B}$  et  $\Delta U_{B-L}$  ont été estimées à l'aide de l'équation (4.1). Nous retrouvons qualitativement le comportement des fonctions  $\epsilon_{\text{down}}(T, \tau_{\text{obs}})$  et  $\epsilon_{\text{up}}(T, \tau_{\text{obs}})$  mesurées sur les simulations [voir figure 4.6]. Ces résultats sont de plus cohérents avec les simulations présentées par Agez et al. [4] dans leur figure 15.

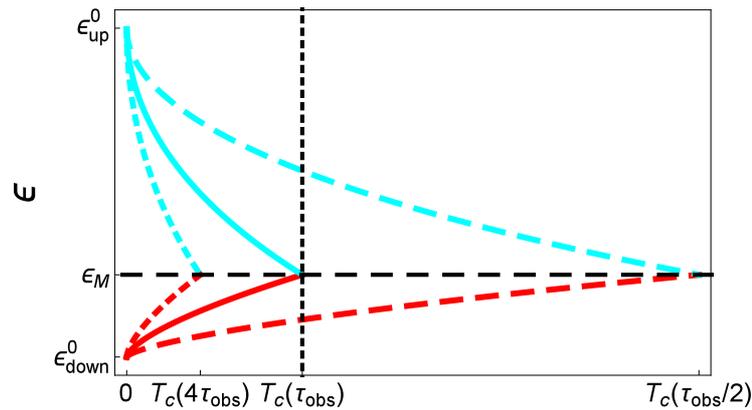


FIGURE 4.7 – Évolution qualitative attendue pour les seuils d'hystérésis  $\epsilon_{\text{up}}(T, \tau_{\text{obs}})$  (cyan) et  $\epsilon_{\text{down}}(T, \tau_{\text{obs}})$  (rouge) en fonction de la température et pour trois temps d'observation différents  $\tau_{\text{obs}}/\tau_0 = 0.5$  (trait tiret),  $\tau_{\text{obs}}/\tau_0 = 1$  (trait plein) et  $\tau_{\text{obs}}/\tau_0 = 4$  (trait pointillé). La température critique  $T_c(\tau_{\text{obs}})$  décroît lorsque  $\tau_{\text{obs}}$  augmente. Le confinement  $\epsilon_M$  correspond au point de Maxwell pour lequel les deux états stables ont la même énergie.

Le croisement des courbes de  $\epsilon_{\text{down}}(T, \tau_{\text{obs}})$  et  $\epsilon_{\text{up}}(T, \tau_{\text{obs}})$  a lieu par définition à la température  $T = T_c(\tau_{\text{obs}})$ . Il se situe nécessairement à un confinement  $\epsilon = \epsilon_M$  indépendant de  $\tau_{\text{obs}}$  et de  $T$  car cette valeur particulière  $\epsilon_M$  est définie comme le confinement pour lequel les barrières énergétiques pour passer d'un état à l'autre sont identiques, telles que :

$$\Delta U_{L-B}(\epsilon_M) = \Delta U_{B-L}(\epsilon_M), \quad (4.4)$$

Cette valeur est appelée *point de Maxwell*. Remarquons que cette équation et par conséquent la valeur de  $\epsilon_M$  est indépendante de la température. La figure 4.6 nous permet d'estimer la valeur de  $\epsilon_M = 0 \pm 0.01$ .

## 4.5 Régime d'intermittence et paysage énergétique ( $T > T_C$ )

On s'intéresse maintenant au régime d'intermittence. Nous montrerons dans cette section que malgré les fluctuations induites par l'agitation thermique, il est possible de tirer partie des nombreuses transitions entre configurations permises dans ce régime pour déterminer les caractéristiques importantes du paysage énergétique du système (point de Maxwell et hauteurs de barrières énergétiques).

### 4.5.1 Temps de résidence et paysage énergétique

Lorsque la température est supérieure à  $T_c(\tau_{\text{obs}})$ , le régime d'intermittence est atteint dès que  $\tau_{B-L}(\epsilon, T) < \tau_{\text{obs}}$  et  $\tau_{L-B}(\epsilon, T) < \tau_{\text{obs}}$ . Un exemple de comportement d'intermittence est présenté figure 4.8 où on observe l'évolution typique de la hauteur maximale dans le système  $h_m(\epsilon, T, t)$  en fonction du temps. Le système reste pendant un certain temps dans une des deux configurations avant de sauter rapidement vers l'autre. On peut alors définir le temps  $\tau_L$  passé par le système dans la configuration en ligne et de manière complémentaire le temps  $\tau_B$  passé dans la configuration en bulle. La distribution de ces temps de résidence dans chaque configuration est présentée figures 4.9 (a) et (b).

À partir de ces distributions, il est possible d'extraire les temps moyens  $\langle \tau_L \rangle$  et  $\langle \tau_B \rangle$ <sup>4</sup>. Pour vérifier la pertinence de ces temps, il est possible de comparer leurs distributions obtenues à partir des simulations à la distribution de Poisson homogène attendue pour un tel processus :  $P(\tau) = e^{-\tau/\langle \tau \rangle} / \langle \tau \rangle$ <sup>5</sup>. Les figures 4.9 (a) et (b) montrent un très bon accord.

La connaissance de ces temps moyens de résidence fournit beaucoup d'informations sur le système. De manière évidente, ils indiquent la configuration la plus probable pour le système, ce qui ne peut pas être déduit directement du diagramme de transition flouté à haute température [voir, figure 4.4 (c) et (d)]. De plus, l'évolution de ces temps de résidence avec le confinement  $\epsilon$  nous offre une autre méthode pour déterminer le point de Maxwell qui ne peut pas être obtenu directement à partir du diagramme d'hystérésis et pour lequel on s'attend à avoir  $\langle \tau_L \rangle = \langle \tau_B \rangle$ . La figure 4.9 (c) montre l'évolution des temps de résidence moyens  $\langle \tau_L \rangle$  et  $\langle \tau_B \rangle$  en fonction de  $\epsilon$

4. On remarque que pour une température et un confinement donnés, ces temps de résidence moyens correspondent par définition à :  $\langle \tau_L \rangle = \tau_{L-B}$  et  $\langle \tau_B \rangle = \tau_{B-L}$

5. Cette distribution décrit la probabilité de mesurer des temps de résidence tirés aléatoirement et de faible probabilité [107].

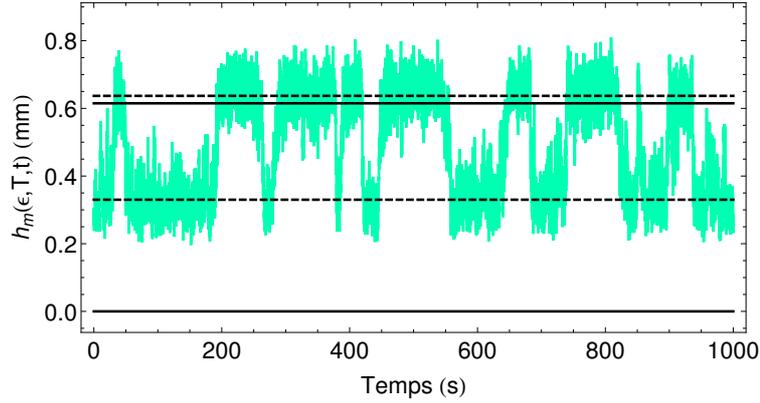


FIGURE 4.8 – Hauteur maximale instantanée  $h_m(\epsilon, T, t)$  (en mm) en fonction du temps  $t$  (en s) pour  $\epsilon = 0.005$  et  $T = 8.10^{10}$  K. Les traits noirs pleins indiquent la hauteur maximale à température nulle  $h_m(\epsilon, 0, t)$  à la fois pour la ligne et pour la bulle. Les traits noirs en tirets indiquent la hauteur maximale moyennée dans le temps  $h_m(\epsilon, T)$  à la fois pour la configuration en ligne et en bulle à  $T = 8.10^{10}$  K.

pour une température de  $T = 8.10^{10}$  K. Les deux temps de résidence sont égaux pour un confinement  $\epsilon_M = 0.003 \pm 0.004$ , ce qui est en très bon accord avec l'estimation précédente déduite de la fermeture du cycle d'hystérésis avec la température [voir figure 4.6].

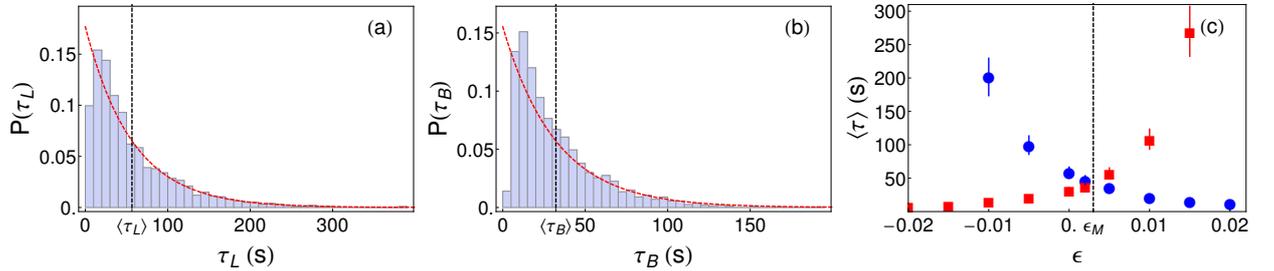


FIGURE 4.9 – (a) Distribution  $P(\tau_L)$  des temps de résidence  $\tau_L$  (en s) dans une configuration en ligne. (b) Distribution  $P(\tau_B)$  des temps de résidence  $\tau_B$  (en s) dans une configuration en bulle. Dans les deux cas, le confinement correspond à  $\epsilon = 0.0$  et une température de  $T = 8.10^{10}$  K. La courbe en tirets rouges correspond à une distribution de Poisson  $P(\tau) = e^{-\tau/\langle\tau\rangle}/\langle\tau\rangle$  déterminée grâce au temps de résidence moyen  $\langle\tau\rangle$  calculé à partir des mesures et indiqué en tirets noirs. (c) Évolution des temps de résidence moyens  $\langle\tau_L\rangle$  (points bleus) et  $\langle\tau_B\rangle$  (carrés rouges) en fonction de  $\epsilon$  pour  $T = 8.10^{10}$  K. Le croisement de ces temps définit le point de Maxwell  $\epsilon_M$ , noté par la ligne verticale.

Par ailleurs, les hauteurs de barrières énergétiques  $\Delta U_{L-B}(\epsilon)$  et  $\Delta U_{B-L}(\epsilon)$  pour un confinement  $\epsilon$  donné peuvent être déterminées à partir de l'évolution des temps de résidence avec la température. La première étape est donc de déterminer l'évolution des temps de résidence moyens avec la température pour  $\epsilon$  fixé comme présenté figure 4.10. Ensuite on note que les données mesurées sur les simulations sont très bien décrites par une loi de Kramers [75], ce qui nous donne une estimation fiable des hauteurs de barrières  $\Delta U_{L-B}(\epsilon)$  et  $\Delta U_{B-L}(\epsilon)$  pour un confinement  $\epsilon$  donné.

Lorsque l'on répète ce processus pour différentes valeurs  $\epsilon$ , il est possible d'obtenir l'évolution des hauteurs de barrières avec le confinement, comme le montre la figure 4.11. Comme attendu,

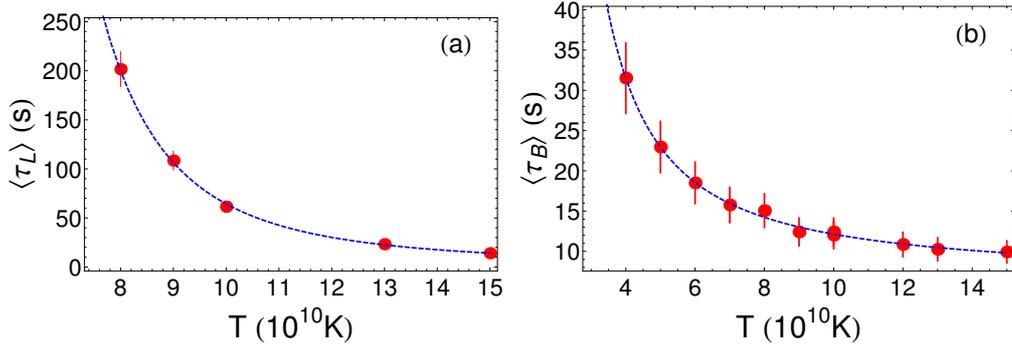


FIGURE 4.10 – (a) Évolution du temps moyen de résidence  $\langle \tau_L \rangle$  (en s) dans la configuration en ligne en fonction de la température (en  $10^{10}$  K), pour  $\epsilon = -0.01$ . (b) Évolution du temps moyen de résidence  $\langle \tau_B \rangle$  (en s) dans la configuration en bulle en fonction de la température (en  $10^{10}$  K), pour  $\epsilon = -0.01$ . Les points rouges correspondent aux données de simulation et la courbe bleue à un ajustement de la loi de Kramers.

l'évolution des hauteurs de barrières est monotone avec le confinement  $\epsilon$ ,  $\Delta U_{L-B}(\epsilon)$  étant décroissante et  $\Delta U_{B-L}(\epsilon)$  croissante. On remarquera que les hauteurs de barrière ainsi obtenues sont indépendantes comme il se doit de la température et du temps d'observation. Le croisement des deux courbes, pour lequel les deux barrières sont égales, nous offre une troisième manière de mesurer le point de Maxwell  $\epsilon_M$  [voir équation (4.4)]. La valeur estimée à partir de la figure 4.11 est  $\epsilon_M = 0.007 \pm 0.004$ . Ces trois estimations de  $\epsilon_M$  sont cohérentes.

#### 4.5.2 Reconstruction du cycle d'hystérésis à $T=0$ K

Il est également possible de retrouver les seuils du cycle d'hystérésis à température nulle à partir de données obtenues sur un système à température non nulle dans le régime d'intermittence.

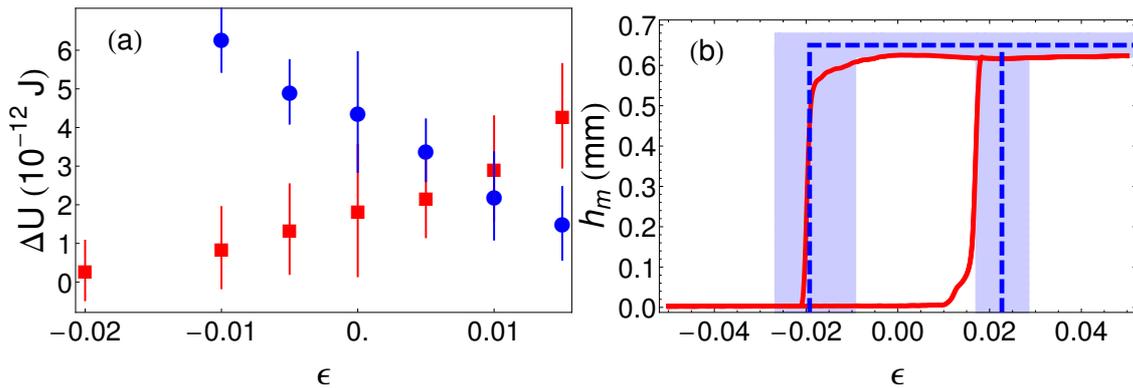


FIGURE 4.11 – (a) Évolution des hauteurs de barrières énergétiques (en  $10^{-12}$  J) en fonction du confinement  $\epsilon$ , en points bleus pour la transition de la ligne vers la bulle,  $\Delta U_{L-B}(\epsilon)$ , et en carrés rouges pour la transition de la bulle vers la ligne. (b) La courbe pleine rouge correspond au cycle d'hystérésis obtenu à très basse température ( $T = 10^7$  K) et les traits en tirets bleus sont déterminés à partir de l'extrapolation des hauteurs de barrières énergétiques (voir détails dans le texte). La zone colorée bleue correspond à une estimation de l'incertitude.

Comme le montre la figure 4.11 (a), l'évolution des hauteurs de barrières énergétiques est presque

linéaire en fonction du confinement  $\epsilon$ . Il est donc possible d'extrapoler les données pour estimer les valeurs de  $\epsilon_{\text{up}}(T = 0)$  et  $\epsilon_{\text{down}}(T = 0)$  pour lesquelles les barrières  $\Delta U_{L-B}(\epsilon)$  et  $\Delta U_{B-L}(\epsilon)$  s'annulent. Ces valeurs correspondent par définition aux seuils du cycle d'hystérésis à  $T = 0$  K. De plus la branche supérieure du cycle d'hystérésis est relativement bien retrouvée en considérant la valeur du maximum des distributions de hauteur maximale. Et la branche du bas correspond au zéro par définition de la configuration en ligne. La figure 4.11 (b) montre le bon accord entre le cycle d'hystérésis obtenu à température nulle et celui reconstruit à partir de la méthode que nous venons de décrire.

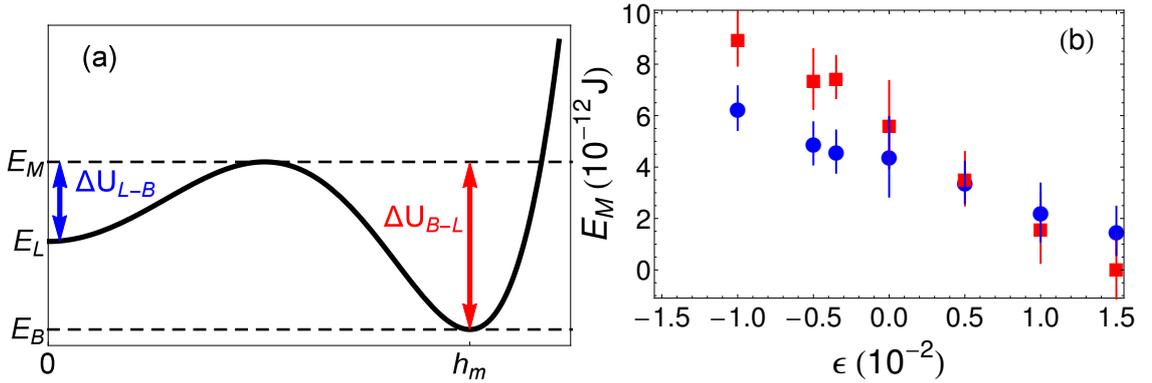


FIGURE 4.12 – (a) Représentation schématique du paysage énergétique pour un confinement  $\epsilon$  donné. Les flèches indiquent les hauteurs de barrières énergétiques  $\Delta U_{L-B}$  et  $\Delta U_{B-L}$ . (b) Valeurs de l'énergie  $E_M$  (en  $10^{-3}$  nJ) en fonction de  $\epsilon$  [voir équation (4.5)]. Les points bleus correspondent à la reconstruction à partir des mesures de la barrière énergétique  $\Delta U_{L-B}$  et de l'énergie de la ligne, et les carrés rouges correspondent à la reconstruction à partir de la barrière  $\Delta U_{B-L}$  et de l'énergie de la configuration en bulle. L'origine des énergies est l'énergie de la configuration en ligne,  $E_L$ .

Pour conclure cette discussion, nous nous intéresserons à la détermination du maximum local d'énergie  $E_M(\epsilon)$  par lequel le système transite pour passer d'une configuration à l'autre. La méthode utilisée est illustrée schématiquement figure 4.12 (a). On note tout d'abord que les énergies des configurations en ligne  $E_L(\epsilon)$  et en bulle  $E_B(\epsilon)$  peuvent être calculées à partir des configurations d'équilibre obtenues par simulation. Par ailleurs  $E_M(\epsilon)$  est la valeur d'énergie minimale que le système doit dépenser pour pouvoir changer de configuration. Si ni la valeur de  $E_M(\epsilon)$ , ni la configuration correspondante ne sont connues, il est toutefois possible d'écrire :

$$E_M(\epsilon) = E_L(\epsilon) + \Delta U_{L-B}(\epsilon) = E_B(\epsilon) + \Delta U_{B-L}(\epsilon). \quad (4.5)$$

Ces deux sommes sont présentées figure 4.12 (b) et elles sont en très bon accord, notamment si on considère les très faibles valeurs des hauteurs de barrières par rapport aux énergies des configurations, de l'ordre de 15 nJ. Ce bon accord confirme la validité de notre analyse des temps de résidence comme des temps de Kramers. On peut donc souligner l'apport majeur de l'analyse des temps de résidence qui permet d'obtenir un grand nombre d'informations non triviales concernant le paysage énergétique d'un problème complexe<sup>6</sup>.

6. La procédure que l'on vient de décrire pour déterminer les hauteurs de barrière du paysage énergétique est

## 4.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous nous sommes concentrés sur l'influence de la température sur la bifurcation fourche sous-critique observée lorsque le confinement transverse de la chaîne de particule varie. Nous avons montré que les structures localisées en forme de bulle restent stables sur une large gamme de température.

En l'absence de température nous avons observé au chapitre précédent que la transition entre une configuration en ligne et une configuration en bulle présentait un comportement hystérétique. Nous avons étudié dans ce chapitre l'influence de la température sur ce cycle d'hystérésis. Sa description est plus difficile à température non nulle car des sauts entre les deux configurations d'équilibre peuvent être thermiquement induits. Nous avons montré qu'il était alors nécessaire de comparer les temps caractéristiques associés à ces sauts,  $\tau_{L-B}(\epsilon, T)$  et  $\tau_{B-L}(\epsilon, T)$  définis comme des temps de Kramers, avec la durée d'observation du système,  $\tau_{\text{obs}}$ . La dépendance des temps de saut en température permet de définir deux régimes distincts séparés par la température critique  $T_c(\tau_{\text{obs}})$  telle que  $\tau_{L-B}(\epsilon, T_c) \sim \tau_{B-L}(\epsilon, T_c) \sim \tau_{\text{obs}}$ . Pour  $T < T_c(\tau_{\text{obs}})$  la durée de l'observation est suffisamment courte pour que le système garde en mémoire la configuration dans laquelle il est, de telle sorte qu'il ne change pas de configuration pendant une observation à  $\epsilon$  constant. Dans ce régime hystérétique, un cycle d'hystérésis est observé avec cependant une extension diminuant à mesure que la température s'approche de  $T_c(\tau_{\text{obs}})$ . Pour  $T > T_c(\tau_{\text{obs}})$  la mémoire de la configuration dans laquelle le système se trouve est perdue à cause des sauts entre configurations en ligne et en bulle ayant lieu pendant le temps d'observation  $\tau_{\text{obs}}$ . Dans ce régime d'intermittence on ne peut plus observer de cycle d'hystérésis bien défini. Cependant, ce régime permet l'étude des temps moyens de résidence dans chacune des configurations, ce qui nous offre l'opportunité de déterminer précisément les hauteurs de barrières dans le paysage énergétique du système, et de reconstruire, à partir de ces hauteurs de barrières mesurées à haute température, le diagramme d'hystérésis du système à très faible température.

---

bien adaptée pour des systèmes soumis à une température élevée, présentant alors une évolution monotone des temps de résidence. En revanche à plus faible température des comportements plus complexes non monotones des temps de résidence en fonction de la température peuvent être attendus, notamment au travers du phénomène de « noise-enhanced stability » [6, 102, 51].

# Chapitre 5

## Configurations stationnaires inhomogènes

### Sommaire

---

<b>5.1 Introduction</b>	<b>87</b>
<b>5.2 Configurations stationnaires en système infini</b>	<b>88</b>
5.2.1 Solutions « Parois »	89
5.2.2 Solutions « Bulles »	90
5.2.3 Solutions « Zigzag modulés »	92
<b>5.3 Solution pour les systèmes ayant un nombre fini de particules</b>	<b>94</b>
5.3.1 Bulles dans les systèmes de taille finie	94
5.3.2 Structure en zigzag modulé	97
<b>5.4 Comparaison énergétique des configurations</b>	<b>100</b>
<b>5.5 Conclusion</b>	<b>102</b>

---

### 5.1 Introduction

Comme nous venons de le voir, les systèmes de particules en interaction répulsive confinées dans une géométrie quasi-unidimensionnelle peuvent présenter des configurations d'équilibre non triviales lorsque les interactions entre particules sont de courte portée et que les conditions aux bords sont périodiques.

Nous allons voir dans ce chapitre qu'il est possible de les déterminer en trouvant des solutions stationnaires aux équations de la forme normale obtenue dans le modèle non linéaire décrit dans le chapitre 3 et qu'elles sont bien comparables aux configurations observées en simulation.

Dans la section 5.2 nous présenterons ces solutions stationnaires expliquant les formes en bulle et en zigzag modulé d'un système infini. Puis dans la section 5.3 nous prendrons en compte les effets de taille finie et nous comparerons quantitativement les configurations en zigzag inhomogènes observées en simulation à celles calculées par la forme normale, à la fois pour les configurations en bulle et pour les configurations en zigzag modulé. Enfin nous nous intéresserons à l'énergie associée

aux configurations prises par le système, nous montrerons que la configuration en bulle peut être moins énergétique que la configuration en zigzag (section 5.4).

Ces résultats ont été publiés dans un article, *Subcriticality of the zigzag transition : A nonlinear bifurcation analysis*, *Phys. Rev. E* [37].

## 5.2 Configurations stationnaires en système infini

À partir d'un développement non linéaire couplant les champs de déplacement longitudinaux et transverses on a pu déterminer la forme normale de la bifurcation [voir équation (3.25)]. Nous nous intéresserons ici uniquement aux solutions stationnaires inhomogènes, c'est à dire aux solutions dont les champs de déplacement varient en espace<sup>1</sup>.

Ces solutions stationnaires de la forme normale satisfont l'équation (3.25) avec  $h_t = 0$  et donc sont solutions de :

$$h_{xx} = -\frac{dW}{dh} = -\frac{d}{dh} \left[ \frac{1}{2}\epsilon\beta_{ZZ}h^2 - \frac{1}{4}a_3(2-\alpha)h^4 - \frac{1}{6}a_5h^6 \right]. \quad (5.1)$$

Pour en chercher les solutions, on peut observer que cette équation est similaire à l'équation de mouvement conservative d'une particule fictive de masse l'unité dans un potentiel  $W(h)$ , avec la variable  $x$  jouant le rôle du temps [70].

Les extrema de ce potentiel  $W(h)$  et leurs conditions de stabilité s'écrivent directement :

$$h = 0, \quad (5.2)$$

$$h_-^2 = \frac{-a_3(2-\alpha)}{2a_5} \left( 1 - \sqrt{1 + \frac{4\epsilon\beta_{ZZ}a_5}{a_3^2(2-\alpha)^2}} \right),$$

$$h_+^2 = \frac{-a_3(2-\alpha)}{2a_5} \left( 1 + \sqrt{1 + \frac{4\epsilon\beta_{ZZ}a_5}{a_3^2(2-\alpha)^2}} \right)$$

Les extrema  $\pm h_-$  existent si  $\epsilon_{\text{coex}} \equiv -a_3^2(2-\alpha)^2/(4\epsilon\beta_{ZZ}a_5) \leq \epsilon \leq 0$ , tandis que les extrema  $\pm h_+$  sont définis pour  $\epsilon_{\text{coex}} \leq \epsilon$ . L'analyse de stabilité linéaire est directe, et on trouve que les solutions  $\pm h_-$  sont instables alors que les solutions  $\pm h_+$  sont stables.

Pour  $\epsilon_{\text{coex}} \leq \epsilon \leq 0$  plusieurs solutions inhomogènes  $h_x \neq 0$  existent. Elles peuvent être décrites à l'aide des figures 5.1, 5.2 et 5.4 présentant l'évolution de  $W(h)$  en fonction de  $h$  pour trois valeurs de confinement  $\epsilon$  caractéristiques différentes. Quelle que soit la valeur de  $\epsilon$ , on a  $W(h=0) = 0$  et lorsque  $\epsilon_{\text{coex}} \leq \epsilon \leq 0$ , cette valeur correspond à un maximum local de  $W(h)$ . Une configuration en ligne ( $h = 0$ ) correspond alors à une solution stable de l'équation (3.25). La solution instable homogène  $h_-$  correspond, dans l'analogie mécanique, à un minimum local de  $W(h)$ , et la solution homogène stable  $h_+$  correspond à un maximum local. Une configuration inhomogène est alors définie, dans l'analogie mécanique, par son « énergie »  $W_0$  qui est une grandeur conservée.

1. Le cas des solutions homogènes a déjà été discuté dans la section 3.4, où nous avons montré que si l'on se restreint à la recherche de solutions homogènes la bifurcation fourche est toujours surcritique.

### 5.2.1 Solutions « Parois »

La configuration inhomogène la plus simple à calculer correspond à la solution « paroi ». Cette solution relie un état homogène non bifurqué pour lequel  $h = 0$  à un état homogène bifurqué  $h = h_+$ , où  $h_+$  est donné par l'équation (5.2). Une condition nécessaire pour obtenir cette coexistence est donc que  $W(h_+) = W(0) = 0$ . Une seule valeur de confinement  $\epsilon_{\text{paroi}}$  rend cette solution possible [voir figure 5.3 (a)], elle est donnée par :

$$\epsilon_{\text{paroi}} = -\frac{3a_3^2(\alpha - 2)^2}{16\beta_{ZZ}a_5}, \quad h_{\text{paroi}} \equiv h_+(\epsilon_{\text{paroi}}) = \sqrt{\frac{3a_3(\alpha - 2)}{4a_5}}. \quad (5.3)$$

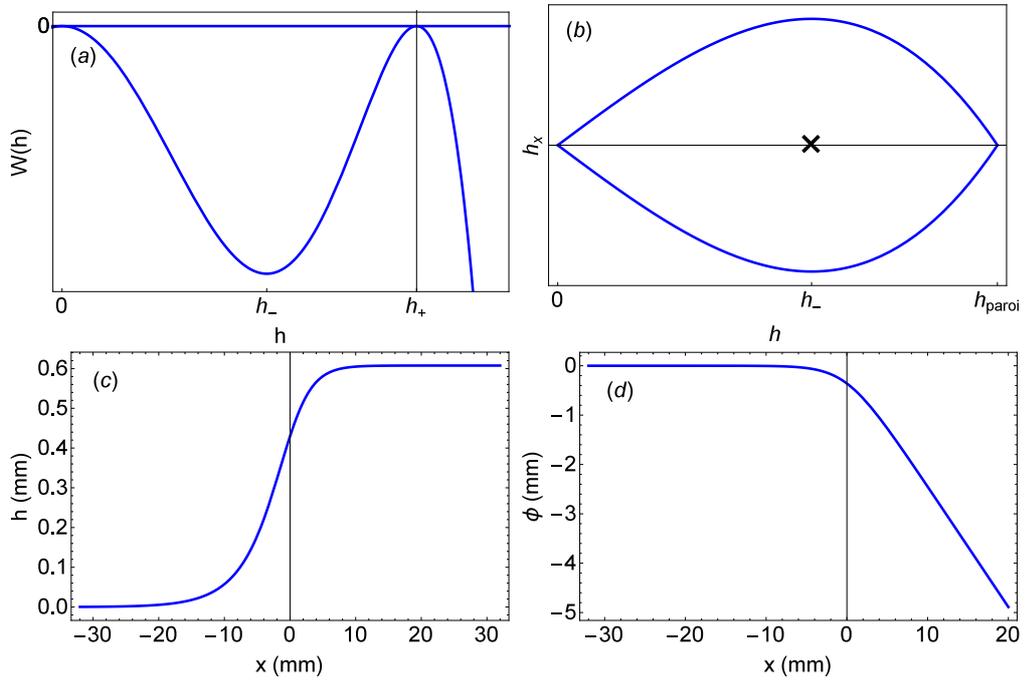


FIGURE 5.1 – (a) : Évolution du potentiel sans dimension  $W(h)$ , équation (5.1), en fonction de la hauteur adimensionnée du zigzag  $h$ . Les positions du minimum local  $h_-$  et du maximum  $h_+$  local sont précisées sur la figure. La courbe est réalisée pour la valeur spécifique  $\epsilon = \epsilon_{\text{paroi}}$ , telle que  $W(h_+) = W(0) = 0$ . (b) : Représentation dans l'espace des phases  $\{h, h_x\}$  des trajectoires correspondant aux solutions parois en bleu. Ces trajectoires relient deux points fixes de l'espace des phases  $\{0, 0\}$  et  $\{h_{\text{paroi}}, 0\}$ . (c) : Évolution de la hauteur  $h$  (en mm) en fonction de la position  $x$  (en mm) pour une configuration paroi reliant une solution  $h = 0$  pour  $x \rightarrow -\infty$  à une solution  $h = h_{\text{paroi}}$  pour  $x \rightarrow +\infty$ . (d) : Évolution de la phase  $\phi$  (en mm) en fonction de la position  $x$  (en mm) pour la configuration paroi présentée en (b).

En transposant l'analogie mécanique à notre système, on trouve que  $h \rightarrow 0$  pour  $x \rightarrow -\infty$  et  $h \rightarrow h_{\text{paroi}}$  pour  $x \rightarrow +\infty$ , ce qui justifie le nom de cette structure comme *paroi*. La « trajectoire » dans l'espace des phase correspondant à cette solution est représentée figure 5.3 (b), elle relie les deux points fixe  $\{0, 0\}$  et  $\{h_{\text{paroi}}, 0\}$  entre eux. À partir des deux racines de  $W(h)$ , on peut ré-écrire  $W(h)$  sous une forme particulièrement simple :

$$W_{\text{paroi}}(h) = -\frac{a_5}{6}h^2(h_{\text{paroi}}^2 - h^2)^2. \quad (5.4)$$

La fonction  $W_{\text{paroi}}(h)$  est représentée figure 5.1. En intégrant directement l'équation (5.1) on obtient la forme de la solution paroi comme :

$$\frac{h(x)}{d} = h_{\text{paroi}} \frac{\exp(\kappa \frac{x}{d})}{\sqrt{1 + \exp(2\kappa \frac{x}{d})}} \quad \text{avec} \quad \kappa \equiv \frac{\sqrt{3} a_3 (\alpha - 2)}{4 \sqrt{a_5}}, \quad (5.5)$$

où on a rétabli les unités physiques du problème, et on a choisi pour la position de la paroi la coordonnée  $x = 0$ .

En connaissant l'expression de  $h(x)$ , on détermine la déviation longitudinale  $\phi(x)$  après intégration à l'aide de l'équation (3.23), et on trouve :

$$\frac{\phi(x)}{d} = -\alpha h_{\text{paroi}}^2 \frac{\log(1 + \exp(2\kappa \frac{x}{d}))}{2\kappa}. \quad (5.6)$$

Une seule configuration paroi ne peut bien entendu pas être observée dans des systèmes cycliques car cette configuration brise la condition de périodicité. Cette solution ne constitue donc pas une solution possible pour les systèmes cycliques considérés.

### 5.2.2 Solutions « Bulles »

Une seconde configuration inhomogène solution de l'équation (5.1) correspond à une solution localisée. Lorsque  $\epsilon_{\text{paroi}} < \epsilon < 0$ , le maximum de  $W(h)$  est strictement positif, comme l'illustre la figure 5.2 (a). On peut alors considérer la « trajectoire » correspondant à une énergie constante  $W(h = 0) = W_0 = 0$ . Dans ce cas, la trajectoire de la particule fictive est homocline, elle relie le point fixe  $\{0, 0\}$  à lui même [voir figure 5.2 (b)]. La particule fictive met un « temps » infini pour partir de sa position d'équilibre instable  $h = 0$  et atteindre la valeur maximale de hauteur possible  $h_{\text{bulle}}$  telle que  $W(h_{\text{bulle}}) = 0$ , puis elle met un « temps » infini pour revenir à sa position initiale  $h = 0$ . Dans le cadre de la transition zigzag, cette structure correspond à une configuration zigzag localisée de hauteur  $h_{\text{bulle}}$  entourée par des particules alignées avec des hauteurs  $h(x \rightarrow \pm\infty) \rightarrow 0$ . Cette configuration correspond donc à ce qu'on a appelé et décrit comme une bulle dans les chapitres précédents.

La hauteur maximale de la bulle  $h_{\text{bulle}}$  est solution de  $W(h_{\text{bulle}}) = 0$ . Les racines non nulles correspondant à cette équation sont :

$$h_{b_{\pm}}^2 = \frac{3a_3(\alpha - 2)}{4a_5} \left( 1 \pm \sqrt{1 + \frac{16\epsilon\beta_{ZZ}a_5}{3a_3^2(\alpha - 2)^2}} \right), \quad (5.7)$$

On a  $h_{b-} \leq h_{b+}$ , l'égalité correspondant à la configuration en paroi. La hauteur maximale de la bulle est alors  $h_{\text{bulle}} = h_{b-}$ , comme l'illustre la figure 5.2 (a).

Dans cette configuration là, le potentiel  $W(h)$  peut se réécrire :

$$W_{\text{bulle}}(h) = \frac{a_5}{6} h^2 (h^2 - h_{b-}^2) (h_{b+}^2 - h^2). \quad (5.8)$$

Il est directement possible d'intégrer l'équation (5.1) pour ce potentiel, on trouve alors :

$$\frac{h(x)}{d} = \frac{h_{b-}}{\sqrt{(1 - \chi^2) \cosh^2(\sqrt{-\epsilon\beta_{ZZ}} \frac{x}{d}) + \chi^2}} \quad \text{avec} \quad 0 \leq \chi \equiv \frac{h_{b-}}{h_{b+}} \leq 1, \quad (5.9)$$

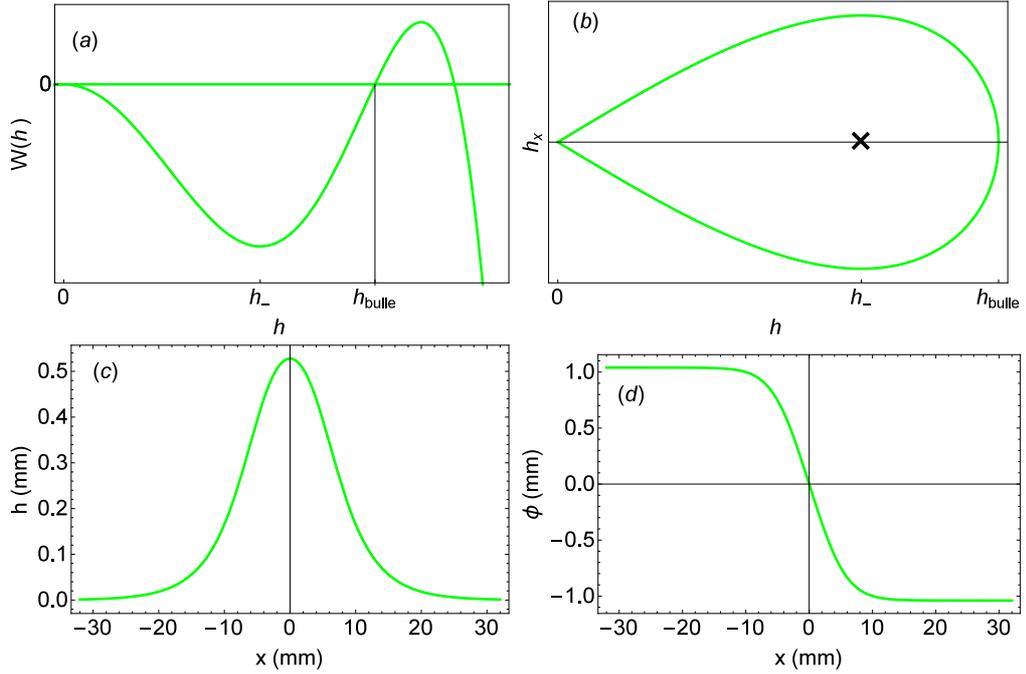


FIGURE 5.2 – (a) : Évolution du potentiel sans dimension  $W(h)$  pour  $\epsilon_{\text{wall}} < \epsilon < 0$  [voir équation (5.1)], en fonction de la hauteur adimensionnée du zigzag  $h$ . La ligne  $W(h) = 0$  définit une bulle de hauteur maximale  $h_{\text{bulle}}$ . (b) : Représentation dans l'espace des phases  $\{h, h_x\}$  de la trajectoire correspondant à la solution bulle en vert. Cette trajectoire est homocline, elle relie le point fixe  $\{0, 0\}$  à lui même. (c) : Évolution de la hauteur  $h$  (en mm) en fonction de la position  $x$  (en mm) pour une solution localisée bulle avec pour hauteur maximale  $h = h_{\text{bulle}}$  pour  $x = 0$ . (d) : Évolution de la phase  $\phi$  (en mm) en fonction de la position  $x$  (en mm) pour la solution bulle présentée en (b).

En reportant cette expression dans l'équation (3.23), on trouve en intégrant :

$$\frac{\phi(x)}{d} = -\alpha \frac{h_{b+} h_{b-}}{\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}} \operatorname{arctanh} \left[ \chi \tanh \left( \sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon} x \right) \right]. \quad (5.10)$$

Il est important pour la suite de s'intéresser au comportement limite des champs de déplacement correspondant à cette solution en bulle. On obtient directement à partir de l'équation (5.9) que pour  $x \rightarrow \pm\infty$  on a  $h(x) \sim \tilde{H} \exp(\mp \sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon} x)$  avec :

$$\tilde{H} \equiv \frac{2h_-}{\sqrt{1 - \chi^2}}. \quad (5.11)$$

De manière plus générale ce comportement est caractéristique des ondes solitaires [46] et sera un point essentiel dans le calcul de l'interaction entre bulles présenté section 7.2.2.

Lorsque  $\epsilon \rightarrow \epsilon_{\text{paroi}}$  il est facile de voir que  $\sqrt{-\epsilon\beta_{ZZ}} \rightarrow \kappa$ , ce qui signifie que la variation spatiale de la hauteur de la bulle devient égale à celle de la configuration paroi. Dans cette limite, la hauteur maximale de la bulle devient indépendante de  $\epsilon$ , mais la bulle devient de plus en plus plate et élargie<sup>2</sup>. Un exemple de telle configuration est présenté dans le deuxième graphique figure 5.7.

2. Plus spécifiquement, si l'on prend  $\epsilon = \epsilon_{\text{paroi}}(1 - \delta^2)$  avec  $\Delta \ll 1$ , on trouve que  $h(x) \approx dh_{b-}$ , au premier ordre en  $\Delta$ , si  $x \in [-d \ln \Delta / \kappa, d \ln \Delta / \kappa]$

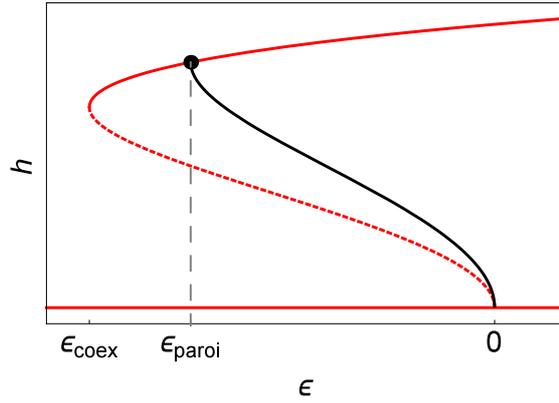


FIGURE 5.3 – Hauteur  $h$  d'une configuration zigzag homogène en fonction de l'écart au seuil  $\epsilon$ . Les lignes pleines rouges correspondent aux extrema stables  $h = 0$  et  $h = h_+$  de  $W(h)$ . Les lignes pointillés rouges sont les extrema instables  $h = h_-$  de  $W(h)$  [voir équation (5.2)]. La ligne noire correspond à la hauteur maximale des solutions bulles  $h = h_{\text{bulle}}$  [voir équation (5.7)]. L'intersection des lignes  $h_{\text{bulle}}$  et  $h_+$  correspond à une solution paroi indiquée par le point noir.

La figure 5.3 récapitule les domaines d'existence des deux solutions que nous venons de décrire. Celui de la solution bulle est représenté par l'évolution de la hauteur maximale de la bulle en fonction de  $\epsilon$  en noir, cette solution existe pour des confinements tels que  $\epsilon_{\text{paroi}} < \epsilon < 0$ . Dans la limite où  $\epsilon = \epsilon_{\text{paroi}}$  la solution en bulle tend vers la solution paroi qui est représentée ici par un point noir.

### 5.2.3 Solutions « Zigzag modulés »

La dernière solution inhomogène à laquelle nous allons nous intéresser correspond à une modulation non linéaire de la configuration zigzag. Comme on l'a dit le minimum de  $W(h)$  correspond à l'extremum instable  $\pm h_-$  [voir équation (5.2)]. Si l'on considère maintenant une constante  $W_0$  négative telle que  $0 > W_0 > W(\pm h_-)$ , l'équation  $W(h) = W_0$  admet trois racines réelles et positives  $h_1 < h_2 < h_3$ , définies figure 5.4. Dans le cadre de l'analogie mécanique, cela correspond à une oscillation non linéaire périodique autour de  $\pm h_-$  [voir courbe rouge figure 5.4 (b)], et cela décrit une *modulation non linéaire* de la configuration zigzag. La valeur de hauteur minimale est donnée par  $h_1$  et la valeur maximale par  $h_2$ .

Il est important de noter que dans cette analyse il existe une inconnue de plus qui correspond à  $W_0$ . Les racines  $h_i$  correspondent alors à des expressions compliquées de  $\epsilon$  et  $W_0$ , mais deux d'entre elles peuvent être facilement exprimées en fonction de la troisième, avec  $h_1 = h_{m-}$  et  $h_3 = h_{m+}$ , où :

$$h_{m\pm} = \frac{1}{2} \left[ \frac{3a_3(\alpha - 2)}{2a_5} - h_2^2 \pm \sqrt{\left( h_2^2 - \frac{3a_3(\alpha - 2)}{2a_5} \right)^2 - 4 \left( h_2^4 - \frac{3a_3(\alpha - 2)}{2a_5} h_2^2 - \frac{3\epsilon\beta_{ZZ}}{a_5} \right)} \right]. \quad (5.12)$$

Cette écriture va s'avérer très pratique pour notre analyse, car elle permet de remplacer l'inconnue  $W_0$  par  $h_2$  qui correspond à la hauteur maximale de la modulation, grandeur qui peut être facilement mesurée directement sur les configurations.

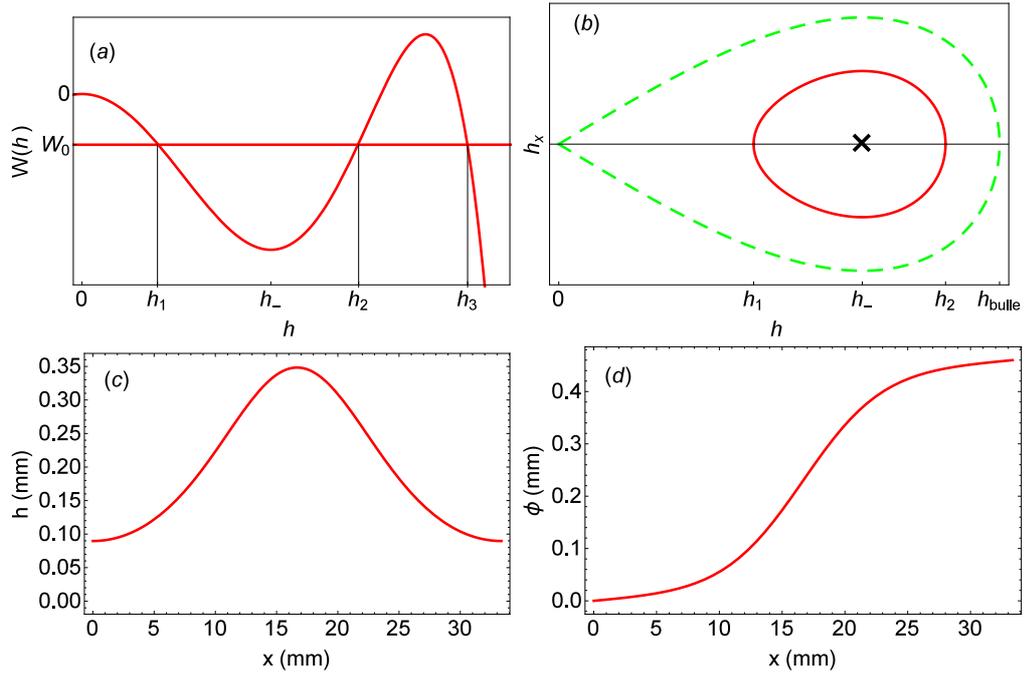


FIGURE 5.4 – (a) : Évolution du potentiel sans dimension  $W(h)$  pour  $\epsilon_{\text{wall}} < \epsilon \leq 0$ , équation (5.1), en fonction de la hauteur adimensionnée du zigzag  $h$ . La ligne droite d'ordonnée  $W_0$  définit une modulation non linéaire entre la hauteur minimum  $h_1$  et la hauteur maximum  $h_2$ . (b) : Représentation dans l'espace des phases  $\{h, h_x\}$  de la trajectoire correspondant à une solution zigzag modulé, en rouge. La trajectoire du zigzag modulé est un cycle périodique. Pour repère la trajectoire de la solution bulle a été représentée en trait vert hachuré. (c) : Évolution de la hauteur  $h$  (en mm) en fonction de la position  $x$  (en mm) pour une solution modulée, la modulation non linéaire reliant des solutions de hauteur minimale  $h = h_1$  et de hauteur maximale  $h = h_2$ . (d) : Évolution de la phase  $\phi$  (en mm) en fonction de la position  $x$  (en mm) pour la solution bulle présentée en (b).

À partir des trois racines,  $h_1 < h_2 < h_3$ , de l'équation  $W(h) = W_0$  on peut écrire :

$$W_0 - W(h) = \frac{a_5}{6} (h^2 - h_1^2)(h^2 - h_2^2)(h^2 - h_3^2). \quad (5.13)$$

Avec l'aide des références [61, 109] on peut montrer que les configurations modulées peuvent s'exprimer en terme de fonctions elliptiques de Jacobi, comme :

$$\frac{h(x)}{d} = \frac{h_1 h_2}{\sqrt{h_2^2 \operatorname{cn}^2\left(\frac{x - \Lambda K(Q)}{d\Lambda}, Q\right) + h_1^2 \operatorname{sn}^2\left(\frac{x - \Lambda K(Q)}{d\Lambda}, Q\right)}}, \quad (5.14)$$

où  $K(\cdot)$  est l'intégrale elliptique complète de première espèce, et où :

$$\Lambda \equiv \left[ (h_3^2 - h_1^2) h_2^2 \frac{a_5}{3} \right]^{-1/2}, \quad Q \equiv \frac{h_3 \sqrt{h_2^2 - h_1^2}}{h_2 \sqrt{h_3^2 - h_1^2}}. \quad (5.15)$$

Le champ de déplacement longitudinal est lui décrit par :

$$\frac{\phi(x)}{d} = -\alpha h_1^2 \Pi\left(1 - \frac{h_1^2}{h_2^2}, \operatorname{am}\left(\frac{x - \Lambda K(Q)}{d\Lambda}, Q\right), Q\right) \frac{\Lambda \operatorname{dn}\left(\frac{x - \Lambda K(Q)}{d\Lambda}, Q\right)}{\sqrt{1 - Q \operatorname{sn}^2\left(\frac{x - \Lambda K(Q)}{d\Lambda}, Q\right)}}, \quad (5.16)$$

La solution présentée équation (5.14) est telle que la hauteur maximale correspond à la position  $x = 0$ , et la longueur  $2\Lambda K(Q)$  est la longueur d'onde de la modulation spatiale. La configuration modulée du zigzag est donc complètement déterminée à partir des deux paramètres  $\epsilon$  et  $h_2$  ce qui est particulièrement bien adapté pour la comparaison avec les structures observées, comme nous allons le voir sous-section 5.3.2.

### 5.3 Solution pour les systèmes ayant un nombre fini de particules

Nous venons d'établir l'existence de différentes solutions stationnaires localisées ou modulées aux équations de la dynamique dans la limite des systèmes infinis retrouvant ainsi les topologies des configurations observées [voir figure 3.1]. Cependant, les réalisations expérimentales et numériques de tels systèmes sont nécessairement faites pour des systèmes finis. De plus, comme on l'a vu, il est nécessaire que le système présente un mode de phase lié à une invariance par translation ou par rotation pour que ces solutions localisées soient possible. C'est pourquoi nous allons nous concentrer ici sur des systèmes cycliques avec un nombre fini de particules, tels que la période de la cellule vaut  $L$ .

Par ailleurs, dans les simulations une difficulté majeure reste en suspens car les configurations inhomogènes sont observées lorsque la raideur  $\beta_{\text{simu}}$  du potentiel de confinement est telle que  $\beta_{\text{simu}} < \beta_{ZZ}(d)$ . Ceci correspond à une valeur *positive* du paramètre  $\epsilon_{\text{simu}}$  défini comme  $\beta_{\text{simu}} = \beta_{ZZ}(d)(1 - \epsilon_{\text{simu}})$ , ce qui semble en désaccord avec le modèle non linéaire que l'on vient de développer. En effet les configurations inhomogènes prédites par la forme normale le sont pour des valeurs *negatives* de  $\epsilon$ . Dans cette section nous allons expliquer comment résoudre cet apparent désaccord en prenant en compte les effets de taille finie.

#### 5.3.1 Bulles dans les systèmes de taille finie

##### § Détermination de $d_{\text{eff}}$ et $\epsilon_{\text{eff}}$

On s'intéresse tout d'abord aux configurations en bulle. Comme nous venons de le voir l'existence de cette phase localisée en zigzag engendre une modulation  $\phi(x)$  de la distance longitudinale entre particules. Cette modulation correspond à un rapprochement longitudinal des particules participants à la forme de bulle libérant plus de place pour les particules restées dans la configuration en ligne. Cette nouvelle distance effective entre particules en ligne est notée  $d_{\text{eff}}$  et on a donc nécessairement  $d_{\text{eff}} > d$ .

La méthode pour déterminer la forme des bulles dans les systèmes finis est de calculer la valeur de la distance entre particules dans la phase en ligne  $d_{\text{eff}}$  uniquement à partir de la condition de cyclicité de la cellule de longueur  $L$ . Cette condition revient à imposer que la longueur  $\tilde{L}$  occupée par un système fini de  $N$  particules, décrivant une modulation  $\phi(x)$  liée à l'existence d'une structure localisée, soit égale à la longueur  $L$  de la cellule cyclique.

L'expression analytique de cette longueur  $\tilde{L}$  s'écrit alors sous la forme<sup>3</sup> :

$$\tilde{L} \equiv d_{\text{eff}} \left( N - \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \phi}{\partial x} dx \right) \approx d_{\text{eff}} \left[ N - \frac{2\alpha h_{b-} h_{b+}}{\sqrt{-\epsilon \beta_{ZZ}}} \operatorname{arctanh} \left( \frac{h_{b-}}{h_{b+}} \right) \right] = Nd = L \quad (5.17)$$

où tous les coefficients  $\alpha$ ,  $h_{b+}$ ,  $h_{b-}$  et  $\sqrt{-\epsilon \beta_{ZZ}}$  de cette expression sont des fonctions connues dépendant de la distance  $d_{\text{eff}}$ . Cette équation ne possède alors qu'une seule inconnue  $d_{\text{eff}}$  pour une valeur donnée de confinement transverse  $\beta_{\text{simu}}$ .

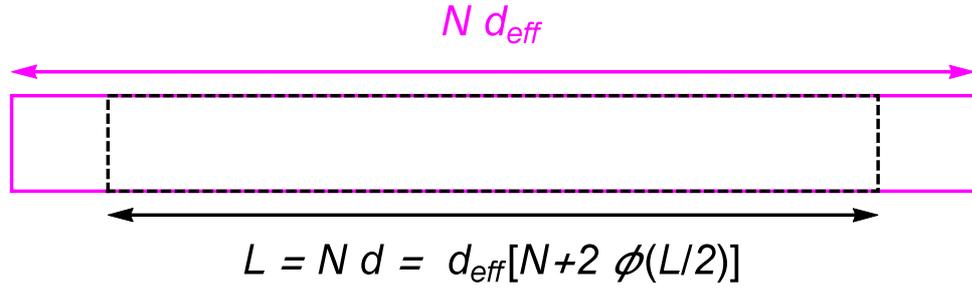


FIGURE 5.5 – Représentation schématique de la taille de la cellule périodique. En l'absence de configuration en bulle, si le système est homogène l'extension de la cellule est  $Nd_{\text{eff}}$ , alors qu'en présence d'une bulle la taille longitudinale du système diminue de  $2d_{\text{eff}}\phi(L/2)$ .

À partir de cette distance entre particules, on peut définir un paramètre de bifurcation  $\epsilon_{\text{eff}}$  tel que :

$$\epsilon_{\text{eff}} = 1 - \frac{\beta_{\text{simu}}}{\beta_{ZZ}(d_{\text{eff}})}. \quad (5.18)$$

On interprétera alors l'observation d'une bulle dans le système périodique de taille finie comme l'existence d'une bulle dans un système infini, avec une distance moyenne entre particules  $d_{\text{eff}}$  et un écart au seuil de transition zigzag  $\epsilon_{\text{eff}}$ . Cette hypothèse sera validée *a posteriori* d'une part par le bon accord observé entre les structures décrites à l'aide de cette méthode et celles observées en simulation, et d'autre part par une comparaison directe des distances entre particules dans la configuration en ligne.

On peut ainsi déterminer de manière unique les valeurs de  $d_{\text{eff}}$  puis de  $\epsilon_{\text{eff}}$  en fonction du confinement transverse appliqué en simulation  $\beta_{\text{simu}}$ . Les solutions numériques de la distance effective  $d_{\text{eff}}$  de l'équation (5.17) et les valeurs correspondantes pour l'écart au seuil  $\epsilon_{\text{eff}}$  sont représentés figure 5.6 pour différentes valeurs de confinement appliquées en simulation  $\epsilon_{\text{simu}}$ <sup>4</sup>. On note que les valeurs calculées pour  $d_{\text{eff}}$  sont toujours plus grandes que  $d$ , et que les  $\epsilon_{\text{eff}}$  sont bien négatifs, ce qui est cohérent avec le régime d'existence des bulles. De plus, une fois que les paramètres  $d_{\text{eff}}$  et

3. Pour le calcul de la longueur du système,  $L = d_{\text{eff}} [N + 2\phi(L/2)]$  a été simplifié en utilisant l'approximation  $L = d_{\text{eff}} [N + 2\phi(\infty)]$ . Cette approximation est justifiée tant que l'extension de la bulle est beaucoup plus petite que la taille de la cellule.

4. Pour obtenir l'équation (5.17), il est nécessaire d'intégrer les champs de déplacement longitudinal  $\phi$  à l'infini. C'est pourquoi ce calcul n'a de sens pour des systèmes finis périodiques que lorsque l'extension de la bulle, pour laquelle  $h(x)$  est significativement différente de zéro, est faible en comparaison à la taille de la cellule  $L$ . La valeur maximale de  $\epsilon_{\text{simu}}$  dans la figure 5.6 a été choisie de manière à ce que l'extension de la bulle soit plus petite que  $L/2$ .

$\epsilon_{\text{eff}}$  sont définis, il n'existe qu'une forme de bulle déterminée par l'équation (5.9). Cette méthode garantit que pour chaque couple  $\{N, \beta_{\text{simu}}\}$  (ou de manière équivalente  $\{N, \epsilon_{\text{simu}}\}$ ) il existe une unique forme de bulle décrivant la configuration d'équilibre du système<sup>5</sup>.

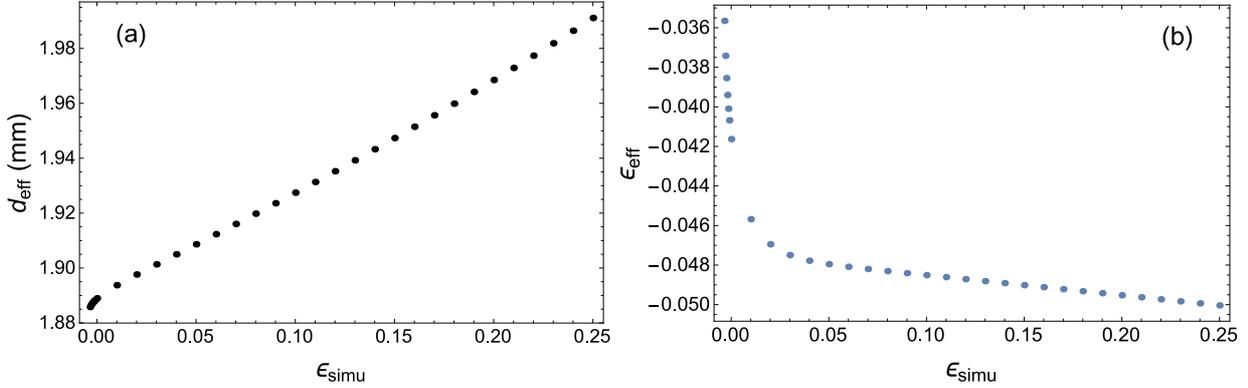


FIGURE 5.6 – (a) Évolution de la solution numérique de la distance effective  $d_{\text{eff}}$  (mm) définie équation (5.17) en fonction de  $\epsilon_{\text{simu}}$  pour  $N = 128$  particules et  $L = 240$  mm. (b) Évolution de l'écart au seuil effectif  $\epsilon_{\text{eff}}$  en fonction de  $\epsilon_{\text{simu}}$  pour  $N = 128$  et  $L = 240$  mm.

### § Comparaison avec les simulations

Cette analyse a été menée pour plusieurs simulations, et les résultats typiques obtenus sont présentés figure 5.7. Dans chaque configuration la comparaison entre les simulations et les formes de bulles attendues à partir de l'analyse théorique montre un excellent accord<sup>6</sup>. Dans le dernier graphique figure 5.7, la présence de deux bulles implique que la valeur de  $d_{\text{eff}}$  a été obtenue en considérant la superposition des modulations de la longueur du système dues à chaque bulle. La même valeur de  $d_{\text{eff}}$  est utilisée pour décrire les deux bulles, avec bien entendu les mêmes formes. Ces configurations d'équilibre métastables où plusieurs bulles coexistent dans un même système sont parfois observées, et à chaque fois les bulles ont la même forme ce qui est cohérent avec notre analyse. Nous reviendrons en détails sur ces configurations métastables avec plusieurs bulles dans le chapitre 7, notamment pour étudier leur interaction et leur dynamique.

Par construction, la longueur  $\tilde{L}$  a été prise comme identique à la période  $L$  de la cellule considérée, afin de déterminer la distance effective entre particules dans la phase en ligne. Pour valider une nouvelle fois notre procédure on peut comparer cette distance effective entre particules  $d_{\text{eff}}$  déterminé analytiquement [voir équation (5.17)] à la distance entre particules dans la phase en ligne  $d_{\text{ligne}}$  mesurée en simulation, afin de comparer quantitativement l'accord entre la prédiction théorique pour la forme de la bulle et la forme observée en simulation. Le tableau 5.1 récapitule les valeurs de ces deux distances  $d_{\text{eff}}$  et  $d_{\text{ligne}}$  pour différentes configurations en bulle. On trouve que, sans aucun paramètre ajustable, l'accord entre les deux longueurs est très bon, la différence relative entre les deux estimations est inférieure à 0.5%, dans la majeure partie des cas que nous

5. On remarque cependant qu'à densité de particules fixe, pour différentes tailles de systèmes  $N$ , il est possible de trouver pour chaque système une valeur de confinement pour laquelle les formes des bulles sont strictement identiques. On reviendra plus spécifiquement sur cette propriété section 6.4.2.

6. Ceci justifie *a posteriori* l'approximation non contrôlée faite sur l'estimation du coefficient  $a_5$ , section 3.4.3.

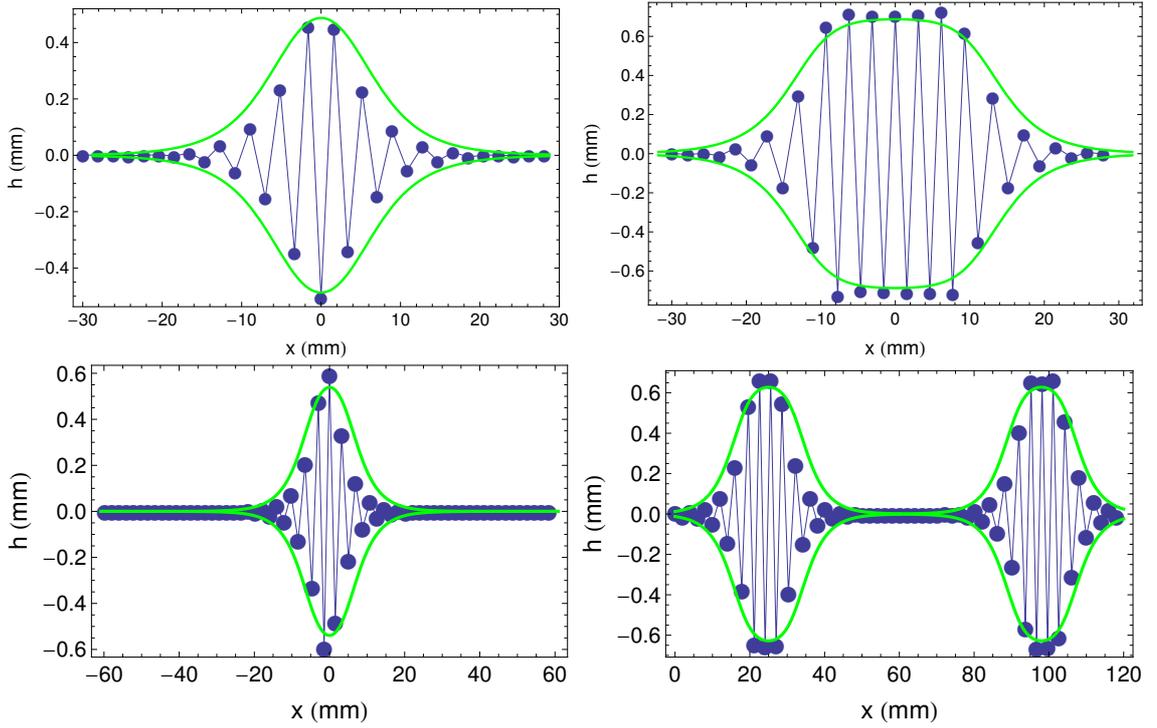


FIGURE 5.7 – Comparaison entre configurations obtenues à partir de simulations (points bleus) et formes théoriques prédites (traits pleins verts) pour des configurations d'équilibre en forme de zigzag localisé. De haut en bas et de gauche à droite, pour  $N = 32$  et  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.07$ ,  $N = 32$  et  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.48$ ,  $N = 64$  et  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.0264$ ,  $N = 64$  et  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.261$ . Par soucis de clarté, les maxima des configurations ont été placés arbitrairement au centre de l'image même si les structures peuvent apparaître n'importe où dans la cellule périodique.

avons considérés<sup>7</sup>. On peut également comparer la taille du système déterminée à partir du simple calcul  $Nd_{\text{eff}}$  à la taille de la cellule. On voit alors que le calcul de la « taille » longitudinale du système  $Nd_{\text{eff}}$  est toujours bien plus grande que la taille de la cellule.

### 5.3.2 Structure en zigzag modulé

On s'intéresse maintenant aux configurations « zigzags modulées », pour lesquelles la hauteur du zigzag varie d'une valeur minimum  $h_1 > 0$  à une valeur maximum  $h_2$ .

Pour des structures modulées, aucune distance effective entre particules dans la phase en ligne  $d_{\text{eff}}$  ne peut être définie puisque aucune particule dans la cellule ne se trouve dans une configuration en ligne. Cependant comme le montre l'expression équation (5.16), la modulation non linéaire du zigzag est de nouveau associée à une modulation de la distance longitudinale entre particules. Il est donc possible d'utiliser une méthode semblable à celle des bulles afin de déterminer les paramètres décrivant la forme de modulation dans les systèmes cycliques avec un nombre fini de particules. On cherche comme précédemment à ce que la longueur du système fini de  $N$  particules soit égale à la longueur  $L$  de la cellule.

7. L'augmentation du désaccord dans le cas d'un système avec  $N = 32$  particules et  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.480$  est lié à la limite de notre modélisation, en effet pour déterminer  $d_{\text{eff}}$  on a fait l'hypothèse que l'extension de la bulle était faible devant la longueur du système ce qui n'est plus le cas pour d'aussi faible confinement [voir figure 5.7].

$N$	$d_{\text{eff}}$	$\epsilon_{\text{simu}}$	$\epsilon_{\text{eff}}$	$d_{\text{ligne}}$	$ d_{\text{eff}} - d_{\text{ligne}} /d_{\text{eff}}$	$(Nd_{\text{eff}} - L)/L$
–	(mm)	–	–	(mm)	(%)	(%)
16	1.967	0.206	-0.037	–	–	4.9
32	1.910	0.070	-0.0230	1.914	0.21	1.9
32	1.929	0.110	-0.042	1.936	0.36	2.9
32	2.120	0.480	-0.052	2.158	1.8	13.1
64	1.897	0.0284	-0.036	1.905	0.42	1.2
64	1.893	0.021	-0.032	1.901	0.42	1.0
64	1.996	0.261	-0.050	2.002	0.30	6.5

TABLE 5.1 – Résumé des écarts effectifs au seuil  $\epsilon_{\text{eff}}$  et de la distance effective  $d_{\text{eff}}$  entre particule comparé à la distance entre particule dans la partie en ligne  $d_{\text{ligne}}$  mesurée en simulation pour plusieurs structures en bulle localisées, la colonne suivante indique l'écart relatif avec la distance  $d_{\text{eff}}$ . La distance  $d_{\text{ligne}}$  ne peut être mesurée pour la configuration avec  $N = 16$  particules car le système ne présente pas de phase en ligne [voir figure 5.9]. La dernière colonne indique l'erreur relative commise en l'absence de déplacement longitudinal des particules. À titre de comparaison,  $d = 1.875$  mm.

Dans le cadre d'une modulation non linéaire du zigzag la longueur du système fini de  $N$  particules s'écrit :

$$\tilde{L} \equiv d_{\text{eff}} \left( N - \alpha \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\partial \phi}{\partial x} dx \right) = d_{\text{eff}} \left[ N - 2\alpha h_1^2 \Pi \left( 1 - \frac{h_1^2}{h_2^2}, Q \right) \right] = Nd = L \quad (5.19)$$

où  $\Pi(.,.)$  correspond à l'intégrale elliptique complète de troisième espèce [2]. Pour trouver cette expression on a utilisé le fait que la période de la modulation spatiale est  $L$  et que la modulation non linéaire est symétrique. Il est important de remarquer que dans cette expression tous les coefficients ne sont plus uniquement des fonctions connues de la distance  $d_{\text{eff}}$ , mais qu'il existe une seconde inconnue  $h_2$  qui correspond à la hauteur maximale de la modulation, comme il a été indiqué dans la sous-section 5.2.3.

Afin de comparer les modulations calculées à celles observées pour une valeur donnée de confinement transverse  $\beta_{\text{simu}}$  il est donc nécessaire de mesurer la hauteur maximum  $h_2$  directement sur les configurations modulées. Ensuite seulement le paramètre inconnu  $d_{\text{eff}}$  peut être déterminé numériquement à partir de la condition autoconsistante donnée par l'équation (5.19), comme on l'a fait pour la configuration en bulle. La distance effective  $d_{\text{eff}}$  correspond alors à une racine réelle de l'équation  $L = 2\Lambda(h_2, d_{\text{eff}})K[Q(h_2, d_{\text{eff}})]$ . Avec l'aide des équations (5.12) et (5.18), cette équation ne possède qu'une seule inconnue  $d_{\text{eff}}$ . Cette équation est formellement compliquée mais elle peut être facilement résolue numériquement. Une fois que les grandeurs  $d_{\text{eff}}$  et  $h_2$  sont connues, la configuration modulée est complètement déterminée. Le tableau 5.2 résume les valeurs de  $d_{\text{eff}}$  et  $\epsilon_{\text{eff}}$  pour différentes structures modulées. Notons qu'afin d'être cohérent le paramètre  $\epsilon_{\text{eff}}$  doit être négatif puisque les configurations zigzag modulées surviennent seulement lorsque la solution homogène instable  $\pm h_-$  existe, ceci est en effet le cas pour toutes les formes du tableau 5.2.

La comparaison entre les structures modulées observées et les modulations non linéaires prédites

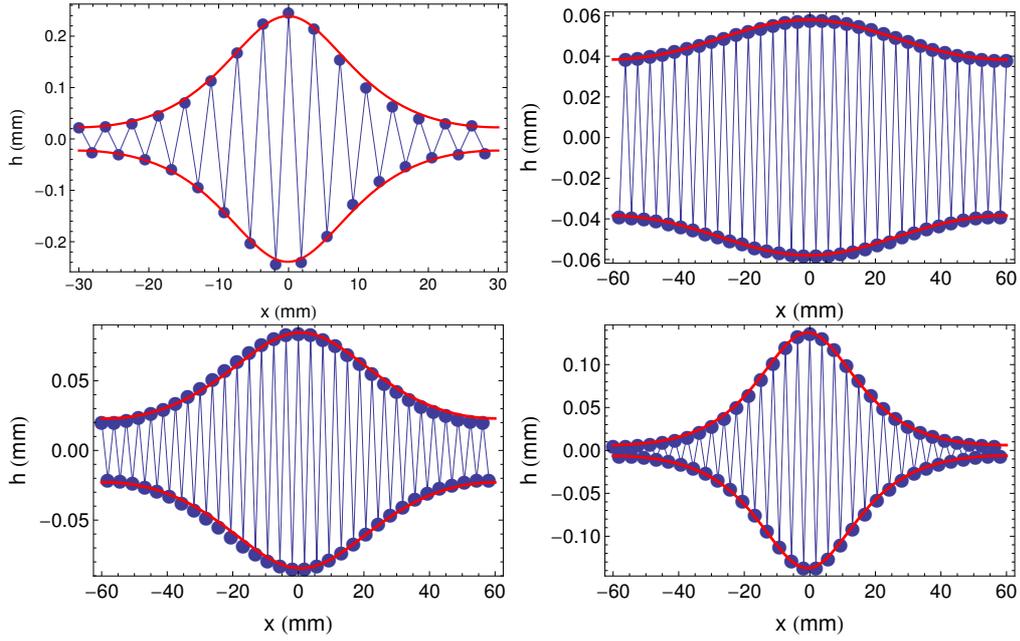


FIGURE 5.8 – Configurations zigzag modulées. De haut en bas et de gauche à droite :  $N = 32$  et  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.05$ , puis  $N = 64$  et  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.0173$ ,  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.0185$  et  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.0207$ . Les points bleus correspondent aux positions des particules dans les simulations, tandis que les lignes pleines rouges représentent la modulation théorique [voir équation (5.14)].

théoriquement par les équations (5.14) et (5.15) sont présentées figures 5.8 et 5.9. Pour les systèmes de grande taille (32 et 64 particules) l'accord est excellent, et on est capable de décrire des structures fortement non sinusoïdales pour toutes les configurations. Des comparaisons pour un système avec seulement 16 particules sont présentées figure 5.9. On remarque que même dans ces cas assez peu propices à la comparaison avec notre modèle continu, construit pour un système infini, l'accord entre les structures observées et celles prédites par le modèle est très bon. Il est intéressant de voir que pour la valeur la plus élevée  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.206$  présentée figure 5.9, il est impossible de décrire la configuration par une modulation non linéaire, en effet il n'existe pas dans ce cas de racine réelle à l'équation  $L = 2\Lambda K(Q)$ . Il est cependant possible de décrire cette configuration comme une bulle, par une méthode légèrement différente de celle mentionnée section 5.3.1. On détermine ici le paramètre  $d_{\text{eff}}$  à partir de la hauteur maximale de la configuration (car le système ne présente pas de partie en ligne) et à l'aide de l'équation (5.7)<sup>8</sup>.

La cohérence de la configuration en zigzag modulé a été vérifiée en comparant la taille du système obtenue grâce à  $\tilde{L}$  à la taille du système estimée simplement à la partir de la distance entre particules comme  $Nd_{\text{eff}}$ . Les résultats sont résumés dans le tableau 5.2. On note que pour ces structures modulées aussi l'erreur sur l'estimation de la longueur du système est faible, et bien plus faible que l'estimation directe  $Nd_{\text{eff}}$ .

8. Cette comparaison brise complètement la limite de validité fixée section 5.3.1, indiquant que l'extension de la bulle devait être beaucoup plus petite que la taille de la cellule. Cependant celle-ci provenait de la comparaison entre la longueur d'un système présentant une bulle et la taille de la cellule pour déterminer  $d_{\text{eff}}$ , or ici la détermination de  $d_{\text{eff}}$  est faite uniquement à partir de la hauteur maximale de la configuration.

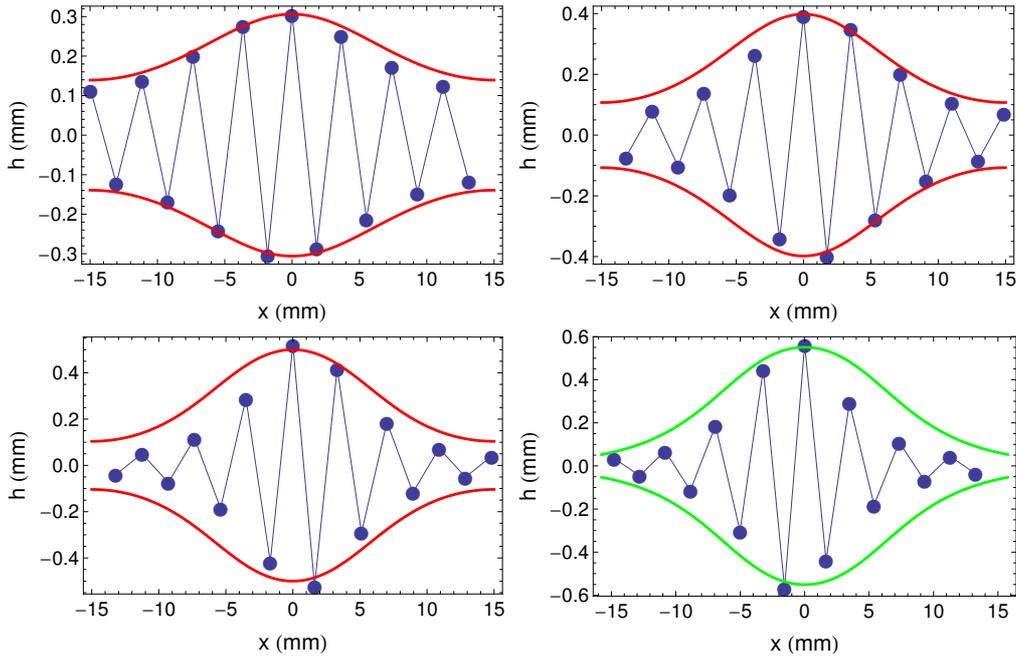


FIGURE 5.9 – Configurations zigzag modulées pour  $N = 16$ . De haut en bas et de gauche à droite :  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.132$ ,  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.150$ ,  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.187$  et  $\epsilon_{\text{simu}} = 0.206$ . Les points bleus correspondent aux positions des particules dans les simulations, tandis ce que les lignes pleines rouges représentent la modulation théorique prédite équation (5.14). La ligne pleine verte correspond à la prédiction théorique pour une bulle, équation (5.9), car cette configuration ne peut pas être décrite par une modulation non linéaire.

## 5.4 Comparaison énergétique des configurations

Dans cette section nous allons profiter de l’opportunité qui nous est donné d’avoir pu calculer ces formes stationnaires pour calculer et comparer l’énergie associée à chacune des configurations prises par le système.

L’énergie de la configuration en ligne est bien entendue la plus simple à calculer. Pour un système de  $2N$  particules alignées dans le fond du potentiel de confinement et séparées par une distance  $d \equiv L/(2N)$ , l’énergie du système s’écrit :

$$E_{\text{ligne}} = 2N [U(d) + U(2d)] \quad (5.20)$$

où  $U(\cdot)$  est l’énergie d’interaction entre particules. Nous prenons ici uniquement en compte les interactions entre particules avec les seconds plus proches voisins, de manière à être cohérent avec le développement non linéaire présenté au chapitre 3<sup>9</sup>. Cette énergie est donc indépendante du confinement appliqué au système et nous la prendrons comme origine d’énergie pour la suite.

On peut ensuite s’intéresser à l’énergie de la configuration en zigzag. La hauteur  $h$  de la configuration en zigzag homogène proche du seuil de transition zigzag s’écrit directement  $h_{ZZ} =$

9. Cette approximation est suffisante pour décrire notre système comme le montre le bon accord avec les simulations. Elle est de plus consistante avec le fait que les structures en bulle et en zigzag localisées que nous présentons ici sont observées pour des interactions à courte portée [voir section 2.3.3]

$N$	$d_{\text{eff}}$	$\epsilon_{\text{simu}}$	$\epsilon_{\text{eff}}$	$h_2$	$ L - \tilde{L} /L$	$(Nd_{\text{eff}} - L)/L$
–	(mm)	–	–	(mm)	(%)	(%)
16	1.932	0.132	-0.0257	0.306	0.35	3.1
16	1.943	0.150	-0.0351	0.398	0.87	3.6
16	1.962	0.187	-0.0463	0.500	2.26	4.6
32	1.897	0.050	-0.0137	0.239	0.12	1.2
64	1.881	0.017	-0.0012	0.058	0.18	0.34
64	1.882	0.018	-0.0019	0.085	0.19	0.38
64	1.884	0.021	-0.0047	0.137	0.18	0.47

TABLE 5.2 – Résumé de l'écart effectif au seuil  $\epsilon_{\text{eff}}$  et de l'erreur relative sur la longueur du système  $|L - \tilde{L}|/L$  correspondant à plusieurs configurations de zigzag modulés. L'estimation théorique  $\tilde{L}$  est donnée par l'équation (5.19). À titre de comparaison,  $d = 1.875$  mm.

$\sqrt{\epsilon\beta_{ZZ}/(2a_3)}$  à partir de l'équation (3.22). En introduisant cette solution dans l'expression de l'énergie potentielle écrite dans l'équation (3.17) pour la densité de Lagrangien et en intégrant l'énergie sur la taille du système on trouve :

$$E_{\text{zigzag}} = -2Nmc_{\perp}^2 \frac{(\epsilon\beta_{ZZ})^2}{8a_3} \quad (5.21)$$

où le facteur  $2N$  prend en compte le nombre de particules et le coefficient  $mc_{\perp}^2$  correspond à l'unité d'énergie correspondant à l'adimensionnement introduit section 3.4.3. Cette énergie dépend du confinement appliqué au système et on trouve naturellement qu'elle est négative car la configuration en ligne est instable dans le domaine d'existence de la configuration en zigzag homogène ( $\epsilon \leq 0$ ).

L'énergie de la configuration en bulle peut être facilement calculée en injectant les expressions des déplacements transverses et longitudinaux présentés équations (5.9) et (5.10) dans la densité d'énergie potentielle écrite équation (3.17) et en intégrant le long de l'axe longitudinal. Il est cependant important de remarquer ici que l'augmentation de la distance effective  $d_{\text{eff}}$  présentée section 5.3 impose de prendre en compte le changement d'énergie de la configuration en ligne de telle sorte que l'énergie de la bulle s'écrit :

$$E_{\text{bulle}} = -mc_{\perp}^2 \sqrt{\frac{3}{a_5}} \left\{ \epsilon\beta_{ZZ} \operatorname{arctanh} \chi + \frac{a_3(\alpha - 2)h_+^2}{8} [(1 + \chi^2) \operatorname{arctanh} \chi - \chi] \right\} + 2N [U(d_{\text{eff}}) + U(2d_{\text{eff}}) - U(d) - U(2d)] \quad (5.22)$$

où l'expression sur la seconde ligne prend en compte le changement d'origine des énergies.

La figure 5.10 présente l'évolution de l'énergie de la configuration en zigzag homogène et de la configuration en bulle. On trouve bien que l'énergie de la bulle est plus faible que celle du zigzag homogène, ce qui est cohérent avec l'observation de systèmes en configuration en bulle en simulation, même pour de très faible confinement [voir figure 5.7]. Ce calcul énergétique montre bien que le déplacement local des particules augmentant l'énergie de confinement dans le système est malgré tout avantageuse pour diminuer son énergie totale, car cela permet de diminuer grandement l'énergie d'interaction dans particules dans la phase en ligne en les éloignant plus les unes des autres.

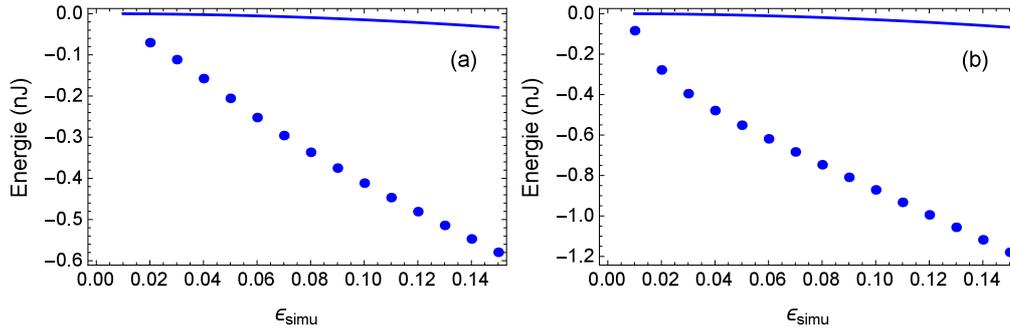


FIGURE 5.10 – La ligne pleine bleue correspond à l'énergie (en nJ) du zigzag homogène et les points bleus correspondent à l'énergie de la configuration en bulle en fonction du confinement  $\epsilon_{\text{simu}}$ . À titre de comparaison l'intensité de l'énergie d'interaction entre particules vaut  $U_0 = 9.42$  nJ. En (a) pour un système de  $N = 32$  particules et en (b) pour  $N = 64$  particules.

## 5.5 Conclusion

Dans ce chapitre, nous avons décrit les formes prises par le système de particules en interaction répulsive à partir de la forme normale développée dans le chapitre 3.

Nous avons présenté et discuté l'existence de trois solutions stationnaires inhomogènes à l'équation de la forme normale décrivant les configurations de zigzag inhomogènes observées pour un système infini. Cette méthode a ensuite été adaptée aux systèmes de taille finie, et nous avons établi une procédure permettant de définir de manière unique la configuration du système à l'aide de la distance entre particules. Ainsi nous avons montré que ces solutions, *sans paramètre ajustable*, sont en bon accord avec les structures observées en simulation. Nous décrivons de cette manière avec précision les configurations inhomogènes prises par le système. Enfin nous avons comparé les énergies associées aux configurations en ligne, en zigzag et en bulle, afin de confirmer que les bulles sont les solutions énergétiquement les plus favorables.

## Deuxième partie

# Dynamique des structures localisées dans un système quasi-1D discret de particules



# Chapitre 6

## Diffusion des bulles

### Sommaire

---

<b>6.1 Introduction</b> . . . . .	<b>105</b>
<b>6.2 Caractéristiques dynamiques d'une bulle en mouvement</b> . . . . .	<b>107</b>
6.2.1 « Masse » des bulles . . . . .	107
6.2.2 Modulation de l'énergie potentielle du système . . . . .	108
<b>6.3 Détermination de la position d'une bulle en mouvement</b> . . . . .	<b>111</b>
<b>6.4 Diffusion libre des bulles à haute température</b> . . . . .	<b>112</b>
6.4.1 Déplacement quadratique moyen des bulles . . . . .	112
6.4.2 Diffusion libre des bulles à temps long . . . . .	113
6.4.3 Comportement à temps court des bulles . . . . .	116
<b>6.5 Piégeage et mouvement activé des bulles à basse température</b> . . . . .	<b>117</b>
6.5.1 Piégeage et mouvement activé . . . . .	117
6.5.2 Diffusion libre pour des valeurs spécifiques du confinement . . . . .	119
<b>6.6 Conclusion</b> . . . . .	<b>122</b>

---

### 6.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons étudier les mouvements des bulles en présence d'une agitation thermique. Ces configurations d'équilibre sont stables pour une large gamme de température [voir chapitre 4] et peuvent se déplacer le long du système sur une longue durée<sup>1</sup>. Un tel déplacement est montré figure 6.1. Dans cet exemple la température est suffisamment élevée pour que la bulle se déplace sur la totalité de la longueur de la cellule, tout en conservant sa forme. On remarque que le déplacement de la bulle correspond au mouvement de l'enveloppe de l'onde solitaire le long de la chaîne et non au mouvement de translation global des particules elles-mêmes. En effet, au passage de la bulle, l'ensemble des particules impliquées dans la structure en zigzag localisée est renouvelé lorsque la bulle se déplace suffisamment. Ce comportement sera de nouveau mis en évidence par la comparaison entre les déplacements d'une particule typique dans le système et ceux de la bulle elle-même [voir figure 6.5 (a)].

---

1. Cette échelle de temps est beaucoup plus longue que les temps caractéristiques des systèmes considérés, voir Annexe A.5.

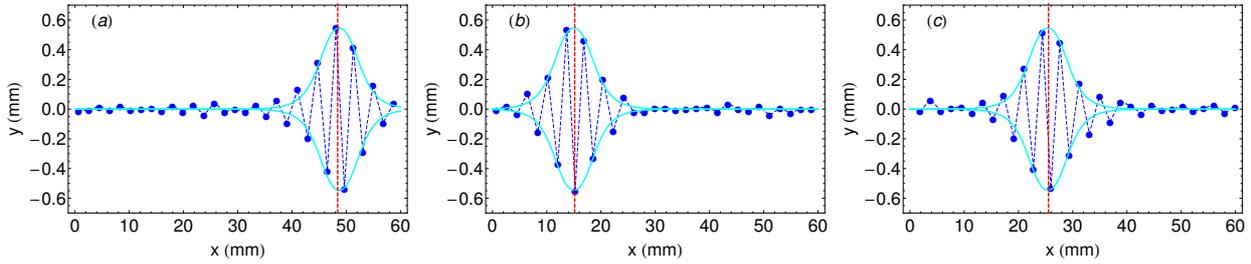


FIGURE 6.1 – Trois configurations instantanées prises par une bulle, dans un système de  $N = 32$  particules dans une cellule de longueur  $L = 60$  mm, pour une température  $T = 5 \cdot 10^9$  K et  $\epsilon = 0.08$ . Les points bleus sont les positions  $(x_i, y_i)$  des particules aux temps 100 s (a), 500 s (b) et 700 s (c). La ligne pleine en cyan correspond à la forme analytique de l’enveloppe de la bulle déterminée à partir de l’équation (5.9). Cette forme est la même pour chaque configuration. La ligne en pointillé rouge indique la position de la bulle déterminée à partir de l’équation (6.8).

Pour chaque position de l’enveloppe de la bulle le long du système, les particules adoptent une configuration spécifique qui pourra être calculée, tout comme l’énergie potentielle  $E_p$  associée à cette configuration. Nous montrerons que les modifications des positions des particules par rapport à l’enveloppe de la bulle lors de son déplacement induisent une faible variation périodique de l’énergie du système qui sera déterminante pour expliquer son mouvement.

Dans ce chapitre nous montrerons, qu’à haute température, le mouvement d’une bulle est identique à celui d’une particule effective diffusant librement, et nous calculerons son coefficient de diffusion. À basse température cependant, nous verrons que le mouvement des bulles devient sensible à la modulation de l’énergie potentielle  $E_p$  évoquée précédemment. En particulier nous observerons que pour des températures suffisamment basses, lorsque l’énergie thermique du système est comparable aux modulations d’énergie potentielle, le mouvement des bulles peut être décrit comme celui d’une particule effective dans un potentiel périodique. Pour des températures encore plus basses, on observera un piégeage total des bulles.

L’influence du caractère discret du système sur le mouvement de l’onde solitaire décrit ici, a déjà été observée dans plusieurs systèmes classiques. Les premiers systèmes correspondent au mouvement de dislocation à l’intérieur des cristaux, notamment à partir du modèle de Frenkel-Kontorova [15], mais un grand nombre d’autres exemples comme les parois de domaines dans les ferroélectriques, les parois entre phases incommensurables, les solitons dans les matériaux magnétiques ou la dynamique non linéaire de l’ADN mettent en évidence le rôle important joué par le caractère discret dans la description de la dynamique des ondes solitaires de manière générale. La référence [87] présente de façon exhaustive l’étude de tels systèmes. Il est cependant important de noter que pour tous ces systèmes les effets discrets proviennent du déplacement d’une onde solitaire le long d’un potentiel périodique qui est externe au système. Ce qui n’est pas le cas ici, où le potentiel périodique est intrinsèque au caractère discret du système lui même.

Nous rappellerons brièvement section 6.2 les caractéristiques des ondes solitaires décrivant la modulation localisée du zigzag tirées du modèle non linéaire continu présenté au chapitre 3 et

qui sont nécessaire à la description de la masse  $M_B$  de la particule effective associée à la bulle. Nous établirons ensuite l'expression analytique de cette masse et calculerons la variation d'énergie potentielle du système liée au déplacement de l'enveloppe de la bulle le long de la chaîne. Les détails sur les simulations et l'analyse des données sont décrits dans l'annexe A.5. L'analyse du mouvement spécifique des particules dans les systèmes présentant une telle configuration et l'analyse de la position des bulles seront décrits dans la section 6.3. Les mouvements de bulles obtenus par simulation à haute température seront présentés section 6.4. Puis nous nous concentrerons sur les comportements à les basses températures (section 6.5), où nous discuterons l'influence des effets liés au caractère discret du système sur le mouvement des bulles.

L'ensemble de ces résultats a fait l'objet d'un article, *Thermal motion of a nonlinear localized pattern in a quasi-one-dimensional system*, *Phys. Rev. E* [38].

## 6.2 Caractéristiques dynamiques d'une bulle en mouvement

### 6.2.1 « Masse » des bulles

Au chapitre 3 nous avons présenté équation (3.17) la densité de Lagrangien du système, à partir de laquelle nous avons déterminé les équations non linéaires couplées pour les deux champs de déplacement  $\phi(x, t)$  et  $h(x, t)$ . Nous avons montré au chapitre 5 que les structures modulées observées dans le système sont bien décrites comme des ondes solitaires solutions des équations de la forme normale de la bifurcation. Les expressions mathématiques correspondant à ces ondes solitaires ont été présentées équations (5.9) et (5.10) respectivement pour  $\phi(x, t)$  et  $h(x, t)$ .

La description d'une bulle par une enveloppe sous forme d'une onde solitaire permet également de calculer sa masse effective. En effet à partir de cette densité de Lagrangien [voir équation (3.17)], on peut déduire le *tenseur énergie-impulsion* [59] et calculer la densité linéique de quantité de mouvement  $\mathcal{P}$  :

$$\mathcal{P} = -\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial \phi}{\partial t}\right)} \frac{\partial \phi}{\partial x} - \frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \left(\frac{\partial h}{\partial t}\right)} \frac{\partial h}{\partial x} = -\left(\frac{\partial \phi}{\partial t} \frac{\partial \phi}{\partial x} + \frac{\partial h}{\partial t} \frac{\partial h}{\partial x}\right). \quad (6.1)$$

Si on considère une bulle se déplaçant à vitesse constante  $V$ , telle que  $h(x, t) = h(\xi \equiv x - Vt)$ , la densité linéique de quantité de mouvement devient :

$$\mathcal{P} = V \left[ \left(\frac{d\phi}{d\xi}\right)^2 + \left(\frac{dh}{d\xi}\right)^2 \right] = V \left[ \alpha^2 h^4 + \left(\frac{dh}{d\xi}\right)^2 \right], \quad (6.2)$$

dans laquelle nous avons injecté l'équation (3.23) pour trouver l'expression de droite. La quantité de mouvement de la bulle est donnée par l'intégration de l'équation (6.2) sur la totalité de la longueur de l'axe  $\xi$ , avec  $h(\xi)$  donnée par l'équation (5.9). On peut alors définir la *masse* de la bulle comme  $M_B = \lim_{V \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} (\mathcal{P}(\xi)/V) d\xi$ . On trouve :

$$M_B = \frac{3\alpha^2 \sqrt{-\epsilon\beta_{ZZ}}}{a_5} \left[ \frac{1 + \chi^2}{\chi} \operatorname{arctanh} \chi - 1 \right] - \frac{\sqrt{3}\epsilon\beta_{ZZ}}{4\sqrt{a_5}} \left[ \frac{1 + \chi^2}{\chi} - \frac{(1 - \chi^2)^2}{\chi^2} \operatorname{arctanh} \chi \right] \quad (6.3)$$

avec  $0 < \chi \equiv h_-/h_+ < 1$ .

Les expressions considérées étant présentées en unité adimensionnées (avec  $d$  comme unité de dis-

tance et  $d/c_\perp$  comme unité de temps), la masse de la bulle  $M_B$  présentée ici est en unité de  $m$ , la masse d'une particule.

Deux commentaires doivent cependant être ajoutés. Tout d'abord pour établir l'équation (6.2), nous avons utilisé l'équation (3.23) qui n'est valable *a priori* que pour des bulles stationnaires. Toutefois pour des bulles mises en mouvement thermiquement cette expression reste correcte. En effet, si on considère des bulles se déplaçant en translation uniforme à une vitesse  $V$  telle que  $\xi = x - Vt$ , et donc  $h(x, t) = h(\xi)$  et  $\phi(x, t) = \phi(\xi)$ , en injectant ces fonctions dans l'équation (3.19), on déduit :

$$(b_3 - V^2)\phi'' = -a_3 h h' \implies \phi' = -\frac{\alpha b_3}{b_3 - V^2} h^2 \equiv -\tilde{\alpha}(V) h^2, \quad (6.4)$$

où  $h' = dh/d\xi$ . Pour des bulles se déplaçant à des vitesses *subsoniques*,  $V < 1$  (on rappelle que  $c_\perp$  est l'unité de vitesse, et que  $b_3 \approx 4$ ), donc  $\tilde{\alpha}(V) > \alpha$  tel que la sous-criticalité de la bifurcation soit préservée. Dès lors, les calculs peuvent être réalisés exactement de la même manière que précédemment et on obtient une équation d'amplitude de la bulle en mouvement identique à celle de l'équation (3.25), mais avec la constante  $\alpha$  qui doit être remplacée par  $\tilde{\alpha}(V)$ .

Dans le cas des bulles diffusant thermiquement, la vitesse des bulles  $V$  peut être estimée à partir de la masse de la bulle  $M_B$  [voir équation (6.3)] et à partir de l'énergie thermique,  $V \sim \sqrt{2k_B T/M_B}$ . On trouve à partir de la figure 6.10 qu'une valeur typique pour la masse de la bulle est  $M_B/m \sim 0.2$ . Pour des températures de  $T = 10^{10}$  K, on obtient une vitesse  $V \sim 0.1$  cm/s. Au contraire, pour une distance entre particules de  $d = (60/32)$  mm, en utilisant l'équation (3.12) et les valeurs numériques précisées section A.5, on trouve  $c_\perp \sim c_{//}/2 \sim 1.5$  cm/s. La correction  $(V/c_\perp)^2$  est donc très faible, de telle sorte que  $\tilde{\alpha}(V) \approx \alpha$  est une excellente approximation. La forme stationnaire des bulles présentée équation (5.9) décrit donc aussi les *bulles non stationnaires* mises en mouvement thermiquement. Ainsi  $M_B$  dans l'approximation équation (6.3) est une très bonne estimation de la masse de la bulle considérée comme une particule effective.

### 6.2.2 Modulation de l'énergie potentielle du système

Au delà de la masse de la bulle, qui est une caractéristique liée à la description de la bulle pour une enveloppe continue, une seconde caractéristique dynamique apparaît pour ces systèmes constitués d'un nombre  $N$  fini de particules. En effet la description complète d'une bulle nécessite de connaître la réorganisation des particules le long de cette enveloppe. Cette réorganisation est contrôlée par les champs  $\{\phi(x), h(x)\}$ . À chaque position du sommet de l'enveloppe de la bulle correspond ainsi une configuration spécifique de particules, et chaque changement de position de l'enveloppe induit une redistribution des particules sur celle-ci.

Considérons tout d'abord un système de  $N$  particules équidistantes réparties sur une enveloppe de bulle dont l'apex est exactement situé au niveau de la position longitudinale de la particule  $i_0$ . La configuration discrète associée est alors :

$$\begin{cases} x_i &= d[i + \phi(i - i_0)] \\ y_i &= d(-1)^i h(i - i_0) \end{cases} \quad \text{pour } i \in [1, N]. \quad (6.5)$$

Lorsque l'apex de l'enveloppe se décale d'une distance  $\Delta$  par rapport à la chaîne de particules, les

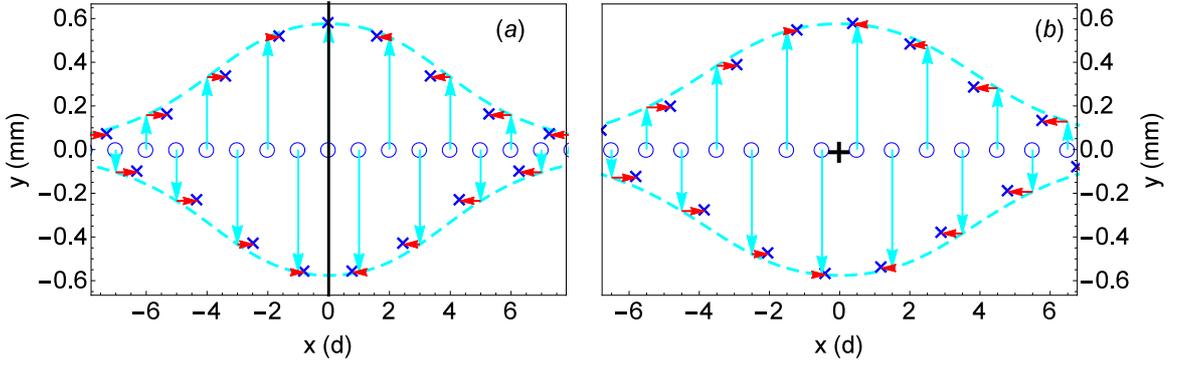


FIGURE 6.2 – Configurations discrètes des particules le long de la bulle, avec un zoom sur les particules centrales. Le nombre total de particules est  $N = 64$  et la longueur de la cellule  $L = 120$  mm. L'abscisse correspond aux positions longitudinales données en unité de  $d$ , et l'ordonnée aux positions transverses en mm. Les lignes en cyan pointillées correspondent à l'enveloppe de l'onde solitaire, présentée équation (5.9), et centrée en  $x = 0$ . Les cercles vides indiquent les positions non perturbées de la chaîne de particules et les croix sont les positions réelles des particules dans la bulle. Les flèches montrent les déplacements des particules. (a) La particule centrale se trouve à l'apex de la bulle,  $\Delta = 0$  [voir équation (6.5)]. La ligne pleine noire indique le plan de symétrie miroir. (b) La configuration est décalée d'une demi période,  $\Delta = 1/2$  [voir équation (6.6)]. L'épaisse croix noire + indique le centre de symétrie d'inversion de la configuration.

positions des particules deviennent alors :

$$\begin{cases} x_i = d[i + \Delta + \phi(i - i_0 + \Delta)] \\ y_i = d(-1)^i h(i - i_0 + \Delta) \end{cases} \quad \text{pour } i \in [1, N]. \quad (6.6)$$

Ces configurations sont donc périodiques, et pour le choix d'adimensionnement des longueurs par la distance moyenne entre particules on trouve que la période vaut  $\Delta = 1$ . Deux exemples de telles configurations sont présentés figure 6.2 (a) pour  $\Delta = 0$  et figure 6.2 (b) pour  $\Delta = 1/2$ .

Il est à noter que la symétrie des différentes configurations dépend de la position de l'enveloppe de long de la chaîne. Par construction, la première configuration ( $\Delta = 0$ ) présente une symétrie miroir par rapport au plan  $x = i_0 d$ . Puisque  $h(x)$  est une fonction paire [voir équation (5.9)] et  $\phi(x)$  est une fonction impaire [voir équation (5.10)], cette symétrie est observable de manière plus générale lorsque le décalage vaut  $\Delta = p$  avec  $p$  entier. La seconde configuration ( $\Delta = 1/2$ ) correspond en revanche à une symétrie d'inversion ponctuelle par rapport au centre  $\{x = (i_0 - 1/2)d, y = 0\}$ . De manière plus générale, le centre d'inversion de cette symétrie est  $\{x = (i_0 - p - 1/2)d, y = 0\}$  lorsque  $\Delta = p + 1/2$  avec  $p$  entier.

À partir des positions des particules obtenues pour chaque déplacement  $\Delta$  de l'enveloppe [voir équation (6.6)], on peut calculer l'énergie potentielle  $E_p(\epsilon, \Delta)$  de la configuration correspondante. Cette énergie  $E_p(\epsilon, \Delta)$  est représentée figure 6.3 en fonction de  $\Delta$ , pour deux valeurs différentes de confinement  $\epsilon$  correspondant à des formes localisées de différentes extensions latérales. Cette énergie est périodique de période  $\Delta = 1$ , conséquence directe de la périodicité des configurations

discrètes de particules.  $E_p(\epsilon, \Delta)$  est une fonction sinusoïdale de  $\Delta$ , de la forme :

$$E_p(\epsilon, \Delta) = \frac{\Delta E(\epsilon)}{2} \cos(2\pi\Delta). \quad (6.7)$$

Les extrema de l'énergie potentielle correspondent à des configurations dont la symétrie dépend du confinement, de façon assez surprenante. Dans le cas de la figure 6.3 (a) par exemple la configuration minimisant l'énergie correspond au cas où une particule est disposée à l'apex de l'enveloppe ( $\Delta = p$ ,  $p$  entier), alors que dans le cas de la figure 6.3 (b) la configuration de plus basse énergie correspond à une configuration où l'apex de l'enveloppe est situé au milieu de deux particules ( $\Delta = p + 1/2$ ,  $p$  entier).

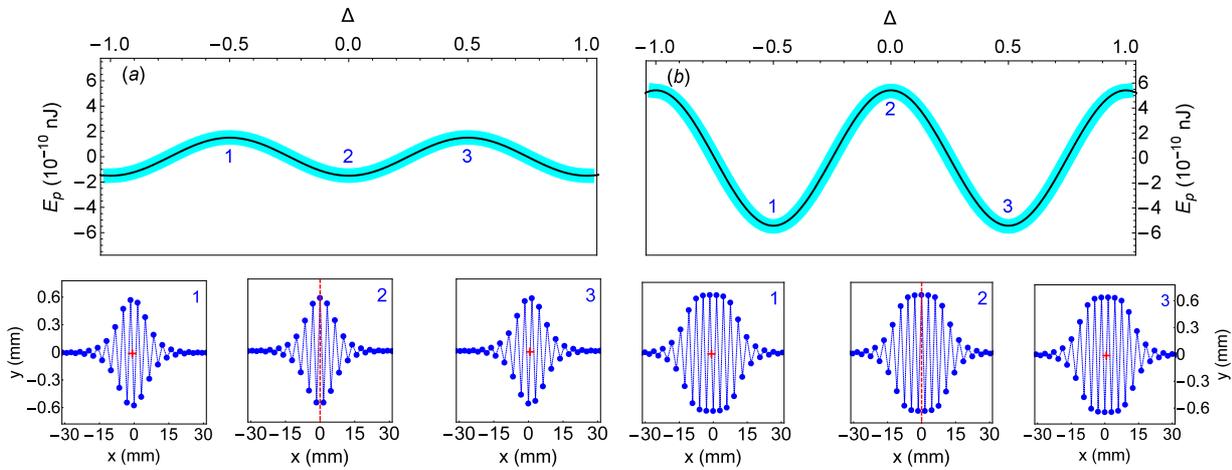


FIGURE 6.3 – (a) & (b) : évolution de l'énergie potentielle de la configuration en bulle (en  $10^{-10}$  nJ) en fonction du décalage adimensionné  $\Delta$ , pour  $N = 64$  particules dans une cellule de longueur  $L = 120$  mm et pour une confinement  $\epsilon = 0.077$  dans la figure (a), et  $\epsilon = 0.22$  figure (b). La ligne épaisse cyan correspond à l'énergie mesurée en simulation et la fine ligne noire correspond à un ajustement sinusoïdal. En dessous sont représentées les configurations des particules correspondant aux indices 1, 2 et 3 dans les figures (a) et (b). La ligne verticale rouge indique le plan de symétrie miroir tandis que la croix rouge montre le centre de symétrie.

En étudiant de manière systématique l'amplitude  $\Delta E(\epsilon)$  de la variation d'énergie, on constate qu'elle change avec le confinement  $\epsilon$  sous forme d'une succession d'arches allant de zéro à une valeur maximale qui augmente légèrement avec  $\epsilon$  [voir figure 6.4]. Ces arches sont quasi-régulièrement espacées, la différence entre deux zéros successifs de  $\Delta E(\epsilon)$  étant à peu près constante, [voir figure 6.4 (b)].

De plus, le long d'une arche donnée, les symétries respectives des configurations associées au minimum et au maximum de  $E_p(\epsilon, \Delta)$  sont fixées, tandis que le long de l'arche suivante ces symétries sont inversées. Les lignes en tirets bleus dans la figure 6.4 (a) correspondent à des confinements pour lesquels le minimum d'énergie est associé à une configuration de symétrie miroir. Par exemple, le carré bleu sur la figure 6.4 (a) correspond à l'énergie du système présentée figure 6.3 (a). À l'inverse les lignes pleines rouges sur la figure 6.4 (a) correspondent à des confinements pour lesquels la configuration minimisant l'énergie présente une symétrie d'inversion ponctuelle. Le point rouge figure 6.4 (a) symbolise la configuration pour laquelle l'énergie est présentée sur la figure 6.3 (b).

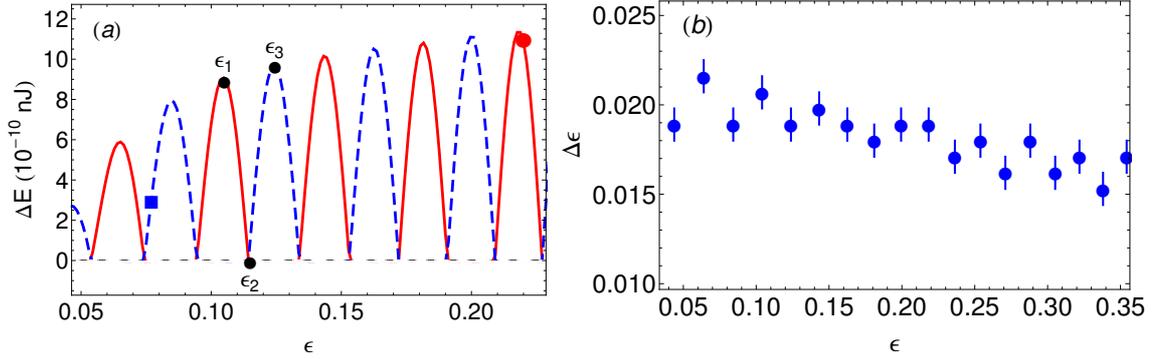


FIGURE 6.4 – (a) : Évolution de la barrière d'énergie  $\Delta E(\epsilon)$  (en  $10^{-10}$  nJ) en fonction du confinement  $\epsilon$ , pour  $N = 64$  particules dans une cellule de longueur  $L = 120$  mm. Les lignes en tirets bleus correspondent aux confinements pour lesquels les configurations minimisant l'énergie présentent une symétrie miroir et les lignes pleines rouges correspondent aux confinements pour lesquels les configurations d'énergie minimales présentent une symétrie d'inversion ponctuelle. Les confinements spécifiques  $\epsilon_1$ ,  $\epsilon_2$  et  $\epsilon_3$  sont discutés dans la section 6.5. Le carré bleu indique le confinement de la figure 6.3 (a) et le point rouge indique le confinement de la figure 6.3 (b). (b) : Évolution de la différence entre deux zéros successifs de  $\Delta E(\epsilon)$ , en fonction du confinement  $\epsilon$ .

### 6.3 Détermination de la position d'une bulle en mouvement

Afin d'étudier le mouvement de la bulle, il est possible d'obtenir sa position instantanée en ajustant à chaque instant la forme analytique de l'onde solitaire à la configuration instantanée observée [voir figure 6.1]. Cependant cette procédure est très coûteuse en temps de calcul. Nous avons donc décidé de nous servir d'une méthode plus rapide, utilisant directement les positions instantanées des particules  $\{x_i(t), y_i(t)\}$ . Cette méthode consiste à augmenter le "poids" alloué aux particules à l'intérieur de la bulle ( $|y_i(t)|$  élevé) par rapport à celles en ligne. La position de la bulle  $x_B(t)$  est alors définie comme :

$$x_B(t) = \frac{\sum_{i=1}^N x_i(t) y_i^2(t)}{\sum_{i=1}^N y_i^2(t)} \quad (6.8)$$

Cette méthode a été validée en comparant les trajectoires obtenues à celles trouvées par la méthode d'ajustement de la forme de la bulle. Ces deux méthodes donnent le même résultat, comme le montre par exemple la figure 6.1.

Une trajectoire typique de bulle  $x_B(t)$  ainsi que le mouvement longitudinal d'une particule typique dans le système sont présentés figure 6.5 (a). Le mouvement de la bulle s'effectue sur des distances de plusieurs fois la distance entre particules, tandis que pendant la même durée, la particule typique ne se déplace que sur une distance entre particules. Ceci confirme bien que le déplacement de la bulle n'est pas associé à un mouvement longitudinal d'ensemble des particules mais plutôt au passage de l'onde solitaire le long de la chaîne entraînant une réorganisation transverse continue des particules.

La trajectoire  $x_B(t)$  fluctue selon deux échelles de temps très différentes. On observe des fluctuations rapides de faible amplitude intégrées dans un mouvement plus lent mais de bien plus grande

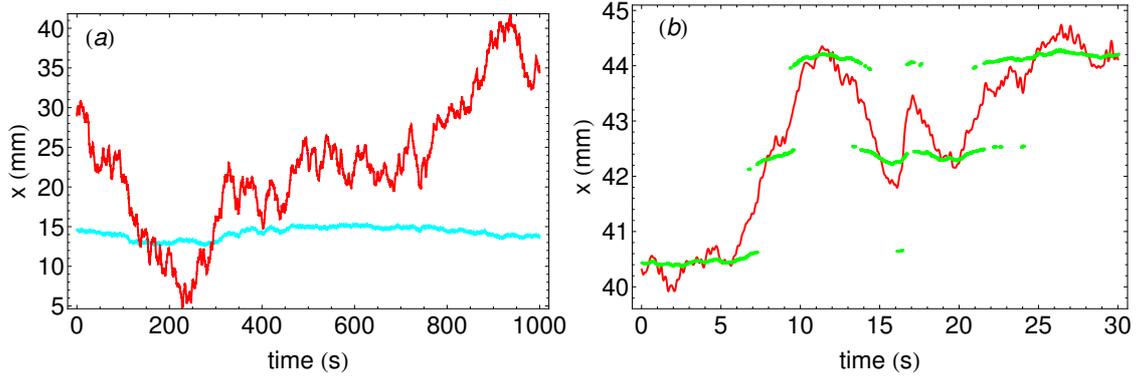


FIGURE 6.5 – Déplacements longitudinaux (en mm) en fonction du temps (en s), pour un système de  $N = 32$  particules,  $L = 60$  mm, à la température  $T = 5 \cdot 10^9$  K,  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  et  $\epsilon = 0.08$ . (a) Ligne pleine rouge : trajectoire typique d'une bulle, mesurée par  $x_B(t)$ . Ligne pleine cyan : mouvement longitudinal d'une particule typique du système. (b) Ligne pleine rouge : zoom sur la trajectoire de la bulle [attention à la différence d'échelle avec (a)]. Points verts : position instantanée de la particule avec la position transverse la plus éloignée de l'axe du confinement.

amplitude. Ces deux échelles de temps correspondent à deux processus dynamiques différents. Les mouvements lents sont associés au mouvement de l'enveloppe de la bulle et seront principalement décrits dans la section 6.4. Au contraire, les fluctuations rapides sont associées aux excitations thermiques individuelles des particules. Afin de mieux comprendre l'origine de ces mouvements de faible amplitude la figure 6.5 (b) compare la position de la bulle  $x_B(t)$  (en rouge) avec la position  $x_i(t)$  de la particule ayant la position transverse  $|y_i(t)|$  la plus grande (en vert), correspondant au sommet de la bulle. On remarque que les fluctuations thermiques transverses des particules impliquent un réarrangement local aléatoire des particules autour de leur position le long de la bulle qui entraîne des sauts de la position de la bulle sur une distance typique de  $d$ . Ces sauts sont mis en évidence dans la figure 6.5 (b) qui montre les changements brutaux de la position de la particule au sommet de la bulle qui change abruptement d'une distance  $d$  lorsque l'indice de la particule au sommet change. Nous verrons sous-section 6.4.3 qu'à ces échelles de temps courts le mouvement de la bulle est effectivement bien décrit à partir des fluctuations indépendantes des particules.

## 6.4 Diffusion libre des bulles à haute température

Dans cette section, nous considérons uniquement le mouvement des bulles lorsque l'énergie thermique est bien plus grande que l'amplitude  $\Delta E(\epsilon)$  du potentiel périodique lié au caractère discret du système [voir section 6.2.2].

### 6.4.1 Déplacement quadratique moyen des bulles

Comme le montre la figure 6.5, le mouvement des bulles ressemble fortement à une marche aléatoire. Nous allons donc nous intéresser aux propriétés statistiques des trajectoires de bulles et calculer leur Déplacement Quadratique Moyen (DQM)  $\langle \Delta x_B^2(t) \rangle$ .

Les DQM des bulles pour trois températures différentes  $T = 10^9$  K,  $T = 5 \cdot 10^9$  K et  $T = 10^{10}$  K, et pour deux coefficients de dissipations différents  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  et  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$  sont présentés figures 6.6.

Ces DQM présentent comme pour une particule libre deux régimes distincts s'étendant sur six décades. Aux temps très courts (dans la figure 6.6,  $t \leq 0.1$  s) le DQM de la bulle varie en  $t^2$  et est indépendant de  $\gamma$ . Au contraire à temps long (dans la figure 6.6,  $t \geq 10$  s) le DQM de la bulle varie en  $t$  avec un coefficient qui décroît comme  $1/\gamma$  lorsque la dissipation augmente. On remarque également que le DQM des bulles est proportionnel à la température du bain thermique comme le montre la superposition des DQM normalisés par la température  $\langle \Delta x_B^2(t) \rangle / (k_B T)$  [voir figures 6.6 (b) et 6.6 (d)]. De plus, à titre de comparaison, les figures 6.6 (a) et 6.6 (c) présentent aussi le DQM longitudinal d'une particule typique à l'intérieur de la chaîne, celui-ci est deux ordres de grandeur plus faible que le DQM de la bulle, ce qui est cohérent avec les observations faites sur les trajectoires figure 6.5 (a).

Les temps caractéristiques de ces deux régimes asymptotiques peuvent être estimés à partir de la vitesse typique des ondes acoustiques  $c$  dans la chaîne [voir section 3.4.3], de la distance moyenne entre particules  $d$  et de la taille du système  $L$ . Par exemple, le temps caractéristique nécessaire à une onde pour se déplacer entre deux plus proches voisins est  $d/c$ . Ceci définit l'échelle de temps en dessous de laquelle les particules sont indépendantes, de telle sorte que la dynamique des bulles est guidée par les fluctuations non corrélées des particules entre elles. Une estimation grossière donne  $d/c \sim 0.1$  s ce qui est cohérent avec l'échelle de temps court de la figure 6.6, identique pour la bulle et pour la particule quelconque présentée. Le mouvement des bulles au cours de ce régime sera décrit dans la sous-section 6.4.3.

D'autre part, le temps caractéristique  $L/c$  mis par une onde pour traverser la totalité de la cellule définit l'échelle de temps au dessus de laquelle toutes les particules du système peuvent être corrélées, même à longue portée. Ce temps caractérise un régime cohérent de déplacement des particules, notamment associé au mouvement de grande amplitude de l'onde solitaire, comme nous allons le voir sous-section 6.4.2. Une estimation de ce temps donne  $L/c \sim 10$  s, ce qui est toujours en bon accord avec le temps long présenté figure 6.6.

### 6.4.2 Diffusion libre des bulles à temps long

Aux temps longs la bulle semble se comporter comme une particule effective diffusant librement. Dans ce cadre là on s'attend à observer un coefficient de diffusion spécifique pour la bulle  $D_B = k_B T / (M\gamma)$ , où la masse  $M$  serait exactement la masse  $M_B$  calculée dans le cadre du modèle continu et présenté section 6.2 ( $M_B$  est définie dans l'équation (6.3)), les autres dépendances étant vérifiées [voir sous-section 6.4.1].

Afin de tester notre interprétation, nous avons mesuré le DQM pour différentes formes de bulles obtenues pour différentes valeurs de confinement transverse. Ces mesures sont présentées figure 6.7. Pour toutes les valeurs de confinement on observe un comportement diffusif à temps long, avec  $\langle \Delta x_B^2 \rangle \propto t$ . On remarque que le changement du confinement et donc de la forme de bulle diminue légèrement le DQM, de telle sorte que le coefficient de diffusion décroît avec le confinement, ce qui suggère une augmentation de la masse de la particule effective. La figure 6.8 rapporte les valeurs de coefficients de diffusion effectifs  $D_B$  déduits des DQM des bulles pour différentes valeurs de  $\epsilon$  et pour trois tailles de système différentes,  $N = 16$ ,  $N = 32$  et  $N = 64$  à densité constante

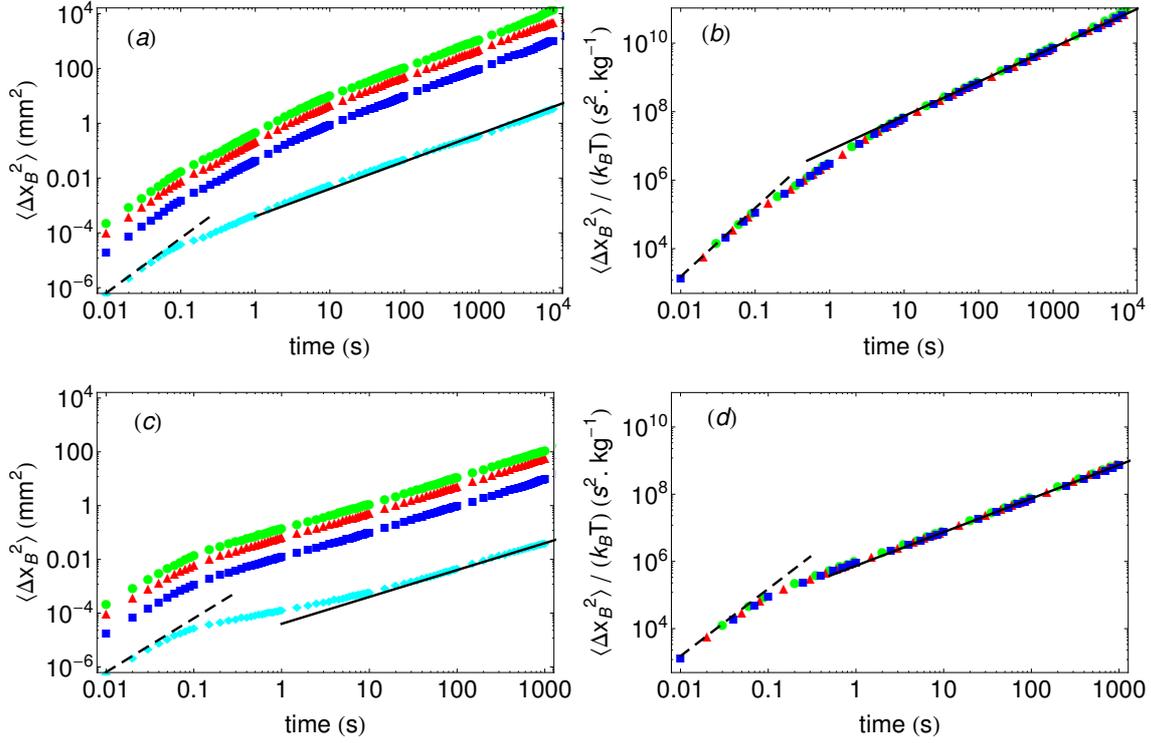


FIGURE 6.6 – Figures à gauche : évolution du DQM de la bulle (échelle Log, en  $\text{mm}^2$ ) en fonction du temps (échelle Log, en s) pour  $N = 32$  particules dans une cellule de longueur  $L = 60$  mm, et  $\epsilon = 0.08$ . Les températures sont  $T = 10^9$  K (en carrés bleus),  $T = 5 \cdot 10^9$  K (en triangles rouges) et  $T = 10^{10}$  K (en points verts). Le coefficient de friction est  $\gamma = 1$   $\text{s}^{-1}$  dans la figure (a) et  $\gamma = 10$   $\text{s}^{-1}$  dans la figure (c). À titre de comparaison le DQM longitudinal d’une particule typique du système à  $T = 10^9$  K est présenté en diamants cyan. La ligne en pointillé noire correspond au régime ballistique à temps court et la ligne pleine noire au régime diffusif à temps long pour une simple particule dans la chaîne [32]. Figures à droite : évolution de  $\langle \Delta x_B^2(t) \rangle / (k_B T)$  (échelle Log, en  $\text{s}^2 \text{kg}^{-1}$ ) en fonction du temps (échelle Log, en s) pour  $\gamma = 1$   $\text{s}^{-1}$  (b) et  $\gamma = 10$   $\text{s}^{-1}$  (d). La ligne noire pleine correspond au régime de diffusion libre d’une bulle de masse  $M_B$  définie dans l’équation (6.3), la ligne en pointillé noire est le régime ballistique défini par l’équation (6.9), sans aucun paramètre ajustable.

(voir annexe A.5). On retrouve bien que  $D_B(\epsilon)$  est une fonction fortement décroissante de  $\epsilon$  pour une taille de système donnée. Indépendamment de la taille du système, les fines bulles (faibles  $\epsilon$ ) diffusent beaucoup plus rapidement que les bulles plus étendues (grands  $\epsilon$ ).

Il nous reste toutefois à déterminer si cet effet est lié à la diminution du confinement ou s’il est directement lié au changement de forme des bulles, entraînant donc un changement de leur masse  $M_B$ . Pour distinguer les deux phénomènes qui semblent *a priori* liés nous allons tirer avantage de la possibilité d’observer une même forme d’onde solitaire pour différentes valeurs de confinement  $\epsilon$ . Comme nous l’avons vu dans la section 5.3 la forme de la bulle, et sa description par une onde solitaire, varie à la fois en fonction du confinement  $\epsilon$  et de la taille du système, contrôlée ici par  $N$ . Il est alors possible de trouver plusieurs combinaisons de paramètres  $(N, \epsilon)$  telles que les formes des bulles soient identiques. Sur la figure 6.9 (a) trois bulles avec une enveloppe identique sont

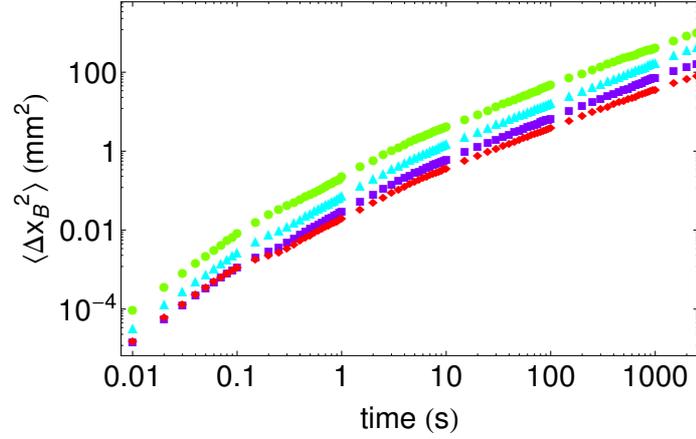


FIGURE 6.7 – Évolution du DQM de la bulle (échelle Log, en  $\text{mm}^2$ ) en fonction du temps (échelle Log, en s) pour  $\epsilon = 0.06$  (en points verts),  $\epsilon = 0.07$  (en triangles cyan),  $\epsilon = 0.10$  (en carrés violet) et  $\epsilon = 0.18$  (en diamants rouge), pour  $N = 32$  particules et  $L = 60$  mm, une température  $T = 5 \cdot 10^9$  K et pour  $\gamma = 1$   $\text{s}^{-1}$ .

représentées, mais elles sont obtenues dans des systèmes de  $N = 64$ ,  $N = 32$  et  $N = 16$  particules donc pour des valeurs de confinement différents, respectivement  $\epsilon = 0.03$ ,  $\epsilon = 0.10$  et  $\epsilon = 0.25$ . Les DQM, correspondant aux mouvements de chacune de ces bulles mesurés pour la même température  $T$  et pour le même  $\gamma$ , sont strictement identiques [voir figure 6.9 (b)]. Ceci montre que la dépendance du coefficient de diffusion effectif en fonction de  $\epsilon$  est uniquement liée à l’enveloppe de la bulle et pas directement au confinement lui-même.

On vient de voir qu’aux temps longs, les bulles diffusent comme des particules effectives libres soumises à un bain thermique, et que leur DQM ne dépend que de la forme des bulles. Leurs coefficients de diffusion devraient s’écrire  $D_B = k_B T / (M_B \gamma)$  avec  $M_B$  la masse de la bulle calculée équation (6.3). Dans la figure 6.10 (a) on compare le coefficient de diffusion mesuré à partir des DQM des bulles obtenus par simulation (symboles pleins) à la valeur du coefficient de diffusion  $k_B T / (M_B \gamma)$  attendu, et ceci pour deux tailles de systèmes différentes<sup>2</sup>. Cette comparaison ne nécessite *aucun paramètre d’ajustement*, et l’accord est excellent. De plus on montre bien dans la figure 6.10 (b) que les coefficients de diffusion mesurés pour les deux tailles de système retombent sur la même courbe, et cette courbe varie effectivement comme l’inverse de la masse effective de la bulle  $M_B(\epsilon)$ .

On remarque également que ces coefficients de diffusion sont cohérents avec l’image de marche aléatoire tirée de la figure 6.5 (b). On peut en effet dans ce cas considérer que le mouvement de la bulle résulte de sauts aléatoires, d’amplitude  $d$  (la distance moyenne entre particules), avec un temps caractéristique  $\tau$ , ce qui donnerait un coefficient de diffusion  $D \sim d^2 / (2\tau)$ . Par exemple, d’après la figure 6.5 (b) on a une estimation approximative de  $\tau \sim 5$  s, et comme  $T = 5 \cdot 10^9$  K et

2. Comme il a été expliqué dans la section 5.3.1, le modèle continu ne peut être comparé aux systèmes finis que si la taille de la cellule est beaucoup plus grande que l’extension de la bulle. Les calculs de masse de bulles sont valides pour  $N = 32$  et  $N = 64$ , mais les systèmes présentant seulement  $N = 16$  particules sont trop petits. Cependant comme le montre la figure 6.8, la phénoménologie reste identique.

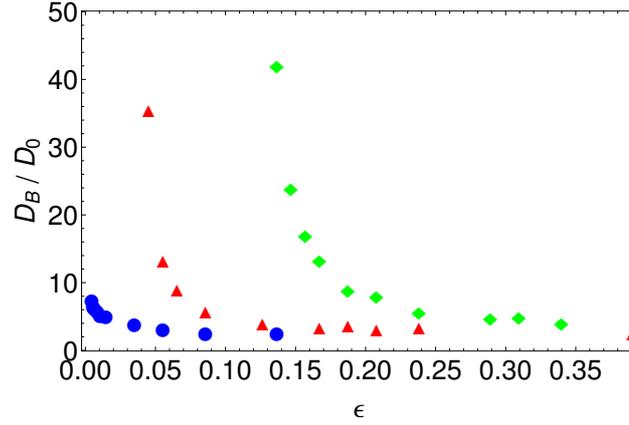


FIGURE 6.8 – Évolution du coefficient de diffusion  $D_B$  extrait à partir du comportement à temps long du DQM de la bulle, et normalisé par le coefficient de diffusion d'une simple particule libre  $D_0 = k_B T / (m\gamma)$ , en fonction du confinement  $\epsilon$ . On présente des données pour  $N = 16$  et  $L = 30$  mm (en diamants verts),  $N = 32$  et  $L = 60$  mm (en triangles rouges) et  $N = 64$  et  $L = 120$  mm (en points bleus).

$\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$ , ceci correspond à  $D_B/D_0 \sim 12$ , ce qui est du bon ordre de grandeur en comparaison avec les données présentées figures 6.7 et 6.10.

En conclusion nous avons montré que le mouvement d'une bulle à temps long pouvait être décrit comme celui d'une particule effective de masses  $M_B(\epsilon)$  diffusant librement à la température  $T$ .

### 6.4.3 Comportement à temps court des bulles

À temps court, les positions instantanées  $x_i(t)$  et  $y_i(t)$  de chaque particule  $i$  correspondent à des variables aléatoires indépendantes. Dans ce régime le DQM est facilement calculable. Puisque les particules fluctuent aléatoirement autour de leurs positions d'équilibre,  $\bar{x}_i$  et  $\bar{y}_i$ , on pose  $x_i(t) = \bar{x}_i + \delta x_i(t)$  et  $y_i(t) = \bar{y}_i + \delta y_i(t)$ , avec les faibles fluctuations  $\delta x_i(t)$  et  $\delta y_i(t)$  qui sont telles que  $\langle \delta x_i^2(t) \rangle = (k_B T / m)t^2$  et  $\langle \delta y_i^2(t) \rangle = (k_B T / m)t^2$ . Comme toutes les corrélations entre déplacements des particules sont négligeables, on peut injecter directement ces expressions dans l'équation (6.8). On obtient alors :

$$\langle \Delta x_B^2(t) \rangle = \left( \frac{\sum_{i=1}^N 4(\bar{x}_i - \bar{x}_B)^2 \bar{y}_i^2 + \sum_{i=1}^N \bar{y}_i^4}{\left( \sum_{i=1}^N \bar{y}_i^2 \right)^2} \right) \frac{k_B T}{m} t^2 \quad (6.9)$$

avec  $\bar{x}_B = \frac{\sum_{i=1}^N \bar{x}_i \bar{y}_i^2}{\sum_{i=1}^N \bar{y}_i^2}$

Comme attendu on retrouve que  $\langle \Delta x_B^2(t) \rangle$  varie comme  $t^2$  et est proportionnel à la température et indépendant de  $\gamma$ . Ceci explique les parfaites superpositions à temps court présentées figures 6.6 (b) et (d). De plus, on trouve une expression pour le préfacteur de la loi d'échelle en  $t^2$ , qui peut être comparé aux mesures de simulation. Les figures 6.6 (b), 6.6 (d) et 6.9 (b) montrent *sans aucun paramètre* d'ajustement que l'équation (6.9) décrit très bien les comportements à temps court (typiquement  $t \leq 0.1$  s) du DQM des bulles. Soulignons également que le comportement en  $t^2$  décrit ici ne correspond pas au régime balistique de la particule effective associée à la bulle, en

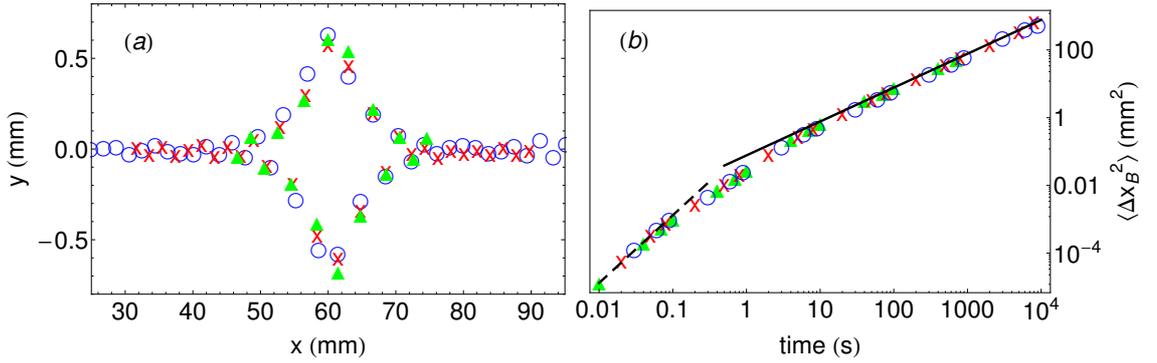


FIGURE 6.9 – (a) : Trois configurations de bulles identiques obtenues à  $d = L/N$  constant pour trois jeux de paramètres différents  $(N, \epsilon)$  :  $(16, 0.25)$  triangles verts ;  $(32, 0.1)$  croix rouges ;  $(64, 0.03)$  cercles bleus. On présente les configurations  $\{x_i, y_i\}$  (les deux longueurs en mm), avec l’apex de la bulle placé au centre de la cellule. (b) : Evolution du DQM de la bulle (échelle Log, en  $\text{mm}^2$ ) en fonction du temps (échelle Log, en s) pour les trois configurations de la figure (a), et en utilisant les mêmes symboles. La température est  $T = 5 \cdot 10^9$  K et le coefficient de friction est  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  dans chaque simulation. La ligne pleine noire correspond au régime de diffusion libre d’une bulle de masse  $M_B$  définie dans l’équation (6.3), la ligne en pointillé noire est le régime balistique défini par l’équation (6.9), sans paramètres ajustables.

effet celui ci devrait s’écrire  $(k_B T / M_B) t^2$ , ce qui ne coïncide pas numériquement avec les résultats mesurés, ce qui est normal car la grandeur  $M_B$  n’est définie que pour des temps suffisamment longs.

## 6.5 Piégeage et mouvement activé des bulles à basse température

Le régime de basse température est atteint lorsque l’énergie thermique  $k_B T$  devient plus petite ou comparable à l’amplitude des modulations de l’énergie potentielle du système. Plus quantitativement, on déduit à partir des figures 6.3 et 6.4 que  $\Delta E(\epsilon) \sim 10^{-10}$  nJ soit une température de  $T \sim 10^4$  K, ce qui correspond à une très faible température dans notre système (les échelles d’énergies pertinentes dans le problème sont rappelées annexe A.5). Dans ce régime, les mouvements des bulles deviennent sensibles au coût énergétique modulé  $E_p(\epsilon, \Delta)$  induit par leur translation le long de la chaîne de particules.

### 6.5.1 Piégeage et mouvement activé

Dans le cadre de notre description par une particule effective, la dynamique des bulles peut être interprétée comme le déplacement thermiquement activé d’une particule le long d’un potentiel modulé de la forme  $E_p(\epsilon, \Delta)$  [voir équation (6.7)].

Le mouvement d’une particule unique dans un potentiel extérieur périodique a été largement étudié [40, 94, 92]. Lorsque  $\Delta E(\epsilon) \gg k_B T$ , la particule est piégée dans un puits du potentiel, menant ainsi à une saturation du DQM. Au contraire quand  $\Delta E(\epsilon)$  et  $k_B T$  sont comparables, les fluctuations thermiques de la particule peuvent permettre son mouvement au dessus de la barrière énergétique  $\Delta E(\epsilon)$  entraînant finalement des déplacements de grande amplitude après plusieurs sauts successifs, le temps caractéristique entre deux sauts variant exponentiellement avec  $\Delta E / (k_B T)$  [94]. De tels

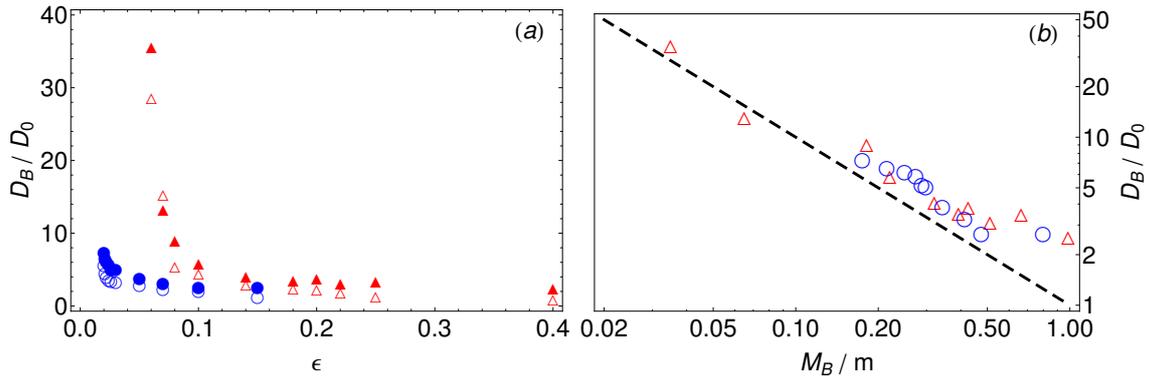


FIGURE 6.10 – (a) : Évolution du coefficient de diffusion  $D_B$ , normalisé par le coefficient de diffusion d’une simple particule libre  $D_0 = k_B T / (m\gamma)$ , en fonction du confinement  $\epsilon$ , pour  $N = 32$  et  $L = 60$  mm (en triangles rouges); et  $N = 64$  et  $L = 120$  mm (en points bleus). Les symboles pleins correspondent aux coefficients de diffusion mesurés à partir des comportements temps long des DQM, et les symboles ouverts correspondent au calcul du coefficient de diffusion  $k_B T / (M_B \gamma)$  où la masse  $M_B$  est donnée par l’équation (6.3). (b) : Évolution en échelle Log-Log de  $D_B/D_0$  en fonction de la masse de la particule effective adimensionnée par la masse d’une particule dans le système,  $M_B/m$ . La ligne en tiret indique la valeur attendue de pente  $-1$ .

déplacement activés impliquent une diminution drastique du coefficient de diffusion par rapport à celui d’une particule diffusant librement [40].

Cette phénoménologie peut être retrouvée dans le mouvement des bulles à basse température. La figure 6.11 (a) montre les trajectoires des bulles obtenues pour quatre températures différentes, augmentant de haut en bas, et correspondant à quatre dynamiques de bulle différentes. Pour  $T = 10^6$  K, la bulle reste immobile autour d’une position correspondant à une configuration minimisant l’énergie potentielle du système. Pour des températures légèrement plus élevées, on observe des sauts discrets de la position de la bulle entre minima successifs du potentiel. Pour  $T = 5 \cdot 10^6$  K un seul saut est observé pendant la séquence présentée tandis que pour  $T = 7 \cdot 10^6$  K plusieurs sauts sont observables. Ces observations sont en bon accord qualitatif avec le comportement attendu dans le cadre du mouvement d’une particule effective dans la gamme de température intermédiaire pour laquelle des sauts discrets se produisent, avec un temps caractéristique entre deux sauts diminuant avec la température. Enfin pour  $T = 2 \cdot 10^7$  K la température est suffisamment élevée pour que la bulle ne soit plus piégée et sa trajectoire devient celle d’une particule libre.

Les DQM des bulles  $\langle \Delta x_B^2(t) \rangle$  associés à ces trajectoires sont présentés figure 6.11 (b). Pour la température la plus faible ( $T = 10^6$  K) le DQM est saturé puisque la bulle est piégée aux temps longs. Au contraire pour les températures intermédiaires ( $T = 5 \cdot 10^6$  K et  $T = 7 \cdot 10^6$  K), le DQM varie comme  $t$  à temps long après un régime intermédiaire correspondant au piégeage de la bulle. La durée de ce régime intermédiaire, comme le temps caractéristique entre les sauts, décroît avec l’augmentation de la température [40]. Et enfin, pour la température la plus élevée ( $T = 2 \cdot 10^7$  K) le DQM varie comme  $t$  de la même manière qu’une particule libre, avec le coefficient de diffusion  $D_B = k_B T / (M_B \gamma)$  calculé dans la section 6.4, comme le montre la ligne noire dans la figure 6.11 (b).

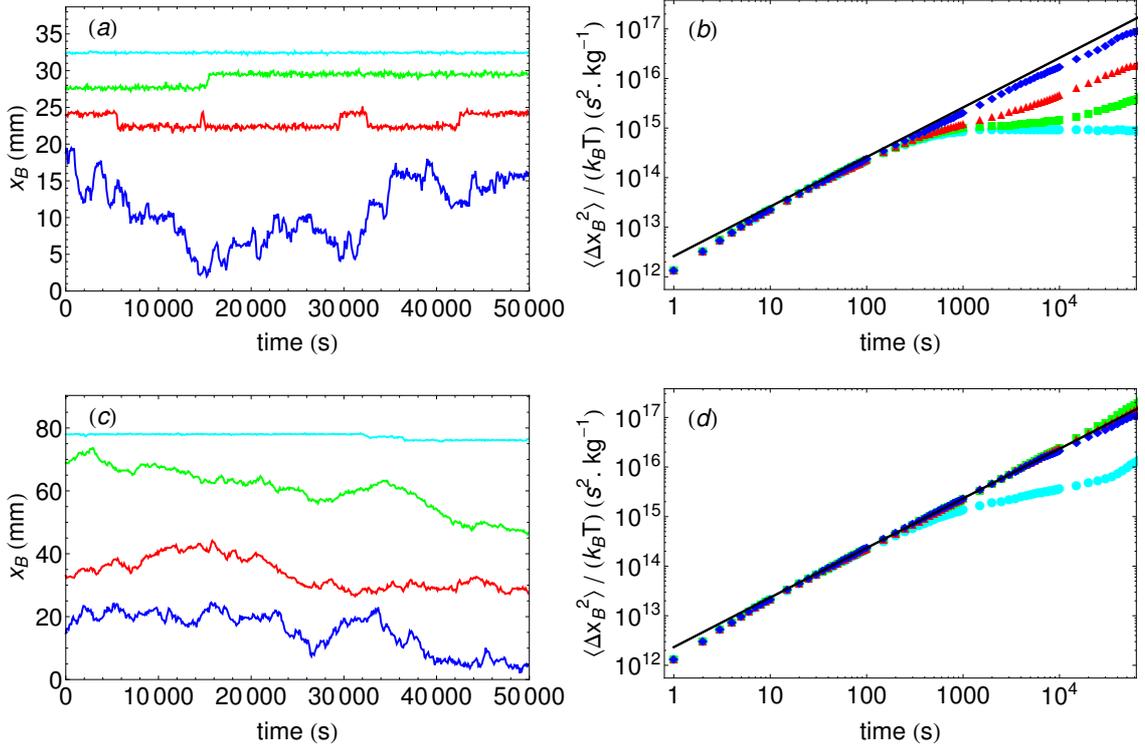


FIGURE 6.11 – Gauche : évolution de la position de la bulle  $x_B$  (en mm) en fonction du temps (en s), pour un système de  $N = 64$  particules dans une cellule de  $L = 120$  mm avec  $\gamma = 1$  s $^{-1}$ . Pour les figures du haut le confinement est  $\epsilon_t = 0.085$  et tel que  $\Delta E(\epsilon_t) = 7.9 \cdot 10^{-10}$  nJ. Pour les figures du bas le confinement est  $\epsilon_b = 0.093$  et  $\Delta E(\epsilon_b) = 1.0 \cdot 10^{-10}$  nJ. Les températures sont  $T = 10^6$  K (en points cyans),  $T = 5 \cdot 10^6$  K (en carrés vert),  $T = 7 \cdot 10^6$  K (en triangles rouges) et  $2 \cdot 10^7$  K (en diamants bleus). Droite : évolution des DQM correspondants  $\langle \Delta x_B^2(t) \rangle / (k_B T)$  (échelle Log, en s $^2$  kg $^{-1}$ ) en fonction du temps (échelle Log, en s).

Tous ces comportements sont en accord qualitatif avec la description du mouvement des bulles comme celui d'une particule effective de masse  $M_B$  dans un potentiel périodique extérieur. Cependant, le confinement  $\epsilon$  dans la figure 6.11 (a) correspond à une amplitude de modulation de l'énergie potentielle équivalent à une température de  $T \sim 7.7 \cdot 10^4$  K. Il semble donc que le calcul des hauteurs de barrières de la modulation de l'énergie potentielle décrit section 6.2.2 sous-estime l'amplitude des modulations.

### 6.5.2 Diffusion libre pour des valeurs spécifiques du confinement

Dans la sous-section 6.2.2 nous avons mis en évidence une remarquable variation de l'amplitude de modulation de l'énergie potentielle, qui s'annule pour des valeurs spécifiques de confinement transverse [voir figure 6.4]. Afin de valider notre description des mouvements à basse température on se restreint maintenant à des valeurs de confinement proches d'une de ces valeurs spécifiques  $\epsilon^*$ , telle que  $\Delta E(\epsilon^*) = 0$  et pour lesquelles on s'attend à retrouver une diffusion libre.

Sur les figures 6.11 (c) et 6.11 (d), on présente des données de simulation obtenues pour un confinement présentant une très faible barrière  $\Delta E(\epsilon)$ , et ce pour les mêmes températures que

celles présentées figures 6.11 (a) et 6.11 (b). Pour  $T = 5 \cdot 10^6$  K,  $T = 7 \cdot 10^6$  K et  $T = 2 \cdot 10^7$  K les trajectoires sont très similaires et ressemblent à celles d'une particule diffusant librement. Ceci est confirmé par les courbes de DQM qui montrent que  $\langle \Delta x_B^2(t) \rangle / (k_B T)$  ne dépend pas de la température [voir figure. 6.11 (d)]. Cependant pour la plus basse température, plusieurs sauts ont lieu durant la simulation, ce qui montre que la bulle n'est plus piégée dans un puits du potentiel périodique, à l'inverse du cas figure 6.11 (a). Le DQM de la bulle est alors intermédiaire entre celui d'une diffusion libre et d'une particule piégée et on retrouve aux temps longs un coefficient de diffusion bien plus faible que celui attendu pour la diffusion libre.

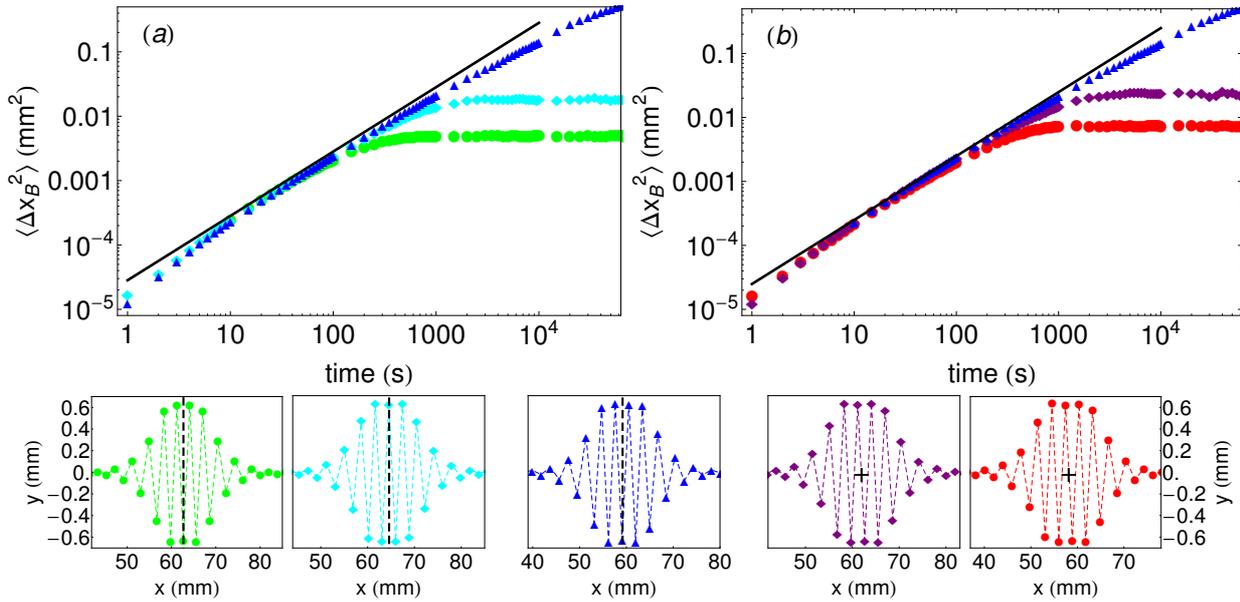


FIGURE 6.12 – Évolution du DQM de la bulle  $\langle \Delta x_B^2(t) \rangle$  (échelle Log, en  $\text{mm}^2$ ) en fonction du temps (échelle Log, en s) pour un système de  $N = 64$  particules dans une cellule de longueur  $L = 120$  mm et une température de  $T = 10^6$  K et  $\gamma = 1$   $\text{s}^{-1}$ . (a) : Pour les confinements  $\epsilon_1 = 0.12$  (points verts),  $\epsilon = 0.13$  (diamants cyan) et  $\epsilon_2 = 0.134$  (triangles bleus). (b) : Pour les confinements  $\epsilon_2 = 0.134$  (triangles bleus),  $\epsilon = 0.138$  (diamants violets) et  $\epsilon_3 = 0.145$  (points rouges). La ligne pleine noire correspond au comportement diffusif à temps long avec  $D_B = k_B T / (M_B \gamma)$ . En dessous sont représentées les configurations prises par le système minimisant l'énergie associées à chaque confinement, de gauche à droite par ordre croissant de  $\epsilon$ . Les lignes pointillées noires indiquent les plans de symétrie miroir, et les croix noires indiquent les centres de symétrie d'inversion.

Plaçons nous maintenant au voisinage d'un des zéros de  $\Delta E(\epsilon)$  [ $\epsilon = \epsilon_2$ , voir figure 6.4 (a)], en considérant des confinements compris entre  $\epsilon_1 < \epsilon < \epsilon_2$  et puis compris entre  $\epsilon_2 < \epsilon < \epsilon_3$  afin d'explorer toute l'amplitude  $\Delta E(\epsilon)$  entre un maximum ( $\epsilon_1$  ou  $\epsilon_3$ ) et un zéro ( $\epsilon_2$ ). Notons que pour cette faible variation de confinement les enveloppes des bulles sont quasi-identiques et correspondent à une même masse de la bulle  $M_B$ . Les DQM correspondant  $\langle \Delta x_B^2(t) \rangle$  sont présentés figure 6.12. Comme dans le cas précédent, pour le confinement  $\epsilon = \epsilon_2$  tel que  $\Delta E(\epsilon_2) \approx 0$  le DQM varie uniquement comme  $t$  alors que pour les autres valeurs de confinement pour lesquelles  $\Delta E(\epsilon) > 0$  le DQM est saturé. Les valeurs de saturation du DQM et les temps caractéristiques auxquels elles sont

atteintes *augmentent* lorsque  $\epsilon$  passe de  $\epsilon_1$  à  $\epsilon_2$ , ce qui est cohérent avec le fait que  $\Delta E(\epsilon) < \Delta E(\epsilon_1)$  [voir figure 6.12 (a)]. Dans la figure 6.12 (b) les valeurs de saturation du DQM et les temps auxquels elles sont atteintes *décroissent* lorsque  $\epsilon$  passe de  $\epsilon_2$  à  $\epsilon_3$ , ce qui est de nouveau en accord avec le fait que  $\Delta E(\epsilon) < \Delta E(\epsilon_3)$ . Avant saturation le DQM présente un comportement en  $D_B t$ , avec le même coefficient  $D_B = k_B T / (M_B \gamma)$  pour chaque  $\epsilon$ , ce qui confirme bien le fait que les enveloppes des bulles sont très semblables, comme le montrent les configurations en bas de la figure 6.12. On remarque également que, comme attendu, la symétrie des configurations en bulles change lorsque le confinement croise un zéro de  $\Delta E(\epsilon)$ . Les configurations présentées figure 6.12 montrent bien que pour  $\epsilon_1 < \epsilon < \epsilon_2$  elles présentent une symétrie miroir, alors que pour  $\epsilon_2 < \epsilon < \epsilon_3$  elles ont une symétrie d'inversion ponctuelle.

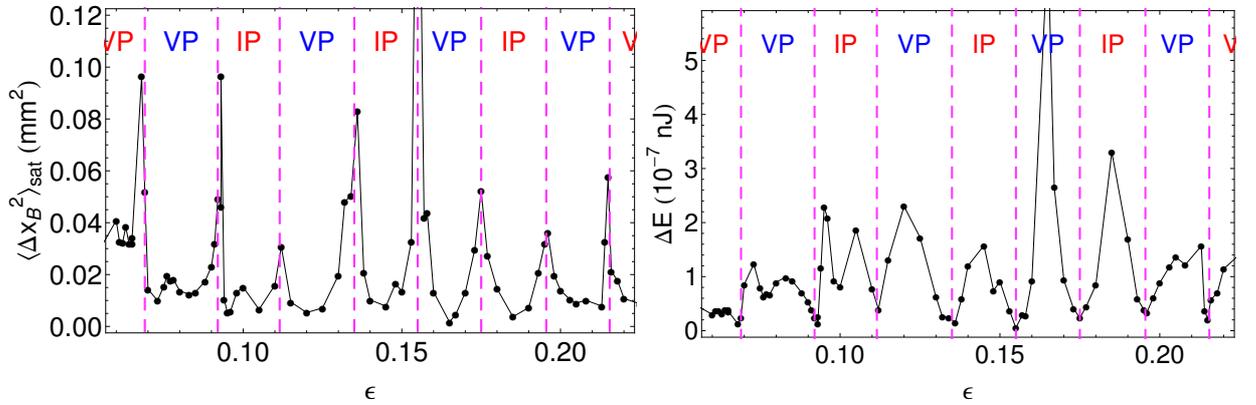


FIGURE 6.13 – (a) Évolution des valeurs de saturation des DQM  $\langle \Delta x_B^2(t) \rangle$  (en  $\text{mm}^2$ ) en fonction du confinement  $\epsilon$ , pour  $N = 64$  particules dans une cellule avec  $L = 120$  nm. (b) Évolution de l'amplitude de la barrière  $\Delta E(\epsilon)$  (en  $10^{-7}$  nJ) en fonction du confinement  $\epsilon$  (voir le texte pour la méthode de calcul). Dans les deux figures la symétrie de la configuration minimisant l'énergie, est respectivement indiquée en bleu pour les symétries par un plan vertical (VP) et en rouge pour les symétries par un point d'inversion (IP).

Cette analyse autour d'un zéro de  $\Delta E(\epsilon)$  peut être étendue pour toute la gamme de confinement présentée figure 6.4 en étudiant systématiquement les valeurs de saturation des DQM des bulles,  $\langle \Delta x_B^2 \rangle_{\text{sat}}$  et les symétries des configurations correspondantes. Les résultats sont présentés figure 6.13. On observe une série de pics de la valeur de saturation du DQM régulièrement espacés. Ces pics sont associés à des valeurs très faibles de  $\Delta E(\epsilon)$ . Dans la table 6.1 on présente les valeurs de confinement pour lesquels ces pics ont lieu à partir de la figure 6.13 et on les compare avec les zéros de  $\Delta E(\epsilon)$  prédits à partir de la figure 6.4. On observe que les deux jeux de valeurs numériques sont pratiquement identiques. De plus, le changement alternatif de symétrie de la configuration prédit dans la figure 6.4 est en effet observé comme le montre la figure 6.13.

Enfin les valeurs de  $\Delta E(\epsilon)$  peuvent être estimées à partir des valeurs de saturation des DQM des bulles. Pour une particule unique piégée dans un minimum du potentiel sinusoïdal  $E_p(\epsilon, \Delta)$  [voir équation (6.7)], la valeur de saturation s'écrit alors  $\langle \Delta x^2 \rangle_{\text{sat}} = k_B T d^2 / (4\pi^2 \Delta E)$ . Les valeurs estimées pour  $\Delta E(\epsilon)$  sont présentées figure 6.13 (b). Cette figure est en accord qualitatif avec celle attendue figure 6.4 cependant les barrières énergétiques mesurées sont deux ordres de grandeur plus élevées. Malgré ce désaccord numérique sur les hauteurs de barrière, les mouvements des bulles à

basse température sont très bien décrit comme ceux d'une particule effective de masse  $M_B$  dans un potentiel périodique extérieur.

$\epsilon$	$\epsilon_{\text{num}}$	$\delta\epsilon_{\text{num}}$
0.075	0.068	$\pm 0.003$
0.094	0.093	$\pm 0.001$
0.114	0.112	$\pm 0.003$
0.133	0.136	$\pm 0.002$
0.153	0.155	$\pm 0.002$
0.172	0.175	$\pm 0.002$
0.190	0.196	$\pm 0.002$
0.216	0.215	$\pm 0.001$

TABLE 6.1 – Colonne de gauche : zéros de  $\Delta E(\epsilon)$ , voir figure 6.4 (a). Colonne centrale : positions des pics dans les valeurs de saturation de DQM de la bulle, voir figure 6.13 (a). Colonne de droite : estimation de la barre d'erreur sur les positions des pics, déduites à partir de leurs largeurs.

## 6.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous nous sommes concentrés sur la dynamique de structures en bulles, décrites par une onde solitaire, lorsque le système est couplé à un bain thermique.

Ces bulles sont stables sur une large gamme de température.

À haute température, leur mouvement thermique présente toutes les caractéristiques de la diffusion d'une particule libre. Le coefficient de diffusion décrivant ce mouvement est donné par  $D_B = k_B T / (M_B \gamma)$ , où  $M_B$  est la masse de la bulle qui est déterminée analytiquement à partir de la forme normale.

À cause du caractère discret du système, à chaque position de l'enveloppe de la bulle le long de la chaîne de particules, caractérisée par la position de son apex, les particules adoptent une configuration spécifique. Ce changement de disposition des particules le long de l'enveloppe de la bulle induit une modulation périodique de l'énergie potentielle du système. L'amplitude de cette modulation dépend fortement du confinement transverse et tend vers zéro pour une série de valeurs régulièrement espacées de confinement.

Si cette modulation de l'énergie potentielle du système ne joue aucun rôle à haute température, nous avons montré qu'à basse température les conséquences physiques de ce potentiel étaient importantes. Lorsque l'amplitude des modulations est non nulle les bulles sont piégées à très basse température dans des minima de potentiel et leurs DQM saturent. À température intermédiaire les bulles diffusent par sauts aléatoires d'un minimum à l'autre, de telle sorte que le DQM varie comme  $t$  à temps long, et après un régime intermédiaire correspondant au piégeage temporaire des bulles. Pour les valeurs spécifiques de confinement telles que l'amplitude de la modulation s'annule, la bulle retrouve un comportement de diffusion libre même à très basse température.

Les zéros de l'amplitude de modulation mesurés à partir des simulations sont en très bon accord

---

avec les calculs d'énergie des configurations discrètes. À partir de l'analyse des variations de valeurs de saturation du DQM en fonction du confinement  $\epsilon$ , nous avons pu estimer l'amplitude de la modulation du potentiel. Sa dépendance en fonction du confinement est en accord qualitatif avec le modèle toutefois les valeurs numériques de hauteurs de barrière sont plus grandes qu'attendues.



# Chapitre 7

## Interaction entre bulles

### Sommaire

---

<b>7.1 Introduction</b>	<b>125</b>
<b>7.2 Interaction entre bulles</b>	<b>127</b>
7.2.1 Configurations Non Frustrées et Frustrées de paires de bulles	127
7.2.2 Interaction entre bulles dans le modèle continu	128
7.2.3 Modulation de l'énergie potentielle d'interaction	133
<b>7.3 Mouvements des bulles à température nulle</b>	<b>133</b>
7.3.1 Mouvement de bulles dans des systèmes-NF	133
7.3.2 Mouvement de bulles dans des systèmes-F	136
<b>7.4 Réorganisation vers une configuration d'équilibre</b>	<b>138</b>
7.4.1 Les deux chemins vers un état d'équilibre stable	138
7.4.2 Le processus de coalescence	139
7.4.3 Le processus de collapse	141
7.4.4 Configuration finale	143
<b>7.5 Conclusion</b>	<b>144</b>

---

### 7.1 Introduction

Pour des confinements intermédiaires le système présente également des configurations métastables constituées de plusieurs bulles. Lorsque le système de particules est couplé à un bain thermique, ces configurations à plusieurs bulles transitent rapidement vers des configurations plus simples d'équilibre avec une seule bulle, les bulles les plus fines disparaissant au profit des bulles les plus étendues. Au cours de ce processus de réorganisation, le système adopte le plus souvent une configuration transitoire avec deux bulles identiques présentes dans le système [voir figure 5.7]. Le but de ce chapitre est de discuter en détails l'interaction entre ces deux bulles et de décrire les processus menant à leur réorganisation vers une bulle unique.

Un grand intérêt a été porté à la formation d'ensemble de structures localisées dans le contexte général des instabilités dans les systèmes étendus [27]. Sous certaines conditions, ces structures peuvent être décrites par des solitons ce qui permet une caractérisation complète de l'interaction

entre structures localisées [43]. Cependant l'intégrabilité complète des équations aux dérivées partielles (EDP) non linéaires est rare, et le plus souvent les structures non linéaires sont décrites comme des ondes solitaires et non des solitons, de sorte qu'il est nécessaire d'utiliser des méthodes perturbatives pour calculer leur interaction [86, 45, 46, 44, 27]. De plus le lien entre les équations « microscopiques » du système (par exemple les équations de Navier-Stokes dans le contexte des structures de convection) et les EDP décrivant les structures est difficile à établir quantitativement [27]. Dans ce chapitre, nous montrerons que de notre système permet d'étudier l'interaction entre structures non linéaires à partir d'un développement direct de l'interaction « microscopique » entre particules, de façon à déduire analytiquement tous les coefficients de l'interaction explicitement.

Pour des systèmes discrets présentant une paire de bulles, deux types de systèmes doivent être considérés suivant le nombre de particules situées entre les deux bulles. Lorsque ce nombre est pair, toutes les particules entre les bulles ont la possibilité de se réorganiser en quinconce sans contrainte en se déplaçant transversalement dans une direction opposée alternativement [voir figure 7.1 (a)]. Ces systèmes seront dit *Non Frustrés* (systèmes-NF). Au contraire, lorsque le nombre de particules entre les configurations bulles est impair, les contraintes géométriques provoquent un *défait topologique* [voir la boîte noire figure 7.1 (b)] qui implique qu'au moins une particule ne peut pas prendre une position compatible avec une configuration complètement en quinconce (même modulée). Ces systèmes seront appelés *Frustrés* (systèmes-F). Cette distinction est essentielle pour analyser la dynamique de réorganisation des bulles, les forces effectives ressenties par les bulles et les processus impliqués dans la réorganisation des paires de bulles étant différents pour les systèmes-NF et les systèmes-F.

La réorganisation d'une paire de bulles vers une simple bulle peut se faire par deux mécanismes distincts. Le premier se produit seulement dans les systèmes-NF. Au cours de ce processus, les bulles se rapprochent, entrent en contact et fusionnent en une bulle unique. C'est le *processus de coalescence*. Il domine la dynamique de réorganisation vers l'équilibre dans les systèmes-NF à basse température. Dans le second mécanisme, une des deux bulles disparaît au profit de l'autre qui s'étend, les positions des deux bulles restant essentiellement inchangées au cours de ce processus. Ce processus est appelé *processus de collapse*. Il est le seul qui soit accessible aux systèmes-F, et correspond au processus dominant la dynamique de réorganisation pour les systèmes-NF à haute température.

Dans la section 7.2, on calculera l'interaction effective entre deux bulles dans le cadre du modèle continu développé chapitre 3. On utilisera une approche formelle pour calculer cette interaction, et on discutera les principaux ingrédients physiques à l'aide d'un développement plus simple de l'énergie d'interaction permettant de comprendre la différence entre systèmes-NF et systèmes-F. Les véritables mouvements de bulles en interaction obtenus par simulation seront présentés section 7.3 et comparés aux prédictions théoriques. En particulier, on mettra en avant le rôle limitant de la modulation périodique  $\Delta E$  dans l'interaction entre bulles. Enfin section 7.4, nous discuterons des processus de coalescence et de collapse plus en détails.

Ces résultats font l'objet d'un article en cours de révision, soumis au journal *Phys. Rev. E*.

## 7.2 Interaction entre bulles

### 7.2.1 Configurations Non Frustrées et Frustrées de paires de bulles

Dans le cas d'une configuration présentant une paire de bulles, il est important d'examiner la compatibilité des positions relatives des particules par rapport à chacune des bulles.

Pour mieux préciser cette idée, considérons tout d'abord une configuration schématique des deux bulles zigzag dans un système-NF. Si l'on considère que les bulles se rapprochent, chaque bulle impose un déplacement dans la même direction aux particules indexées par un nombre pair et dans la même direction mais de sens opposé à celles indexées par un nombre impair. Les particules entre les bulles peuvent donc s'écarter de l'axe de confinement et prendre des positions satisfaisant l'ordre imposé par une configuration zigzag modulée [voir figure 7.1 (a)]. À l'inverse si on considère deux bulles dans un système-F et si de la même manière on rapproche les bulles l'une de l'autre, chacune d'elles impose à chaque particule un déplacement dans une direction opposée. Par conséquent, la particule centrale située entre les deux bulles reste le long l'axe de la cellule [voir la boîte noire figure 7.1 (b)]. Cette particule apparaît ici comme un *défaut topologique* qui interdit alors la réorganisation en un seul zigzag modulé. Il est important de remarquer que dans une cellule cyclique avec un nombre pair de particules, il existe nécessairement deux de ces défauts topologiques, l'un dans chaque domaine séparant les bulles les unes des autres. Cet effet de frustration est une conséquence directe du caractère discret du système, dont nous allons voir qu'il peut être incorporé de manière *ad hoc* dans la description continue de l'interaction.

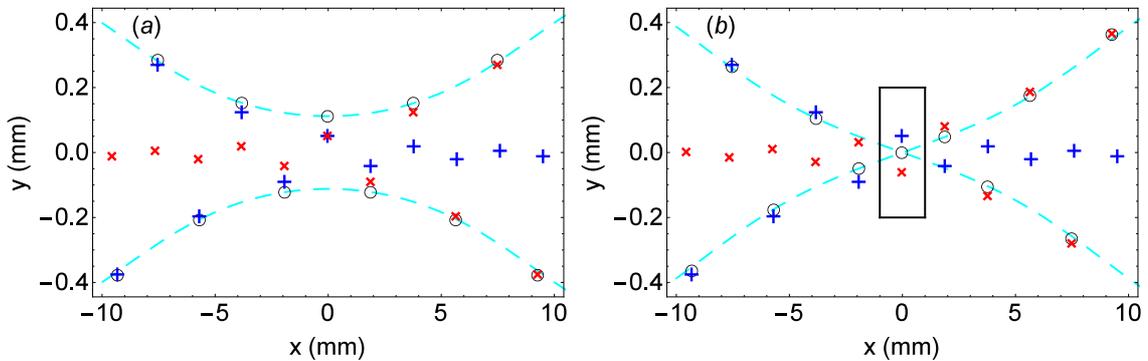


FIGURE 7.1 – Représentation schématique des configurations des particules pour un système-NF en (a) et pour un système-F en (b). Dans les deux schémas les signes + bleus (respectivement signes × rouges) représentent les positions virtuelles des particules en présence uniquement de la bulle de gauche (respectivement de droite), les cercles ouverts noirs correspondent aux positions réelles des particules en présence des deux bulles et les lignes en tirets cyans correspondent au déplacement analytique transverse présenté équation (7.1). Dans la figure (b) la boîte noire met en avant la position du défaut topologique.

## 7.2.2 Interaction entre bulles dans le modèle continu

Nous allons déterminer dans cette sous-section la force d'interaction entre bulles à partir de leur description en ondes solitaires.

On donnera tout d'abord [voir sous-section 7.2.2.1] une description du mécanisme physique responsable de la force d'interaction entre bulles. Pour cela nous déduirons la force d'interaction entre bulles à partir de l'énergie potentielle du système calculée en superposant simplement l'influence des deux bulles.

Nous montrerons ensuite [voir sous-section 7.2.2.2] que les expressions obtenues pour la force d'interaction entre bulle sont retrouvée avec un calcul rigoureux de la force entre deux bulles, en utilisant le formalisme général développé par Elphick, Meron and Spiegel [46].

### 7.2.2.1 Mécanisme physique sous-jacent à l'interaction entre bulles

Afin de prendre en compte la différence entre les configurations zigzag et zagzig des bulles, on écrit simplement le déplacement transverse  $h(i)$  de la  $i^{\text{ème}}$  particule comme :

$$h(i) = (-1)^i \left[ H_L \left( i + \frac{D}{2} \right) \pm H_R \left( i - \frac{D}{2} \right) \right], \quad (7.1)$$

où le signe  $+$  correspond aux systèmes-NF et le signe  $-$  correspond aux systèmes-F. Puisque le champ  $\phi$  dépend seulement du carré du déplacement transverse [voir équation (3.21)], on pose :

$$\phi(i) = \Phi_L \left( i + \frac{D}{2} \right) + \Phi_R \left( i - \frac{D}{2} \right), \quad (7.2)$$

à la fois pour les systèmes-NF et les systèmes-F. Cette description pour les systèmes de paires de bulles correspond aux configurations présentées figure 7.1 avec les configurations des bulles et les enveloppes correspondantes calculées.

Dans cette description, on estime la densité d'énergie potentielle du système comme la superposition des déplacements associés aux deux bulles et en négligeant tous les termes plus petits que le produit  $H_L H_R$ , qui sont exponentiellement faibles pour une grande distance  $D$  [voir équation (5.11)]. On obtient alors :

$$e_P = e_P^L + e_P^R \mp \beta_{ZZ} \epsilon H_L H_R \pm a_3 (2 - \alpha) (H_L^3 H_R + H_L H_R^3) \pm H_L' H_R' \pm a_5 (H_L^5 H_R + H_L H_R^5), \quad (7.3)$$

où les symboles primes indiquent les dérivées en  $x$ , et où on a utilisé l'équation (3.21) qui donne  $\Phi_{L,R}' = -\alpha H_{L,R}^2$ , et  $e_P^{L,R}$  désigne la densité d'énergie potentielle d'une bulle unique  $\{L, R\}$ , qui est déduite de l'équation (3.17). L'énergie potentielle de la configuration avec deux bulles est alors obtenue en intégrant selon l'axe  $x$ , et donne :

$$E_P^{\text{int}} = E_P^L + E_P^R \pm \int_{-\infty}^{\infty} [-\beta_{ZZ} \epsilon H_L + a_3 (2 - \alpha) H_L^3 + a_5 H_L^5 - H_L''] H_R dx \pm \int_{-\infty}^{\infty} [a_3 (2 - \alpha) H_R^3 + a_5 H_R^5] H_L dx, \quad (7.4)$$

Puisque  $H_L$  est une solution de la forme présentée équation (5.9) de l'équation (3.20), il est facile de voir que la première intégrale s'annule. Pour l'intégrale restante, on utilise l'approximation

consistant à remplacer  $H_L$  par son expression asymptotique  $H_L \sim \tilde{H} \exp[-\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon} (x + D/2)]$ . L'énergie potentielle s'écrit maintenant :

$$E_P^{\text{int}} = E_P^L + E_P^R \pm \frac{\tilde{H}}{\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}} e^{-\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}D} \int_{-\infty}^{\infty} [a_3(2 - \alpha)H(w)^3 + a_5H(w)^5] e^{-w} dw, \quad (7.5)$$

avec  $w = \sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}(x - D/2)$ . Ce changement de variable montre clairement que l'intégrale restante est indépendante de  $D$ . À cause de l'invariance par translation du système, l'énergie potentielle de chaque bulle est égale,  $E_P^L = E_P^R$ , et ne dépend pas de la distance  $D$  non plus.

Lorsque l'intégration est réalisée en utilisant l'équation (5.7), on obtient l'énergie potentielle d'interaction entre les deux bulles comme :

$$E_P^{\text{int}}(D) = \mp 8\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon} \frac{h_-^2}{1 - \chi^2} e^{-\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}D}. \quad (7.6)$$

Puisque l'énergie décroît exponentiellement avec la distance  $D$ , il est naturel de choisir la constante d'intégration telle que cette énergie s'annule lorsque les bulles sont infiniment éloignées. On trouve alors l'expression de la force exercée par la bulle gauche sur la droite comme :

$$F(D) = -\frac{dE_P^{\text{int}}}{dD} = \mp \mathcal{F}_0 e^{-\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}D} \quad \text{avec} \quad \mathcal{F}_0 \equiv -8\beta_{ZZ}\epsilon \frac{h_-^2}{1 - \chi^2} \geq 0. \quad (7.7)$$

Cette expression de la force montre que l'intensité de l'interaction entre bulles dépend uniquement de leur distance.

Puisque les bulles ne sont visibles que pour des valeurs négatives de  $\epsilon$ , cette équation correspond à une force d'interaction attractive entre les bulles pour les systèmes-NF, et à une force d'interaction répulsive pour les systèmes-F. Nous allons voir dans la suite que ce résultat peut être obtenu de manière formelle comme la condition de solvabilité d'un développement perturbatif de la superposition des ondes solitaires décrivant les bulles.

À partir de ces expressions de la force d'interaction, on obtient l'équation d'évolution de la distance entre les deux bulles,  $D(t)$  :

$$M_B \frac{d^2 D}{dt^2} = \mp 2\mathcal{F}_0 e^{-\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}D} \quad \text{avec} \quad \mathcal{F}_0 \equiv -8\beta_{ZZ}\epsilon \frac{h_-^2}{1 - \chi^2} \geq 0. \quad (7.8)$$

Pour une interaction attractive, en considérant que les conditions initiales sont telles que  $D(t=0) = D_0$  et  $dD/dt|_{(t=0)} = 0$ , on trouve après intégration que :

$$D(t) = D_0 + \frac{2}{\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}} \log \left[ \cos \left( \frac{\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}\mathcal{F}_0}{M_B e^{\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}D_0}} \right)^{1/2} t \right]. \quad (7.9)$$

Les bulles fusionnent lorsque  $D(t_{\text{max}}) = 0$ , ce qui arrive au bout d'un temps  $t_{\text{max}}$  qui s'écrit :

$$t_{\text{max}} = \left( \frac{M_B \exp(\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}D_0)}{\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}\mathcal{F}_0} \right)^{1/2} \arccos \left[ \exp \left( -\frac{\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}D_0}{2} \right) \right]. \quad (7.10)$$

Ce résultat ne peut être qu'approximatif, car le calcul réalisé ici suppose que les bulles soient suffisamment éloignées, ce qui est une approximation de moins en moins bonne avec le rapprochement des bulles.

### 7.2.2.2 Dérivation rigoureuse de l'interaction entre structures localisées

Dans cette partie, on calcule perturbativement l'interaction entre deux bulles en utilisant la méthode générale développée par Elphick, Meron et Spiegel [46] (noté par la suite EMS). Une excitation solitaire d'un système non linéaire d'équations aux dérivées partielles à une dimension d'espace et une dimension temporelle est nécessairement la solution d'un système dynamique analogue. L'excitation solitaire correspond alors à une solution de période infinie de ce système dynamique et par conséquent à une orbite homocline [46, 70] qui connecte un point fixe à lui-même [voir figure 5.9]. Une onde solitaire décroît alors de manière générale exponentiellement à l'infini. Pour notre système le lien entre la solution explicite en bulle équation (5.9) et un système dynamique analogue a été montré en détail dans la section 5.3.1, et l'équation (5.11) montre clairement le comportement asymptotique exponentiel évoqué ici.

Une paire d'ondes solitaires ne constitue pas une solution exacte du système Lagrangien, et il est nécessaire de prendre en compte les interactions non linéaires entre les deux structures. Cependant, si celles-ci sont séparées par une grande distance notée  $D_0$  ( $D_0 \gg 1/\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}$ ), lorsque l'amplitude d'une bulle est maximum l'amplitude de la seconde est exponentiellement faible. C'est pourquoi, EMS [46] suggèrent un calcul perturbatif de l'interaction entre structures, en prenant  $\eta \equiv \exp(-\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon} D_0)$  comme petit paramètre.

Afin d'adapter la méthode de EMS à notre problème, on considère une bulle gauche  $\{\phi_L, H_L\}$ , centrée en  $-D_0/2$  et une bulle droite  $\{\phi_R, H_R\}$ , centrée en  $+D_0/2$ , avec l'origine de l'axe  $x$  placé au milieu des bulles. Leur superposition va être différente pour un système-NF ou un système-F. Comme nous venons de le voir le signe du déplacement transverse doit alterner strictement pour un système-NF (deux bulles en zigzag) alors qu'un défaut topologique doit apparaître pour deux bulles dans un système-F (une bulle en zigzag (+ bleus) et une bulle en zagzig ( $\times$  rouges), voir figure 7.1 (b)). La bulle en zagzig peut donc être décrite par des déplacements transverses de signes opposés par rapport à la bulle en zigzag.

On cherche donc des solutions sous la forme :

$$\begin{cases} h = H(x + \frac{D_0}{2} - \psi_L(\tau)) \pm H(x - \frac{D_0}{2} - \psi_R(\tau)) + \eta R_h(x, \tau) \equiv H_L \pm H_R + \eta R_h, \\ \phi = \Phi(x + \frac{D_0}{2} - \psi_L(\tau)) + \Phi(x - \frac{D_0}{2} - \psi_R(\tau)) + \eta R_\phi(x, \tau) \equiv \Phi_L + \Phi_R + \eta R_\phi. \end{cases} \quad (7.11)$$

Ici  $\{H_i(x), \Phi_i(x)\}$ , sont des solutions stationnaires des équations (3.19) et (3.20), de la forme présentée équation (5.9), où l'indice  $i \in \{L, R\}$  (correspond respectivement à gauche et droite), tel que :

$$\mathcal{L} \begin{pmatrix} H_i \\ \Phi_i \end{pmatrix} + \begin{pmatrix} \mathcal{N}_h(H_i, \Phi_i) \\ \mathcal{N}_\phi(H_i, \Phi_i) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (7.12)$$

avec la définition évidente de l'opérateur linéaire  $\mathcal{L}$  et des parties non linéaires  $\mathcal{N}_h(H_i, \Phi_i)$  et  $\mathcal{N}_\phi(H_i, \Phi_i)$  à partir de la densité de Lagrangien équation (3.17).

L'origine étant prise au milieu des deux bulles, qui sont initialement séparées d'une distance  $D_0$ , et puisque la superposition des deux bulles ne peut être une solution exacte, on autorise un faible mouvement des deux bulles aux travers des fonctions  $\psi_i(\tau)$ . On inclut également les deux termes restant  $\eta R_h$  et  $\eta R_\phi$ . L'échelle de temps lente est choisie comme  $\tau = \eta^{1/2}t$ . EMS [46] ont réalisé un

choix d'échelle de temps différent à cause du caractère sous-amorti de leur modèle, ce qui n'est pas le cas ici comme le montrent les équations (3.19) et (3.20).

Ensuite l'ansatz présenté équation (7.11) est injecté dans le système d'équations (3.19) et (3.20). Le développement des termes dérivés en temps donne :

$$\eta^2 \frac{\partial^2 R_h}{\partial \tau^2} + \eta \left( H_L'' \dot{\psi}_L^2 - H_L' \ddot{\psi}_L \pm H_R'' \dot{\psi}_R^2 \mp H_R' \ddot{\psi}_R \right), \quad (7.13)$$

et

$$\eta^2 \frac{\partial^2 R_\phi}{\partial \tau^2} + \eta \left( \Phi_L'' \dot{\psi}_L^2 - \Phi_L' \ddot{\psi}_L + \Phi_R'' \dot{\psi}_R^2 - \Phi_R' \ddot{\psi}_R \right). \quad (7.14)$$

Puisque  $H_i$  et  $\Phi_i$  sont des fonctions avec seulement un argument, pour simplifier les notations on écrit les dérivées par des symboles primes. Et puisque  $\psi_i$  est une fonction de  $\tau$ , on écrit ses dérivées avec des points.

L'étape suivante du développement consiste à développer les termes non linéaires en puissance de  $\eta$ . Pour cela on utilise, comme le proposent EMS [46], ce qui est appelé la « *Superposed Pulse Approximation* ». L'étape essentielle de cette approximation est de remarquer qu'à la position  $x = -D_0/2$  (respectivement.  $x = +D_0/2$ ) la valeur de  $H_R$  (respectivement  $H_L$ ) est d'ordre  $\mathcal{O}(\eta)$  et que les fonctions  $\mathcal{N}_h$  et  $\mathcal{N}_\phi$  sont des sommes de monômes en  $h$ ,  $\phi$  et leurs dérivées. Pour réaliser le développement de manière rigoureuse, il faut considérer que pour  $i \neq j$  et un exposant donné  $a$ ,  $H_i^a H_j^a = \mathcal{O}(\eta^a)$  et  $H_i^a \Phi_j^{a/2} = \mathcal{O}(\eta^a)$  car  $\Phi_j' = -\alpha H_j^2$ . Par conséquent, en prenant en compte que  $\{H_i(x), \Phi_i(x)\}$  est solution de l'équation (5.9), on trouve à l'ordre dominant :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} \begin{pmatrix} R_h \\ R_\phi \end{pmatrix} &= - \begin{pmatrix} H_L'' \dot{\psi}_L^2 - H_L' \ddot{\psi}_L \pm H_R'' \dot{\psi}_R^2 \mp H_R' \ddot{\psi}_R \\ \Phi_L'' \dot{\psi}_L^2 - \Phi_L' \ddot{\psi}_L + \Phi_R'' \dot{\psi}_R^2 - \Phi_R' \ddot{\psi}_R \end{pmatrix} + \\ &+ \frac{1}{\eta} \begin{pmatrix} a_3 [6(\pm H_L^2 H_R + H_R^2 H_L) + H_L \Phi_R' \pm H_R \Phi_L'] - 5a_5 (\pm H_L^4 H_R + H_R^4 H_L) \\ \pm a_3 (H_L H_R' + H_R H_L') \end{pmatrix} + \mathcal{O}(\eta), \end{aligned} \quad (7.15)$$

où l'opérateur linéaire  $\mathcal{H}$  est :

$$\mathcal{H} = -\mathcal{L} + \begin{pmatrix} 6a_3 (H_L^2 + H_R^2) + a_3 (\Phi_L' + \Phi_R') + 5a_5 (H_L^4 + H_R^4) & a_3 (H_L \pm H_R) \frac{\partial}{\partial x} \\ -a_3 [H_L' \pm H_R' + (H_L \pm H_R) \frac{\partial}{\partial x}] & 0 \end{pmatrix} \quad (7.16)$$

Afin d'être cohérent, les termes de correction  $\eta(R_h, R_\phi)$  dans l'équation (7.11) doivent être petits, de telle sorte que les champs  $R_i$  doivent être finis partout. Cette contrainte décrit la condition de solvabilité pour la méthode perturbative à partir du théorème de Fredholm [81], le membre de droite de l'équation (7.15) doit être orthogonal au noyau de l'adjoint de l'opérateur  $\mathcal{H}^\dagger$ , qui est défini à l'aide du produit interne habituel pour des fonctions vectorielles à support fini, par la relation :

$$\int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{P} \cdot (\mathcal{H} \mathbf{R}) dx = \int_{-\infty}^{\infty} (\mathcal{H}^\dagger \mathbf{P}) \cdot \mathbf{R} dx. \quad (7.17)$$

De plus, le développement perturbatif nécessite seulement que l'orthogonalité soit valable à l'ordre  $\mathcal{O}(\eta)$ . On peut alors considérer les opérateurs linéaires suivant :

$$\mathcal{H}_L = -\mathcal{L} + \begin{pmatrix} 6a_3 H_L^2 + a_3 \Phi_L' + 5a_5 H_L^4 & a_3 H_L \frac{\partial}{\partial x} \\ -a_3 (H_L' + H_L \frac{\partial}{\partial x}) & 0 \end{pmatrix}, \quad (7.18)$$

$$\mathcal{H}_R = -\mathcal{L} + \begin{pmatrix} 6a_3 H_R^2 + a_3 \Phi_R' + 5a_5 H_R^4 & \pm a_3 H_R \frac{\partial}{\partial x} \\ \mp a_3 (H_R' + H_R \frac{\partial}{\partial x}) & 0 \end{pmatrix} \quad (7.19)$$

L'intérêt d'introduire ces deux opérateurs est double. D'une part, en intégrant par parties, et en utilisant les conditions aux bords  $H_i(\pm\infty) = 0$  et  $\Phi'_i(\pm\infty) = 0$ , on peut vérifier que ces opérateurs sont auto-adjoints. Par ailleurs, à cause de l'invariance par translation des équations (3.19) et (3.20) sous-jacentes, on sait que le vecteur des fonctions  $(H'_i, \Phi'_i)$  est un vecteur propre du noyau de  $\mathcal{H}_i$ , ce qui peut être vérifié en prenant la dérivée en  $x$  de l'équation (7.12). On connaît donc le noyau de leur adjoint, ce qui n'est pas le cas de l'opérateur  $\mathcal{H}$ . Mais cela suffit pour nos calculs, car lorsque  $\mathcal{H}^\dagger$  est appliqué au noyau de  $\mathcal{H}_L$  et  $\mathcal{H}_R$  il est facile de voir que le résultat est d'ordre  $\eta$ .

La cohérence de l'ansatz équation (7.11) est alors assurée si l'on choisit les fonctions  $\psi_L$  et  $\psi_R$  de manière à ce que le produit interne du membre de droite de l'équation (7.15) avec les noyaux de  $\mathcal{H}_L$  et  $\mathcal{H}_R$  soient tous les deux d'ordre  $\mathcal{O}(\eta)$ . Pour être plus spécifique, on considère le produit interne avec le noyau  $(H'_L, \Phi'_L)$  de  $\mathcal{H}_L$ . Les termes qui impliquent  $\psi_R$  sont au moins d'ordre  $\mathcal{O}(\eta)$  et peuvent être abandonnés. Ensuite les termes  $H'_L H''_H$  et  $\Phi'_L \Phi''_L$  sont des dérivées exactes, et ne contribuent donc pas à l'intégrale à cause des conditions aux bords. Enfin en utilisant la relation  $\Phi'_L = -\alpha H'^2_L$ , et en intégrant par partie, on peut écrire l'équation résultante comme :

$$\left[ \int_{-\infty}^{\infty} (H'^2_L + \Phi'^2_L) dx \right] \ddot{\psi}_L = M_B \ddot{\psi}_L = \pm \frac{a_3(\alpha - 2)}{\eta} \int_{-\infty}^{\infty} H'^3_L H'_R dx \mp \frac{a_5}{\eta} \int_{-\infty}^{\infty} H'^5_L H'_R dx, \quad (7.20)$$

où on a identifié la masse effective de la bulle à l'aide de l'équation (6.3).

Pour calculer les intégrales restantes, on suit toujours EMS [46]. En remarquant que l'influence de la bulle gauche  $H_L$  ne prend des valeurs significatives que pour  $x \approx -D_0/2$ , on peut remplacer  $H'_R$  par sa valeur asymptotique pour  $x \ll D_0/2$ . Alors, en incluant les arguments des fonctions, on trouve :

$$\begin{aligned} \frac{1}{\eta} \int_{-\infty}^{\infty} H'^n_L H'_R dx &= \frac{1}{\eta} \int_{-\infty}^{\infty} H \left( x + \frac{D_0}{2} - \psi_L \right)^n \tilde{H} \sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon} e^{\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}(x - D_0/2 - \psi_R)} dx + \mathcal{O}(\eta) \\ &= \tilde{H} e^{\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}(\psi_L - \psi_R)} \int_{-\infty}^{\infty} H(w)^n e^w dw, \end{aligned} \quad (7.21)$$

où on a simplifié par  $\eta = e^{-D_0\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}}$  et où on a posé  $w \equiv \sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}(x + D_0/2 - \psi_L)$ . À partir des expressions connues équation (5.9) de  $H(w)$ , on obtient  $M_B \ddot{\psi}_L = \pm \mathcal{F}_0 e^{-\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}(\psi_R - \psi_L)}$  où  $\mathcal{F}_0$  a été introduit équation (7.7). Le produit interne du membre de droite de l'équation (7.15) avec le noyau de  $\mathcal{H}_R$  donne de manière similaire l'équation,  $M_B \ddot{\psi}_R = \mp \mathcal{F}_0 e^{-\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}(\psi_R - \psi_L)}$ .

À partir de ces deux résultats, on déduit l'évolution temporelle de la distance  $D$  entre les deux bulles, qui s'écrit  $D = D_0 + \psi_R - \psi_L$ . L'échelle de temps physique  $t$  est telle que  $d^2 D/dt^2 = \eta \ddot{D}$ , avec  $\eta = \exp(-\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}D_0)$ , et on trouve alors :

$$M_B \frac{d^2 D}{dt^2} = \mp 2\mathcal{F}_0 e^{-\sqrt{-\beta_{ZZ}\epsilon}D} \quad \text{avec} \quad \mathcal{F}_0 \equiv -8\beta_{ZZ}\epsilon \frac{h^2}{1 - \chi^2} \geq 0. \quad (7.22)$$

On retrouve avec cette équation l'expression obtenue précédemment pour l'évolution temporelle de la distance entre les bulles [voir équation (7.8)].

### 7.2.3 Modulation de l'énergie potentielle d'interaction

Un potentiel additionnel doit être ajouté à ce potentiel d'interaction entre bulles  $E_P^{\text{int}}(D)$ . En effet comme pour le déplacement d'une seule bulle, la réorganisation des particules au cours du déplacement de l'onde solitaire le long de l'axe de la cellule induit une faible modulation périodique de l'énergie potentielle du système. Cette modulation est très bien décrite par une fonction sinusoïdale d'amplitude  $\Delta E(\epsilon)$  [voir chapitre 6] et de période 2 (puisque  $d$  est pris comme unité de distance) et l'amplitude de modulation est doublée. L'énergie potentielle complète s'écrit donc :

$$E_P(D, \epsilon) = E_P^{\text{int}}(D) + 2\Delta E(\epsilon) \sin \pi D. \quad (7.23)$$

Cette énergie est tracée figure 7.2. À courte distance, l'énergie potentielle est complètement dominée par l'interaction entre bulles, mais celle-ci décroissant exponentiellement, la modulation du potentiel liée au caractère discret devient dominante à grandes distances comme le montre l'existence de minima locaux d'énergie [voir insert figure 7.2].

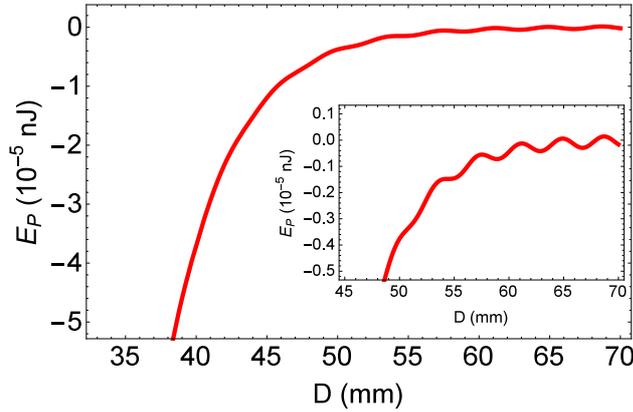


FIGURE 7.2 – Évolution de l'énergie potentielle d'interaction modulée [en  $10^{-5}$  nJ; voir équation (7.23)] en fonction de la distance entre les bulles (en mm). L'insert correspond à un zoom sur le comportement à grande distance qui présente les minima locaux de l'énergie.

## 7.3 Mouvements des bulles à température nulle

Dans cette section, nous allons discuter les mouvements déterministes d'une paire de bulles. On compare l'analyse théorique présentée à des simulations de dynamique moléculaire réalisées à température nulle. Les conditions initiales considérées correspondent à des configurations présentant une paire de bulles éloignées d'une distance  $D_0$ . Les détails concernant la préparation minutieuse des conditions initiales présentant des paires de bulles sont présentés en annexe A.6.

Puisque les forces d'interaction ont des signes opposés entre les systèmes-NF et les systèmes-F, on discutera successivement ces deux types de système.

### 7.3.1 Mouvement de bulles dans des systèmes-NF

On considère un système-NF de deux bulles à température nulle et leur mouvement sans dissipation. Dès que la distance initiale  $D_0$  entre les bulles est telle que  $d|(dE_P^{\text{int}}/dx)_{D_0}| > \Delta E(\epsilon)$ ,

il n'y a plus de minima locaux d'énergie et l'interaction entre les deux bulles est attractive. On présente dans la colonne de gauche de la figure 7.3 plusieurs instantanés d'un système-NF pris à différents temps. Ces trois instantanés mettent en évidence l'interaction attractive entre les bulles, et le commencement de la fusion entre les deux bulles<sup>1</sup>. On compare aussi ces structures à l'ansatz présenté équation (7.1). On voit que cette approximation est en très bon accord avec l'enveloppe des bulles lorsque celles-ci sont éloignées, mais on remarque que l'accord se détériore au cours du processus de fusion.

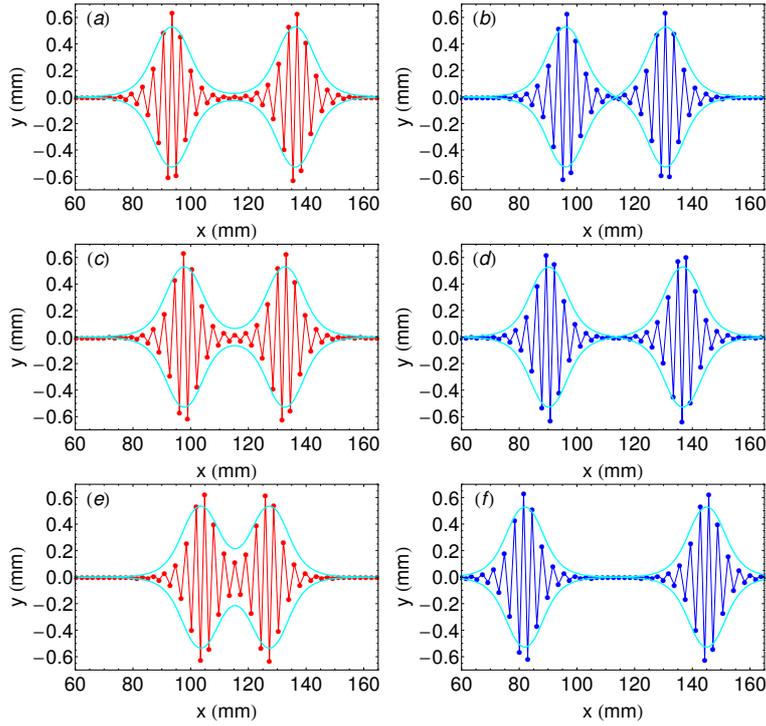


FIGURE 7.3 – Images instantanées des configurations prises par les particules (les deux axes en mm) pour un système-NF (à gauche) et pour un système-F (à droite). Pour le système-NF, les configurations sont présentées aux temps 0.0 s (a), 9.0 s (c) and 10.8 s (e). Pour le système-F les configurations sont présentées aux temps 0.0 s (b), 5.0 s (d) and 10.0 s (f). Dans les deux systèmes, il y a  $N = 128$  particules (pour une longueur  $L = 240$  mm) et le confinement est  $\epsilon = 0.05$ .

Les trajectoires correspondantes des bulles sont présentées figure 7.4. Les trajectoires des deux bulles sont bien symétriques par rapport à la position centrale entre les deux bulles, et elles sont de plus en plus accélérées l'une vers l'autre par la force attractive. Ces observations sont en accord avec les prédictions [voir équation (7.7)] d'une force attractive qui ne dépend que de la distance entre bulles et qui décroît rapidement avec l'augmentation de la distance.

Lorsque  $d | (dE_P^{\text{int}}/dx)_{D_0} | < \Delta E(\epsilon)$ , ce qui arrive lorsque la distance  $D_0$  est suffisamment grande, l'augmentation locale de l'énergie potentielle du système liée à la réorganisation de particules n'est plus compensée par le gain d'énergie associé à la force d'interaction attractive, de telle sorte qu'il est énergétiquement plus favorable que les bulles restent immobiles. Les bulles sont piégées et oscillent

1. Des animations sur l'interaction entre bulles et leurs mises en mouvement pour les systèmes-NF et les systèmes-F sont disponibles sur le site internet [1].

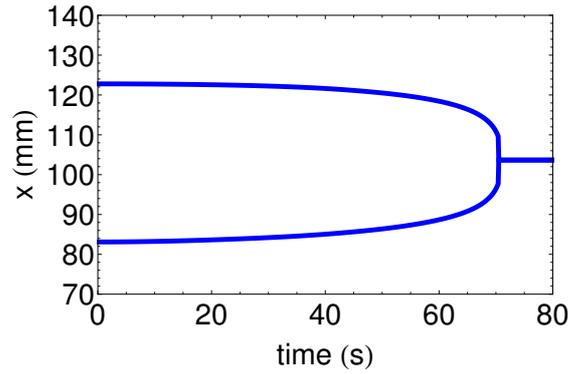


FIGURE 7.4 – Évolution des positions des deux bulles (en mm) en fonction du temps (en s) pour un système-NF de  $N = 128$  particules, un confinement  $\epsilon = 0.05$  et avec deux bulles initialement éloignées d'une distance  $D_0 = 39.7$  mm.

autour de la position du minimum local du potentiel modulé.

Le rôle joué par la modulation de l'énergie potentielle sur les mouvements des bulles est parfaitement illustré si on compare les trajectoires observées en simulation par rapport à celles calculées théoriquement pour les mêmes conditions initiales mais en considérant uniquement le potentiel d'interaction attractif. Les trajectoires correspondantes sont présentées figure 7.5. Puisqu'il n'existe aucune distance limite dans le modèle continu au delà de laquelle le mouvement attractif des bulles est interdit, les bulles des systèmes-NF sont attirées quel que soit leur éloignement initial. Pour chaque condition initiale, les trajectoires semblent comparables. En particulier les décroissances finales de  $D(t)$  sont indépendantes de la distance initiale entre les bulles, ce qui est cohérent avec une accélération dépendant uniquement de  $D$  et non de la vitesse acquise, en accord avec l'équation (7.7) de  $D(t)$ . Cependant les dynamiques décrites par le modèle continu sont toujours plus rapides que celles observées en simulation. Le temps théorique de fusion est toujours sous estimé, le désaccord entre les deux augmentant avec la distance initiale entre les bulles. Ces différences sont dues à la modulation de l'énergie.

Afin de mieux comprendre l'influence de la distance initiale des bulles et de l'amplitude  $\Delta E(\epsilon)$  sur leur dynamique nous avons simulé le mouvement relatif de deux bulles pour quatre distances  $D_0$  initiales différentes, et ce pour deux valeurs différentes du confinement. L'ensemble des résultats est présenté figure 7.5.

Pour les trois premières figures 7.5 (a), (b) et (c),  $\Delta E(\epsilon)$  est tel qu'aucun piégeage n'existe. Les mouvements des bulles présentent donc la même phénoménologie, avec une très forte force d'attraction à courte distance menant à la fusion des bulles. La durée du déplacement des bulles augmente très rapidement avec la distance initiale entre bulles  $D_0$ . Ceci est cohérent avec le résultat présenté équation (7.10) qui prédit que le temps de mise en contact des bulles dépend exponentiellement de la distance initiale entre bulles.

On observe également que pour la même distance  $D_0$  ce temps de mise en contact augmente lorsque l'amplitude  $\Delta E(\epsilon)$  de la modulation périodique augmente. L'influence la plus remarquable de la modulation du potentiel est présentée figure 7.5 (d). Pour la même distance initiale  $D_0$ , lorsque  $\Delta E(\epsilon)$  est important (ici  $\Delta E(\epsilon_1) = 7.9 \cdot 10^{-10}$  nJ), les bulles sont simplement piégées dans leur puits

local de potentiel et elles restent indéfiniment autour de leurs positions initiales. Au contraire, pour une amplitude beaucoup plus faible de  $\Delta E(\epsilon)$  (ici  $\Delta E(\epsilon_2) = 1.0 \cdot 10^{-10}$  nJ) les bulles restent attirées l'une vers l'autre et se rapprochent jusqu'à rentrer en contact pour amorcer leur fusion.

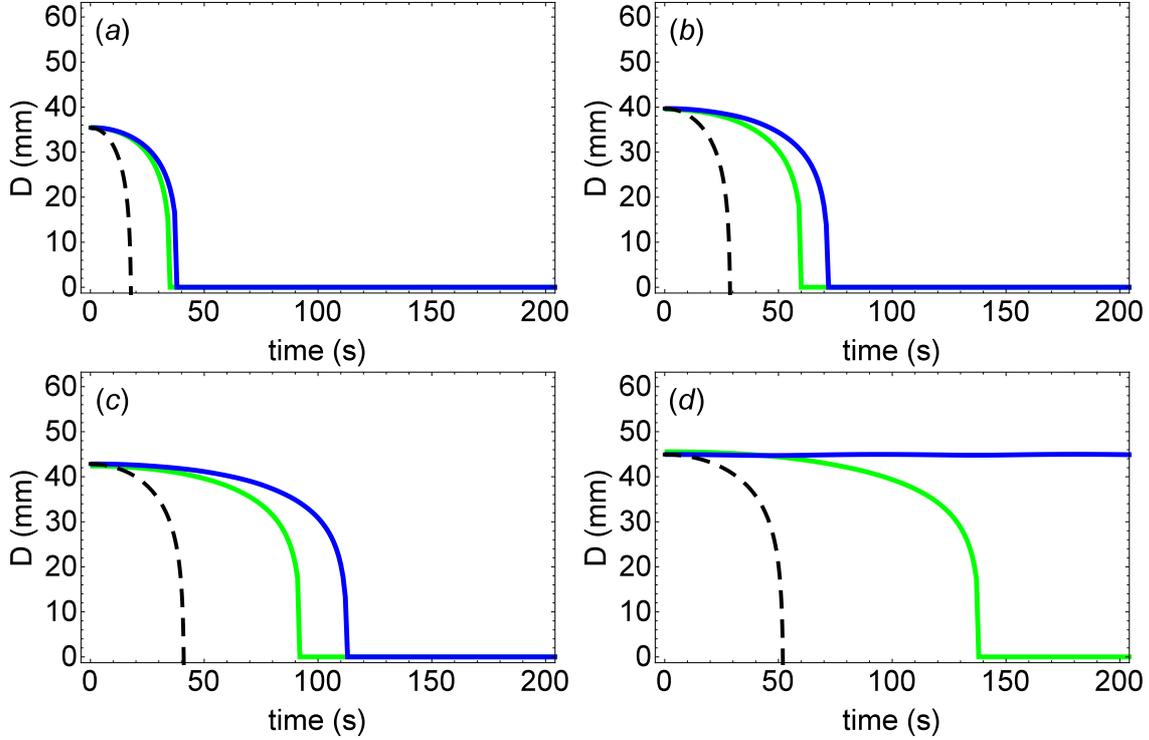


FIGURE 7.5 – Évolution de la distance  $D(t)$  (en mm) entre une paire de bulles en fonction du temps  $t$  (en s), pour un système-NF de  $N = 128$  particules. Ligne pleine bleue : pour un confinement  $\epsilon_1 = 0.085$  et  $\Delta E(\epsilon_1) = 7.9 \cdot 10^{-10}$  nJ. Ligne pleine verte : pour un confinement  $\epsilon_2 = 0.093$  et  $\Delta E(\epsilon_2) = 1.0 \cdot 10^{-10}$  nJ. Ligne en tirets noirs : solution analytique, équation (7.9), avec une énergie potentielle périodique d'amplitude  $\Delta E(\epsilon) = 0$ .

Plus quantitativement, de ces trajectoires des bulles on peut remonter à l'accélération des bulles. L'évolution d'une telle accélération est présentée figure 7.6. Sur l'évolution en échelle Logarithmique-Linéaire [voir figure 7.6 (b)], on observe clairement une décroissance exponentielle de l'accélération avec la distance entre bulles, en accord avec l'expression théorique présentée équation (7.8).

On peut déterminer l'évolution de l'énergie potentielle d'une paire de bulles [voir équation (7.23)] en fonction de leur distance directement à partir de ces simulations. La connaissance des positions instantanées des particules nous permet en effet de calculer facilement l'énergie du système à partir de l'énergie d'interaction entre particules et de l'énergie de confinement. La figure 7.7 montre l'évolution de cette énergie en fonction de la distance  $D$  lorsque les deux bulles du système-NF se rapprochent. À courte distance, cette énergie décroît de manière monotone avec la distance.

### 7.3.2 Mouvement de bulles dans des systèmes-F

L'analyse théorique présentée section 7.2.2 prédit une différence remarquable entre systèmes-NF et systèmes-F. En effet, alors que l'interaction entre bulles dans un système-NF est attractive, celle

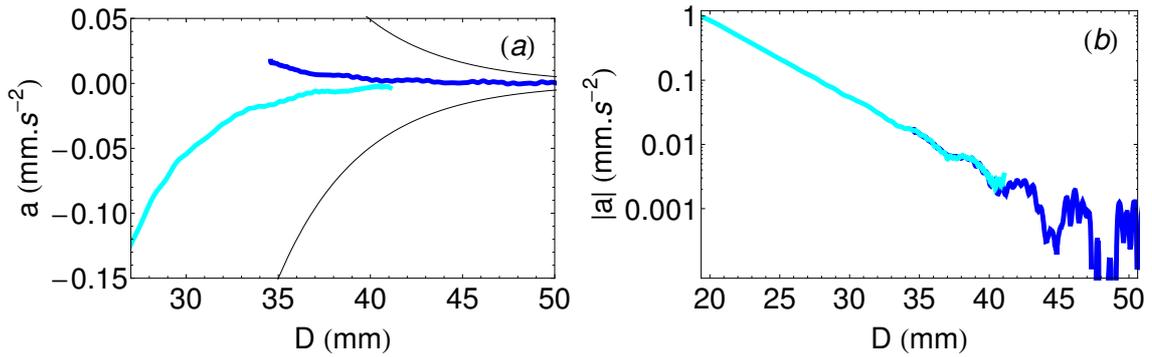


FIGURE 7.6 – Évolution de l'accélération de la distance entre les deux bulles (en  $\text{mm.s}^{-2}$ ) extrait à partir des trajectoires obtenues par simulations, figures 7.4 et 7.3, en fonction de la distance entre les bulles (en mm). (a) et (b) : respectivement en échelles Lin-Lin et Lin-Log. Pour les deux figures la courbe cyan correspond à un système-NF et la courbe bleue correspond à un système-F. Dans (a) la fine courbe noire correspond à l'expression théorique de l'accélération calculée à partir de l'équation (7.8). Dans chaque cas  $N = 128$  particules,  $\epsilon = 0.05$ ,  $D_0 = 42.8$  mm (système-NF) et  $D_0 = 34.6$  mm (système-F).

entre bulles d'un système-F est répulsive. L'interaction répulsive entre bulles dans les systèmes-F est illustrée dans la colonne de droite figure 7.3. Initialement, les bulles sont très proches l'une de l'autre au centre de la cellule [voir figure 7.3 (a)], puis elles se repoussent entre elles [voir figures 7.3 (d) et (f)]. En présence de conditions aux bords cycliques, ce mouvement persiste jusqu'à ce que la force de répulsion devienne suffisamment forte pour que les bulles repartent en sens inverse. En l'absence de dissipation ce mécanisme induit une trajectoire oscillante comme le montre la figure 7.8 (a). Si un très faible coefficient de dissipation est introduit, ces mouvements d'oscillation sont amortis et finalement les positions d'équilibre des bulles sont telles que la distance finale entre bulles est  $L/2$  [voir figure 7.8 (b)].

Comme pour les systèmes-NF, les variations de l'accélération avec la distance entre bulles peuvent être déterminées à partir des trajectoires. L'accélération dans un système-F en fonction de la distance entre les bulles est présentée figure 7.6. Il est clair que lorsqu'elles sont mesurées pour la même distance  $D$ , les accélérations dans le système-NF et le système-F sont de signes opposés. Ces accélérations ont toutefois la même valeur absolue et décroissent exponentiellement avec la distance  $D$ , ce qui est cohérent avec l'équation (7.8) [voir figure 7.6 (b)].

La figure 7.7 montre l'évolution de l'énergie potentielle de la paire de bulles en fonction de leur distance. Cette énergie augmente lorsque la distance entre bulles diminue, contrairement aux systèmes-NF. On remarque que l'énergie du système-F est mesurée sur une plus grande gamme de distances que pour les systèmes-NF. En effet pour une condition initiale avec une paire de bulles très proches dans un système-F, la force de répulsion entre bulles leur permet d'acquérir une grande quantité d'énergie cinétique. Cette énergie cinétique est alors suffisante pour permettre aux bulles de compenser le coût énergétique lié à leur mise en mouvement.

On remarque également que l'énergie d'un système-F est l'opposée de l'énergie d'un F-système, ce qui est en parfait accord avec l'équation (7.6). Par conséquent, les simulations valident la description de la distinction entre systèmes-NF et systèmes-F que nous avons présentée dans l'ansatz

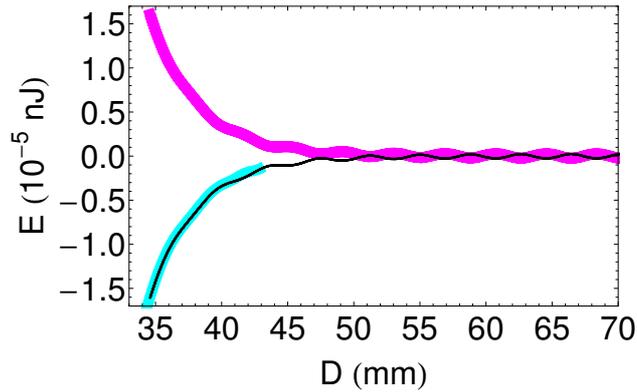


FIGURE 7.7 – Évolution de l'énergie des configurations (en  $10^{-5}$  nJ) en fonction de la distance entre bulles (en mm), avec le zéro de l'énergie pris lorsque les bulles sont infiniment éloignées. L'épaisse courbe pleine cyan correspond à l'énergie des configurations pour le même système-NF que dans la figure 7.6, et la courbe épaisse magenta correspond au même système-F que dans la figure 7.6. La fine courbe noire correspond à l'opposée de l'énergie du système-F, et on trouve qu'elle est presque identique à celle du système-NF.

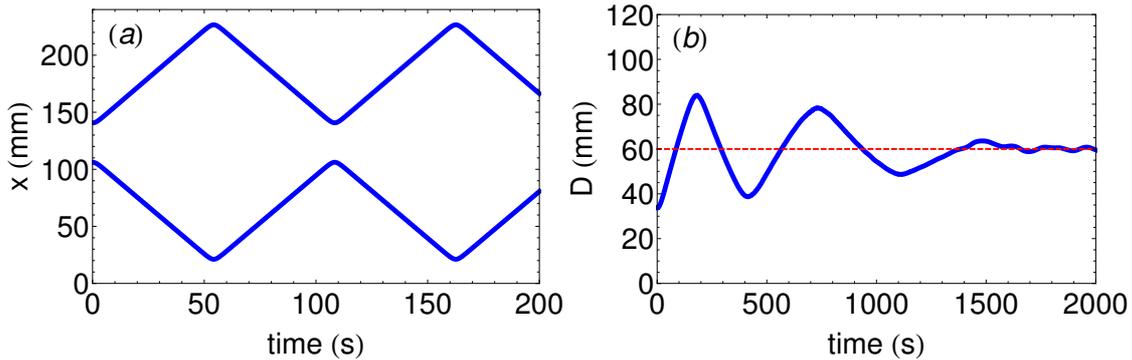


FIGURE 7.8 – Évolution des positions des deux bulles (en mm) en fonction du temps (en s) pour un système-F de  $N = 128$  particules, une confinement  $\epsilon = 0.05$  et pour deux bulles initialement séparées par une distance de  $D_0 = 34.6$  mm.

équation (7.1).

## 7.4 Réorganisation vers une configuration d'équilibre

### 7.4.1 Les deux chemins vers un état d'équilibre stable

La *coalescence* et le *collapse* sont les deux processus par lesquels une paire de bulles peut se réorganiser vers l'état d'équilibre constitué d'une seule bulle. Au cours du processus de coalescence, les bulles entrent en contact et finissent par fusionner ensemble. Le contact requis entre les deux bulles n'est possible que pour les systèmes-NF car l'interaction répulsive entre bulles pour les systèmes-F l'interdit. À l'inverse, le processus de collapse, pour lequel une des deux bulles se vide au profit de l'autre, ne nécessite aucune mise en contact des bulles, c'est pourquoi il est possible de l'observer à la fois pour les systèmes-NF et les systèmes-F.

Pour les systèmes-NF, l'efficacité relative de chacun des deux processus dépend uniquement de

la température, qui contrôle les temps caractéristiques de chacun. Le temps de coalescence  $\tau_D$  est le temps nécessaire aux deux bulles typiquement initialement séparées d'une distance maximale  $L/2$ , pour entrer en contact par diffusion. Ce temps varie comme  $1/T$ . Le processus de collapse quant à lui est presque instantané mais est un processus d'activation qui nécessite de franchir une barrière énergétique  $\delta U$  dans l'espace des phases. Le temps caractéristique  $\tau_A$  de ce processus activé thermiquement est un temps de Kramers variant comme  $\sqrt{T} \exp(-\delta U/k_B T)$ . Si  $\tau_A > \tau_D$ , le processus de collapse sera toujours moins efficace que le processus de coalescence. C'est ce qui arrive à basse température. Au contraire, lorsque  $\tau_A < \tau_D$ , des bulles suffisamment éloignées ont plus de chance de se réorganiser à l'aide du processus de collapse. C'est ce qui arrive à haute température.

Pour quantifier l'importance relative de ces deux processus en fonction de la température, nous avons utilisé une approche statistique. Pour différentes températures, un grand nombre de simulations ont été réalisées à partir des mêmes configurations de paires de bulles comme conditions initiales. On peut alors déduire la probabilité de voir se réaliser chaque processus en comptant le nombre de coalescences et le nombre de collapses. Ces probabilités sont présentées en fonction de la température sur la figure 7.9. Le processus de coalescence est clairement dominant à basse température tandis que la réorganisation du système à haute température est principalement liée au processus de collapse.

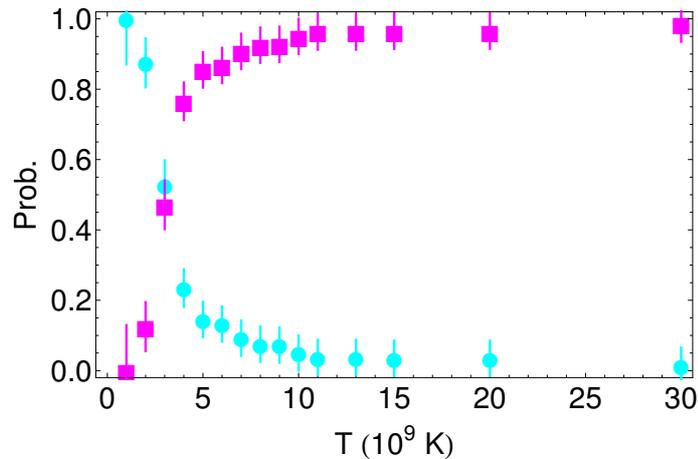


FIGURE 7.9 – Probabilité d'observer la réorganisation de la paire de bulles en un système de simple bulle via le processus de coalescence (points cyans) ou via le processus de collapse (carrés magenta) en fonction de la température (en  $10^9$  K). Pour des systèmes-NF de  $N = 64$  particules et un confinement  $\epsilon = 0.13$ , avec initialement deux bulles séparées de  $D_0 = 44.1$  mm.

#### 7.4.2 Le processus de coalescence

Jusqu'ici, on a décrit le mouvement des bulles dans les systèmes-NF à  $T = 0$ . Pour les températures non nulles, des comportements similaires sont observés lorsque  $k_B T > \Delta E(\epsilon)$ . Cependant, dans ces cas là, le bain thermique induit des déplacements aléatoires des bulles, comme le montre la figure 7.10 (a). On peut voir que les bulles semblent diffuser indépendamment tant qu'elles restent suffisamment éloignées pour que leur interaction soit faible comparée à l'excitation thermique. Au contraire, lorsque les bulles sont suffisamment proches, les mouvements thermiques deviennent

négligeables vis à vis de la force d'interaction de telle sorte que le mouvement des bulles est essentiellement déterministe et très proche de celui observé à température nulle.

Le processus de coalescence de deux bulles proches a été décrit dans la section 7.3.1 à température nulle. À température non nulle, les bulles se comportent comme des particules effectives soumises à un bain thermique et suivent un mouvement diffusif [voir chapitre 6]. Un exemple typique de trajectoires pour une paire de bulle est présenté figure 7.10 (a) et est à comparer avec la figure 7.4. On observe que les trajectoires sont bruitées à température non nulle car chaque bulle diffuse dans le potentiel attractif créé par l'autre. Lorsque les bulles sont suffisamment proches, leur mouvement est dominé par leur interaction attractive jusqu'à ce qu'elles finissent par fusionner ensemble. Les dernières étapes de ce processus sont présentées figure 7.11<sup>2</sup>.

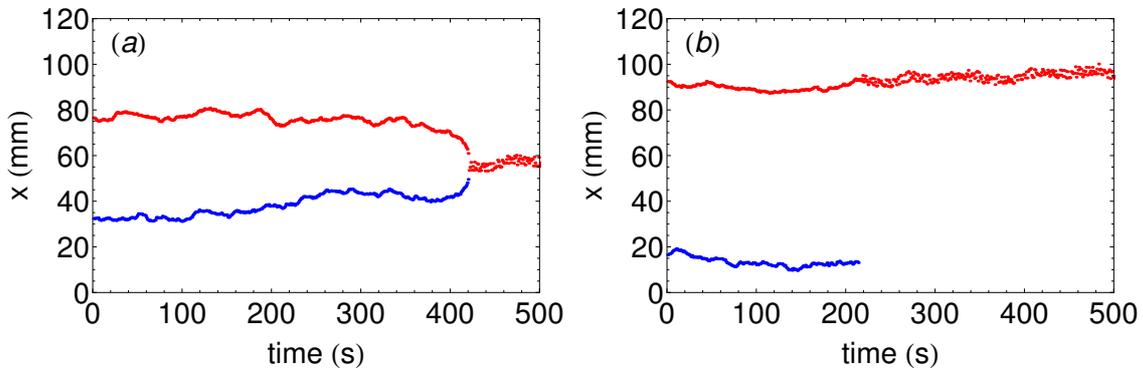


FIGURE 7.10 – Positions des deux bulles (en mm) en fonction du temps (en s) pour un système-NF de  $N = 64$  particules, un confinement  $\epsilon = 0.13$  et avec initialement deux bulles séparées par une distance de  $D_0 = 44.1$  mm à  $T = 3.10^9$  K et  $\gamma = 1$  s<sup>-1</sup>. Pour un exemple typique de processus de coalescence en (a) et de processus de collapse en (b).

Le processus de coalescence induit un gain d'énergie potentielle, car la configuration avec une simple bulle est plus stable qu'une paire de bulles. Cette énergie potentielle relâchée est transférée aux modes de vibration de la chaîne puis dissipée. Si le coefficient de dissipation est faible, les particules centrales initialement entre les deux bulles présentent de fortes oscillations transverses, telles que les bulles semblent rebondir l'une sur l'autre. Ceci est illustré dans la figure 7.12 qui montre le mouvement transverse de deux particules adjacentes entre les deux bulles. Avant le contact, ces particules sont alignées le long de l'axe de confinement. Dès que les bulles commencent à se chevaucher, les positions transverses des particules augmentent jusqu'à leurs hauteurs finales et oscillent autour de ces valeurs, l'amplitude des oscillations décroissant avec le temps. Les déplacements de ces deux particules adjacentes sont en opposition de phase, ce qui est cohérent avec la géométrie zigzag. Ces états intermédiaires correspondent au mode d'oscillation de plus basse énergie d'une simple configuration en bulle [33]. Finalement toutes les particules présentent de faibles fluctuations thermiques autour de leurs positions d'équilibre dans la configuration finale [voir figure 7.12].

Intéressons nous maintenant à l'évolution de l'énergie du système pendant sa réorganisation par coalescence. De tels événements arrivent aléatoirement, il est alors nécessaire de réaliser beaucoup

2. Des animations sur le mouvement des bulles pendant les processus de coalescence et de collapse sont disponibles sur le site internet [1].

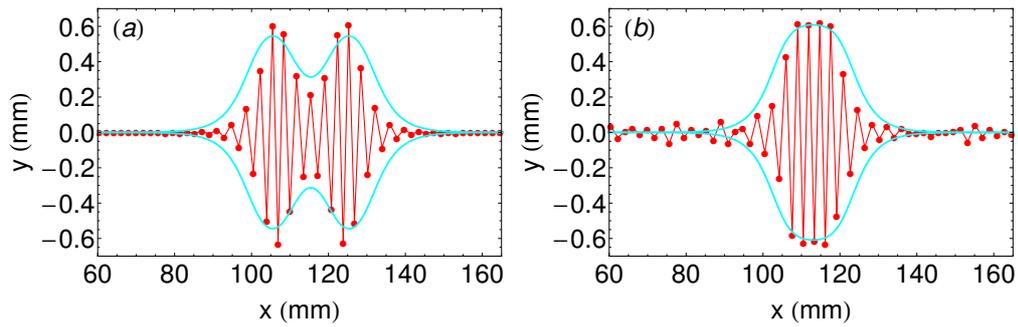


FIGURE 7.11 – Succession de deux configurations instantanées de particules (les deux axes en mm) à l'intérieur d'un système-NF pendant les étapes finales de la coalescence, suivant la série présentée figure 7.3. Pour un système-NF de  $N = 128$  particules et  $\epsilon = 0.05$  aux temps 11.0 s (a) et 34.0 s (b).

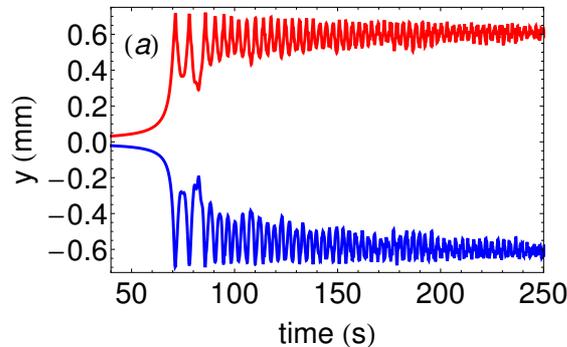


FIGURE 7.12 – Évolution des positions transverses (en mm) de deux particules successives situées juste au milieu des deux bulles en fonction du temps (en s).

de simulations à partir des mêmes conditions initiales pour obtenir une mesure fiable de l'énergie  $E(t)$  au cours du processus de l'évolution. Pour chaque simulation, l'énergie est donc calculée à chaque étape, avec l'instant de la coalescence pris pour origine des temps. Ensuite une moyenne d'ensemble est réalisée sur tous les événements similaires à la même température, ce qui donne  $E(t)$  pour le processus de coalescence. Une telle variation typique d'énergie est présentée figure 7.13 (a). Sur cette figure, on peut identifier trois étapes distinctes. La première correspond à une décroissance monotone de l'énergie, qui est très faible tant que les bulles sont éloignées. Cette étape est suivie d'une décroissance très rapide avant la fusion des bulles. Ensuite l'énergie oscille légèrement, ce qui correspond aux excitations vibrationnelles de la bulle finale induites par la coalescence. Finalement, l'énergie atteint la valeur associée à une bulle unique stable. L'énergie en excès dégagée par la coalescence est redistribuée comme énergie cinétique sur les différents degrés de liberté du système.

### 7.4.3 Le processus de collapse

Au contraire du processus de coalescence qui concerne uniquement les systèmes-NF, le processus de collapse est observable aussi bien pour les systèmes-NF que pour les systèmes-F. Un exemple typique de trajectoires correspondant à ce processus est présenté figure 7.10 (b). On observe que les deux bulles diffusent librement jusqu'à ce qu'une des deux bulles disparaisse brusquement, sans qu'il soit possible d'observer une modification particulière sur les trajectoires des bulles. Exactement à

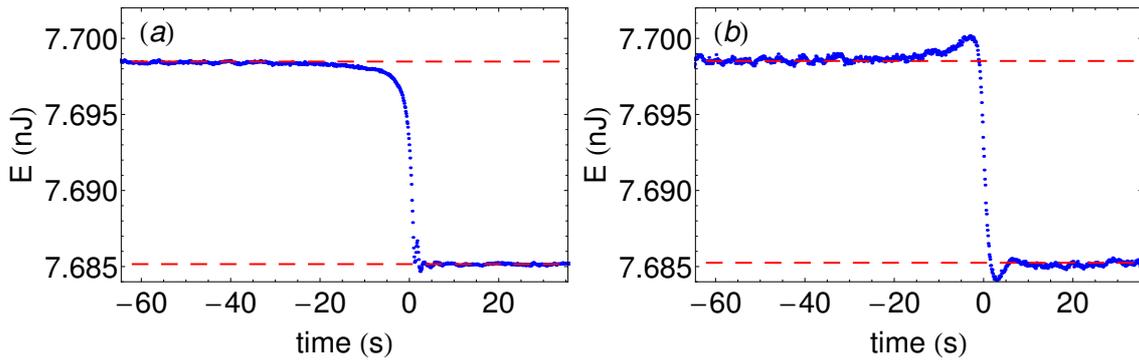


FIGURE 7.13 – Évolution de l'énergie des configurations instantanées (en nJ) décalée dans le temps pour que la coalescence ait lieu à  $t = 0$  et moyennée sur un grand nombre de réalisations en fonction du temps (en s). (a) & (b) respectivement pour un système-NF et pour un système-F de  $N = 64$  particules et  $\epsilon = 0.13$ , et à température  $T = 10^9$  K.

l'instant où une bulle disparaît la seconde s'élargit comme on le remarque à partir de l'épaississement de la trajectoire de la bulle restante.

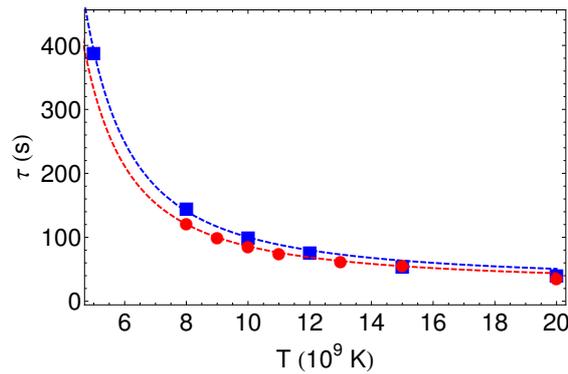


FIGURE 7.14 – Évolution du temps moyen (en s) mis par le système pour se réorganiser vers un état à une simple bulle via le processus de collapse en fonction de la température (en  $10^9$  K). Les points rouges correspondent à des systèmes-NF et les carrés bleus à des systèmes-F.

Ce processus correspond au passage d'une barrière énergétique dans l'espace des phases et domine le comportement à haute température. L'évolution de l'énergie potentielle du système durant sa réorganisation par collapse est présentée figure 7.13 (b), où l'origine des temps a été arbitrairement fixée comme la fin du processus de collapse. Une paire de bulles est un état métastable, ainsi l'énergie du système reste approximativement constante avant le collapse. Le collapse est caractérisé par une augmentation soudaine de l'énergie du système pour atteindre une valeur maximale, suivie d'une décroissance très rapide de l'énergie jusqu'à la valeur d'une configuration avec une simple bulle. Cette augmentation d'énergie caractéristique correspond à la hauteur de barrière énergétique attendue pour un processus activé.

Comme pour n'importe quel processus activé, il est utile d'étudier l'évolution du temps moyen  $\tau$  mis par le système pour franchir la barrière énergétique en fonction de la température. Puisque toutes les simulations sont faites à partir des mêmes conditions initiales, le temps de collapse moyen correspond à la moyenne d'ensemble, à une température donnée, du temps auquel le collapse arrive

dans chaque simulation. La figure 7.14 montre l'évolution de ces temps moyen en fonction de la température pour des systèmes-NF et des systèmes-F. Comme attendu le temps moyen décroît lorsque la température augmente. De plus, la dépendance en température est approximativement la même pour les systèmes-NF et les systèmes-F. Ceci suggère que le mécanisme sous-jacent au processus de collapse, qui permet au système d'atteindre son état d'équilibre est presque indépendant de l'existence d'un défaut topologique entre les deux bulles.

#### 7.4.4 Configuration finale

Enfin la description de la configuration finale de la bulle est présentée ici. Que les bulles initiales appartiennent à un système-NF ou un système-F ; qu'elles se soient réorganisées par coalescence ou par collapse, dans tous les cas, la bulle finale possède les mêmes caractéristiques. Tout d'abord elle correspond bien à un état d'équilibre pouvant être décrit par une enveloppe comme présentée équation (5.9). Un exemple de cet accord est montré figure 7.11 (b) pour une bulle obtenue par coalescence d'un système-NF. D'autre part la bulle finale implique toujours moins de particules dans la phase de zigzag modulée que dans la somme des deux phases modulées initialement. Enfin sa hauteur maximale est toujours légèrement plus faible et la distance entre particules dans la phase en ligne est plus grande dans la configuration finale que dans la configuration initiale [voir figure 7.15].

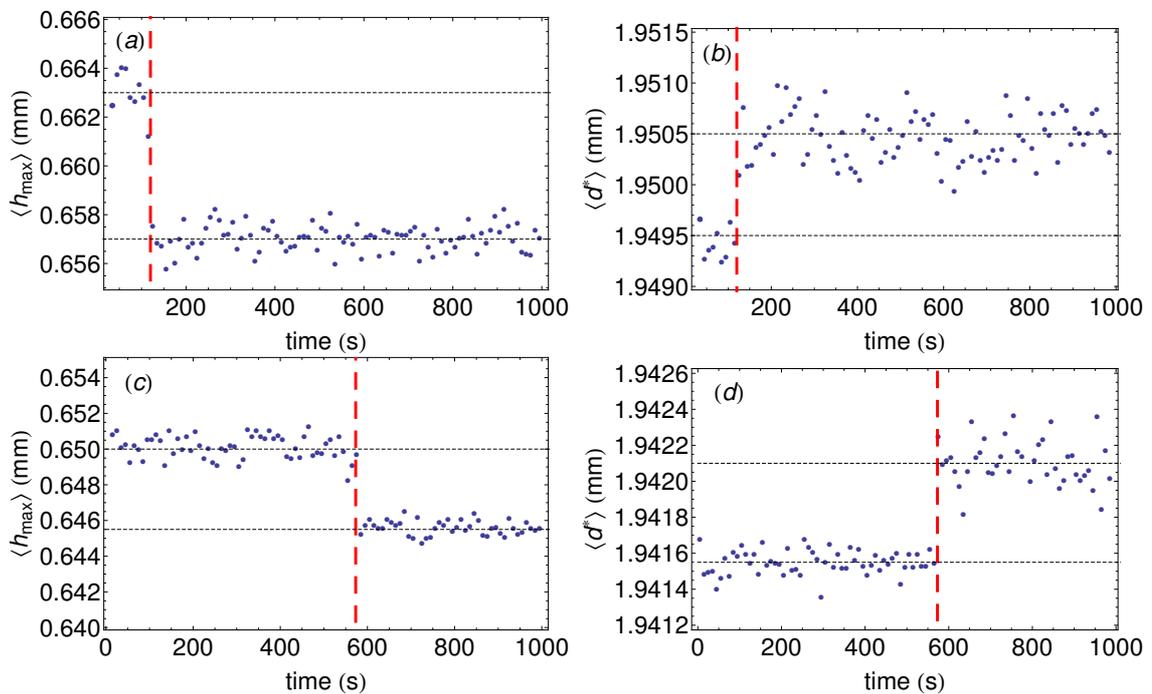


FIGURE 7.15 – À gauche : amplitude maximale de la bulle  $h_{\max}$  (en mm) pour une configuration métastable avec deux bulles puis pour une bulle unique, en fonction du temps (en s). À droite : distance entre plus proches voisins la plus faible  $d^*$  (en mm) pour des particules en dehors de la bulle, pour une paire de bulles métastable et pour une bulle unique stable, en fonction du temps (en s). Les figures du haut correspondent à des processus de coalescence, et les figures du bas à des processus de collapse. Dans chaque figure la ligne en tirets rouges indique le temps auquel la fusion ou le collapse ont lieu.

## 7.5 Conclusion

Dans ce chapitre notre attention s'est portée sur les chemins accessibles au système pour atteindre sa configuration d'équilibre. Les configurations initiales que nous avons considérées sont une paire d'ondes solitaires décrivant l'enveloppe de deux structures bulles qui sont des configurations métastables évoluant spontanément vers un état d'équilibre caractérisé par une simple bulle.

Des comportements spécifiques, non observables pour des systèmes continus, ont été mis en évidence et sont liés au caractère discret sous-jacent au système. On a introduit le concept de *frustration topologique* associé à de telles paires de bulles. Une configuration est dite Frustrée lorsqu'une phase en zigzag régulier modulé est impossible à atteindre entre les deux bulles. À partir de simulations numériques, on a mis en évidence que l'interaction entre les bulles est alors attractive lorsque celles-ci sont dans une configuration Non Frustrée. À l'inverse, lorsque la paire de bulles est Frustrée, l'interaction entre les bulles est répulsive. On a décrit un modèle d'onde solitaires en interaction prenant en compte le caractère Non Frustré ou Frustré des paires de bulles. Ce modèle fournit une description qualitative de toutes les caractéristiques de la force d'interaction : son caractère attractif ou répulsif, pour les systèmes Non-Frustré ou Frustré ; et le comportement de décroissance exponentielle avec la distance entre les bulles.

Pour les systèmes-NF, la force attractive implique un premier chemin de retour vers l'équilibre, les bulles bougent l'une vers l'autre et finissent par fusionner en une simple bulle. Ce processus de fusion est appelé *coalescence*. Il existe toutefois un autre chemin vers l'équilibre, le long duquel une des bulles disparaît au profit de l'autre. On l'appelle processus de *collapse*. Ce processus se produit à la fois pour les systèmes-NF et les systèmes-F, alors que le processus de coalescence est spécifique aux systèmes-NF pour lesquels les bulles peuvent entrer en contact. La coalescence domine le comportement à basse température de ces systèmes-NF tandis que le processus de collapse domine la réorganisation des deux systèmes à haute température. La coalescence est un processus dans lequel l'énergie décroît rapidement lorsque les bulles se rapprochent tandis que le collapse est un processus activé thermiquement.

## Troisième partie

# Diffusion de deux chaînes couplées



## Chapitre 8

# Comportement diffusif d'une chaîne de particules en zigzag

### Sommaire

---

<b>8.1 Introduction</b> . . . . .	<b>147</b>
<b>8.2 Méthode de reconstruction des DQM à partir de la description en modes de vibration</b> . . . . .	<b>148</b>
<b>8.3 Méthode de reconstruction des DQM pour la configuration zigzag</b> . . .	<b>152</b>
<b>8.4 Divergence du DQM transverse et transition zigzag</b> . . . . .	<b>156</b>
8.4.1 Passage de la configuration en ligne à la configuration en zigzag . . . . .	157
8.4.2 Passage de la configuration en zigzag à la configuration en ligne . . . . .	159
<b>8.5 Modification du DQM et déstabilisation du zigzag vers les configurations inhomogènes</b> . . . . .	<b>162</b>
8.5.1 Évolution de la variance transverse à la transition homogène/inhomogène .	162
8.5.2 Évolution de la variance longitudinale à la transition homogène/inhomogène	165
<b>8.6 Conclusion</b> . . . . .	<b>167</b>

---

## 8.1 Introduction

Nous nous sommes intéressés jusqu'à présent à la forme et à la dynamique des structures localisées observées dans les systèmes quasi-unidimensionnels de particules. Dans ce chapitre, nous allons revenir à l'étude de la configuration zigzag lorsque celle-ci est une configuration stable du système<sup>1</sup>. En particulier nous nous concentrerons ici sur l'étude des propriétés statistiques des mouvements individuels des particules car elles donnent accès à des grandeurs structurales difficilement accessibles autrement, notamment la distinction entre transition entre configurations homogènes et celle entre configurations inhomogènes.

Nous présenterons dans un premier temps la méthode de reconstruction des *Déplacements Quadratiques Moyen* (DQM) des particules à partir des modes propres de vibration du système, à

---

1. C'est notamment pourquoi nous nous restreignons dans ce chapitre à la description de petits systèmes, pour lesquels la configuration en zigzag homogène est stable [voir chapitre 2]. On considérera ici un système constitué de 16 particules.

travers l'exemple d'une seule chaîne de particules (section 8.2). Cette description initialement développée pour une chaîne linéaire de particules [32] sera adaptée dans la section 8.3 à la configuration zigzag dont l'étude des modes de vibration a été déjà présentée au chapitre 2.

Il a été montré que l'étude du DQM transverse était un excellent indicateur de la transition structurale d'une configuration en ligne à en zigzag car il présente une divergence à la transition [35]. L'accent sera mis dans ce chapitre sur l'étude de la transition de la configuration en zigzag vers celle en ligne (section 8.4). Nous pourrions ainsi comparer le comportement de divergence du DQM transverse à l'approche des deux côtés du seuil de transition.

Par ailleurs nous montrerons que les valeurs des seuils de hauteurs pour lesquelles la configuration zigzag change au profit d'une configuration non homogène [voir chapitres 3 et 5] peuvent être mesurées de manière très précise grâce à l'étude des propriétés statistiques des mouvements individuels des particules. De plus nous mettrons en évidence les différences majeures entre les comportements des DQM à l'approche de la transition zigzag et pour la transition d'une configuration en zigzag homogène à une configuration inhomogène (section 8.4).

## 8.2 Méthode de reconstruction des DQM à partir de la description en modes de vibration

### § *Principe de la méthode*

La méthode de reconstruction des DQM à partir des modes propres de vibration [30] sera décrite en nous appuyant sur l'exemple d'un système constitué d'une chaîne de particules en interaction répulsive confinée par un potentiel harmonique dans une géométrie quasi-unidimensionnelle et avec des conditions aux limites périodiques dans la direction longitudinale. Le mouvement des particules en interaction peut être modélisé de manière générale par un système d'équations de Langevin couplées.

La première étape consiste à linéariser ces équations de mouvement autour de la configuration d'équilibre du système, afin de se ramener à un système d'équations linéaires puis à en trouver les modes propres en diagonalisant la matrice dynamique associée.

Cette décomposition en modes propres permet de remplacer le système d'équations couplées par un jeu d'équations de modes découplés. Chaque mode propre, indexé par  $s$ , est ainsi associé à une équation de Langevin de la forme :

$$m\ddot{x}_s = -m\gamma\dot{x}_s + m\omega^2(s)x_s + \mu_s(t) \quad (8.1)$$

où  $\gamma$  correspond au coefficient de dissipation,  $\omega(s)$  à la fréquence propre associée au mode d'indice  $s$  et  $\mu_s(t)$  à une force aléatoire de moyenne nulle et avec :

$$\langle \mu_s(t)\mu_{s'}(t') \rangle = 2k_B T m \gamma \delta_{s,s'} \delta(t,t') \quad (8.2)$$

Cette force aléatoire  $\mu_s(t)$  correspond ici à la somme des termes de forces aléatoires associées au système d'équation de Langevin initiale pondérés par l'expression des modes propres du système.

Ces forces aléatoires étant de moyenne nulle, on trouve directement que  $\langle \mu_s(t) \rangle = 0$ . De plus leur caractère Gaussien assure que la somme soit également une force de distribution Gaussienne. Enfin les propriétés de normalisation et d'orthogonalité des modes propres assurent la propriété exprimée équation (8.2).

Chacune de ces équations indexées par  $s$  correspond à une équation de Langevin pour une particule dans un potentiel harmonique dont la raideur correspond à  $m\omega(s)$ . Les solutions de ces équations de Langevin associées au mouvement dans un potentiel harmonique sont très bien connues [94] et elles permettent de déterminer facilement le DQM associé à chaque mode  $s$  :

$$\langle \Delta(x_s)^2 \rangle = \frac{2Nk_B T}{\omega(s)} \left[ 1 + \frac{\omega_- e^{\omega_+ t}}{\omega_+ - \omega_-} - \frac{\omega_+ e^{\omega_- t}}{\omega_+ - \omega_-} \right] \quad (8.3)$$

où  $\omega_{\pm} \equiv -\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{4} - \omega^2}$  avec  $\omega \equiv \omega(s)$  la fréquence propre du système associée à l'indice  $s$ .

Toutefois cette expression n'est valable que pour une fréquence propre non nulle. Dans le cas contraire, l'équation de Langevin correspondante est associée à un mouvement libre, et le DQM du mode correspondant s'écrit alors :

$$\langle \Delta(x_s)^2 \rangle = \frac{Nk_B T}{m\gamma} \left[ t - \frac{1}{\gamma} (1 - e^{-\gamma t}) \right] \quad (8.4)$$

Ainsi, aux temps courts, caractérisés par ( $t < 1/\gamma$ ), l'évolution des DQM pour chaque mode même si leur de fréquence propre est nulle varie comme :

$$\langle \Delta(x_s)^2 \rangle \stackrel{t \rightarrow 0}{\sim} \frac{Nk_B T}{m} t^2 \quad (8.5)$$

Dans la limite des temps longs ( $t > 1/\omega(s)$ ), les modes de fréquences propres non nulles décrivent un DQM qui sature à partir de  $t \sim 1/\omega(s)$  à une valeur de :

$$\langle \Delta(x_s)^2 \rangle \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{Nk_B T}{m\omega^2(s)} \quad (8.6)$$

alors que pour les modes de fréquences propres nulles, le DQM aux temps longs évolue comme :

$$\langle \Delta(x_s)^2 \rangle \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{Nk_B T}{m\gamma} t \quad (8.7)$$

Enfin, pour les temps intermédiaires ( $1/\gamma < t < 1/\omega(s)$ ), on trouve que les DQM des modes suramortis ( $\omega(s) < \gamma$ ) évoluent linéairement en temps alors que les DQM des modes sousamortis ( $\omega(s) > \gamma$ ) évoluent toujours en  $t^2$ .

À partir des DQM associés à chaque mode propre du système il est finalement possible de reconstruire les DQM associés aux particules. Grâce à l'orthogonalité des modes propres entre eux, le DQM de la particule  $p$  s'écrit simplement :

$$\langle \Delta(x_p)^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \left\langle \sum_{s=1}^N \mathbb{A}_j(s) x_s^j e^{i \frac{2\pi}{N} s p} \sum_{s'=1}^N \mathbb{A}_j(s') x_{s'}^j e^{i \frac{2\pi}{N} s' p} \right\rangle \quad (8.8)$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{s=1}^N |\mathbb{A}_j|^2 \langle \Delta(x_s^j)^2 \rangle \quad (8.9)$$

où les coefficients  $\mathbb{A}_j$  correspondent aux valeurs de la matrice de changement de base permettant de repasser des modes propres déplacements des particules. La convention de sommation sur les indices  $j$  répétés a été utilisée.

La variation temporelle du DQM des particules résulte de la subtile superposition du DQM de chaque mode ayant une dynamique temporelle et un valeur de saturation spécifiques.

### § *Principe de la méthode*

Afin de mieux comprendre la relation entre le comportement typique des DQM reconstruits et ceux des modes propres du système, nous allons considérer l'exemple d'une chaîne de particules. Le calcul des modes propres d'une chaîne de particules a été réalisé au chapitre 1. Les fréquences propres du système sont données par les équations (1.8) et (1.9). Les modes propres longitudinaux et transverses étant directement découplés, la reconstruction de DQM longitudinaux et transverses correspond simplement à la sommation des DQM de chaque mode.

Aux temps courts, le DQM de chaque mode est identique [voir équation (8.5)] de telle sorte que le DQM des particules correspond à la somme des  $N$  évolutions des modes, d'après l'équation (8.9) :

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \stackrel{t \rightarrow 0}{\sim} \frac{k_B T}{m} t^2 \quad \text{et} \quad \langle \Delta y^2(t) \rangle \stackrel{t \rightarrow 0}{\sim} \frac{k_B T}{m} t^2 \quad (8.10)$$

Pour les temps intermédiaires, il existe un régime corrélé durant lequel la variation du DQM dépend fortement de l'amortissement du système. Deux cas distincts sont à considérer : le régime sous-amorti pour lequel  $\gamma \ll \omega(s = 1)$  et le régime sur-amorti pour lequel  $\gamma \gg \omega(s = N)$ <sup>2</sup>.

En régime sous-amorti, chaque mode évolue en  $t^2$ , oscille et puis sature. L'évolution du DQM des particules pour le régime intermédiaire résulte de la superposition progressive des différentes oscillations, notamment des premiers maxima, l'amplitude des autres oscillations décroissant avec le temps et leur superposition donnant une valeur constante. Le premier maximum des oscillations de chaque mode est atteint au temps  $1/\omega(s)$ . Ainsi le DQM des particules s'écrit :

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \sim \frac{k_B T}{Nm} t^2 n(t) \quad (8.11)$$

où  $n(t)$  correspond au nombre de mode n'ayant pas atteint leur premier maxima, c'est à dire les modes tels que  $\omega(s) < 1/t$ .

Pour estimer le nombre de modes  $n(t)$ , nous allons utiliser l'approximation de Debye, consistant à linéariser la relation de dispersion pour se placer dans une régime où la fréquence propre des modes dépend linéairement du nombre d'onde avec un coefficient de proportionnalité noté  $\Gamma$ . La distance entre deux modes étant  $2\pi/N$ , on trouve alors que le nombre de modes n'ayant pas atteint son premier maxima varie comme  $n(t) \sim 2(N/2\pi)(1/t\Gamma)$ . En reportant cette expression dans l'équation (8.11), on trouve que :

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \sim \frac{k_B T}{\pi m \sqrt{\Gamma}} t \quad (8.12)$$

---

2. Ici les fréquences propres  $\omega(1)$  et  $\omega(N)$  correspondent respectivement aux fréquences non nulles la plus petite et la plus grande.

Dans l'exemple de la chaîne de particule on trouve que  $\Gamma = \sqrt{K/m}$ , où  $K$  est la raideur de l'interaction entre les particules. Cette expression permet de retrouver l'évolution linéaire du régime corrélé dans le régime sous-amorti observé dans de multiples systèmes [77, 78, 104].

Dans le cas sur-amorti, l'évolution temporelle du DQM de chaque mode varie linéairement avant saturation, de telle sorte que  $n(t) \sim 2(N/2\pi)\sqrt{\gamma/(\Gamma t)}$ , ce qui donne :

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \sim \frac{2k_B T}{Nm\gamma} t n(t) \sim \frac{2k_B T}{\pi m \sqrt{\gamma \Gamma}} t^{1/2} \quad (8.13)$$

Avec pour la chaîne de particule  $\Gamma = \sqrt{K/m}$ , on trouve que cette expression correspond au comportement sous-diffusif observé pour le mouvement longitudinal d'une chaîne de particules dans le régime sur-amorti, aussi appelé « Single File Diffusion » [64, 106, 104].

Pour ces deux régimes on a vu que l'évolution temporelle de DQM pouvait être directement reliée aux évolutions des DQM des modes propres notamment à travers l'évolution des temps de saturation des DQM de chaque mode. Nous reviendrons en particulier sur cette aspect au chapitre 9, durant lequel on montrera qu'une modification de la relation de dispersion du système, comme par exemple l'apparition d'une bande interdite, entraîne une modification des DQM des particules.

Les DQM transverses présentent un régime corrélé semblable, qu'il est possible de décrire à nouveau par la saturation successive des DQM des modes propres du système [35, 80].

On s'intéresse maintenant au comportement du DQM aux temps longs ( $t \gg 1/\omega(s = N)$ ) pour la chaîne de particules. Pour les DQM longitudinaux, on remarque qu'il existe un mode propre de fréquence nulle dans la relation de dispersion longitudinale, correspondant au mode  $\omega(s = 0)$  lié à l'invariance par translation du système. Le DQM de ce mode correspond donc au DQM d'une particule libre décrivant une évolution linéaire en temps quand  $t \rightarrow \infty$ . Cette évolution linéaire en temps du DQM du mode de fréquence nulle domine l'évolution du DQM des particules car tous les autres modes de fréquences propres non nulles saturent, de telle sorte que :

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2k_B T}{Nm\gamma} t \quad (8.14)$$

On retrouve ici la diffusion d'ensemble de la chaîne associée à son invariance par translation, la chaîne diffuse alors dans son ensemble comme une particule de masse ( $Nm$ ).

Pour le DQM transverse des particules il n'existe pas de tel mode de fréquence propre nulle. Le DQM aux temps longs est contrôlé par l'évolution du DQM du mode de plus basse fréquence propre. Il s'agit donc du dernier mode qui sature dans le système. Dans l'exemple de la chaîne de particule ce mode correspond à l'indice  $s = N$  et prend pour valeur  $m\omega^2(s = N) = -2F(d)/d - \beta$  dans la limite d'interaction avec uniquement les plus proches voisins [voir équation (1.9)], de telle sorte que :

$$\langle \Delta y^2(t) \rangle \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2k_B T}{-2F(d)/d - \beta} \quad (8.15)$$

où  $F(\cdot)$  correspond à la force entre particules et  $\beta$  à la raideur du confinement transverse.

Cette expression montre notamment que la valeur de saturation du DQM transverse diverge à l'approche du seuil de transition zigzag, lorsque  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^+$  par valeur supérieure. Ce comportement

de divergence de la saturation de DQM transverse à la transition rend cette observable intéressante pour déterminer précisément le seuil de transition en présence de bruit comme il a été indiqué en introduction. Nous reviendrons plus en détails sur ce comportement au seuil de transition zigzag par la suite section 8.4.

### 8.3 Méthode de reconstruction des DQM pour la configuration zigzag

Dans cette section nous allons décrire la reconstruction des DQM des particules d'un zigzag homogène à partir des modes propres de vibration du zigzag présentés chapitre 2.

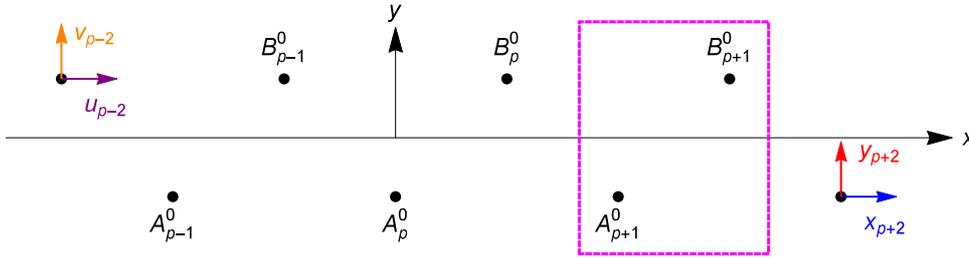


FIGURE 8.1 – Schéma de la configuration zigzag. Rappel de la figure 2.1.

La configuration zigzag considérée est décrite comme une succession de mailles contenant chacune deux particules, avec une particule de coordonnées  $A_p = \{2pd + x_p(t), -h + y_p(t)\}$  et l'autre de coordonnées  $B_p = \{2pd + u_p(t), +h + v_p(t)\}$ , où les déplacements  $x_p(t)$ ,  $y_p(t)$ ,  $u_p(t)$  et  $v_p(t)$  correspondent à des mouvements autour des positions d'équilibre de faible amplitude comparé à  $d$  ou  $h$  [voir figure 8.1].

Rappelons que l'équation dynamique linéarisée correspondant à ces faibles déplacements peut s'écrire d'après la décomposition sur les modes de Fourier [voir équation (2.11)] de la manière suivante :

$$m\ddot{\mathcal{X}}_s = -m\gamma\ddot{\mathcal{X}}_s + \mathbb{M}(h)\mathcal{X}_s + \mathcal{M}_s(t) \quad (8.16)$$

où  ${}^t\mathcal{X}_s \equiv (x(s, t), u(s, t), y(s, t), v(s, t))$ , et la matrice  $\mathbb{M}(h)$  est définie équation (2.12) et où  $\mathcal{M}_s(t)$  correspond à un vecteur de bruits blancs non corrélés spatialement et temporellement, de la forme  ${}^t\mathcal{M}_s(t) \equiv (\mu_x(s, t), \mu_u(s, t), \mu_y(s, t), \mu_v(s, t))$ <sup>3</sup>.

Afin de calculer les modes propres correspondant à cette matrice dynamique, celle-ci peut être simplifiée en l'exprimant dans la base des vecteurs propres associés à la configuration en ligne décrite par la matrice  $\mathbb{B}_0$  [voir équation (2.17)]. On montre alors que la matrice dynamique donnée par  $\hat{\mathbb{M}}(h) = \mathbb{B}_0^{-1} \cdot \mathbb{M} \cdot \mathbb{B}_0$ , est diagonale par bloc [voir équation (2.18)]. Après diagonalisation les expressions compactes pour les fréquences propres du système ont été présentées équations (2.19)

3. Comme précédemment pour la configuration en ligne, les forces aléatoires  $\mu_i(s, t)$  correspondant au bruit thermique, sont des sommes de variables aléatoires Gaussiennes de moyenne nulle et avec

$$\langle \mu_i(s, t) \mu_j(s', t') \rangle = 2k_B T m \gamma \delta_{i,j} \delta_{s,s'} \delta(t - t')$$

et (2.20). Ces expressions permettent donc de définir la matrice diagonale suivante :

$$\mathbb{D}(h) = \begin{pmatrix} m\omega_{OL}^2 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & m\omega_{OT}^2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & m\omega_{AL}^2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & m\omega_{AT}^2 \end{pmatrix} \quad (8.17)$$

qui s'écrit directement à partir de la matrice  $\hat{\mathbb{M}}(h)$  comme  $\hat{\mathbb{D}}(h) = \mathbb{P}^{-1} \cdot \hat{\mathbb{M}}(h) \cdot \mathbb{P}$  où la matrice  $\mathbb{P}$  correspond à la matrice de passage définie à partir des vecteurs propres.

Ces vecteurs propres correspondant à la matrice  $\hat{\mathbb{M}}(h)$  s'écrivent :

$$\mathbf{V}_{OL} = \frac{1}{N_{OL}} \begin{pmatrix} \frac{T_{O+} + \sqrt{4C_{xv}^2 + T_{O+}^2}}{2iC_{xv}} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{V}_{OT} = \frac{1}{N_{OT}} \begin{pmatrix} \frac{T_{O+} - \sqrt{4C_{xv}^2 + T_{O+}^2}}{2iC_{xv}} \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix} \quad (8.18)$$

$$\mathbf{V}_{AL} = \frac{1}{N_{AL}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{T_{A+} + \sqrt{4C_{xv}^2 + T_{A+}^2}}{2iC_{xv}} \\ 1 \end{pmatrix}; \quad \mathbf{V}_{AT} = \frac{1}{N_{AT}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \frac{T_{A+} - \sqrt{4C_{xv}^2 + T_{A+}^2}}{2iC_{xv}} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (8.19)$$

La matrice de passage est donc définie comme la juxtaposition de ces vecteurs propres  $\mathbb{P} = (\mathbf{V}_{OL}, \mathbf{V}_{OT}, \mathbf{V}_{AL}, \mathbf{V}_{AT})$  correspondant respectivement aux fréquences propres  $\omega_{OL}^2$ ,  $\omega_{OT}^2$ ,  $\omega_{AL}^2$  et  $\omega_{AT}^2$ .

Il s'agit maintenant de remonter à partir de l'expression de la matrice diagonale  $\mathbb{D}$  à la matrice dynamique et on trouve :

$$\mathbb{M}(h) = \underbrace{\mathbb{B}_0 \mathbb{P}}_{\mathbb{A}} \mathbb{D} \underbrace{\mathbb{P}^{-1} \mathbb{B}_0^{-1}}_{\mathbb{A}^{-1}} \quad (8.20)$$

où la matrice  $\mathbb{A}$  correspond à la matrice de passage du système.

Il faut toutefois faire attention au fait que les vecteurs propres présentés ici ne sont pas définis lorsque  $C_{xv} = 0$ . On trouve d'après l'expression de  $C_{xv}$  équation (2.13) que ce coefficient peut être nul sous deux conditions, une première pour  $h = 0$  et dans ce cas là pour tout nombre d'onde  $s$  on a  $C_{xv} = 0$ ; et une seconde condition, cette fois-ci pour n'importe quelle valeur de hauteur mais pour le nombre d'onde  $s = 0$  on a  $C_{xv}(s = 0) = 0$ .

Pour ces deux conditions on trouve que  $C_{xv} = 0$  mais également que la matrice  $\hat{\mathbb{M}}(h = 0)$  est déjà diagonale. Il n'est alors plus nécessaire de diagonaliser cette matrice et on trouve simplement que  $\mathbb{A} = \mathbb{B}_0$  à la fois lorsque  $h = 0$  et pour toutes valeurs de hauteur lorsque  $s = 0$ .

Ces cas particuliers n'entraînent aucune difficulté majeure, il est cependant nécessaire prendre soin de déterminer les comportements particuliers des modes propres pour ces configurations séparément, comme nous le verrons notamment équations (8.25) et (8.26).

Après la présentation de ces détails concernant le calcul des modes propres, il est facile de remonter à l'équation dynamique diagonalisée :

$$m\ddot{\mathcal{Y}}_s = -m\gamma\dot{\mathcal{Y}}_s + \mathbb{D}(h)\mathcal{Y}_s + \mathcal{N}_s(t) \quad (8.21)$$

avec  $\mathcal{Y}_s = \mathbb{A}^{-1}\tilde{\mathcal{X}}_s$  et où  $\mathcal{N}_s(t) = \mathbb{A}^{-1}\mathcal{M}_s(t)$  correspond de nouveau à un vecteur de bruits blancs non corrélés spatialement et temporellement, avec les mêmes propriétés statistiques que  $\mathcal{M}_s(t)$ .

Il nous reste donc plus qu'à réaliser l'étape de reconstruction des DQM correspondant à chaque modes pour remonter jusqu'aux DQM des particules  $A_p$  et  $B_p$ . On retrouve les déplacements des particules dans l'espace de Fourier à partir de  $\tilde{\mathcal{X}}_s = \mathbb{A}\mathcal{Y}_s$ . Le mouvement des particules dans l'espace physique correspond alors à :

$$\mathcal{X}_j = \sum_{s=1}^N \mathbb{A}_s \mathcal{Y}_s e^{i\frac{2\pi}{N}sj} \quad (8.22)$$

On peut exprimer la valeur du DQM  $\langle \Delta(\mathcal{X}_p^n)^2 \rangle$  à partir de la décomposition en modes de Fourier et profiter alors de l'orthogonalité des modes pour obtenir :

$$\langle \Delta(\mathcal{X}_p^n)^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \left\langle \sum_{s=1}^N \mathbb{A}_{nj}(s) \mathcal{Y}_s^j e^{i\frac{2\pi}{N}sp} \sum_{s'=1}^N \mathbb{A}_{nj}(s') \mathcal{Y}_{s'}^j e^{i\frac{2\pi}{N}s'p} \right\rangle \quad (8.23)$$

$$= \frac{1}{N^2} \sum_{s=1}^N \sum_{j=1}^4 |\mathbb{A}_{nj}|^2 \langle \Delta(\mathcal{Y}_s^j)^2 \rangle \quad (8.24)$$

Nous ne donnons et discutons que les DQM obtenues pour les particules  $A_p$  mais les mêmes équations sont obtenues pour les particules  $B_p$  en remplaçant  $x_p \rightarrow u_p$  et  $y_p \rightarrow v_p$ . On déduit donc de la superposition des modes que :

$$\begin{aligned} \langle \Delta x^2(t) \rangle &= \frac{2k_B T}{2Nm} \left( \frac{t}{2\gamma} - \frac{1}{2\gamma^2} (1 - e^{-\gamma t}) + \frac{1}{2\mathbb{D}_{2,2}(0)} \left[ 1 + \frac{\omega_{2,-} e^{\omega_{2,+} t}}{\omega_{2,+} - \omega_{2,-}} - \frac{\omega_{2,+} e^{\omega_{2,-} t}}{\omega_{2,+} - \omega_{2,-}} \right] \right. \\ &\quad \left. + \sum_{s=1}^N \sum_{j=1}^4 \frac{|\mathbb{A}_{1j}(s)|^2}{\mathbb{D}_{j,j}(s)} \left[ 1 + \frac{\omega_{j,-} e^{\omega_{j,+} t}}{\omega_{j,+} - \omega_{j,-}} - \frac{\omega_{j,+} e^{\omega_{j,-} t}}{\omega_{j,+} - \omega_{j,-}} \right] \right) \end{aligned} \quad (8.25)$$

$$\begin{aligned} \langle \Delta y^2(t) \rangle &= \frac{2k_B T}{2Nm} \left( \frac{1}{2\mathbb{D}_{1,1}(0)} \left[ 1 + \frac{\omega_{1,-} e^{\omega_{1,+} t} - \omega_{1,+} e^{\omega_{1,-} t}}{\omega_{1,+} - \omega_{1,-}} \right] + \frac{1}{2\mathbb{D}_{4,4}(0)} \left[ 1 + \frac{\omega_{4,-} e^{\omega_{4,+} t} - \omega_{4,+} e^{\omega_{4,-} t}}{\omega_{4,+} - \omega_{4,-}} \right] \right. \\ &\quad \left. + \sum_{s=1}^N \sum_{j=1}^4 \frac{|\mathbb{A}_{3j}(s)|^2}{\mathbb{D}_{j,j}(s)} \left[ 1 + \frac{\omega_{j,-} e^{\omega_{j,+} t} - \omega_{j,+} e^{\omega_{j,-} t}}{\omega_{j,+} - \omega_{j,-}} \right] \right) \end{aligned} \quad (8.26)$$

où  $\omega_{n,\pm} \equiv -\frac{\gamma}{2} \pm \sqrt{\frac{\gamma^2}{4} - \omega_n^2}$  avec  $\omega_n^2 = \mathbb{D}_{n,n}(s)/m$ .

Il est important de remarquer que la dépendance des modes  $s = 0$  a été séparée du reste des modes dans la reconstruction à cause de la particularité des vecteurs propres discutée précédemment. On observe notamment que seul les modes  $\mathbb{D}_{1,1}(s = 0)$  et  $\mathbb{D}_{4,4}(s = 0)$  sont impliqués dans le DQM transverse des particules, alors que seul les modes  $\mathbb{D}_{2,2}(s = 0)$  et  $\mathbb{D}_{3,3}(s = 0)$  jouent un rôle dans la reconstruction du DQM longitudinal. On note en particulier que le mode de fréquence nulle  $\mathbb{D}_{3,3}(s = 0) = 0$  influence uniquement le déplacement longitudinal des particules, ce qui est consistant avec le fait qu'il correspond à l'invariance par translation longitudinale du système.

Discutons maintenant les caractéristiques générales du DQM des particules.

### § Régime balistique à temps court ( $t < 1/\gamma$ )

Aux temps courts, tous les modes de la somme présentée équations (8.25) et (8.26) évoluent en  $t^2$  avec un coefficient donné par l'équation (8.5) et ceci indépendamment de la fréquence propre des modes. De plus à cause des propriétés de normalisation de la matrice de transfert  $\mathbb{A}$  on sait que  $\sum_{j=1}^4 |\mathbb{A}_{nj}|^2 = 1$  ce qui nous permet de trouver le comportement du régime balistique aux temps courts :

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \stackrel{t \rightarrow 0}{\sim} \frac{k_B T}{m} t^2 \quad \text{et} \quad \langle \Delta y^2(t) \rangle \stackrel{t \rightarrow 0}{\sim} \frac{k_B T}{m} t^2 \quad (8.27)$$

### § Régime intermédiaire

Dans le régime intermédiaire, à faible dissipation une évolution linéaire en temps peut être attendue alors qu'à forte dissipation une évolution en  $t^{1/2}$  typique du comportement de « Single File Diffusion » apparaît. Ces différents régimes correspondent à la superposition des DQM des modes propres du système, et à leur saturation respective aux temps longs comme on l'a montré dans la section 8.2. Cependant le choix de décrire un système avec un faible nombre de particules, afin d'observer une configuration en zigzag stable, implique que la durée de ce régime intermédiaire est faible [32].

### § Régime à temps long

Pour le régime à temps longs le mouvement de translation d'ensemble du système domine le DQM longitudinal. Pour les mouvements transverses on s'attend à avoir un comportement saturé aux temps longs, typique d'une particule piégée dans un potentiel.

Concernant le DQM longitudinal, lorsque  $t \rightarrow \infty$  tous les modes de fréquences non nulles finissent par saturer et seul le mode  $q = 0$  lié à l'invariance par translation joue un rôle dans l'équation (8.25). Le DQM longitudinal varie alors comme :

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2k_B T}{2Nm\gamma} t \quad (8.28)$$

La description de la saturation des mouvements transverses est à peine plus complexe. Chaque mode sature aux temps longs à une valeur  $\frac{2Nk_B T}{\mathbb{D}_{n,n}(s)}$ . La somme présentée équation (8.26) est alors dominée par les modes basses fréquences, notamment comme on l'a vu pour le mouvement longitudinal par le mode de fréquence nulle. Cependant cette fréquence propre n'entrant pas en jeu dans la reconstruction du DQM transverse les modes de plus basses fréquences correspondent à la branche acoustique transverse,  $\mathbb{D}_{3,3}(q)$ , de telle sorte que le mode de plus basse fréquence corresponde au mode indexé par  $s = 1$ , tel que  $q \approx \pi/N$ , ce qui nous permet d'estimer la variance transverse aux temps longs par :

$$\langle \Delta y^2(t) \rangle \stackrel{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2Nk_B T}{\mathbb{D}_{3,3}(\frac{\pi}{N})} \quad (8.29)$$

### § Comparaison avec les simulations

On retrouve ainsi ces trois régimes dans les figures 8.2, qui correspondent aux DQM longitudinaux et transverses mesurés pour des configurations zigzag de faible amplitude [ $h = 0.1$  mm, zone I dans la section 3.2.2] et de grande amplitude [ $h = 0.78$  mm, zone IV dans la section 3.2.2].

Aux temps courts, tous les DQM longitudinaux et transverses présentent le même comportement balistique en  $t^2$ .

Puis ce régime laisse la place au régime intermédiaire, d'autant plus rapidement atteint que la configuration zigzag est de faible amplitude. Ce régime intermédiaire, en  $t$  et en  $t^{1/2}$  respectivement pour les faibles et fortes dissipations, est plus marqué pour les mouvements longitudinaux que pour les mouvements transverses. Le régime corrélé n'étant visible que sur une décade dans le cas du mouvement transverse à faible amortissement.

Aux temps plus longs un régime diffusif linéaire en temps correspondant au mode de translation d'ensemble du système est retrouvé pour les DQM longitudinaux, le temps caractéristique de passage vers ce régime diffusif étant plus court pour le zigzag de faible amplitude.

Concernant les mouvements transverses, on observe bien une saturation pour toutes les configurations présentées ici avec, comme attendu, une valeur de saturation plus importante pour la configuration zigzag de grande amplitude, ce qui est cohérent avec l'expression présentée équation (8.29).

Maintenant que les caractéristiques régulières des DQM ont été discutées, on va s'intéresser à leur modification à l'approche des seuils de transition. Dans un premier temps nous discuterons de l'évolution des DQM à l'approche de la transition d'une configuration en zigzag vers celle en ligne, c'est à dire lorsque  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^-$  autrement dit lorsque  $h \rightarrow 0$ . Puis dans nous nous intéresserons aux transitions faisant passer le système d'une configuration homogène à une configuration inhomogène.

## 8.4 Divergence du DQM transverse et transition zigzag

En présence de fluctuations thermiques, le seuil de transition zigzag est difficile à définir et à mesurer précisément. En effet si l'on s'intéresse aux configurations moyennes prises par le système, on s'aperçoit que la valeur du seuil est sous estimée car juste en dessous du confinement seuil l'amplitude du zigzag est très faible et le système fluctue très rapidement entre les deux configurations zigzag et zagzig possibles, entraînant l'apparence d'une configuration en moyenne en ligne.

Il a été montré que l'étude des DQM transverses des particules dans la configuration en ligne à l'approche du seuil présente une divergence des valeurs de saturation au seuil [voir équation 8.15] [35]. Cette divergence offre l'opportunité de mesurer précisément le seuil de transition zigzag en présence d'un bain thermique. Nous rappellerons brièvement les comportements observés sur les DQM à l'approche de la transition zigzag par valeur supérieure  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^+$ , c'est à dire lorsque le système est

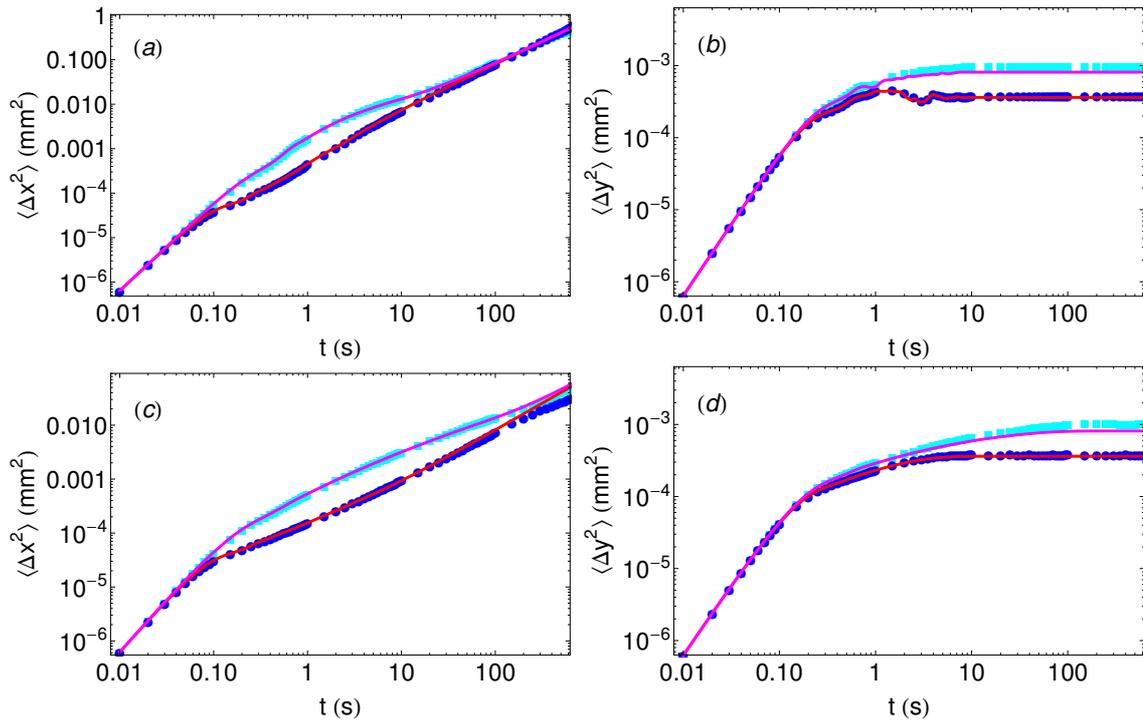


FIGURE 8.2 – Évolution du DQM des particules, à gauche selon la direction longitudinale et à droite selon la direction transverse. En haut  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  et en bas  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$ . Pour chaque figure les symboles correspondent aux valeurs mesurées à partir des simulations, pour un zigzag de hauteur  $h = 0.10 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.04$ ) en carrés cyans et  $h = 0.78 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.80$ ) en ronds bleus. Enfin les courbes continues correspondent aux DQM calculés à partir de la reconstruction des modes, respectivement en magenta et en rouge pour  $h = 0.10 \text{ mm}$  et  $h = 0.78 \text{ mm}$ .

en configuration en ligne, puis nous nous intéresserons à l'évolution du DQM transverse à l'approche de la transition par valeur inférieure  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^-$ , afin de pouvoir comparer l'évolution des comportements critiques de chaque côté du seuil de transition.

#### 8.4.1 Passage de la configuration en ligne à la configuration en zigzag

La figure 8.3 présente l'évolution du DQM transverse des particules de la chaîne à l'approche du seuil de transition zigzag. On observe qu'aux temps longs l'amplitude de saturation augmente lorsque  $\beta$  diminue et tend vers le seuil de transition zigzag.

Ceci peut s'expliquer simplement dans le cadre de notre modèle du DQM, la relation de dispersion de la chaîne est marquée, à la transition zigzag pour  $\beta = \beta_{ZZ}$ , par l'existence d'un mode de fréquence nulle de nombre d'onde  $q = \pi$ . L'apparition de ce mode mou est le signe d'une transition configurationnelle faisant passer le système d'une configuration en ligne à une configuration en zigzag. Ainsi, à l'approche de la transition zigzag, la fréquence propre du mode  $q = \pi$  diminue progressivement pour atteindre zéro à la transition. L'apparition de cette fréquence propre nulle est à l'origine de la divergence de la saturation en  $k_B T / (m\omega^2(s))$  du DQM transverse observé.

La figure 8.3 présente la comparaison entre les valeurs des DQM transverses mesurées à l'aide de simulations et le calcul réalisé à partir de la reconstruction des variances des modes propres.

On observe que l'accord entre les deux est parfait, et ce même pour des valeurs de confinement se rapprochant du seuil de transition zigzag.

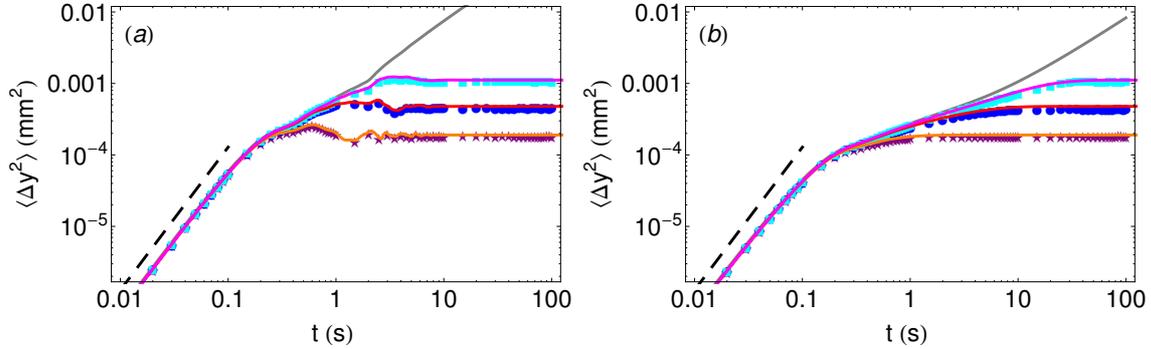


FIGURE 8.3 – Évolution temporelle du déplacement quadratique moyen transverse à l'approche du seuil de transition zigzag par valeur supérieure,  $\beta \geq \beta_{ZZ}$ , pour deux valeurs de dissipation différentes à gauche  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  et à droite  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$ , et pour une température  $T = 10^9 \text{ K}$ . Les symboles correspondent à des mesures effectuées sur des simulations et les courbes au calcul par reconstruction. Les confinements considérés sont tels que  $\epsilon = 0.061$  en étoiles violettes et trait orange,  $\epsilon = 0.012$  en ronds bleus et trait rouge et  $\epsilon = 0.0035$  en carrés cyans et trait magenta. Les courbes en gris correspondent au comportement limite attendu par le calcul lorsque  $\epsilon = 0$ . Le trait noir hachuré souligne le régime balistique à temps court.

De plus à partir de la reconstruction il est possible de calculer le DQM transverse des particules exactement au seuil de transition pour  $\beta = \beta_{ZZ}$ . On observe alors que le mouvement transverse des particules devient diffusif et linéaire en temps à temps long. Ceci est cohérent avec le fait qu'au seuil de transition zigzag la force exercée par le potentiel de confinement est exactement compensé par la force d'interaction entre particules, celle-ci ne ressentent aucun potentiel transverse et diffuse donc librement.

Plus quantitativement la figure 8.4 présente l'évolution de la valeur de saturation du DQM transverse en fonction de l'écart au confinement seuil  $\epsilon$  définit comme  $\beta = (1-\epsilon)\beta_{ZZ}$  et sa divergence à l'approche du seuil. L'insert en échelle Log-Log montre que ce comportement à temps long est principalement dominé par le DQM associé au mode transverse de nombre d'onde  $q = \pi$  dont la fréquence tend vers zéro à la transition.

Remarquons que le DQM longitudinal des particules n'est lui pas du tout modifié à l'approche du seuil de transition zigzag, comme on le voit à la fois sur les résultats de simulation et sur les reconstructions présentés figure 8.5. Cela n'a rien de surprenant car la relation de dispersion présentée équation (1.11) pour les modes longitudinaux qui contrôle le DQM longitudinal de la configuration en ligne ne dépend absolument pas du confinement transverse.

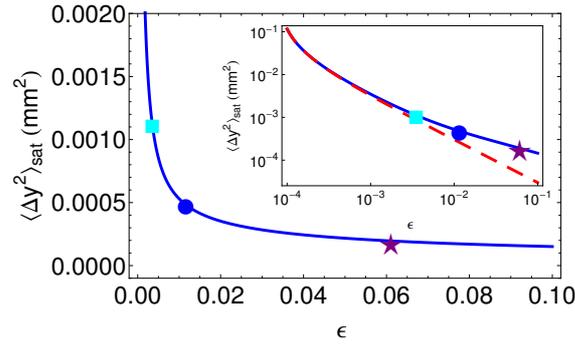


FIGURE 8.4 – Évolution de la valeur de saturation du DQM transverse à l’approche de la transition zigzag ( $\beta \geq \beta_{ZZ}$ ) pour une température de  $T = 10^9$  K. Les symboles correspondent aux différentes valeurs présentées dans la figure 8.3. La figure en insert représente la même évolution en échelle Log-Log et la courbe en pointillés rouge correspond à la valeur de saturation attendue uniquement pour le mode de nombre d’onde  $\pi$ , et qui domine le comportement lorsque  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}$ .

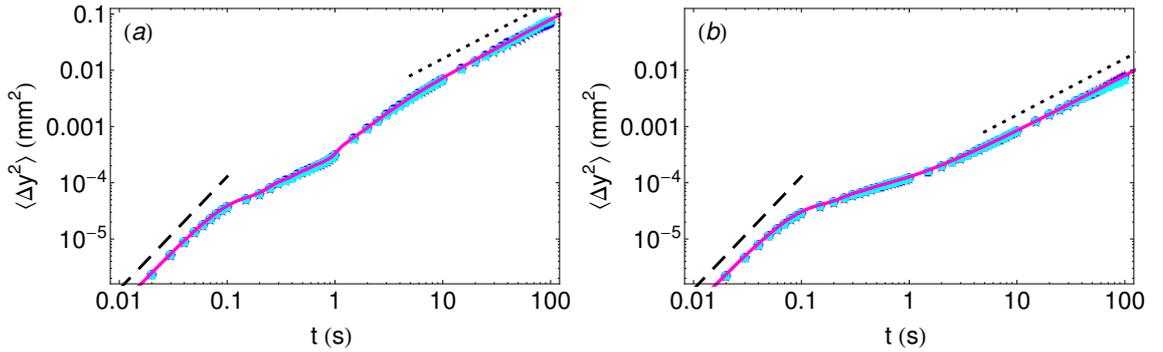


FIGURE 8.5 – Évolution temporelle du DQM longitudinal à l’approche du seuil de transition zigzag par valeur supérieure,  $\beta \geq \beta_{ZZ}$ , pour deux valeurs de dissipations différentes à gauche  $\gamma = 1$  s<sup>-1</sup> et à droite  $\gamma = 10$  s<sup>-1</sup>, et pour une température  $T = 10^9$  K. Les symboles correspondent à des mesures effectuées en simulations et les courbes au calcul par reconstruction des modes. Les confinements considérés sont tels que  $\epsilon = 0.061$  en étoiles violettes et trait orange,  $\epsilon = 0.012$  en ronds bleus et trait rouge et  $\epsilon = 0.0035$  en carrés cyans et trait magenta. Le trait tirets met en évidence le régime balistique à temps court et le trait en pointillés le comportement diffusif à temps long.

#### 8.4.2 Passage de la configuration en zigzag à la configuration en ligne

La présentation de la reconstruction des DQM à partir des comportements des modes propres de la configuration en zigzag, présentée section 8.3, nous permet maintenant de caractériser les mouvements du système à l’approche de la transition zigzag par valeur inférieure, c’est à dire pour  $\beta \lesssim \beta_{ZZ}$  et  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^-$ .

La grande différence par rapport à la section précédente est qu’il existe nécessairement un domaine de confinement proche de  $\beta_{ZZ}$  pour lequel les fluctuations thermiques permettent au système de transiter entre configuration zigzag et zagzig, ce qui rend la description plus délicate.

Le passage d’une configuration à l’autre correspond à un processus activé thermiquement. Le

temps caractéristique de passage entre configurations zigzag et zagzig suit une loi de Kramers [75] de telle sorte que le temps de passage moyen croit exponentiellement avec l'inverse de la température. Ainsi pour exhiber les comportements spécifiques du DQM à la transition, il est préférable de présenter les résultats obtenus à basse température de manière à augmenter fortement le temps passé par système dans une des deux configurations d'équilibre.

La figure 8.6 présente l'évolution du DQM transverse proche du confinement seuil  $\beta_{ZZ}$  ainsi obtenu. On retrouve un comportement très semblable à celui décrit pour l'approche de la transition zigzag par valeur supérieure. En effet aux temps courts on observe toujours en régime balistique. Puis pour des temps intermédiaires un régime corrélé, linéaire en temps pour les faibles dissipations et en racine du temps pour les fortes dissipations. Comme précédemment la durée de ce régime corrélé augmente lorsque l'on se rapproche du seuil de transition zigzag, entraînant une augmentation de la valeur de saturation observée aux temps longs. Les DQM mesurés à l'aide de simulations sont toujours en bon accord avec le calcul effectué par reconstruction des modes.

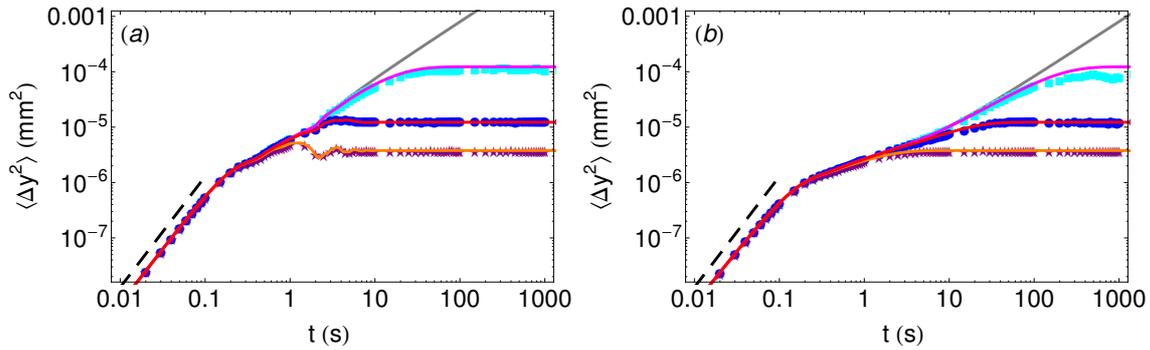


FIGURE 8.6 – Évolution temporelle du déplacement quadratique moyen transverse à l'approche du seuil de transition zigzag par valeur inférieure,  $\beta \leq \beta_{ZZ}$ , pour deux valeurs de dissipations différentes à gauche  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  et à droite  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$ , et pour une température  $T = 10^7 \text{ K}$ . Les symboles correspondent à des mesures effectuées en simulation et les courbes au calcul par reconstruction des modes. Les différents systèmes considérés sont caractérisés par la hauteur du zigzag telle que  $h = 0.069 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.015$ ) en étoiles violettes et trait orange,  $h = 0.022 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.002$ ) en ronds bleus et trait rouge et  $h = 0.0063 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.001$ ) en carrés cyans et trait magenta. Les courbes en gris correspondent au comportement limite attendu par le calcul des modes lorsque  $\epsilon = 0$ . Le trait noir hachuré met en avant le régime balistique à temps court.

La divergence des valeurs de saturation est présentée quantitativement figure 8.7, où l'on trace la valeur de saturation en fonction de la hauteur de la configuration zigzag et également en fonction de l'écart au seuil  $\epsilon$ . Pour rappel cette hauteur correspond de manière univoque à une valeur de raideur de confinement  $\beta$  d'après la relation présentée équation (2.1). On trouve de nouveau une divergence de la valeur de saturation à la transition dominée par le DQM du mode mou de nombre d'onde  $q = 0$  (lié au repliement dans la demie zone de Brillouin du mode  $\pi$ ) à l'approche de la transition. De plus cette divergence est caractérisée par une croissance en  $h^{-2}$  à l'approche du seuil, comme le montre l'insert figure 8.7). Ce comportement correspond à une divergence en  $\epsilon^{-1}$  attendue car la hauteur du zigzag est proportionnelle à la racine carrée de l'écart au seuil proche de celui-ci [voir insert figure 8.7].

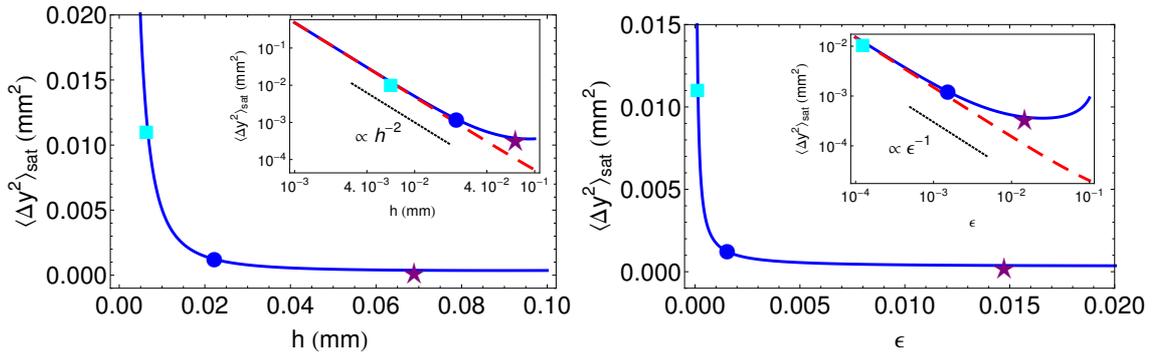


FIGURE 8.7 – Évolution de la valeur de saturation du DQM transverse à gauche en fonction de la hauteur du zigzag et à droite en fonction de  $\epsilon$ , à l'approche de la transition zigzag par valeur inférieure ( $\beta \leq \beta_{ZZ}^-$ ) pour une température de  $T = 10^7$  K. Les symboles correspondent aux différentes valeurs présentées dans la figures 8.6 et 8.8. Les figures en insert représentent la même évolution en échelle Log-Log et les courbes en pointillés rouges correspondent aux valeurs de saturation attendues uniquement pour le mode de nombre d'onde  $\pi/2$ , et qui dominent le comportement lorsque  $h \rightarrow 0$ .

On peut comprendre plus quantitativement la forte augmentation du DQM à l'approche du seuil d'après l'analyse des modes propres du système en remarquant que de nouveau cette augmentation est liée à l'apparition d'un mode mou de fréquence nulle lorsque  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^-$ . Comme on l'a vu dans la section 8.3, le comportement à temps long du DQM transverse est dominé par le DQM associé au mode de fréquence la plus basse. Dans ce contexte pour  $h \rightarrow 0^+$ , on trouve que la fréquence propre la plus petite, correspond au nombre d'onde  $q = 0$ . On obtient alors pour la valeur de saturation l'expression :

$$\langle \Delta y^2(t) \rangle \xrightarrow{t \rightarrow \infty} \frac{2Nk_B T}{\mathbb{D}_{4,4}(0)} \sim \frac{2Nk_B T}{C_4(d_0)h^2} \quad (8.30)$$

où l'expression la plus à droite a été obtenue à partir du développement de la fréquence propre  $\mathbb{D}_{4,4}(0)$  dans la limite  $h \rightarrow 0^+$ . On retrouve avec ce développement la divergence en  $h^{-2}$  à l'approche de la transition zigzag par valeur inférieure.

### § Comportement du DQM longitudinal à la transition

Finalement, la figure 8.8 présente l'évolution des DQM longitudinaux en fonction du temps à l'approche de la transition. On observe que les DQM longitudinaux sont identiques pour les différentes valeurs de confinements présentées figure 8.8. Ceci confirme que la transition zigzag n'induit aucune modification particulière dans les mouvements longitudinaux des particules, à la fois pour l'approche par valeur supérieure  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^+$  comme on l'a vu précédemment mais également pour l'approche par valeur inférieure  $\beta \rightarrow \beta_{ZZ}^-$  de la transition zigzag. Ceci s'explique par le fait que des deux côtés de la transition, les configurations sont homogènes.

4. L'expression exact du coefficient  $C_4(d_0)$  correspond à :

$$C_4(d_0) = \sum_{p=1}^N 16 \frac{F((2p-1)d_0) - (2p-1)d_0 K((2p-1)d_0)}{(2p-1)^3 d_0^3}$$

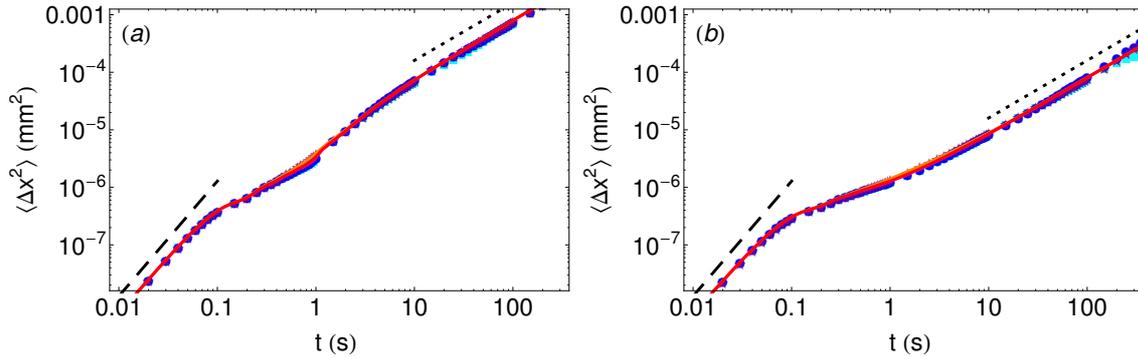


FIGURE 8.8 – Évolution temporelle du déplacement quadratique moyen longitudinal à l'approche du seuil de transition zigzag par valeur inférieure,  $\beta \leq \beta_{ZZ}$ , pour deux valeurs de dissipations différentes en (a)  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  et en (b)  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$ , et pour une température  $T = 10^7 \text{ K}$ . Les symboles correspondent à des mesures effectuées en simulations et les courbes au calcul par reconstruction des modes. Les configurations considérées sont telles que  $h = 0.069 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.015$ ) en étoiles violettes et trait orange,  $h = 0.022 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.002$ ) en ronds bleus et trait rouge et  $h = 0.0063 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.001$ ) en carrés cyans et trait magenta. Le trait tirets met en évidence le régime balistique à temps court et le trait en pointillés le comportement diffusif à temps long.

## 8.5 Modification du DQM et déstabilisation du zigzag vers les configurations inhomogènes

Dans cette section nous allons nous intéresser à la transition faisant passer le système d'une configuration en zigzag homogène à une configuration en zigzag inhomogène.

Nous allons voir que la perte de stabilité de la configuration en zigzag entraîne d'importantes modifications des DQM des particules à l'approche du seuil d'instabilité. Au delà de la similarité du comportement de divergence des DQM transverse à la transition zigzag, on montrera que les comportements critiques à l'approche des hauteurs seuils révèlent une différence de mécanisme de déstabilisation complètement différent. Nous montrerons notamment que le DQM longitudinal des particules est modifié à l'approche de la transition vers une configuration zigzag inhomogène.

### 8.5.1 Évolution de la variance transverse à la transition homogène/inhomogène

Dans cette sous-section l'évolution du DQM transverse des particules à l'intérieur de la configuration zigzag est décrite à l'approche des hauteurs critiques de perte de stabilité du zigzag,  $h_{C1}$  et  $h_{C2}$  définis équations (2.37) et (2.38). Ces deux hauteurs seuils sont caractérisées par l'apparition d'un mode propre de fréquence nulle, correspondant au plus petit nombre d'onde  $q = \pi/N$  nul accessible pour un système de  $2N$  particules. L'apparition de ce mode mou lié à la perte de stabilité entraîne, comme au seuil de transition zigzag, une augmentation importante de la valeur de saturation du DQM transverse.

La figure 8.9 montre le DQM transverse correspondant pour des confinements se rapprochant de plus en plus de celui associé à la hauteur seuil  $h \rightarrow h_{C1}^-$ . On observe pour chaque configuration

un régime balistique à temps court puis un régime intermédiaire corrélé en  $t^{1/2}$ , suivit d'un changement de régime caractérisé par un comportement linéaire en temps dont la durée augmente avec l'approche de la hauteur seuil, avant que ne soit atteint une valeur de saturation. Pour toutes les configurations on observe une saturation du DQM dont la valeur augmente lorsque l'on se rapproche du seuil,  $h_{C1}$ .

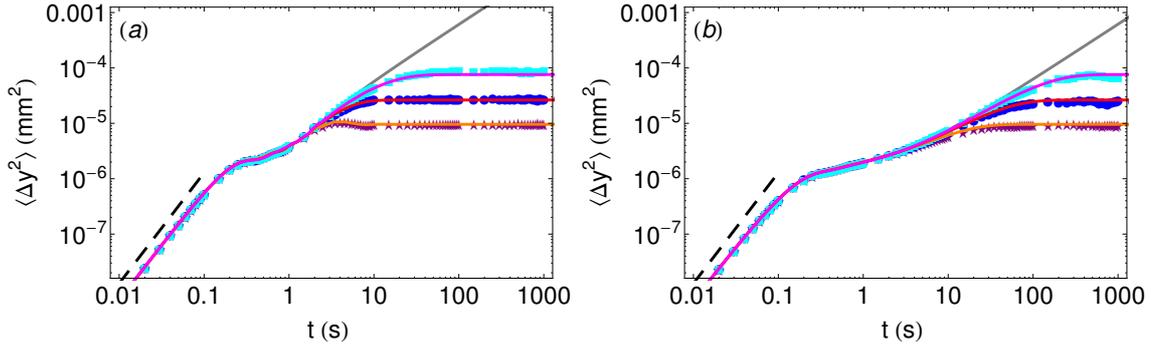


FIGURE 8.9 – Évolution temporelle du déplacement quadratique moyen transverse à l'approche de la hauteur seuil  $h_{C1}$  par valeur inférieure, pour deux valeurs de dissipation différentes en (a)  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  et en (b)  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$ , et pour une température  $T = 10^7 \text{ K}$ . Les symboles correspondent à des mesures effectuées à l'aide de simulations et les courbes au calcul analytique. Les différents système considérés sont caractérisés par la hauteur du zigzag telle que  $h = 0.181 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.10$ ) en étoiles violettes et trait orange,  $h = 0.198 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.112$ ) en ronds bleus et trait rouge et  $h = 0.201 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.117$ ) en carrés cyans et trait magenta. Les courbes en gris correspondent au comportement limite attendu par le calcul des modes lorsque  $\epsilon = 0$ . Le système considéré contient  $2N = 16$  particules dans une cellule périodique de longueur  $L = 30 \text{ mm}$ , et pour laquelle  $h_{C1} = 0.2037 \text{ mm}$ .

L'augmentation de la valeur de saturation du DQM en fonction de la hauteur est présentée figure 8.10. On observe bien que la saturation diverge à l'approche de la hauteur seuil  $h_{C1}$ . L'insert nous montre cependant que cette divergence augmente comme l'inverse de l'écart à la hauteur seuil,  $(h_{C1} - h)^{-1}$  et non plus en  $h^{-2}$  comme précédemment.

De manière équivalente la figure 8.11 présente les DQM transverses des particules à l'approche du second seuil de perte de stabilité  $h_{C2}$ , pour des hauteurs diminuant et se rapprochant de  $h \rightarrow h_{C2}^+$ . Le comportement observé est parfaitement similaire à celui de  $h_{C1}$ , avec une augmentation de la valeur de saturation à l'approche du seuil. La figure 8.10 montre la divergence de la saturation, qui est de nouveau proportionnelle à l'inverse de l'écart à la hauteur seuil,  $(h - h_{C2})^{-1}$ .

Ces divergences correspondent bien à la prédominance progressive dans le DQM transverse de la contribution du mode  $q = \pi/N$  dont la fréquence tend vers zéro lorsque l'on s'approche de l'instabilité du zigzag homogène.

En effet l'expression du DQM transverse se réduit alors à :

$$\langle \Delta y^2(t) \rangle \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2N |A_{3,3}(\frac{\pi}{N})|^2 k_B T}{\mathbb{D}_{3,3}(\frac{\pi}{N})} \underset{h \rightarrow h_{C1}^-}{\sim} \frac{2N k_B T}{C_{h1}(h_{C1} - h)} \quad \text{et} \quad \langle \Delta y^2(t) \rangle \underset{h \rightarrow h_{C2}^+}{\sim} \frac{2N k_B T}{C_{h2}(h - h_{C2})} \quad (8.31)$$

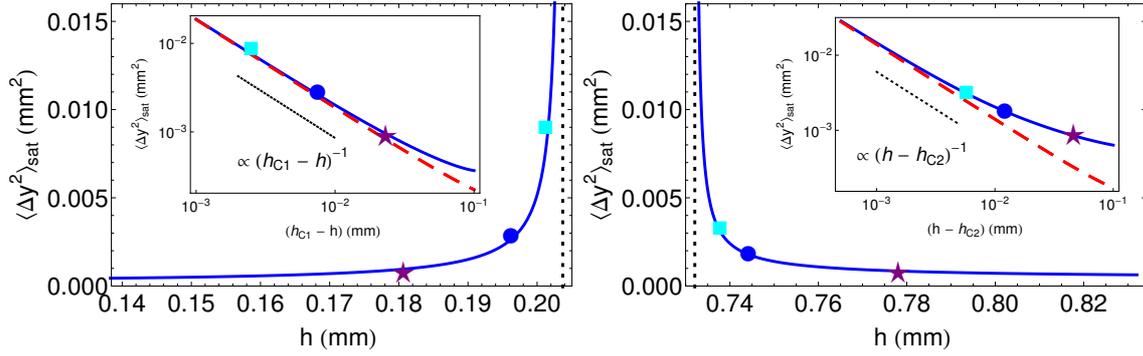


FIGURE 8.10 – Évolution de la valeur de saturation du DQM transverse en fonction de la hauteur du zigzag, à l'approche des hauteurs seuils, à gauche  $h_{C1}$  par valeur inférieure et à droite  $h_{C2}$  par valeur supérieure, pour une température de  $T = 10^7$  K. Les symboles correspondent aux différentes valeurs présentées figures 8.9, 8.13, 8.11 et 8.14. Les figures en insert représentent la même évolution en échelle Log-Log et à chaque fois la courbe en pointillé rouge correspond à la valeur de saturation attendue pour le mode correspondant au premier nombre d'onde nul  $\pi/N$ , qui domine les comportements lorsque  $h \rightarrow h_{C1}^-$  et  $h \rightarrow h_{C2}^+$ .

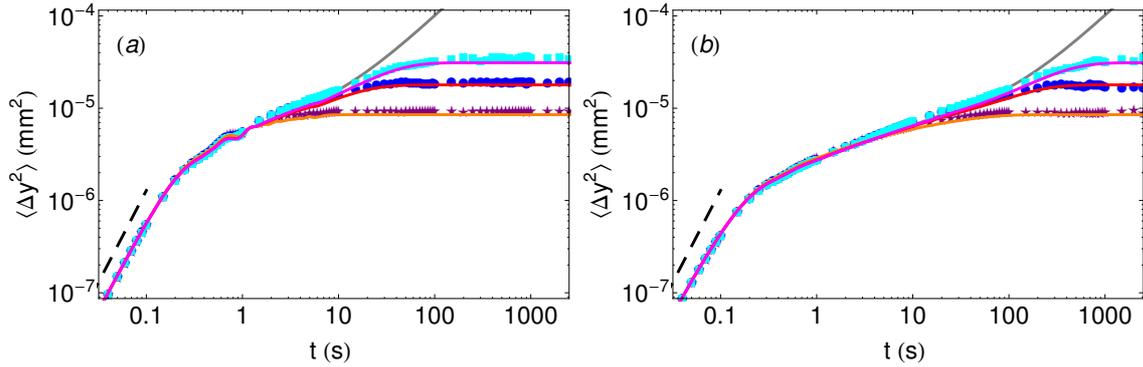


FIGURE 8.11 – Évolution temporelle du DQM transverse à l'approche de la hauteur seuil  $h_{C2}$  par valeur supérieure, pour deux valeurs de dissipations différentes à gauche  $\gamma = 1$  s $^{-1}$  et à droite  $\gamma = 10$  s $^{-1}$ , et pour une température  $T = 10^7$  K. Les symboles correspondent à des mesures effectuées en simulation et les courbes au calcul par reconstruction des modes. Les différents système considérés sont caractérisés par la hauteur du zigzag telle que  $h = 0.778$  mm ( $\epsilon = 0.794$ ) en étoiles violettes et trait orange,  $h = 0.744$  mm ( $\epsilon = 0.769$ ) en ronds bleus et trait rouge et  $h = 0.738$  mm ( $\epsilon = 0.763$ ) en carrés cyans et trait magenta. Les courbes en gris correspondent au comportement limite attendu par le calcul des modes lorsque  $\epsilon = 0$ . Le trait en tirets met en avant le régime balistique à temps court. Le système considéré contient  $2N = 16$  particules dans une cellule périodique de longueur  $L = 30$  mm, et pour laquelle  $h_{C2} = 0.7321$  mm.

Les expressions pour les dépendances de  $\mathbb{D}_{3,3}(\frac{\pi}{N})/|\mathbb{A}_{3,3}(\frac{\pi}{N})|^2$  sont obtenues numériquement à l'aide d'un développement autour des hauteurs seuils  $h_{C1}$  et  $h_{C2}$ . On trouve que l'évolution de  $\mathbb{D}_{3,3}(\frac{\pi}{N})$  proche des hauteurs seuil est linéaire comme le montre la figure 8.12. Les coefficients  $C_{h1}$  et  $C_{h2}$  sont estimés numériquement, à l'aide un ajustement linéaire on trouve  $C_{h1} = 3.7 \times 10^{-1}$  kg.m $^{-1}$ .s $^{-2}$  et  $C_{h2} = 5.0 \times 10^{-1}$  kg.m $^{-1}$ .s $^{-2}$ . On retrouve avec ce développement la dépendance en  $(h_{C1} - h)^{-1}$  et  $(h - h_{C2})^{-1}$  de la valeur de saturation des DQM transverses à l'approche du seuil

de perte de stabilité du zigzag.

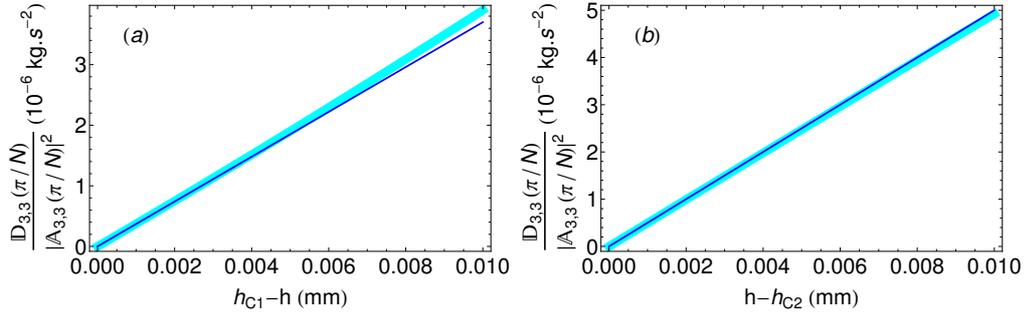


FIGURE 8.12 – Évolution du rapport  $\mathbb{D}_{3,3}(\frac{\pi}{N})/|\mathbb{A}_{3,3}(\frac{\pi}{N})|^2$  en fonction de l'écart aux valeurs de hauteurs seuils  $h_{C1}$  en (a) et  $h_{C2}$  en (b). Les larges traits plein cyan correspondent à l'estimation numérique et les fines droites en bleues correspondent à l'ajustement linéaire. Les hauteurs seuils sont  $h_{C1} = 0.2037$  mm en (a) et  $h_{C2} = 0.7321$  mm en (b) pour un système de  $2N = 16$  particules dans une cellule périodique de longueur  $L = 30$  mm, comme dans les figures 8.9 et 8.11.

### 8.5.2 Évolution de la variance longitudinale à la transition homogène/inhomogène

Finalement nous allons décrire l'évolution du DQM longitudinal à l'approche des hauteurs seuils  $h_{C1}$  et  $h_{C2}$ . Contrairement au cas de la transition zigzag pour laquelle le DQM longitudinal reste identique, la transition homogène/inhomogène entraîne une augmentation du DQM longitudinal des particules.

Les figures 8.13 et 8.14 présentent plusieurs DQM longitudinaux en fonction du temps pour des configurations zigzag dont la hauteur tend respectivement de  $h_{C1}$  par valeur inférieure et  $h_{C2}$  par valeur supérieure. Ces courbes présentent des caractères similaires, aux temps courts le DQM suit un régime balistique classique, puis un court régime corrélé est visible avec toujours un comportement à faible dissipation linéaire en temps et à forte dissipation en racine du temps. Et enfin aux temps long le système retrouve un régime linéaire en temps. Cependant comme le montrent les inserts figures 8.13 et 8.14, le DQM longitudinal des particules augmente légèrement à l'approche des hauteurs seuils respectivement  $h_{C1}$  et  $h_{C2}$ .

Cette augmentation du coefficient de diffusion des particules est présentée dans la figure 8.15 à l'approche des deux seuils  $h_{C1}$  et  $h_{C2}$  en fonction de la hauteur de la configuration zigzag. On voit cette fois-ci que l'augmentation du coefficient de diffusion est saturée.

Le calcul du comportement à temps long des DQM longitudinaux à l'approche des hauteurs seuils de perte de stabilité peut être obtenu à partir de l'expression équation (8.25). En effet les valeurs limites du coefficient de diffusion attendues aux temps longs lorsque  $h = h_{C1}$  et  $h = h_{C2}$  sont dominées par les contributions des deux modes dont les valeurs propres sont nulles et qui conduisent à un DQM longitudinal de la forme :

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \frac{2k_B T}{2Nm\gamma} t(1 + 4|\mathbb{A}_{13}(\frac{\pi}{N})|^2) \quad (8.32)$$

L'augmentation du coefficient de diffusion dépend donc directement de la valeur du coefficient  $|\mathbb{A}_{13}(\frac{\pi}{N})|^2$  lorsque  $h = h_{C1}$  et  $h = h_{C2}$ , on trouve respectivement des valeurs numériques de 0.498

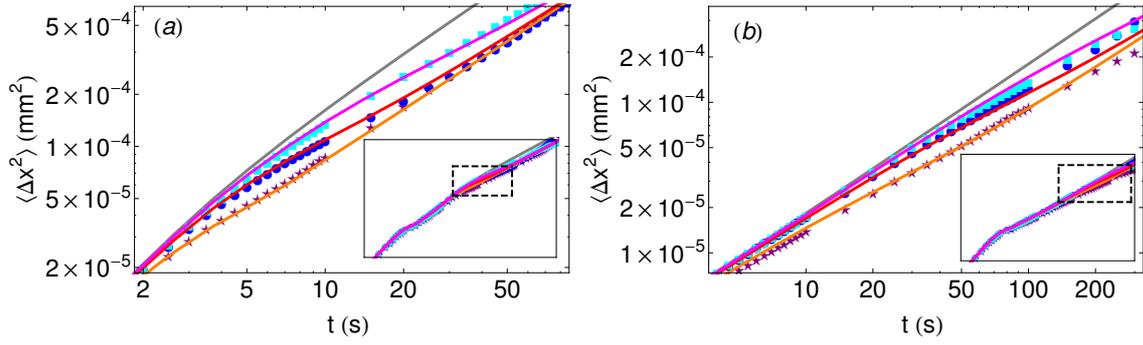


FIGURE 8.13 – Évolution temporelle du DQM longitudinal à l'approche de la hauteur seuil  $h_{C1}$  par valeur inférieure, pour deux valeurs de dissipations différentes en (a)  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  et en (b)  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$ , et pour une température  $T = 10^7 \text{ K}$ . Les symboles correspondent à des mesures effectuées par simulation et les courbes au calcul par reconstruction des modes. Les différents systèmes considérés sont caractérisés par la hauteur du zigzag telle que  $h = 0.181 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.10$ ) en étoiles violettes et trait orange,  $h = 0.198 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.112$ ) en ronds bleus et trait rouge et  $h = 0.201 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.117$ ) en carrés cyans et trait magenta. Les courbes en gris correspondent au comportement limite attendu par le calcul des modes lorsque  $h = h_{C1}$ . L'insert montre l'évolution complète du DQM, sur une plage de temps plus longue. Le système considéré contient  $2N = 16$  particules dans une cellule périodique de longueur  $L = 30 \text{ mm}$ , et pour laquelle  $h_{C1} = 0.2037 \text{ mm}$ .

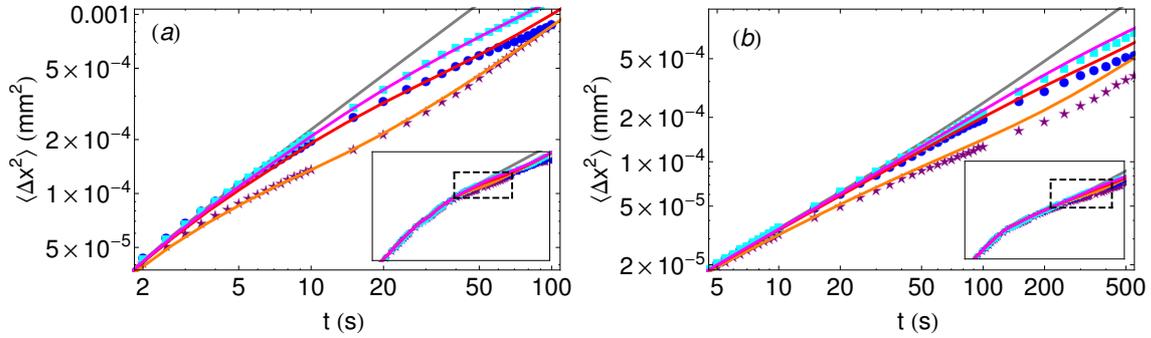


FIGURE 8.14 – Évolution temporelle du DQM longitudinal à l'approche de la hauteur seuil  $h_{C2}$  par valeur supérieure, pour deux valeurs de dissipations différentes en (a)  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  et en (b)  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$ , et pour une température  $T = 10^7 \text{ K}$ . Les symboles correspondent à des mesures effectuées en simulations et les courbes au calcul par reconstruction des modes. Les différents système considérés sont caractérisés par la hauteur du zigzag telle que  $h = 0.778 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.794$ ) en étoiles violettes et trait orange,  $h = 0.744 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.769$ ) en ronds bleus et trait rouge et  $h = 0.738 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.763$ ) en carrés cyans et trait magenta. Les courbes en gris correspondent au comportement limite attendu par le calcul des modes lorsque  $\epsilon = 0$ . L'insert montre l'évolution complète du DQM, sur une plage de temps plus longue. Le système considéré contient  $2N = 16$  particules dans une cellule périodique de longueur  $L = 30 \text{ mm}$ , et pour laquelle  $h_{C2} = 0.7321 \text{ mm}$ .

et 0.461. Ces valeurs correspondent à un multiplication par deux du coefficient de diffusion aux temps longs, dont on retrouve la trace sur les DQM longitudinaux à l'approche des seuils [voir

figures 8.13, 8.14 et 8.15].

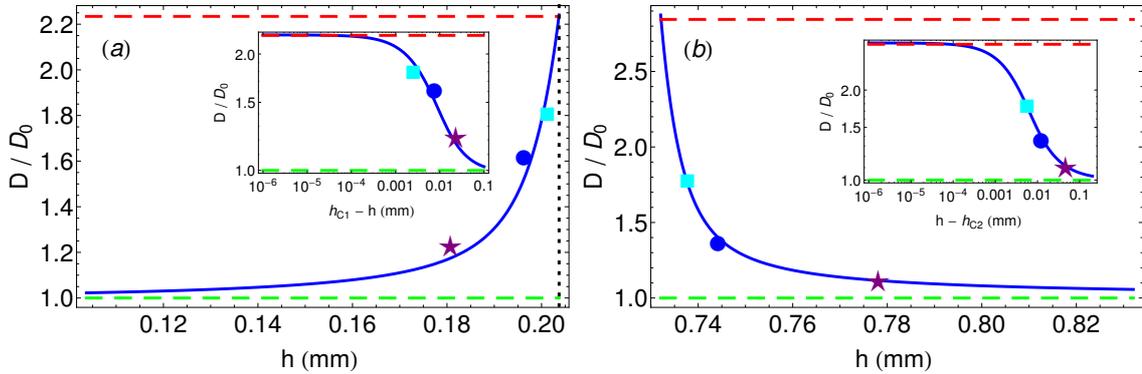


FIGURE 8.15 – Évolution de la valeur du coefficient de diffusion à temps long du DQM longitudinal (en unité de  $D_0 = k_B T / (m\gamma)$ ) en fonction de la hauteur du zigzag, à l’approche des hauteurs seuils, en (a)  $h_{C1}$  par valeur inférieure et en (b)  $h_{C2}$  par valeur supérieure. Les symboles correspondent aux différentes valeurs présentées figures 8.13, 8.13, 8.11 et 8.14. Les figures en insert représentent la même évolution en échelle Log-Log et à chaque fois la courbe en pointillé rouge correspond à la valeur de saturation attendue pour le mode correspondant au premier nombre d’onde non nul  $\pi/N$ , qui domine les comportements lorsque  $h \rightarrow h_{C1}$  et  $h \rightarrow h_{C2}$ .

## 8.6 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons montré comment l’analyse des comportements dynamiques des particules pouvait renseigner sur les propriétés structurales des systèmes qu’elles constituent<sup>5</sup>. Nous avons rappelé les principes généraux de la méthode de reconstruction de leurs DQM à partir des équations associées aux modes propres du système dans le contexte d’une seule chaîne de particule [35], puis l’avons étendue à l’analyse de DQM des particules dans une configuration zigzag en double chaîne.

Nous avons utilisé cette méthode pour interpréter les comportements observés des DQM lors des transition structurelles du systèmes, qu’il s’agisse de la transition entre système homogène (ligne et zigzag) ou entre systèmes homogène/inhomogène (zigzag et bulle).

Au voisinage de la transition entre configurations homogènes (ligne et zigzag), nous avons pu décrire la divergence des DQM transverse à l’approche du seuil  $\beta_{ZZ}$  à la fois par valeur supérieure, comme cela avait déjà été réalisé à partir de la configuration en ligne [30] mais également par valeur inférieure à partir de la configuration en zigzag, pour laquelle nous avons montré que la saturation du DQM transverse diverge comme l’inverse de l’écart au seuil de la transition zigzag, soit en  $h^{-2}$ , de manière symétrique par rapport à l’approche par valeur supérieure. Nous avons remarqué qu’à l’inverse aucune modification n’est visible sur les DQM longitudinaux au passage de la transition entre configurations homogènes.

5. Dans ce chapitre nous nous sommes restreints à la description de petits systèmes, pour lesquels la configuration en zigzag homogène est stable pour une large gamme de confinement [voir chapitre 2]

Près des seuils de transition entre une configuration homogène et inhomogène (zigzag et bulle), comme pour la perte de stabilité de la configuration zigzag, nous avons montré que lorsque  $h \rightarrow h_{C1}^-$  par valeur inférieure et  $h \rightarrow h_{C2}^+$  par valeur supérieure, la valeur de saturation du DQM transverse diverge comme l'inverse de l'écart à la hauteur seuil. Nous avons également mis en évidence la modification du DQM longitudinal à l'approche de la transition entre configuration homogène et inhomogène, au travers de l'augmentation du coefficient de diffusion, phénomène non observé lors de la transition entre configurations homogènes (ligne et zigzag).

# Chapitre 9

## Diffusion d'une chaîne dans un potentiel périodique

### Sommaire

---

<b>9.1 Introduction</b>	<b>169</b>
<b>9.2 Quelques résultats antérieurs</b>	<b>171</b>
<b>9.3 Mouvement d'une chaîne dans un potentiel statique : influence de la commensurabilité</b>	<b>172</b>
9.3.1 Présentation d'un modèle à deux particules par période	173
9.3.2 Validation du modèle par comparaison avec des simulations	179
9.3.3 Interprétation des observations en îlot de Wigner	181
<b>9.4 Mouvement d'une chaîne dans un potentiel fluctuant</b>	<b>183</b>
9.4.1 Rôle des fluctuations sur le mouvement de la chaîne de particule et configuration zigzag	184
9.4.2 Mécanismes de transmission des fluctuations	185
<b>9.5 Conclusion</b>	<b>191</b>

---

### 9.1 Introduction

Dans ce chapitre nous allons étudier la diffusion d'une chaîne de particules soumise à un potentiel périodique. Contrairement au chapitre précédent où nous avons étudié la diffusion des particules dans la configuration zigzag, nous avons choisi ici de découpler les deux chaînes de la configuration et de considérer uniquement la diffusion d'une chaîne de particules dans le potentiel créé par l'autre chaîne.

La question de la diffusion d'une particule dans un potentiel périodique est un problème très ancien, pour lequel de très nombreux résultats ont été obtenus, à commencer par les premiers résultats théoriques concernant la diffusion d'une particule dans un potentiel périodique statique, montrant la diminution drastique du coefficient de diffusion avec l'augmentation de la hauteur de barrière du potentiel [53, 54, 40]. Ces résultats ont été suivis de nombreuses avancées concernant la diffusion d'une particule dans un potentiel asymétrique, de type « ratchet » ou ayant des barrières

intermittentes et fluctuantes en amplitude (Résonance stochastique) [101, 50, 16, 93]. D'autres travaux ont été consacrés à la diffusion dans un potentiel périodique d'une particule soumise à une force extérieure statique ou oscillante [92].

Ce n'est que plus récemment qu'un intérêt a été porté à la diffusion de systèmes de particules couplés, comme par exemple les dimères [65]. Ces études n'ont été que peu poursuivies et le mouvement diffusif d'une chaîne de particules dans un potentiel statique périodique reste encore assez mal compris. Deux types de résultats ont été obtenus, leurs domaines de validité étant guidés le plus souvent par les limites des modèles utilisés. Les uns s'intéressent au mouvement de la chaîne sur des distances plus grandes que le pas du potentiel, les seconds au contraire ne décrivent que le comportement des particules diffusant sur des distances inférieures à ce pas. Nous présenterons plus en détails ces résultats dans la section 9.2.

En outre aucune étude à notre connaissance ne s'est intéressée au problème de la diffusion d'une chaîne dans un potentiel fluctuant en position. Pourtant dans de nombreux systèmes, comme par exemple dans les chaînes de vortex dans les supraconducteurs en bandes [19], dans les chaînes d'ions dans des canaux ioniques ou dans des systèmes de billes confinées en îlots de Wigner, le potentiel de confinement fluctue et ces questions peuvent être importantes.

Dans ce contexte, nos systèmes quasi-unidimensionnels peuvent être de bons candidats pour être des systèmes modèles dès lors qu'on les considère comme un sous-système diffusant dans un potentiel périodique créée par l'autre partie du système. Ainsi un zigzag de  $2N$  particules, correspond à une chaîne de  $N$  particules qui diffusent dans un potentiel périodique de  $N$  périodes créé par la seconde chaîne. La configuration d'un tel système ne comporte donc qu'une seule particule par maille. Cependant dans les systèmes annulaires il est possible d'observer des structures pour lesquelles plusieurs particules de la chaîne se trouvent dans chaque période du potentiel. On retrouve notamment de telles géométries dans les systèmes en îlots de Wigner vers lesquels nous reviendrons en détails section 9.3.3.

Après avoir rappelé section 9.2 les principaux résultats existants concernant le comportement dynamique d'une chaîne dans un potentiel périodique statique, nous nous intéresserons successivement aux cas de configurations commensurables contenant une ou plusieurs particules par période du potentiel (section 9.3). Nous montrerons en particulier que la diffusion des particules peut être augmentée par rapport à celle des particules d'une chaîne libre. Nous avons appliqué cette analyse au cas des particules d'îlots de Wigner dans lesquels un accroissement de la diffusion avait été observé. Ces systèmes de particules confinées dans un disque s'organisent en couronne concentrique, la position relative des particules sur les couronnes étant identiques à celles du modèle proposé.

Toutefois nous montrerons que les observations qui avaient été faites dans ces systèmes de particules confinées circulairement ne peuvent être expliquées uniquement à partir de l'étude du mouvement de la chaîne dans un potentiel statique.

C'est pourquoi nous nous intéresserons ensuite à l'influence des fluctuations thermiques de position du potentiel sur le mouvement de la chaîne (section 9.4), l'hypothèse ayant été faite d'un « transfert de fluctuations » du potentiel aux particules de la chaîne. Cette hypothèse sera validée en comparant le mouvement d'une chaîne de particules dans un potentiel périodique fluctuant avec

une particule par période de potentiel au mouvement des particules dans la configuration zigzag. Puis nous présenterons quelques pistes qui pourraient expliquer l'origine de ce processus de transfert de fluctuations. Nous introduirons la notion de *température effective* pour décrire le transfert direct de fluctuations thermiques à la particule et la notion de *potentiel effectif* pour décrire le potentiel moyen ressenti par la particule de la chaîne.

## 9.2 Quelques résultats antérieurs

Les études décrivant le mouvement d'une chaîne sur des distances plus grandes que la période du réseau concernent soit des systèmes de particules en interaction de type « cœur dur » soit une chaîne de particules liées par un ressort.

Dans le cas des interactions « cœur dur », Taloni *et al* [105] ont montré que la mobilité  $F$  des particules en présence d'un potentiel pouvait être obtenue simplement en remplaçant le coefficient de diffusion libre d'une particule  $D_0$  dans l'expression de la mobilité en absence de potentiel  $F_0 = \sqrt{4D_0}/(\rho^2\pi)$  par le coefficient de diffusion  $D_\sim$  d'une particule en présence du potentiel. Le bon accord entre la mobilité  $F$  obtenue par simulation et celle calculée en utilisant  $F = \sqrt{4D_\sim}/(\rho^2\pi)$  confirme la validité de cette procédure. Qualitativement, l'argument utilisé par Taloni *et al* [105] peut se comprendre en considérant que dans le cas d'une interaction de contact, une particule ne ressent l'existence de ses voisines que lorsqu'elle a diffusé en moyenne sur la distance entre particules. Ce déplacement sera décrit par  $D_0$  ou  $D_\sim$  selon que la diffusion de la chaîne se fera ou non sur un potentiel périodique. On peut s'en convaincre plus quantitativement en retrouvant la formule de la mobilité  $F$ . Le régime corrélé débute lorsqu'une particule du système a diffusé sur la distance  $d$  entre particules, soit à partir d'un temps  $t$  tel que  $t \sim d^2/(2D)$  où  $D$  est le coefficient de diffusion d'une seule particule (égal à  $D_0$  ou  $D_\sim$  selon les cas). L'évolution temporelle de ce régime intermédiaire dépend de  $n(t)$ , la densité de particules qui n'ont pas parcouru cette distance  $d$  à l'instant  $t$ . Cette densité diminue au cours du temps et est simplement donnée par :

$$n(t) = \int_{-d}^d \frac{dx}{\sqrt{4\pi Dt}} e^{-\frac{x^2}{4Dt}} \underset{t \rightarrow \infty}{\sim} \int_{-d}^d \frac{dx}{\sqrt{4\pi Dt}} \sim \frac{d}{\sqrt{\pi Dt}} \quad (9.1)$$

Dans ce cadre, le DQM est alors simplement donné par :

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle = 2Dt \frac{d}{\sqrt{\pi Dt}} \quad (9.2)$$

ce qui conduit à  $F = \sqrt{4D}/(\rho\pi)$ , expression proposée par Taloni *et al.* [105]. Ce raisonnement est totalement général et reste valable pour toute particule ayant un mouvement diffusif.

Le second type de modèle décrivant le mouvement de la chaîne sur plusieurs périodes du potentiel relève des modèles de type Sine–Gordon ou Frenkel–Kontorova [15]. Parmi eux, le modèle de Gunther et Imry [62] propose une image simple pour expliquer les DQM des particules. Ce modèle considère une chaîne de particules liées par des ressorts et se déplaçant dans un potentiel sinusoïdal, la distance entre particules étant égale à la période du potentiel. La présence de solitons mobiles en faible nombre est supposée. Dans ce cadre, une particule oscillera dans son puits de potentiel

jusqu'à ce qu'un soliton passe, la particule pouvant alors sauter dans le puits voisin. La diffusion des particules est ainsi gouvernée par celle des solitons dont la dynamique est largement étudiée dans la littérature, que ce soit une diffusion libre, en présence de force extérieure ou avec des conditions aux limites réfléchissantes. Pour une chaîne infinie avec des solitons de durée de vie infinie, le DQM est trouvé proportionnel à  $t^{1/2}$  à grand temps, le coefficient de proportionnalité décroissant exponentiellement avec l'énergie de la barrière de potentiel. En revanche, lorsque la durée de vie  $\tau$  des solitons est prise en compte la dynamique devient :

$$\langle \Delta x^2(t) \rangle \propto t^{1/2} \quad \text{pour } t < \tau \quad (9.3)$$

$$\propto t^{3/2} \quad \text{pour } t > \tau \quad (9.4)$$

Peu de résultats ont été obtenus concernant le comportement dynamique des particules d'une chaîne lorsqu'elle diffuse sur des distances inférieures à la période du potentiel.

Signalons deux articles qui suggèrent que la mobilité des particules en présence d'un potentiel périodique peut être supérieure à celle observée en absence de potentiel dès lors que la distance entre particules est inférieure à la période du potentiel [66, 67]. Ces études numériques ont été réalisées sur des systèmes colloïdaux en interaction dipolaire électrique [66] et dipolaire magnétique [67]. Les résultats obtenus sont qualitativement identiques. Si la période du potentiel est supérieure à la distance entre particules, leur diffusion passe progressivement d'une diffusion de type « Single File Diffusion » en  $t^{1/2}$  à une diffusion en  $t$  précédée par un ralentissement dû au piégeage temporaire des particules. À l'inverse si la période est inférieure à  $d$ , la mobilité  $F$  devient insensible aux variations d'amplitude du potentiel et supérieure à celle observée en l'absence de potentiel. Les auteurs suggèrent que « cette perte de corrélation » serait due à « un possible dépiégeage des particules sur le potentiel ».

Dans ce contexte, le processus que nous proposons pour expliquer ces comportements ou l'augmentation de la mobilité observée dans les îlots de Wigner est d'une autre nature. L'analyse des DQM par la superposition des diffusions modes propres de vibration montre que l'ouverture de bande interdite dans le spectre de ces excitations peut expliquer ces comportements surprenants. Nous allons expliciter cette approche dans la section suivante.

### 9.3 Mouvement d'une chaîne dans un potentiel statique : influence de la commensurabilité

Dans cette section nous allons étudier les conséquences sur les DQM longitudinaux des particules des modifications du spectre de vibration de la chaîne induites par la présence du potentiel.

Si on s'intéresse au cas d'une seule particule par maille, la configuration d'équilibre du système correspond trivialement à une particule disposée dans chaque minimum du potentiel. La dynamique des particules est alors simple : chacune d'elle est piégée dans un puits de potentiel que l'on peut considérer localement comme harmonique, de telle sorte qu'à faible température le DQM est saturé. Remarquons que dans ce cas, le spectre des fréquences propres n'est que faiblement modifié par le potentiel. La situation devient plus intéressante dans le cas où il y a plusieurs particules par maille.

### 9.3.1 Présentation d'un modèle à deux particules par période

#### § *Présentation du modèle*

On s'intéresse ici au mouvement d'une chaîne de particules dans un potentiel périodique avec plusieurs particules par période du potentiel. Nous nous restreindrons tout d'abord à l'étude d'un système avec deux particules par période.

Pour cela on considère le modèle avec une simple chaîne de  $2N$  particules espacées d'une distance moyenne de  $d$  et couplées par des interactions harmoniques de raideur  $k$  avec les particules voisines. Les conditions aux bords choisies pour ce système sont cycliques. De plus cette chaîne de particules est soumise à un potentiel périodique de période deux fois plus grande que la distance moyenne entre particules, comme le montre la figure 9.1. On suppose *a priori* que la configuration d'équilibre du système correspond à une configuration de particules disposées au niveau des extrema du potentiel de façon homogène. On déterminera *a posteriori* les conditions pour lesquelles cet équilibre particulier est stable. Cette configuration qui peut paraître académique correspond en fait à celle observée dans les îlots de Wigner ayant un nombre dit « magique » de particules [25]. Nous y reviendrons section 9.3.3. Afin de se placer dans le cadre le plus général possible on considèrera que la raideur du potentiel périodique aux positions des maxima, notée  $k_1$  ( $k_1 > 0$ ), est différente de la raideur aux positions des minima, notée  $k_2$  ( $k_2 > 0$ ), voir figure 9.1. Nous verrons que ce point est essentiel.

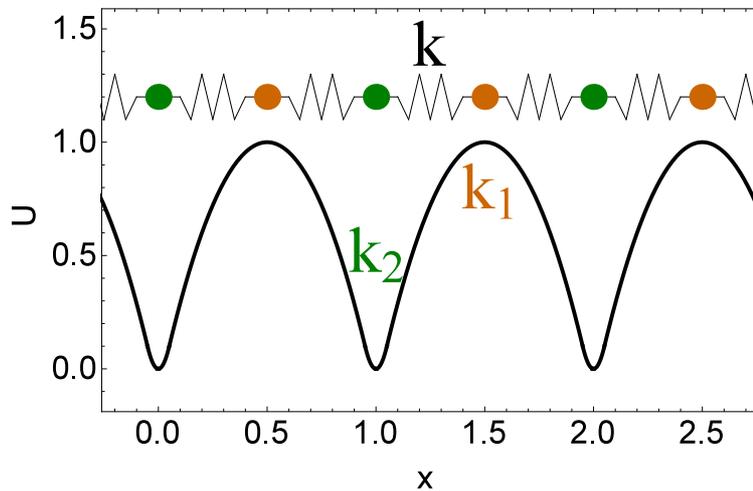


FIGURE 9.1 – Schéma du système présentant une chaîne de particules soumises à un potentiel périodique dont la raideur est différente entre les maxima  $k_1$  et les minima  $k_2$ , et dont la période est égale au double de la distance moyenne entre particules. On suppose que la position d'équilibre correspond à une situation avec des particules aux sommets du potentiel, en orange, et des particules aux creux du potentiel, en vert. Les particules formant la chaîne interagissent entre plus proches voisins, avec une interaction harmonique de raideur  $k$ .

Comme pour l'analyse de la stabilité linéaire de la configuration zigzag, ce système peut être considéré comme un ensemble de  $N$  cellules avec deux particules par maille, localisées respectivement au maximum et au minimum du potentiel. Soient  $x_i(t)$  et  $u_i(t)$  les faibles déplacements

autour des positions d'équilibre des particules de la  $i^{\text{ème}}$  cellule. Les équations dynamiques pour les mouvements des particules s'écrivent :

$$\begin{cases} m\ddot{x}_i = -m\gamma\dot{x}_i + k(u_i + u_{i-1} - 2x_i) + k_1x_i + \mu_i^1(t) \\ m\ddot{u}_i = -m\gamma\dot{u}_i + k(x_{i+1} + x_i - 2u_i) - k_2u_i + \mu_i^2(t) \end{cases} \quad (9.5)$$

où  $\mu_i^1(t)$  et  $\mu_i^2(t)$  correspondent à des forces aléatoires de moyenne nulle et avec  $\langle \mu_i^j(t)\mu_{i'}^{j'}(t') \rangle = 2k_B T m \gamma \delta(i, i') \delta(j, j') \delta(t, t')$ .

À partir de la condition de périodicité on peut développer ces équations couplées sur la base de Fourier discrète suivante :

$$\tilde{x}(s, t) = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N x_j(t) e^{-i\frac{2\pi}{N}sj} \quad \text{et} \quad x_j(t) = \sum_{s=1}^N \tilde{x}(s, t) e^{i\frac{2\pi}{N}sj}. \quad (9.6)$$

De telle sorte que les équations dynamiques deviennent :

$$\begin{cases} \ddot{\tilde{x}}(s) = -\gamma\dot{\tilde{x}}(s) + \frac{k}{m} \left( \tilde{u}(s) + \tilde{u}(s) e^{-i\frac{2\pi}{N}s} - 2\tilde{x}(s) \right) + \frac{k_1}{m} \tilde{x}(s) + \frac{\tilde{\mu}^1(s, t)}{m} \\ \ddot{\tilde{u}}(s) = -\gamma\dot{\tilde{u}}(s) + \frac{k}{m} \left( \tilde{x}(s) e^{i\frac{2\pi}{N}s} + \tilde{x}(s) - 2\tilde{u}(s) \right) + \frac{k_2}{m} \tilde{u}(s) + \frac{\tilde{\mu}^2(s, t)}{m} \end{cases} \quad (9.7)$$

### § Décomposition modale des mouvements de la chaîne de particules

On cherche ici à décomposer les mouvements du système en l'absence de dissipation et de bruit thermique selon les modes propres du système. Cette décomposition nous permettra ensuite de remonter aux propriétés diffusives du mouvement des particules, comme il a été vu section 8.2.

À partir de la décomposition selon les modes de Fourier présentée équation (9.7), on trouve que la matrice dynamique s'écrit :

$$\mathbb{M}(h) \equiv \frac{1}{m} \begin{pmatrix} k_1 - 2k & k(1 + e^{-i\frac{2\pi}{N}s}) \\ k(1 + e^{i\frac{2\pi}{N}s}) & -k_1 - 2k \end{pmatrix}, \quad (9.8)$$

Il suffit de diagonaliser cette matrice pour obtenir les fréquences propres de vibration du système. On trouve alors :

$$\omega_{\pm}^2(q(s)) = \frac{1}{2} \left[ 4k + (k_2 - k_1) \pm \sqrt{(k_1 + k_2)^2 + 16k^2 \cos^2(q(s))} \right] \quad (9.9)$$

avec  $q(s) = 2\pi s/(2N)$  pour  $s = 1, \dots, N$ .

Cette relation de dispersion nous permet tout d'abord de discuter la stabilité de la configuration d'équilibre que nous avons choisi *a priori*. On remarque que la fréquence propre de vibration la plus faible du système correspond au mode  $\omega_-^2(0)$ . La condition de stabilité de la configuration s'écrit alors :

$$\omega_-^2(q=0) = \frac{1}{2} \left[ 4k + (k_2 - k_1) - \sqrt{(k_1 + k_2)^2 + 16k^2} \right] > 0 \quad (9.10)$$

Cette condition lie explicitement les trois raideurs du problème. On définit donc une raideur critique  $k_c$  entre particules caractérisant le seuil de stabilité de cette configuration :

$$k_c \equiv \frac{k_1 k_2}{2(k_2 - k_1)} \quad (9.11)$$

Si  $k > k_c$  la configuration dans laquelle les particules sont équidistantes et disposées au niveau des extrema du potentiel périodique est stable. Au contraire pour une raideur plus faible  $k < k_c$  il est plus favorable énergétiquement au système de ne pas disposer les particules de manière équidistante aux extrema du potentiel. Par ailleurs si  $k_1 > k_2$ , alors la valeur du seuil de raideur devient négative et on trouve que la configuration avec une particule à chaque extremum du potentiel est toujours instable.

Enfin il est important de noter que la différence de raideur du potentiel périodique est essentielle pour stabiliser la configuration choisie *a priori*. En effet si l'on considère un potentiel périodique avec des raideurs  $k_1$  et  $k_2$  identiques, on trouve alors que  $k_c \rightarrow \infty$ , ce qui signifie que la configuration homogène ne peut être que marginalement stable dans la limite  $k_c \rightarrow \infty$ .

### § Relation de dispersion et bande interdite

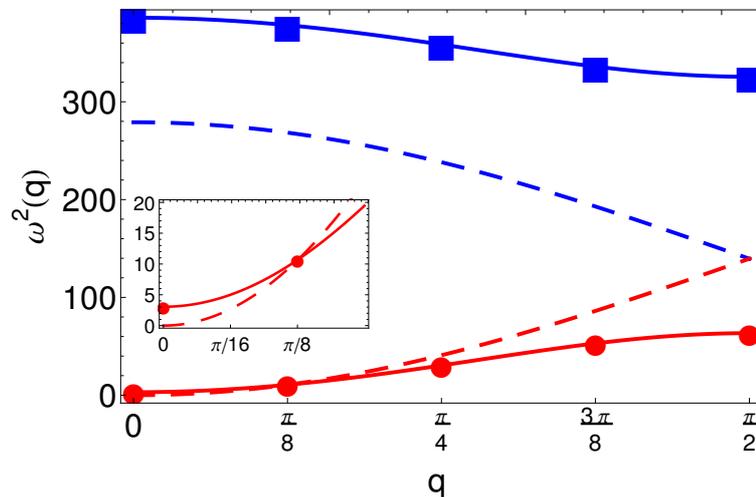


FIGURE 9.2 – Fréquences propres aux carrés  $\omega^2(q)$  (en  $s^{-2}$ ) pour les modes acoustique (en rouge) et optique (en bleu) en fonction du nombre d'onde sans dimension  $q$ . Les courbes hachurées correspondent à la relation de dispersion pour une chaîne de particules et les courbes pleines correspondent à la relation de dispersion pour la chaîne soumise à un potentiel extérieur. Les symboles en carrés bleus et ronds rouges correspondent aux fréquences propres discrètes accessibles pour un système de  $2N = 16$  particules. Ici la raideur de l'interaction entre particules vaut  $k = 1.5 \times 10^{-4} \text{ kg.s}^{-2}$ , et les raideurs du potentiel périodique sont  $k_1 = 1.64 \times 10^{-4} \text{ kg.s}^{-2}$  et  $k_2 = 4.0 \times 10^{-4} \text{ kg.s}^{-2}$ . L'insert correspond à un zoom sur les faibles nombres d'onde.

Il est essentiel de discuter le comportement de cette relation de dispersion plus en détails en se plaçant dans le cas d'une configuration stable ( $k_1 < k_2$  et  $k > k_c$ ). La figure 9.2 présente les relations de dispersion correspondantes pour les branches optique et acoustique. À titre de comparaison, les relations de dispersion pour une simple chaîne harmonique de particules en interaction sans potentiel extérieur sont également représentées.

On remarque que l'interaction avec le potentiel périodique crée une bande interdite dans la relation de dispersion au niveau des grands nombres d'onde<sup>1</sup> [7]. L'apparition de cette bande

1. Ce qui correspond à l'ouverture d'une bande interdite au milieu de la zone de Brillouin si on considère la zone étendue de la chaîne en l'absence de potentiel.

de largeur  $(k_1 + k_2)$  entraîne la modification des valeurs des fréquences propres intermédiaires du système or comme nous l'avons vu précédemment lors de la description de la méthode de reconstruction, ces fréquences propres intermédiaires contrôlent le régime corrélé du DQM à travers la saturation successive des DQM associés aux modes propres. On s'attend donc à ce que l'apparition de cette bande interdite entraîne une forte modification du régime intermédiaire du DQM de la chaîne en interaction avec le potentiel périodique extérieur.

En revanche, on observe que  $\omega_-(q=0) \neq 0$  ce qui correspond au fait que le système n'est plus invariant par translation, à cause de l'interaction avec le potentiel périodique. Cette disparition du mode mou de translation entraîne une modification importante du comportement des DQM aux temps longs. Le régime de diffusion libre de l'ensemble de la chaîne sans potentiel périodique est remplacé par une saturation du DQM aux temps longs. Cependant dans la limite où  $\omega_-(q=0) \rightarrow 0$ , on s'attend à ce que la valeur de saturation diverge comme nous l'avons vu dans le chapitre 8. C'est pourquoi afin d'observer nettement la modification du régime corrélé liée à l'ouverture de gap on cherchera à se placer dans la limite où  $k \rightarrow k_c$  par valeur supérieure, correspondant à la limite  $\omega_-(q=0) \rightarrow 0$ .

### § Reconstruction des DQM

Si l'on prend de nouveau en compte l'interaction avec le bain thermique au travers de la force fluctuante et du coefficient de dissipation, on trouve qu'à chacun des modes propres est associé une équation de Langevin correspondant au mouvement d'une particule Brownienne dans un potentiel harmonique de raideur  $\omega_{\pm}^2(q)/m$  si  $\omega_{\pm}^2(q) \neq 0$  ou correspondant au mouvement d'une particule Brownienne libre si  $\omega_{\pm}^2(q) = 0$ . Comme il a été montré au chapitre 8 [voir équations (8.3) et (8.4)] il est alors possible d'exprimer les DQM associés à chaque mode, pour reconstruire ensuite le DQM des particules.

Pour cela il est nécessaire de calculer les vecteurs propres de la matrice dynamique, s'écrivant ici :

$$\mathbf{V}_{\pm} = \frac{1}{\mathcal{N}_{\pm}} \begin{pmatrix} \frac{(k_1+k_2) \pm \sqrt{8k^2 + (k_1+k_2)^2 + 8k^2 \cos(q)}}{2(1+e^{iq})k} \\ 1 \end{pmatrix} \quad (9.12)$$

où  $\mathcal{N}_{\pm}$  est un facteur de normalisation.

Avec la matrice de passage correspondante  $\mathbb{P} = (\mathbf{V}_+, \mathbf{V}_-)$ , on trouve alors que l'équation dynamique se simplifie comme :

$$\ddot{\mathcal{Y}}_s = -\gamma \mathcal{Y}_s + \mathbb{D} \mathcal{Y}_s + \frac{\mathcal{M}_s(t)}{m} \quad (9.13)$$

avec  $\mathbb{D} = \mathbb{P}^{-1} \mathbb{M} \mathbb{P}$  et  $\mathcal{Y}_s = \mathbb{P}^{-1} \mathcal{X}_s$ , avec  $\mathcal{X}_s = (\tilde{x}(s), \tilde{u}(s))$ , et où  $\mathcal{M}_s(t)$  correspond au vecteur de bruits blancs non corrélés spatialement et temporellement, défini simplement comme une somme des bruits définis équation (9.5).

Les variances des particules dans l'espace physique s'écrivent alors :

$$\langle \Delta x_i^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{s=1}^N |\mathbb{P}_{1j}(s)|^2 \langle \Delta(\mathcal{Y}_s^j)^2 \rangle \quad (9.14)$$

$$\langle \Delta u_i^2 \rangle = \frac{1}{N^2} \sum_{s=1}^N |\mathbb{P}_{2j}(s)|^2 \langle \Delta(\mathcal{Y}_s^j)^2 \rangle \quad (9.15)$$

La figure 9.3 (a) représente les DQM associés à chacun des modes. On observe que les modes de la branche optique [représentés en bleu] saturent très rapidement à une faible valeur de DQM. Puis il existe tout un intervalle de temps pendant lequel aucun mode ne sature du fait de l'existence de la bande interdite dans la relation de dispersion. Et enfin les modes de la branche acoustique saturent à leur tour [voir courbes rouges].

La figure 9.3 (b) compare les DQM obtenus après reconstruction pour les particules placées à un maxima du potentiel en orange et pour les particules placées dans un minima en vert. On trouve que le mouvement des particules sur les maxima est plus important que celui des particules dans les minima. Lorsqu'on calcule le DQM moyen pour toute la chaîne de particule [voir courbe violette] et qu'on le compare à celui d'une particule dans une chaîne libre de particules, on trouve que durant un régime intermédiaire, ici entre 1 s et 10 s, le mouvement des particules soumises à un potentiel périodique est accéléré par rapport à celui d'une particule dans une simple chaîne.

L'existence de cet intervalle de temps pendant lequel aucun mode ne sature va induire des différences importantes de comportement par rapport à ceux observés pour la chaîne libre. Pendant un temps fini, le DQM augmente plus rapidement pour la chaîne couplée au potentiel périodique que pour la chaîne libre. Cet étonnant résultat est montré dans la figure 9.3 (c).

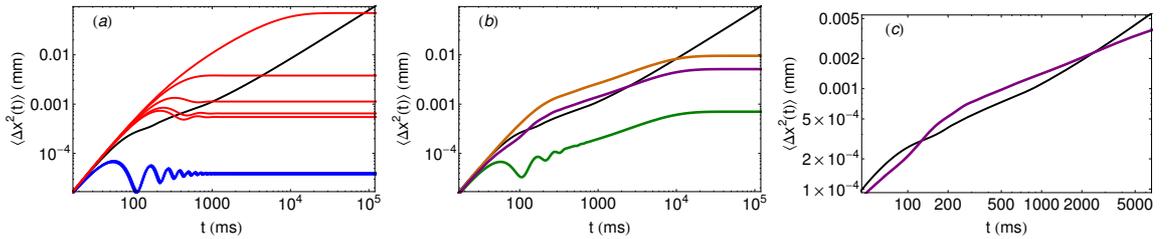


FIGURE 9.3 – Évolution temporelle du DQM (a) pour les différents modes propres mis en jeu dans le système, en rouge la branche inférieure et en bleu la branche supérieure; (b) après reconstruction pour les particules aux sommets du potentiel en orange et pour les particules dans les creux en vert, la courbe violette correspond à la moyenne sur la chaîne entière et la courbe noire à une simple chaîne de particules sans potentiel extérieur. (c) zoom sur les régimes intermédiaire. Pour une raideur entre particules  $k = 1.27 \times 10^{-4} \text{ kg.s}^{-2}$ , et un potentiel de raideurs  $k_1 = 1.67 \times 10^{-4} \text{ kg.s}^{-2}$  et  $k_2 = 5.0 \times 10^{-4} \text{ kg.s}^{-2}$ . Le système considéré est caractérisé par  $2N = 16$  particules,  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$  et  $T = 10^{10} \text{ K}$ .

### § Expression de la mobilité

Plus quantitativement la mobilité des particules peut être calculée en fonction des paramètres du problème. Rappelons que pour la « Single File Diffusion », on définira la mobilité  $F$  comme  $\langle \Delta x^2(t) \rangle = F\sqrt{t}$ .

Pour décrire le comportement du régime intermédiaire on a besoin de connaître le nombre de modes  $n(t)$  dont le DQM n'a pas atteint la saturation à l'instant  $t$ . Pour cela nous utilisons de nouveau l'approximation de Debye, présentée au chapitre précédent. À partir de la relation de dispersion linéaire au voisinage de  $q = 0$  pour  $\omega_{\pm}^2(q)$  [voir figure 9.2] on trouve :

$$m\omega_{\pm}^2(q) \stackrel{q \rightarrow 0}{\sim} \omega_{\pm}^2(q=0) + \frac{2k^2}{\sqrt{(k_1 + k_2)^2 + 16k^2}} q^2 \quad (9.16)$$

On considérera  $\omega_{\pm}^2(q=0) = 0$  correspondant au cas limite  $k \sim k_c$ .

Pour un régime sur-amorti<sup>2</sup> pour lequel la dissipation ( $\gamma \gg \omega_{\pm}(q)$ ) est bien plus grande que toutes les fréquences propres du système, ce nombre est donné par :

$$n(t) \sim \frac{2N}{\pi} \left( \frac{m\gamma \sqrt{(k_1 + k_2)^2 + 16k^2}}{2k^2 t} \right)^{1/2} \quad (9.17)$$

Dans ce régime, on sait aussi que chaque mode évolue linéairement comme  $2k_B T / (Nm\gamma)t$  avant d'atteindre la saturation. Ainsi en partant de l'équation (9.14) de reconstruction du DQM, on trouve :

$$\begin{aligned} \langle \Delta x^2(t) \rangle &\sim \frac{2k_B T}{Nm} n(t) t \sim \frac{2k_B T}{Nm\gamma} t \frac{2N}{\pi} \left( \frac{m\gamma \sqrt{(k_1 + k_2)^2 + 16k^2}}{2k^2 t} \right)^{1/2} \\ &\sim \frac{2k_B T}{\pi} \left( \frac{\sqrt{(k_1 + k_2)^2 + 16k^2}}{m\gamma 2k^2} \right)^{1/2} t^{1/2} = F\sqrt{t} \end{aligned} \quad (9.18)$$

On remarque que pour une raideur entre particules de la chaîne  $k$  donnée, l'augmentation du DQM pour le régime intermédiaire par rapport à la chaîne libre est optimisée lorsque  $(k_1 + k_2)$  est maximum. On retrouve ici l'influence de la bande interdite dans la relation de dispersion du système en interaction avec le potentiel car la largeur de cette bande varie elle aussi comme la somme des raideurs du potentiel périodique  $(k_1 + k_2)$ . Cependant, pour que la configuration avec une particule au maximum et une au minimum soit stable il est nécessaire d'avoir  $k \geq k_c$  avec  $k_c$  présenté équation (9.11). Dans le cas limite où  $k = k_c$  on trouve :

$$\begin{aligned} \frac{F}{F_0} &= \left( \frac{\sqrt{(k_1 + k_2)^2 + 16 \left( \frac{-k_1 k_2}{2(k_1 - k_2)} \right)^2}}{m\gamma 2 \left( \frac{-k_1 k_2}{2(k_1 - k_2)} \right)^2} \right)^{1/2} \quad \text{avec} \quad F_0 \equiv \frac{2k_B T}{\pi} \sqrt{\frac{2}{m\gamma k}} \\ &= \sqrt{\frac{k_1^2 + k_2^2}{2k_1 k_2}} \end{aligned} \quad (9.19)$$

2. Une analyse similaire pourrait être réalisée pour de très faible dissipation, comme il a été montré dans la référence [32] on s'attend à obtenir un régime linéaire en  $t$ . Toutefois les résultats expérimentaux sur les îlots de Wigner ont été obtenues à forte dissipation.

Sur la figure 9.6 est représentée l'évolution de  $F$  adimensionné par  $F_0$  en fonction de la différence de courbure entre le maximum et le minimum du potentiel périodique. On trouve que  $F$  augmente avec l'asymétrie du potentiel.

On peut remarquer que cette augmentation de la diffusion dans le régime intermédiaire est due essentiellement au mouvement des particules localisées sur les maxima du potentiel. En effet comme on le voit sur la figure 9.3 le DQM des particules dans les minima de potentiel est beaucoup plus faible, son influence peut donc être négligée, alors le coefficient du régime intermédiaire de DQM correspond à  $1/2\langle\Delta x^2(t)\rangle$ . Cette estimation est présentée avec un très bon accord figures 9.5 (a), (b) et (c).

### 9.3.2 Validation du modèle par comparaison avec des simulations

#### § Description du potentiel périodique

Nous allons confronter les résultats de ce modèle à ceux de simulation obtenues avec un potentiel périodique asymétrique dont nous pouvons contrôler les raideurs locales afin de satisfaire aux contraintes de stabilité imposées.

Nous considérons ainsi un potentiel périodique continu, dérivable et quadratique par morceau de la forme [42] :

$$U(x) = \begin{cases} \frac{1}{2}k_1x^2 & \text{si } 0 < x < \phi \\ \frac{1}{4}k_1\phi\lambda - \underbrace{k_1\frac{\phi}{\lambda - 2\phi}}_{k_2}(\frac{\lambda}{2} - x)^2 & \text{si } \phi < x < \frac{\lambda}{2} \end{cases} \quad (9.20)$$

où la période du potentiel est notée  $\lambda$  et le paramètre  $\phi$  est la distance à laquelle la courbure change, elle est donc comprise entre 0 et  $\lambda/2$  et permet de faire varier la raideur  $k_2$  par rapport à  $k_1$ . En particulier lorsque  $\phi = \lambda/2$  on a  $k_1 = k_2$ . La gamme de paramètres qui nous intéresse correspond à  $\phi < \lambda/2$  pour laquelle  $k_1 > k_2$ .

Ce potentiel correspond à celui représenté figure 9.1, pour une période de longueur unité et une raideur  $k_2 = 8k_1$ .

#### § Comparaison avec les simulations

Les DQM obtenus par simulation d'une chaîne unidimensionnelle de  $2N = 16$  particules soumises à un potentiel périodique de la forme décrite par l'équation (9.20) ont été comparés aux résultats développés à l'aide de la méthode de reconstruction. Le détail sur les conditions de simulation est présenté en annexe A.7.

L'augmentation du DQM de la chaîne couplée au potentiel périodique dans le régime intermédiaire est retrouvée, ce qui valide le modèle développé précédemment [voir figure 9.4].

Comme on l'a vu dans la description des relations de dispersion du système et dans l'étude des DQM, il est nécessaire de se placer dans une condition telle que la raideur entre particules soit le

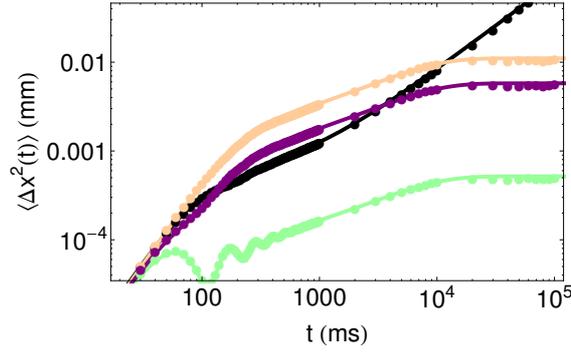


FIGURE 9.4 – Évolution temporelle du DQM pour une chaîne de particules. Les symboles correspondent aux mesures effectuées en simulation et les courbes au calcul par reconstruction des modes propres. La couleur noire correspond à une configuration de chaîne de particules libres, les couleurs orange et verte représentent respectivement les particules au maximum et au minimum du potentiel périodique, et la couleur violette correspond au DQM moyen de la chaîne de particules soumise au potentiel. Pour une raideur entre particules  $k = 1.26 \times 10^{-3} \text{ kg.s}^{-2}$ , et un potentiel de raideurs  $k_1 = 1.67 \times 10^{-3} \text{ kg.s}^{-2}$  et  $k_2 = 5. \times 10^{-3} \text{ kg.s}^{-2}$  ( $k_1/k_2 = 0.33$ ). Les systèmes considérés sont pour  $2N = 16$  particules,  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$  et  $T = 10^{10} \text{ K}$ .

plus proche possible de la raideur critique  $k_c$ . On présentera donc ici trois systèmes de chaîne de particules avec des raideurs d'interaction  $k$  différentes et chacune en interaction avec un potentiel périodique dont les raideurs  $k_1$  et  $k_2$  sont choisies telles que  $k \rightarrow k_c$  par valeur supérieure.

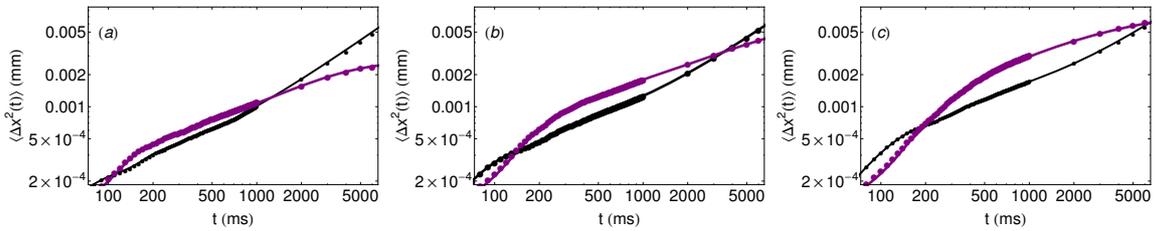


FIGURE 9.5 – (a-c) : Évolution temporelle du DQM pour trois configurations de chaînes de particules, en considérant principalement le régime intermédiaire. Dans chaque figure les symboles correspondent aux mesures effectuées en simulation et les courbes au calcul par reconstruction des modes propres. La couleur noire correspond à une configuration de chaîne de particules libres et la couleur violette correspond au DQM moyen de la chaîne de particules soumise au potentiel. (a) : pour une raideur entre particules  $k = 1.26 \times 10^{-3} \text{ kg.s}^{-2}$ , et un potentiel de raideurs  $k_1 = 1.67 \times 10^{-3} \text{ kg.s}^{-2}$  et  $k_2 = 5. \times 10^{-3} \text{ kg.s}^{-2}$  ( $k_1/k_2 = 0.33$ ). (b) :  $k = 6.85 \times 10^{-4} \text{ kg.s}^{-2}$ ,  $k_1 = 1.1 \times 10^{-3} \text{ kg.s}^{-2}$  et  $k_2 = 5. \times 10^{-3} \text{ kg.s}^{-2}$  ( $k_1/k_2 = 0.21$ ). (c) :  $k = 3.6 \times 10^{-4} \text{ kg.s}^{-2}$ ,  $k_1 = 6.25 \times 10^{-4} \text{ kg.s}^{-2}$  et  $k_2 = 5. \times 10^{-3} \text{ kg.s}^{-2}$  ( $k_1/k_2 = 0.125$ ). Tous les systèmes considérés sont pour  $2N = 16$  particules,  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$  et  $T = 10^{10} \text{ K}$ .

Les figures 9.5 (a-c) présentent les variations temporelles des DQM pour ces trois systèmes avec des asymétries de potentiels ( $k_1, k_2$ ) croissantes. Pour chaque système, l'accord avec les calculs par la méthode de reconstruction est très bon. On retrouve bien un régime balistique aux temps courts, puis un régime corrélé, avant d'atteindre une valeur de saturation. Pour chacun des systèmes les

figures 9.5 (a-c) montrent également que les DQM des particules dans les minima et sur les maxima de potentiel.

Le DQM moyen pour la chaîne de particule est présenté en violet et est à comparer au DQM de la chaîne de particule libre sans interaction avec un potentiel périodique présenté en noir. Pour les trois systèmes on observe que le DQM de la chaîne en interaction avec le potentiel périodique est plus élevé que celui pour la chaîne libre durant le régime intermédiaire.

On retrouve l'influence de l'asymétrie du potentiel dans l'augmentation du DQM durant le régime intermédiaire car celle-ci est plus importante lorsque l'asymétrie entre les raideurs augmente. La figure 9.6 regroupe l'évolution de coefficient  $F$  du régime intermédiaire en fonction de l'asymétrie du potentiel. L'augmentation avec l'asymétrie est en bon accord avec l'évolution estimée à partir de la reconstruction [voir équation (9.19)].

Ces résultats peuvent se généraliser pour l'étude de la diffusion d'une chaîne de particules dans un potentiel périodique tel qu'il y ait trois particules par période du potentiel. On montre que les effets du couplage sont alors ressentis essentiellement dans le régime aux temps longs. Ceci s'explique par le fait que ces comportements aux temps long sont pilotés par les basses fréquences pour lesquelles des bandes interdites peuvent apparaître lorsque le nombre de particule par période augmente.

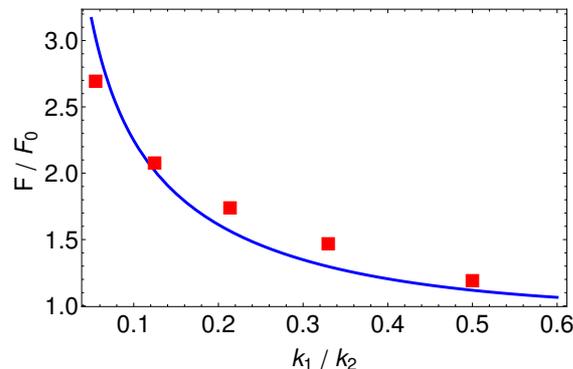


FIGURE 9.6 – Évolution du coefficient  $F$  adimensionné par  $F_0$  [voir équation (9.19)] en fonction de  $k_1/k_2$ . Les points rouges correspondent aux valeurs mesurées en simulation et la courbe en trait plein à l'expression calculée équation (9.19).

### 9.3.3 Interprétation des observations en îlot de Wigner

Dans cette sous-section on s'intéresse au mouvement d'une chaîne de particules couplée directement avec une autre chaîne dont le nombre de particules est plus faible. Une telle configuration est observable dans des îlots de Wigner.

Les particules s'organisent en couronnes concentriques avec un nombre de particules spécifique selon chacune d'elles. Le nombre de particules dans chaque couronne du système est fixé par le nombre de particules dans le système<sup>3</sup>. La structure d'un îlot de 19 particules est présentée fi-

3. Le nombre de particules n'est pas le seul paramètre contrôlant l'organisation de ces structures, leurs formes peuvent également différer suivant l'interaction entre particules.

gure 9.7.

Une étude des propriétés de transport des particules dans la couronne extérieure de cette configuration a été réalisée lorsque le système est soumis à un bain thermique [26] [voir annexe B, pour la présentation succincte du montage expérimental et de la réalisation du bain thermique]. Cette étude a montré que le mouvement diffusif orthoradial de ces particules était plus rapide que celui d'une chaîne présentant le même nombre de particules placées dans une géométrie annulaire ayant le même rayon [voir figure 9.7 (c)].

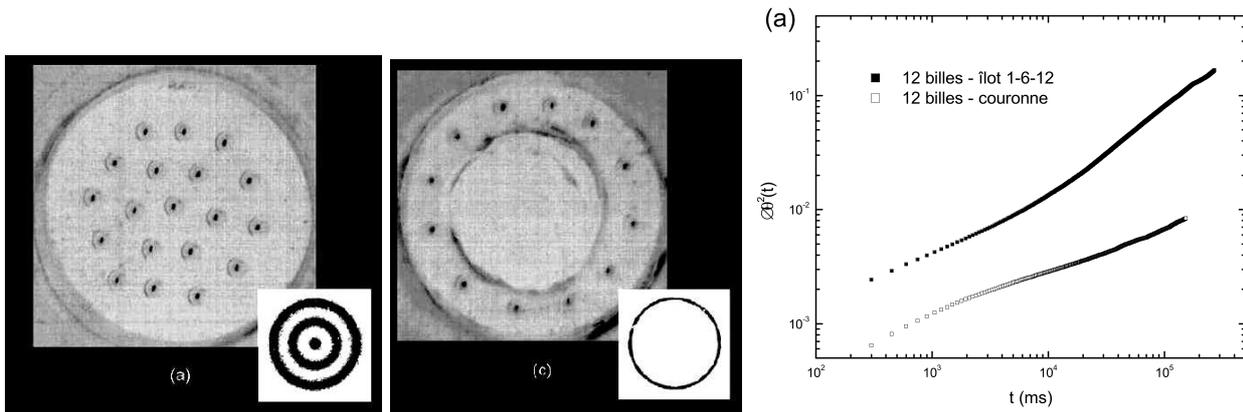


FIGURE 9.7 – À gauche image du système expérimental présentant la configuration en îlot de Wigner pour  $N = 19$  particules et au centre image de la configuration annulaire correspondant à la chaîne extérieure de l'îlot de Wigner. Enfin à droite évolution du DQM orthoradial en fonction du temps, pour les particules dans la couronne extérieure de l'îlot de Wigner en symboles plein et pour les particules dans la géométrie annulaire en symboles vides. (Figure 10.5 de la Thèse de G. Coupier[23])

L'unique différence entre les deux systèmes étudiés pouvant expliquer cette augmentation des propriétés de transport vient du couplage entre la chaîne de particules extérieures et la couronne intérieure dans le système en îlot de Wigner. Ce couplage entre les deux chaînes est complexe à cause du caractère rétroactif de l'interaction d'une chaîne sur l'autre. Cependant, comme nous l'avons fait précédemment, nous allons considérer en première approximation l'influence de la chaîne intérieure sur la chaîne extérieure.

Il semble raisonnable de noter que ce potentiel est de façon évidente périodique, comme le montre la figure 9.8 représentant le potentiel créé par les particules intérieures. On observe sur cette figure que l'équipotentielle décrivant le minimum d'énergie potentielle n'est pas un cercle mais est modulé radialement. Ceci est cohérent avec le fait que les particules externes se placent alternativement sur deux couronnes de rayons légèrement différents. Enfin si l'on calcule l'évolution de l'énergie selon la direction orthoradiale décrite par  $\theta$  le long du minimum de potentiel, voir figure 9.9–(a), on observe que celui-ci de période  $\pi/3$ . Par ailleurs comme le montre la figure 9.9–(b) la raideur du potentiel selon la direction orthoradiale, liée à la courbure de celui-ci, est légèrement plus faible au niveau des maxima du potentiel qu'au niveau des minima.

Ainsi le potentiel ressenti par la chaîne de particules dans la couronne extérieure correspond à un potentiel périodique dans lequel deux particules par période sont disposées sur les extrema du

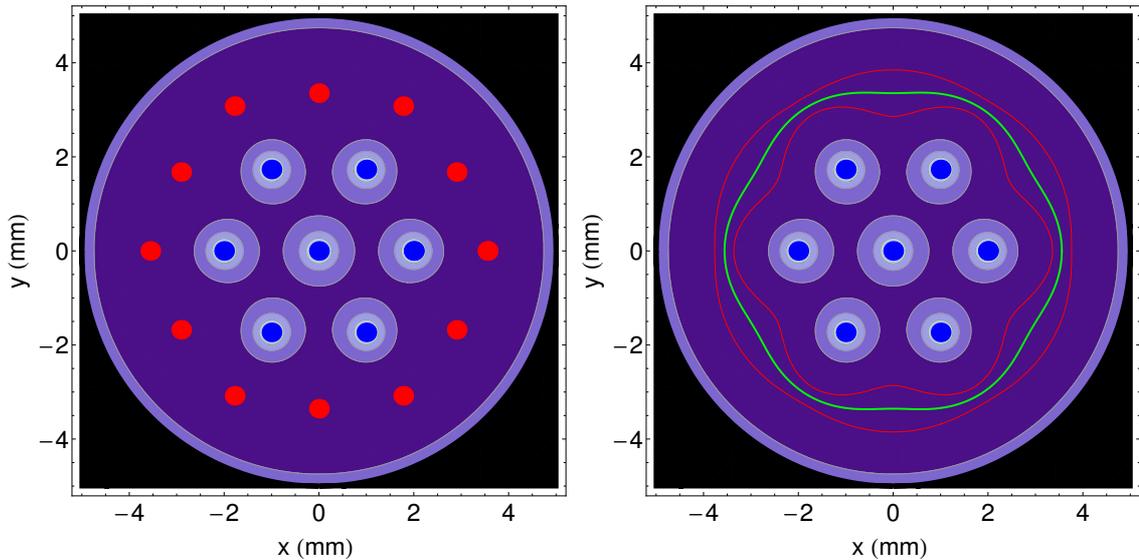


FIGURE 9.8 – À gauche représentation de la configuration de l'îlot de Wigner, les particules dites intérieures sont représentées en bleu et la chaîne de particules extérieures en rouge, l'échelle de couleur correspond à l'intensité de l'énergie potentielle. À droite représentation en échelle de couleur de l'énergie potentielle créée par les particules intérieures et le potentiel de confinement circulaire. La courbe en vert indique le minimum du potentiel selon chaque angle  $\theta$ , et les lignes rouges indiquent des équipotentielles.

potentiel et dont les raideurs aux maxima et aux minima diffèrent. La configuration du système s'inscrit donc dans le cadre du modèle que nous avons présenté précédemment. Comme nous l'avons vu dans une telle géométrie le DQM de la chaîne au cours du régime intermédiaire peut être accélérée par rapport à celui d'une chaîne libre.

Cependant les valeurs numériques obtenues pour les raideurs orthoradiales aux positions des particules de la couronne extérieure et la valeur de raideur d'interaction entre particules ne sont pas suffisantes pour expliquer l'augmentation de raideur observée, il est donc nécessaire de s'intéresser à une autre différence entre la configuration en îlots de Wigner et celle en anneau [voir figure 9.7]. Cette différence a de nouveau pour origine l'interaction avec les particules de la couronne intérieure que nous simplifierons toujours par un potentiel périodique mais dont nous avons omis jusqu'ici le caractère fluctuant. En effet les particules intérieures sont également soumises au bain thermique et leurs positions fluctuent au cours du temps. Le potentiel périodique créé par les particules intérieures n'est pas fixe. On peut s'attendre à ce que les fluctuations thermiques de ces particules et donc du potentiel périodique qu'elles créent pour la chaîne extérieure, engendrent un transfert de fluctuations responsable de l'augmentation du DQM. C'est pourquoi nous allons nous intéresser dans la suite à l'influence des fluctuations du potentiel sur le mouvement de la chaîne de particules.

## 9.4 Mouvement d'une chaîne dans un potentiel fluctuant

Dans toutes les descriptions que nous avons discutées jusque ici le potentiel périodique a été considéré statique. Nous allons montrer maintenant que des fluctuations thermiques de position du potentiel amplifient l'amplitude des mouvements des particules, ce transfert de fluctuation

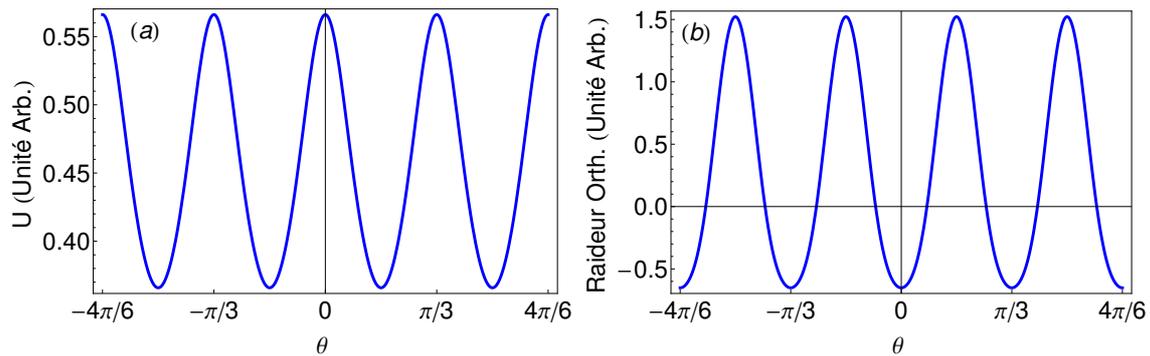


FIGURE 9.9 – (a) : Évolution de l’amplitude de l’énergie potentielle (en Unité Arbitraire) créée par les billes intérieures et le potentiel de confinement circulaire sur la chaîne de particules distribuée le long du minimum de potentiel  $r(\theta)$  en fonction de l’angle  $\theta$ . (b) : Évolution de la courbure orthoradiale de l’énergie potentielle (en Unité Arbitraire) présentée en (a) en fonction de l’angle.

contribuant ainsi à l’augmentation de leur mobilité. Ce genre de transfert de fluctuations avait été mentionné dans des « clusters » colloïdaux organisés en trois couronnes concentriques lorsque les fluctuations radiales de la couronne centrale étaient limitées par un piégeage optique [17]. Les auteurs observaient l’augmentation de la diffusion orthoradiale des particules localisées sur les couronnes voisines.

Pour valider cette approche nous avons montré que ce modèle de transmission de fluctuations du potentiel vers la chaîne de particules permet de rendre compte correctement du mouvement des particules dans la configuration en zigzag, lorsque dans le modèle une seule particule de la chaîne est présente par période du potentiel.

Nous présenterons ensuite quelques pistes pour comprendre les mécanismes mis en jeu dans la transmission de fluctuations par le potentiel extérieur en introduisant les concepts de *température effective* et de *potentiel effectif*.

#### 9.4.1 Rôle des fluctuations sur le mouvement de la chaîne de particule et configuration zigzag

Pour comparer le mouvement d’une chaîne dans un potentiel périodique fluctuant à celui de la chaîne dans la configuration zigzag, on décrit le système par une chaîne de particules séparées d’une distance  $2d$  deux fois supérieure à la distance  $d$  longitudinale entre particules dans la configuration zigzag. Cette chaîne décrit l’une des deux chaînes de la configuration zigzag. L’influence de la seconde chaîne sur celle-ci va être modélisée très simplement par un potentiel périodique également de période  $2d$  et dont la position va fluctuer dans le temps. Ce mouvement de fluctuation d’ensemble du potentiel sera décrit comme le mouvement d’une unique particule libre dont la masse correspondrait cependant à la masse de l’ensemble des deux chaînes du système de comparaison<sup>4</sup>. Enfin le dernier paramètre libre pour modéliser l’interaction entre les deux chaînes reste l’amplitude du potentiel périodique, qui sera variée arbitrairement en fonction de la distance entre les chaînes

4. Le choix de cette masse correspond au fait que la seconde chaîne doit déplacer l’ensemble des particules du système dans son mouvement de fluctuation.

dans la configuration zigzag.

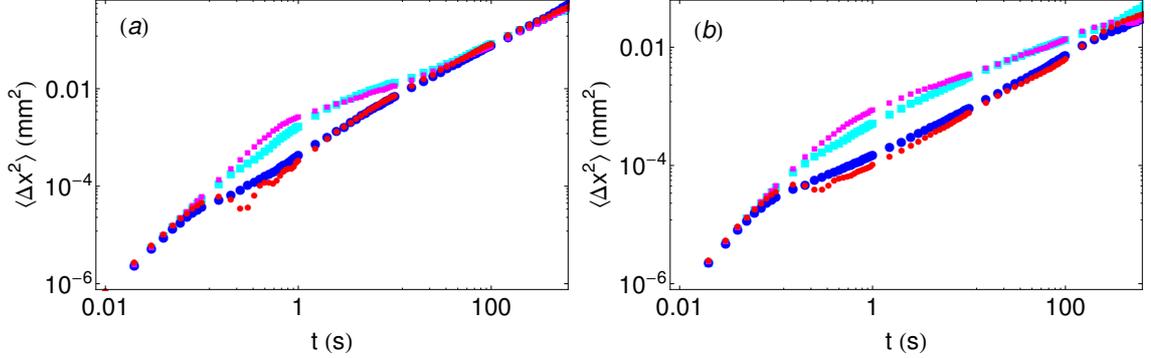


FIGURE 9.10 – Évolution temporelle du DQM pour une chaîne de particules soumise à un potentiel périodique sinusoïdal fluctuant et avec une particule par période. En (a) pour  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  et en (b) pour  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$ . Les points rouges et carrés magenta correspondent respectivement à un potentiel périodique d'amplitude  $\Delta E = 6.0 \times 10^2 \text{ nJ}$  et  $\Delta E = 6.0 \times 10^{-1} \text{ nJ}$ . À titre de comparaison le DQM longitudinal de la configuration en zigzag calculée au chapitre 8 est représenté en points bleus et carrés cyan respectivement pour des hauteurs  $h = 0.10 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.04$ ) et  $h = 0.78 \text{ mm}$  ( $\epsilon = 0.80$ ), comme dans la figure 8.2. Pour chacune de ces configurations on peut estimer que la hauteur de barrière créée par l'une chaîne sur l'autre vaut respectivement  $\Delta E = 1.6 \times 10^2 \text{ nJ}$  et  $\Delta E = 1.7 \text{ nJ}$ . La chaîne en interaction avec le potentiel est composée de  $N = 8$  particules séparées d'une distance deux fois plus grande à celle prise figure 8.2 et soumise à une température  $T = 10^9 \text{ K}$ .

La figure 9.10 compare les DQM longitudinaux obtenues par simulation pour la chaîne de particules modélisée en interaction avec un potentiel fluctuant et les DQM longitudinaux que l'on a présentés et calculés au chapitre 8 [voir figure 8.2]. On retrouve bien quasi-quantitativement un comportement très semblable du DQM pour les deux systèmes et ceci pour différentes valeurs de dissipation et différentes hauteurs de zigzag. En particulier on remarque que lorsque la hauteur de la configuration zigzag augmente l'influence entre chaque chaîne diminue fortement et le DQM de la configuration zigzag tend vers celui d'une chaîne libre avec moitié moins de particules et une distance entre particules deux fois plus grande. Enfin on remarque qu'aux temps longs le système retrouve bien un mouvement diffusif, correspondant au mouvement d'ensemble du système et guidé ici par la fluctuation en position du potentiel périodique.

L'accord entre les DQM des particules de la chaîne en interaction avec un potentiel fluctuant et les DQM des particules dans la configuration zigzag valide la description d'un système de deux chaînes couplées comme un sous-système d'une chaîne en interaction avec un potentiel périodique fluctuant en position.

#### 9.4.2 Mécanismes de transmission des fluctuations

Pour mieux comprendre ce mécanisme de transfert de fluctuation, nous avons étudié le cas plus simple d'une seule particule en interaction avec un potentiel fluctuant. Afin de montrer que le mécanisme de transmission directe des fluctuations thermiques se traduit par une *température effective*

$T_{\text{eff}}$ , nous considérerons d'abord le cas d'une particule piégée dans un potentiel harmonique dont la position du minimum fluctue. Ensuite nous montrerons que dans le cas d'une seule particule piégée dans un potentiel quartique, les fluctuations thermiques sur la position du potentiel entraînent la modification du potentiel ressenti par la particule. On introduira alors l'idée d'un *potentiel effectif* dans lequel la particule se déplace. Enfin nous montrerons que ces deux notions de température effective et de potentiel effectif permettent de comprendre la transmission de fluctuations thermiques dans le cas d'un potentiel extérieur périodique agissant sur une seule particule puis sur une chaîne de particules.

Dans chaque configuration le bruit thermique sur la position absolue du potentiel extérieur correspondra à un bruit Gaussien non corrélé temporellement et d'amplitude moyenne de fluctuations  $\sigma$  [voir l'annexe A.7, pour le détail sur la réalisation du bruit en simulation]. Par ailleurs, pour rester proche des phénomènes physiques réels, notamment ceux que nous considérerons section 9.3.3, nous considérerons que le temps de corrélation du bruit agissant sur le potentiel est le même que pour celui agissant sur les particules.

#### 9.4.2.1 Transmission d'un bruit par un potentiel de piégeage harmonique : température effective

On considère une seule particule libre soumise à un potentiel harmonique de raideur  $K$  et dont l'origine sera fluctuante, de telle sorte que le potentiel s'écrive :

$$U(x) = \frac{1}{2}K(x - y(t))^2 \quad (9.21)$$

où  $y(t)$  correspond à la fluctuation de position du potentiel. Ces fluctuations sont de moyenne nulle avec  $\langle y(t)y(t') \rangle = \sigma^2\delta(t, t')$

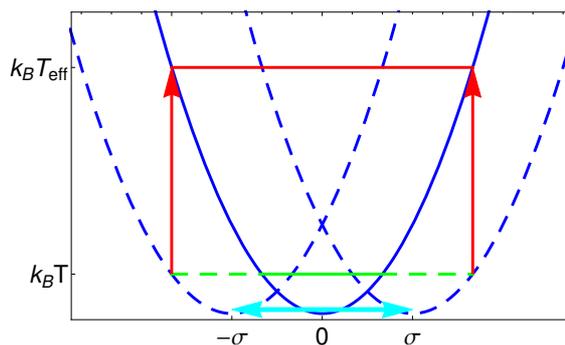


FIGURE 9.11 – Schéma de principe de l'augmentation de la température effective d'une particule dans un potentiel harmonique fluctuant. L'amplitude moyenne des fluctuations  $\sigma$  est symbolisée par les flèches cyan. Le trait plein vert correspond à l'énergie thermique associée à la particule dans le potentiel quadratique. Les traits hachurés correspondent au potentiel harmonique en bleu et à l'énergie thermique de la particule en vert, pour les deux potentiels décalés de  $+\sigma$  et  $-\sigma$ . Les flèches et le trait rouges représentent l'énergie thermique effective de la particule se déplaçant dans un potentiel harmonique fixe.

Il est alors possible d'écrire une équation de Langevin pour le mouvement de la particule dans

le potentiel quadratique fluctuant, sous la forme :

$$\begin{aligned} m\ddot{x} &= -m\gamma\dot{x} - K(x - y(t)) + \mu(t) \\ &= -m\gamma\dot{x} - Kx + \underbrace{Ky(t) + \mu(t)}_{\tilde{\mu}(t)} \end{aligned} \quad (9.22)$$

où  $\mu(t)$  correspond à une force aléatoire de moyenne nulle exercée par le bain thermique sur la particule (avec  $\langle \mu(t)\mu(t') \rangle = 2k_B T m \gamma \delta(t - t')$ ). Comme le montre la re-écriture sur la seconde ligne la fluctuation en position du potentiel entraîne l'ajout d'une seconde force aléatoire, qui peut être sommée pour donner le nouveau terme de bruit effectif  $\tilde{\mu}(t)$ , tel que  $\langle \tilde{\mu}(t)\tilde{\mu}(t') \rangle = 2k_B T_{\text{eff}} m \gamma \delta(t - t')$  avec :

$$\frac{T_{\text{eff}}}{T} = \left( 1 + \frac{K^2 \sigma^2}{2k_B T m \gamma^2} \right) \quad (9.23)$$

Lorsque la position du minimum du potentiel quadratique fluctue aléatoirement sur une longueur moyenne  $\sigma$  tout se passe donc comme si la particule diffusait dans un potentiel fixe mais avec une *température effective*  $T_{\text{eff}}$  plus importante que la température  $T$  de la particule.

Le description schématique de cette température effective est représentée figure 9.11. On observe que pour une particule à la température  $T$  dans le potentiel quadratique, le mouvement du potentiel entraîne un élargissement de la distribution des positions de la particule [voir ligne hachurée verte] qui, si on le ramène au potentiel quadratique immobile, correspond au mouvement d'une particule dans le potentiel initial statique à une température effective  $T_{\text{eff}}$ .

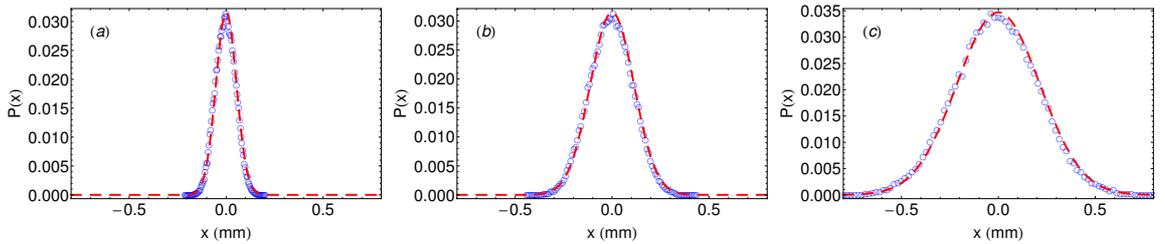


FIGURE 9.12 – Distributions de positions de la particule (en mm) en mouvement dans un potentiel quadratique de raideurs  $K = 5 \times 10^{-4} \text{ kg.s}^{-2}$  pour trois amplitudes de fluctuations, en (a)  $\sigma = 0.009 \text{ mm}$ , (b)  $\sigma = 0.2 \text{ mm}$  et (c)  $\sigma = 0.5 \text{ mm}$ . Les symboles bleus correspondent aux observations réalisées en simulation, les courbes hachurées rouges correspondent à la distribution d'équilibre estimée à partir du potentiel [voir équation (9.21)].

Plus quantitativement cette température effective est obtenue en réalisant un ajustement de la distribution de positions de la particule à l'aide d'une courbe Gaussienne [voir figure 9.12]. La figure 9.13 montre l'évolution de la température effective de la particule, en unité de la température du bain thermique en fonction de l'amplitude du bruit sur la position du potentiel harmonique pour deux valeurs de dissipation différentes. Le bon accord avec l'expression présentée équation (9.23), montre l'importance de la notion de température effective notée  $T_{\text{eff}}$  induite par la transmission de fluctuations du potentiel vers le système, ici constitué d'une seule particule.

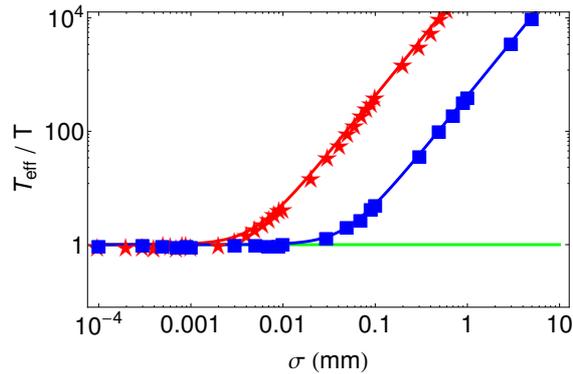


FIGURE 9.13 – Évolution de la température effective (en unité de la température du bain,  $T$ ) d'une particule se déplaçant dans un potentiel harmonique de raideur  $K = 5 \times 10^{-4} \text{ kg.s}^{-2}$  en fonction de l'amplitude des fluctuations propres du potentiel,  $\sigma$  (en mm). Pour  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  en rouge et  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$  en bleu. Les symboles correspondent aux données de simulation et les courbes à l'expression présentée équation (9.23).

#### 9.4.2.2 Influence des fluctuations de position du potentiel sur les hauteurs de barrière : potentiel effectif

La diffusion d'une particule dans un puits de potentiel dont le minimum fluctue en position ayant permis de montrer l'existence d'une température effective  $T_{\text{eff}}$ , nous allons considérer maintenant un autre aspect des fluctuations de position du potentiel qui va nous conduire à la notion de *potentiel effectif* et de *barrière effective*.

Considérons cette fois-ci un potentiel quartique présentant deux minima s'écrivant :

$$U(x) = -\frac{K}{2}(x - y(t))^2 + \frac{K'}{4}(x - y(t))^4 \quad (9.24)$$

où comme précédemment l'origine du potentiel en  $y(t)$  fluctue selon un bruit blanc Gaussien. Ce potentiel quartique correspond à un potentiel en double puits, pour lequel les positions des minima des puits se trouvent en  $\pm x_0 = \pm \sqrt{K/K'}$ , lorsque celui-ci est statique.

Nous allons nous intéresser ici à l'évolution de la distribution de positions prises par la particule en fonction de l'amplitude du bruit appliqué sur le potentiel. La figure 9.14 présente quatre distributions typiques en fonction de l'amplitude des fluctuations du potentiel. Sur les trois premières distributions on observe la formation de deux pics, correspondant au piégeage préférentiel des particules dans l'un des minima du potentiel. Sur la dernière distribution on ne distingue plus qu'un seul pic car cette fois-ci l'amplitude des fluctuations du potentiel devient comparable à la distance entre les minima. Cette évolution ne peut s'expliquer uniquement par l'augmentation de la température effective de la particule discutée précédemment (sous-section 9.4.2.1). En effet la forme des distributions ne coïncide pas avec la distribution de position attendue à l'équilibre thermodynamique, c'est-à-dire la distribution de Boltzmann [voir courbe verte figure 9.14]. Les fluctuations du potentiel induisent donc un nouvel effet correspondant à la déformation du potentiel apparent subit par la particule. En effet, la position du potentiel fluctuant aléatoirement, la particule ressent un potentiel dont la forme est moyennée par ces fluctuations. Il est donc nécessaire de moyennner la forme du potentiel par rapport à la distribution des fluctuations pour obtenir le potentiel effectif

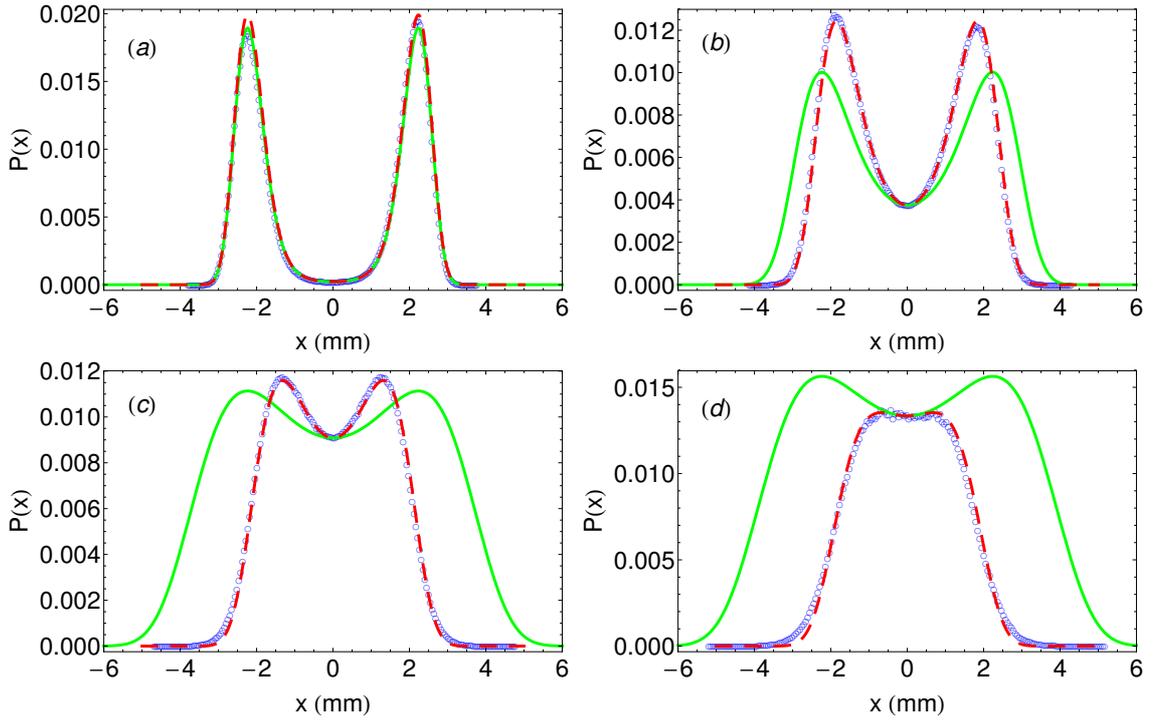


FIGURE 9.14 – Distributions de positions de la particule (en mm) en mouvement dans un potentiel quartique de raideurs  $K$  et  $K'$ , pour quatre amplitudes de fluctuations, en (a)  $\sigma = 0.04$  mm, (b)  $\sigma = 0.63$  mm, (c)  $\sigma = 1.2$  mm et (d)  $\sigma = 1.7$  mm. Les symboles bleus correspondent aux observations réalisées en simulation, les courbes hachurées rouges correspondent à la distribution d'équilibre estimée à partir du potentiel effectif [voir équation (9.25)], et les courbes vertes pleines correspondent à la distribution estimée à partir du potentiel quartique [voir équation (9.24)].

ressenti par la particule. Ce potentiel effectif statique s'écrit sous la forme<sup>5</sup> :

$$\begin{aligned}
 U_{\text{eff}}(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ -\frac{K}{2} (x-y)^2 + \frac{K'}{4} (x-y)^4 \right] \underbrace{\frac{e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}}}{\sigma\sqrt{2\pi}}}_{P(y)} dy \\
 &= -\left( \frac{K}{2} - \frac{6K'}{4}\sigma^2 \right) x^2 + \frac{K'}{4} x^4
 \end{aligned} \tag{9.25}$$

Les distributions de positions présentées figure 9.14 sont alors bien décrites si l'on considère que la particule se déplace dans un tel potentiel effectif avec une température effective. Notons que sa forme évolue avec l'amplitude des fluctuations [voir courbe hachurée magenta figure 9.14].

Cette évolution du potentiel effectif ressenti par la particule avec l'amplitude des fluctuations entraîne notamment la modification de la position de ses minima apparents. La figure 9.15 compare l'évolution de la valeur absolue de la position des minima du potentiel effectif en fonction de l'amplitude des fluctuations et la position des maxima de la distribution de positions de la particule. L'excellent accord entre les deux confirme que la particule diffuse dans le potentiel moyenné.

5. On utilise là une procédure équivalente à celle proposée par Kapitza qui consiste à considérer que lorsque le temps caractéristique d'un forçage est plus petit que tous les temps du problème, les effets du forçage peuvent être pris en compte en remplaçant le potentiel fluctuant par un potentiel effectif statique [9].

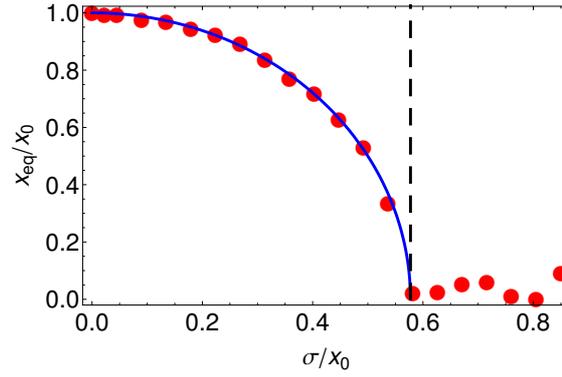


FIGURE 9.15 – Évolution de la position (en unité de  $x_0$ , défini dans le texte) des pics de distribution de position de la particule en fonction de l'amplitude des fluctuations du potentiel (en unité de  $x_0$ ), pour un potentiel quartique. Les symboles rouges correspondent aux résultats de simulations, en rond pour  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  et en croix pour  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$ . La courbe pleine bleue correspond à la position du minimum obtenue à partir du potentiel effectif, équation (9.25).

### 9.4.2.3 Influence des fluctuations sur un potentiel périodique

On considère enfin l'influence d'un potentiel périodique fluctuant sur une seule particule. Dans ce contexte le potentiel considéré s'écrit :

$$U(x) = U_0 \left[ 1 - \cos \left( \frac{2\pi}{L} [x - y(t)] \right) \right] \quad (9.26)$$

où  $y(t)$  correspond à la fluctuation de position du potentiel décrite précédemment.

Pour les mouvements de potentiel de faible amplitude et lorsque la température sur la particule est faible par rapport à l'énergie de la hauteur de barrière  $U_0$ , on est ramené au cas du mouvement d'une particule dans un potentiel quadratique. Cependant lorsque l'amplitude des fluctuations augmente la température effective de la particule finit par saturer à cause de l'amplitude finie du potentiel extérieur.

Si on s'intéresse maintenant à la forme du potentiel effectif ressenti par la particule, on peut calculer, de manière similaire à la section précédente, la forme du potentiel moyen ressenti par le système. Et après intégration sur la réalisation du bruit correspondant aux fluctuations du potentiel on trouve :

$$\begin{aligned} U_{\text{eff}}(x) &= \int_{-\infty}^{\infty} \left[ -U_0 \cos \left( \frac{2\pi}{L} [x - y(t)] \right) \right] \underbrace{\frac{e^{-\frac{y^2}{2\sigma^2}}}{\sigma\sqrt{2\pi}}}_{P(y)} dy \\ &= -U_0 e^{-\left(\frac{\pi\sigma}{L}\right)^2} \cos \left( \frac{2\pi}{L} x \right) \end{aligned} \quad (9.27)$$

On note ici que les fluctuations en position du potentiel périodique ne modifient pas la période du potentiel mais entraînent une diminution de la hauteur de barrière ressentie par la particule. Cette diminution a pour conséquence de faciliter le déplacement de la particule entraînant une augmentation de la diffusion de celle-ci par rapport à un potentiel statique.

Dans le cadre spécifique du potentiel présenté dans la section précédente [voir équation (9.20)], cette moyenne conduit à un potentiel du même type. La période du potentiel effectif n'est pas

modifiée. Les courbures du potentiel ressenties par les particules autour de leurs positions d'équilibre étant liées aux développements quadratiques de ce potentiel au voisinage de ses extrema ne sont pas modifiées. Le potentiel effectif moyen étant de ce point de vue identique au potentiel fluctuant, la largeur de la bande interdite ne sera pas modifiée. Ces effets de moyenne ne semblent donc pas participer à l'augmentation de la diffusion observée dans les îlots de Wigner.

Les pistes pour la compréhension du mécanisme de transmission des fluctuations que nous avons développés ici semblent prometteuses pour comprendre les propriétés du mouvement d'une chaîne de particules dans un environnement fluctuant en position.

## 9.5 Conclusion

Dans ce chapitre nous avons proposé un modèle unidimensionnel minimaliste d'une chaîne de particules en interaction avec un potentiel périodique à courbure asymétrique mettant en avant un mécanisme susceptible d'expliquer une telle augmentation du DQM. Nous avons montré que l'apparition d'une ouverture de gap dans la relation de dispersion de la chaîne de particule entraîne le décalage des temps et des valeurs de saturation des DQM associés aux modes propres de la chaîne, ce qui induit une augmentation du DQM par rapport à celui attendu pour une chaîne libre. Nous avons caractérisé l'amplitude de cette augmentation apparaissant dans le régime corrélé en fonction des différentes raideurs mises en jeu dans la description de ce système. Ces résultats ont pu être confrontés avec succès à des simulations de dynamique moléculaire du système.

Cette configuration où la chaîne comporte deux particules par période du potentiel se retrouve en particulier dans des petits systèmes de particules confinées dans un potentiel circulaire qui s'organisent en couronnes concentriques de particules. Sur ces systèmes il a été observé l'existence d'un régime où le DQM orthoradial de la couronne est supérieur à celui d'une chaîne de particules libre. Le modèle que nous avons développé, s'il explique qualitativement le comportement observé dans ces îlots, est insuffisant pour décrire quantitativement l'amplification du DQM observée dans le régime intermédiaire.

Pour tenter de retrouver cet accord, nous avons proposé un mécanisme complémentaire basé sur le transfert de fluctuations thermiques entre le potentiel et la chaîne, pouvant expliquer en partie les observations réalisées en îlot de Wigner. L'influence du transfert de fluctuation du potentiel vers la chaîne de particules a été validée en comparant le mouvement d'une chaîne avec une particule par période du potentiel extérieur fluctuant avec le mouvement des particules dans la configuration zigzag. On retrouve alors qualitativement un DQM comparable entre les deux systèmes. Quelques pistes de description du transfert de fluctuations ont été explorées en nous restreignant à l'étude du mouvement d'une seule particule dans divers potentiels fluctuants thermiquement, de formes quadratique, quartique ou sinusoïdal. Ces exemples simples nous ont permis de mettre en évidence les notions de température effective et de potentiel effectif. Ces mécanismes semblent prometteurs pour obtenir une meilleure compréhension du mouvement d'une chaîne de particules dans un potentiel fluctuant.



# Conclusion



Les systèmes quasi-unidimensionnels de particules en interaction répulsive confinées sont des systèmes aux propriétés structurales et dynamiques que l'on retrouve dans de nombreux domaines, depuis la physique jusqu'à la biologie.

Leurs configurations d'équilibre résultent d'un compromis entre deux énergies antagonistes. D'un côté l'énergie d'interaction répulsive entre particules qui tend à les éloigner le plus possible, de l'autre l'énergie de confinement qui tend à les aligner.

À fort confinement, le système s'organise pour former une chaîne de particules régulièrement espacées le long de l'axe correspondant au minimum du potentiel de confinement. Lorsque le confinement diminue en deçà d'un seuil caractérisé dans l'approximation d'un potentiel de confinement harmonique par une raideur  $\beta_{ZZ}$ , la configuration en ligne se déstabilise et les particules se redistribuent en quinconce. Le système est alors équivalent à deux chaînes couplées réparties de part et d'autre de l'axe central du canal confinant.

La stabilité de cette configuration dépend de la portée des interactions entre particules, de la densité et de la taille du système. Lorsque l'interaction entre particules est à longue portée le zigzag homogène est toujours stable et la bifurcation décrivant cette transition est sur-critique : les dispositions zigzag ou zagzig sont toutes deux accessibles à la transition tandis que la raideur du confinement et la distance transverse des particules (la « hauteur » du zigzag) peuvent être considérées respectivement comme ses paramètres de contrôle et d'ordre.

Nous avons montré à l'inverse que la configuration zigzag homogène est instable à plus faible confinement lorsque la portée des interactions n'est que de quelques distances inter-particules. En calculant les modes de vibration de cette double chaîne nous avons mis en évidence l'existence de fréquences qui deviennent imaginaires pures lorsque le confinement décroît. Les domaines de stabilité du zigzag ont été calculés puis validés par des résultats de simulation numérique. Cette étude a permis ainsi d'établir que pour une portée d'interaction et une distance inter-particules données, il existe deux hauteurs limites de zigzag (ou deux valeurs de confinement selon la représentation) entre lesquelles aucun zigzag stable ne peut exister. Indiquons que mesurer ces hauteurs pourrait permettre de déterminer la portée d'une interaction dans des systèmes où elle est inconnue. Ainsi dans le cas des interactions à courte portée, la transition initiale est suivie par deux autres transitions, la configuration zigzag n'étant stable que dans un domaine de confinement restreint voisin de  $\beta_{ZZ}$  (pouvant être négligé dans les grands systèmes) ou au contraire à très faible confinement.

La perte de stabilité de la configuration d'équilibre en zigzag posait naturellement la question de la forme de la configuration d'équilibre vers laquelle le système converge. Nos simulations ont montré que ces configurations sont inhomogènes. Selon l'intensité du confinement, les distributions de particules observées sont des "bulles", groupes de particules en zigzag entourées de particules en ligne, ou de simples modulations de grande longueur d'onde de la hauteur du zigzag. Cette organisation inhomogène permet de diminuer l'énergie d'interaction des particules en augmentant leur distance grâce au « repliement » de la chaîne dans la partie zigzag tout en minimisant l'augmenta-

tion de l'énergie de confinement en limitant le nombre de particules hors ligne. Ces configurations inhomogènes sont très stables, leur forme reste inchangée jusqu'à des températures de l'ordre du dixième de l'énergie d'interaction entre particules.

Les domaines d'instabilité présentent toutefois une seconde caractéristique intéressante. Lorsque des cycles de montée/descente d'intensité de confinement sont appliqués au système, l'évolution de la hauteur de la bulle présente une hystérésis. L'observation de cette hystérésis est toutefois délicate et nécessite quelques précautions dès que la température est non nulle. En effet dans ce cas, les fluctuations des positions des particules rendent difficile la détermination précise de la hauteur de la bulle et donc son utilisation comme paramètre d'ordre pour décrire la configuration du système. Pour contourner cette difficulté, nos résultats suggèrent d'utiliser plutôt la valeur du maximum de la distribution des hauteurs prise par le système comme paramètre d'ordre. Elle en a toutes les caractéristiques. La distribution présente un pic centré autour d'une valeur proche de zéro lorsque la configuration est en ligne et sur une valeur comparable à la hauteur de la bulle lorsque la configuration est en bulle. De cette manière la position du ou des maxima de la distribution indique l'état du système, en bulle ou en ligne et permet ainsi d'obtenir sans ambiguïté l'évolution du cycle d'hystérésis lorsque la température est élevée.

Ainsi construit, nous avons pu montrer qu'un cycle d'hystérésis pouvait être bien défini tant que la température du système restait inférieure à une température critique  $T_c$ ; son extension diminuant jusqu'à s'annuler lorsque  $T \rightarrow T_c$ . Au-delà de cette température, l'hystérésis est brouillée, le système se trouvant alors dans un régime que nous avons qualifié « d'intermittence » dans lequel son état fluctue au cours du temps entre configurations en ligne et en bulle. Nous avons montré qu'en mesurant les temps de résidences dans chacune de ces configurations nous pouvions non seulement estimer la hauteur de la barrière énergétique séparant ces deux configurations métastables mais aussi reconstruire le diagramme d'hystérésis qui aurait été mesuré à température nulle et qui contient les informations indispensables à la description du système. L'utilisation de cette procédure pourrait être envisageable dans des systèmes pour lesquels des mesures basses températures sont impossibles.

Si le système est inhomogène, la distance entre particules est malgré tout quasi identique dans tout le système. Aussi peut-on imaginer décrire cette coexistence de phases simplement dans un modèle standard de transition de phase du second ordre, la distance entre particules étant la grandeur commune aux deux phases. Si ce modèle nous a permis de déterminer l'évolution de l'extension de chacune des phases en fonction du confinement, il s'est avéré toutefois insuffisant pour décrire les hystérésis observées. En fait la coexistence de phases et les hystérésis suggéraient que l'instabilité de la ligne n'était pas sur-critique dans le cas d'interaction à courte portée mais au contraire une transition sous-critique. Nous l'avons prouvé en développant un modèle analytique non linéaire de la transition zigzag dans la limite thermodynamique et à température nulle. Ce modèle s'inscrit dans le cadre général de la théorie des bifurcations dans les systèmes étendus ou périodiques, pour lesquels un mécanisme expliquant le changement de caractère de la bifurcation avait déjà été proposé. Après avoir « construit » la forme normale de la bifurcation connaissant toutes les énergies en jeu, nous avons pu déterminer l'origine de sa sous-criticalité. Dans les systèmes que nous avons considérés, elle est due au couplage entre le mode acoustique de grandes longueurs

dont la fréquence nulle correspond à l'invariance par translation ou par rotation pour des systèmes cycliques et le mode mou transverse dont la fréquence s'annule à la transition zigzag. Ce couplage se traduit par celui des champs de déplacement longitudinal et transverse décrivant la distorsion du système homogène.

En outre, les solutions stationnaires des équations de la forme normale de ce modèle permettent de décrire très précisément la forme des configurations inhomogènes. Une fois écartée la solution « paroi » qui relie une phase en ligne à une phase en zigzag mais ne respecte pas la symétrie cyclique des systèmes considérés, il n'en reste que deux qui rendent compte des configurations escomptées. La première est une solution localisée qui décrit une configuration en zigzag dont une onde solitaire module la hauteur entre zéro et la hauteur maximale de la « bulle ». La seconde décrit la simple modulation de la forme en zigzag, sa hauteur non nulle variant périodiquement le long du système.

Pour pouvoir utiliser les résultats de ce modèle continu pour interpréter les résultats de nos simulations, et plus généralement tout résultat obtenu pour des systèmes cycliques de taille finie, nous avons développé une procédure spécifique imposant que la longueur occupée par la configuration inhomogène doit être égale à la longueur réelle du système. En mesurant la distance des particules dans la partie en ligne, on en déduit la valeur du confinement qui doit être introduite dans le modèle continu pour retrouver sans aucun paramètre ajustable la forme observée dans le système de taille finie. Soulignons que l'accord entre les formes calculées et les formes simulées ou observées expérimentalement constitue la première validation quantitative du mécanisme de couplage de modes mous à la transition, responsable du changement de caractère de la bifurcation.

L'étude des propriétés dynamiques de ces systèmes au delà de la transition zigzag, que l'on étudie celles des configurations inhomogènes ou celles d'un zigzag parfait a permis d'obtenir des résultats spécifiques aux systèmes considérés mais aussi de répondre dans chacun des cas à des questions relevant d'un contexte beaucoup plus général.

Si une bulle est stable en présence d'un bain thermique, elle ne reste pas immobile. Lorsque l'agitation thermique est suffisante, elle se met en mouvement. Son déplacement ne correspond pas alors à une translation longitudinale d'ensemble des particules mais à la propagation de l'onde solitaire la décrivant le long du canal. Le mouvement de cette onde solitaire est analogue à celui d'une particule fictive dont nous avons précisé la dynamique. En effet, l'étude des variances de positions longitudinales d'une seule bulle nous a ainsi permis de montrer qu'à haute température, son mouvement est diffusif à temps long. Cette diffusion est analogue à la diffusion libre d'une particule dont la masse  $M_B$  a été calculée dans le cadre de notre modèle non linéaire. Elle ne dépend que de la forme de la bulle conformément aux résultats de simulation.

À plus basse température, nous avons mis en évidence l'existence d'une modulation spatiale périodique de l'énergie potentielle de la configuration associée à la position de la bulle. Son amplitude est due au coût énergétique de la réorganisation permanente des particules le long de l'enveloppe décrite par l'onde solitaire lorsque celle-ci se déplace. Cette modulation bien que de faible amplitude (elle ne dépasse pas une fraction de l'énergie d'interaction entre particules) modifie pourtant considérablement la dynamique de la bulle. De celle d'une particule libre à haute température,

elle devient celle d'une particule soumise à un potentiel périodique dont la forme est celle de la modulation de l'énergie potentielle. Il s'agit là d'un processus de transport par saut activé thermiquement, la bulle pouvant rester piégée à très basse température. Soulignons que cette modulation est intrinsèquement liée au caractère discret du système et n'existe pas pour une onde solitaire dans le modèle continu.

Plusieurs configurations inhomogènes peuvent coexister dans un équilibre métastable du système. Elles interagissent alors pour se réorganiser afin de former une seule bulle qui est le seul état d'équilibre stable. Nous avons montré que pour décrire les processus observés en simulation il convenait de distinguer deux types de configurations de paire de bulles. Dans un système Non Frustré (système-NF) les particules disposées entre les bulles peuvent se réorganiser selon une configuration unique en zigzag sans contrainte géométrique tandis que dans un système Frustré (système-F) les particules ne peuvent pas former une seule et même configuration zigzag, il existe dans ce cas un ou plusieurs défauts topologiques entre les bulles empêchant géométriquement cette réorganisation. Soulignons que cette distinction sera indispensable pour décrire les processus de réorganisation de tout système discret, les dynamiques des configurations inhomogènes étant radicalement différentes pour chacun des cas. En effet, nos simulations montrent que les bulles d'un système-NF s'attirent tandis que celles d'un système-F se repoussent, l'intensité de la force d'interaction entre bulle diminuant exponentiellement avec leur distance. Ces comportements, bien que caractéristiques de systèmes discrets ont pu néanmoins être expliqués à partir de notre modèle non linéaire continu. En adaptant un calcul d'interaction entre ondes solitaires effectué par Elphick, Meron et Spiegel à notre problème, nous avons pu déterminer le sens de la force d'interaction entre les bulles et calculer analytiquement la variation de son intensité avec la distance entre bulles. L'accord avec les simulations est très satisfaisant. Soulignons que de manière plus générale, nous disposons avec le modèle non linéaire que nous avons développé d'un outil permettant de déterminer la « masse » d'une seule configuration inhomogène et la force entre de telles configurations. Cet outil est adaptable pour d'autres systèmes dès lors que tous les termes de sa forme normale sont analytiquement connus et exprimables pour le système considéré.

Par ailleurs nous avons identifié deux processus de réorganisation. Le premier est la « coalescence » au cours de laquelle les bulles se rapprochent l'une de l'autre, entrent en contact et fusionnent pour former une simple bulle. Ce processus n'est observable que pour les systèmes-NF. Le second, le « collapse », pour lequel une bulle disparaît au profit de la seconde. Ce processus ne nécessitant pas de mise en contact s'observe à la fois dans les systèmes-NF et les systèmes-F. A basse température, la coalescence est le processus dominant tandis que le collapse qui est un processus activé thermiquement ne le devient qu'à plus haute température.

Un autre point important est de considérer les opportunités qui sont offertes par les propriétés dynamiques non plus des structures collectives de ces systèmes mais des particules les constituant. Elles permettent en effet de déterminer des grandeurs structurales difficilement accessibles autrement. Ainsi la mesure des variances de positions transverses des particules nous permet d'identifier avec précision des seuils de transitions structurales des systèmes. Leurs mesures dans les simulations montrent qu'elles divergent à la transition. Ce comportement s'interprète simplement dans

le cadre du modèle de reconstruction que nous avons développé. Ce modèle calcule la variance de déplacement dans l'espace réel comme la somme de celles des coordonnées normales des modes de vibration du système. Les équations de Langevin pour chaque mode propre sont formellement identiques à celles d'une particule libre ou d'une particule dans un potentiel harmonique; leur résolution montre que la variance de chaque mode de fréquence  $\omega$  sature à une valeur proportionnelle à  $1/\omega^2$  à un instant variant comme  $1/\omega$ . Chaque transition étant signée par l'apparition d'un mode de vibration de fréquence nulle, la contribution de ce mode à la variance de déplacement devient progressivement dominante et diverge à chaque transition.

La forme de la divergence est néanmoins différente selon la transition considérée. A l'approche de la transition zigzag, le DQM transverse diverge comme l'inverse de la hauteur du zigzag au carré (correspondant à l'inverse de l'écart au seuil) de part et d'autre du seuil de transition. Soulignons qu'à cette transition seul le DQM transverse est sensible à la transition. Ce n'est plus le cas lorsque la transition concerne le passage d'une configuration homogène à une configuration inhomogène. Dans ce cas, la variance longitudinale augmente à la transition tandis que la variance transverse diverge comme l'inverse de l'écart à la hauteur seuil. Cette différence de comportements selon type de transition est générique et ne résulte que du couplage entre les champs de déplacements existants dans les bifurcations sous-critiques. Ceci suggère que la mesure précise de cette divergence pourrait donner, outre les seuils de transition, la nature de la transition pour des systèmes dans lesquelles elles ne sont pas caractérisées.

La dynamique individuelle des particules semble également pertinente pour étudier le mouvement d'une chaîne de particules en interaction dans un potentiel périodique. En effet dans une configuration zigzag, nous pouvons considérer le mouvement des particules, comme celui de particules appartenant à une chaîne se déplaçant dans le potentiel périodique fluctuant créé par la seconde. Cette approche est validée par le fait que la variance des déplacements longitudinaux des particules obtenue par simulation pour un système chaîne/potentiel périodique fluctuant est très voisine à celle calculée dans une configuration zigzag.

Pour une chaîne ayant une particule par période du potentiel, la diffusion des particules est toujours ralentie par rapport à leur diffusion dans une chaîne libre. Plus surprenant a été le résultat obtenu dans le cas d'un système ayant plusieurs particules par période d'un potentiel statique. En effet, nous avons montré analytiquement que dans le cas de deux particules par période et sous certaines conditions que nous avons identifiées comme liées à la dissymétrie du potentiel, la diffusion peut être augmentée par rapport à celle la chaîne libre pour une large gamme de temps, la durée de cette sur-diffusion augmentant avec la dissipation. Ce résultat s'explique par l'existence d'une bande interdite dans la relation de dispersion de la chaîne en interaction avec le potentiel périodique qui n'existe pas en absence de potentiel appliqué. En présence du potentiel, les modes de plus grandes longueurs d'onde ont des fréquences plus petites qu'en l'absence du potentiel. Ceci entraîne le retard de la saturation des DQM de certains modes propres (en  $1/\omega$ ). C'est ce retard à la saturation qui explique l'augmentation de la variance du déplacement longitudinal du régime intermédiaire de diffusion corrélé des particules.

Cette approche, si elle va dans le bon sens ne semble pas toutefois suffisante pour rendre compte du comportement d'une chaîne sur un potentiel fluctuant. Nous avons en effet utilisé ce modèle

---

pour analyser l'augmentation de la diffusion observée dans des îlots de Wigner. Ces systèmes de particules piégées dans un disque s'organisant en couronnes concentriques, il avait été montré que la diffusion des particules de la couronne externe diffusaient plus rapidement que celles appartenant à une couronne de même dimension mais non soumises au potentiel créé par les particules des couronnes internes. L'existence des effets dus à la bande interdite s'avère insuffisante pour expliquer les résultats obtenus. Cette insuffisance pourrait être due au fait que nous n'avons considéré dans le modèle qu'un potentiel statique alors que dans le système physique ce potentiel est fluctuant puisque les particules qui le créent sont elles-mêmes animées d'un mouvement diffusif. En effet, nous avons montré que les fluctuations en position du potentiel peuvent se traduire par une température effective ressentie par les particules de la chaîne et un effet de moyenne sur le potentiel auquel elles sont soumises. Ces fluctuations entraînent par exemple une augmentation du régime de leur diffusion balistique. Ce résultat est encourageant et de nouveaux travaux devraient être poursuivis pour explorer cette piste de la « transmission » des fluctuations du potentiel aux particules de la chaîne.

# Annexes



# Annexe A

## Détails sur les simulations

### Sommaire

---

<b>A.1 Description générale des simulations</b> . . . . .	<b>203</b>
A.1.1 Système en général . . . . .	203
A.1.2 Algorithme de Verlet . . . . .	204
<b>A.2 Simulations « Analyse de stabilité linéaire »</b> . . . . .	<b>205</b>
<b>A.3 Simulations « Modèle non linéaire »</b> . . . . .	<b>206</b>
<b>A.4 Simulations « Influence de la température »</b> . . . . .	<b>206</b>
<b>A.5 Simulations « Diffusion des bulles »</b> . . . . .	<b>207</b>
<b>A.6 Simulations « Interaction entre bulles »</b> . . . . .	<b>207</b>
<b>A.7 Simulations « Chaîne dans un potentiel périodique »</b> . . . . .	<b>208</b>

---

### A.1 Description générale des simulations

#### A.1.1 Système en général

On simule un système de particules ponctuelles de masse  $m$  se déplaçant dans un plan bidimensionnel ( $xOy$ ), et soumises à un bain thermique à la température  $T_b$ . Le bain thermique est caractérisé par un coefficient de dissipation  $\gamma$  et des forces aléatoires appliquées sur chacune des particules, avec les propriétés statistiques d'un bruit blanc Gaussien non corrélé spatialement ni temporellement. Les particules interagissent entre elles avec un potentiel d'interaction répulsif. Dans les simulations que nous avons réalisées deux types de potentiel ont été considérés : un potentiel d'interaction électrostatique écranté de la forme  $U(r) = U_0 K_0(r/\lambda_0)$  avec pour échelle d'énergie  $U_0$ , pour portée typique d'interaction  $\lambda_0$  et où  $K_0(\cdot)$  est une fonction de Bessel modifiée d'ordre 0 et un potentiel d'interaction en loi de puissance de la forme  $U_\alpha(r) = U_0 (\lambda_0/r)^\alpha$ . Cette seconde interaction a uniquement été utilisée dans le chapitre 2 s'intéressant à la stabilité linéaire de la configuration zigzag.

Les particules sont transversalement confinées dans une géométrie quasi-uni dimensionnelle (selon  $y$ ) à l'aide d'un potentiel harmonique de raideur  $\beta$ , alors que des conditions aux bords périodiques sont appliquées dans la direction longitudinale (selon  $x$ ). La dynamique du système est

simulée par l'intégration directe des équations de Langevin à partir d'un algorithme de Verlet, aussi appelé « Leap Frog » décrit dans la sous-section A.1.2. La longueur de la cellule périodique simulée sera notée  $L$  et le nombre de particules  $N$ .

Au cours de toutes les simulations, la distance moyenne entre particules  $d \equiv L/N$  est gardée constante. L'influence de la portée de l'interaction  $\lambda_0$  pourra alors être comparée à cette distance caractéristique. De manière standard on se placera dans des conditions les plus proches possibles du système expérimental pour lesquelles  $d = 1.875$  mm et la portée de l'interaction en fonction de Bessel modifiée est  $\lambda_0 = 0.48$  mm, de telle sorte que  $\lambda_0 \approx d/4$ . Pour de telles valeurs il est possible d'observer des structures en zigzag linéairement instables [voir sous-section 2.3.3].

### A.1.2 Algorithme de Verlet

Nous allons présenter ici une description rapide de l'algorithme de Verlet utilisé pour intégrer numériquement les équations de la dynamique du mouvement des particules [63]. Cet algorithme est particulièrement utilisé dans les simulations de dynamique moléculaire car il offre une plus grande stabilité que la méthode d'Euler et il permet de conserver les propriétés physiques telles que la réversibilité dans le temps et l'énergie totale du système.

L'algorithme de Verlet est construit à partir d'un développement de Taylor de la position d'une particule pour un temps  $t + \delta t$  avec ( $\delta t \ll 1$ ) qui permet d'obtenir facilement :

$$x(t + \delta t) + x(t - \delta t) = 2x(t) + \underbrace{\ddot{x}(t)}_{\sum F(t)/m} \delta t^2 \quad (\text{A.1})$$

$$x(t + \delta t) = x(t) + \left[ \dot{x}(t) + \frac{\sum F(t)}{m} \delta t \right] \delta t \quad (\text{A.2})$$

Un raisonnement similaire peut être réalisé pour l'écriture de la vitesse d'une particule au temps  $t + \delta t$ , en négligeant les termes d'ordre supérieur  $\mathcal{O}(\delta t^3)$  on a :

$$\dot{x}(t + \delta t) = \dot{x}(t) + \frac{\sum F(t)}{m} \delta t \quad (\text{A.3})$$

Ainsi, si on discrétise l'évolution du temps en pas discret de durée  $\delta t$ , on trouve que la position et la vitesse de la particule au pas de temps  $(n + 1)$  dépendent uniquement de la vitesse et de la position au pas  $(n)$ , de telle sorte que :

$$\begin{cases} \dot{x}^{n+1} = \dot{x}^n + \frac{\sum F^n}{m} \delta t \\ x^{n+1} = x^n + \dot{x}^{n+1} \delta t \end{cases} \quad (\text{A.4})$$

Cet algorithme permet donc de décrire la dynamique des particules à l'intérieur du système selon des pas temporels discrets de durée  $\delta t$ . Afin que l'intégration des équations par l'algorithme soit correcte il est tout de même nécessaire que le pas de temps  $\delta t$  soit pris inférieur à la plus petite échelle de temps caractéristique du système. Ici nous avons choisi  $\delta t = 10^{-3}$  s, cette valeur s'est avérée inférieure aux temps caractéristiques de tous les problèmes que nous avons considérés.

L'action du bain thermique sur une particule est modélisée par une force de dissipation visqueuse  $F_{\text{diss}}$  et une force aléatoire  $\mu_i(t)$ . La force de dissipation visqueuse est proportionnelle à la vitesse

de la particule et vaut :

$$F_{\text{diss}i}^n = -m\gamma\dot{x}_i^n \quad (\text{A.5})$$

avec  $m\gamma$  le coefficient de dissipation visqueuse, et  $\gamma^{-1}$  son temps caractéristique. La force aléatoire  $\mu_i(t)$  a quant à elle les propriétés suivantes :

$$\langle \mu_i(t) \rangle = 0 \quad (\text{A.6})$$

$$\langle \mu_i(t)\mu_j(t') \rangle = 2k_B T m\gamma \delta(t-t')\delta_{ij} \quad (\text{A.7})$$

où  $k_B$  est la constante de Boltzmann et  $T$  la température du système. Ces deux paramètres sont caractéristiques d'un bain thermique donné et sont reliés au coefficient de diffusion  $D_0$  d'une particule par la relation d'Einstein :

$$D_0 = \frac{k_B T}{m\gamma} \quad (\text{A.8})$$

À l'aide de l'algorithme développé par Gillespie [58] l'influence du bain thermique sur la vitesse d'une particule est incorporée dans l'équation d'évolution sur la vitesse [voir équation (A.4)], qui devient alors :

$$\dot{x}_i^{n+1} = \dot{x}_i^n + \frac{\sum F^n}{m}\delta t + \underbrace{-\gamma\dot{x}_i^n\delta t}_{F_{\text{diss}}} + \underbrace{\sqrt{D_0}N_{\delta t}(n, x, i)\sqrt{\delta t}}_{\mu_i} \quad (\text{A.9})$$

où  $\dot{x}_n$  désigne la vitesse de la particule au pas de temps  $n$ , telle que  $\dot{x}_n = \dot{x}(n\delta t)$ . Le terme  $N_{\delta t}(x, n)$  correspond à un nombre aléatoire généré à partir d'une distribution gaussienne de moyenne nulle et d'écart type l'unité. Ce nombre aléatoire est tiré pour chaque pas de temps  $n$  à l'aide de la méthode de Box-Muller [14].

La simulation du mouvement des particules est alors réalisée en utilisant cet algorithme pour calculer le mouvement de chaque particule dans chaque direction de l'espace.

## A.2 Simulations « Analyse de stabilité linéaire »

Les résultats de simulation présentés au cours du chapitre 2 portent essentiellement sur les configurations d'équilibre du système, c'est pourquoi durant ce chapitre la température du bain thermique a été choisie de telle sorte que  $U(d)/(k_B T_b) < 0.01$  dans toutes les simulations. Cette faible amplitude de bruit permet d'observer de manière très précise la configuration prise par le système mais également de s'assurer dans une certaine mesure que celle-ci est bien une configuration d'équilibre stable.

On s'intéresse dans ce chapitre aux valeurs de hauteurs seuils pour lesquelles la configuration en zigzag homogène n'est plus une configuration d'équilibre stable et en particulier à l'influence de la taille du système et de l'interaction entre les particules sur ces valeurs.

C'est pourquoi on a choisi d'utiliser les deux formes de potentiels d'interaction présentées section A.1 en fonction de Bessel modifiée et en loi de puissance. Dans le premier cas la portée de l'interaction a été variée allant de  $\lambda \sim d/2$  à  $\lambda \sim 2d/9$  où  $d$  est la distance moyenne standard entre

particules. Et dans le second cas la puissance de l'énergie d'interaction a été variée entre  $\alpha = 1$  et  $\alpha = 6$ . Pour les deux types d'interaction le nombre de particules dans le système a été varié avec pour valeurs 8, 16, 32 ou 64 particules.

### A.3 Simulations « Modèle non linéaire »

Comme pour le chapitre précédent les simulations présentées dans le chapitre 3 ont principalement été réalisées pour observer l'évolution des configurations d'équilibre du système donc de nouveau la température du bain thermique a été choisie très faible par rapport aux autres énergies mises en jeu.

Les simulations étant réalisées à température finie non nulle, pour obtenir de façon précise les configurations d'équilibre, il a été nécessaire de moyenniser les mouvements des particules dans le système sur une échelle de temps intermédiaire entre le pas de temps et la durée de la simulation. Puisque cette durée n'est jamais plus petite que  $10^6$  pas de temps, le temps typique de moyenne considéré pour observer une configuration d'équilibre est de  $10^3$  pas de temps. Toutes les mesures de longueur caractéristiques ( $d, h, l^* \dots$ ) ont été réalisées sur ces configurations d'équilibre.

De plus afin d'observer continûment l'évolution des configurations du système et pour observer l'apparition de cycle d'hystérésis il a été nécessaire de faire varier le confinement appliqué au système. Pour cela la raideur  $\beta$  a été variée par sauts discrets les plus petits possible tout en laissant entre chaque changement de confinement le temps au système de converger vers sa configuration d'équilibre. Le durée typique en simulation de ces paliers de confinement constant est de  $10^4$  pas de temps, et nous réalisons typiquement  $10^3$  paliers de raideur (parfois allant jusqu'à  $10^5$  paliers) pour obtenir une variation relative de l'écart au seuil de transition zigzag  $\epsilon$  de l'ordre de  $10^{-3}$ . Toutes ces valeurs ont été variées afin de s'assurer qu'aucun artefact lié à cette discrétisation n'apparaissait.

### A.4 Simulations « Influence de la température »

Dans toutes les simulations présentées dans le chapitre 4, un système suffisamment grand a été choisi afin d'observer un comportement d'hystérésis net. C'est pourquoi les simulations ont été réalisées pour des systèmes de  $N = 128$  particules placées dans une cellule de longueur  $L = 240$  nm. Le coefficient de dissipation associé au bain thermique est  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  afin d'amplifier l'influence des fluctuations thermiques. Pour de tels paramètres les propriétés d'équilibre du système ont été décrites par une bifurcation fourche sous-critique [voir section 3].

Ce chapitre se concentre principalement sur l'influence de la température sur la bifurcation sous-critique. La gamme de température considérée se situe entre  $10^9$  et  $2 \cdot 10^{11}$  K, qu'il est utile de comparer avec l'énergie typique d'interaction entre particules pour la densité moyenne de particules du système qui vaut  $U_{inter} \approx 0.117 \text{ nJ}$  ( $U_{inter} \approx 8.46 \cdot 10^{12} \text{ K}$ ).

Afin d'avoir une statistique suffisante pour obtenir les densités de probabilité de  $h_m(\epsilon, T, t)$  il a été nécessaire de réaliser des simulations longues allant jusque  $10^7$  pas de temps pour une valeur fixe de confinement.

De plus au cours du chapitre nous avons mis l'accent sur l'importance de la durée finie de l'observation du système entre chaque changement de raideur par sauts discrets. La durée typique de ces paliers de raideur est ici de  $2 \cdot 10^5$  pas de temps pour une variation relative de la raideur de  $10^{-3}$ .

Enfin l'analyse des temps de résidence dans chaque configuration d'équilibre du système a été obtenue en mesurant au minimum 1000 sauts entre configurations pour chaque valeur de confinement étudiée. La régularité des distributions obtenues [voir figure 4.9] atteste de la qualité de ces mesures.

## A.5 Simulations « Diffusion des bulles »

Comme il a été évoqué au chapitre 4 au delà d'une température de  $T \sim 5 \cdot 10^{12}$  K, même les structures en zigzag homogènes sont détruites par les fluctuations thermiques. On a également vu que la description de la forme des structures en bulle restait valable jusqu'à des températures de  $10^{10}$  K, alors que la mise en mouvement des bulles est observée en simulation à partir de températures de l'ordre de  $10^6$  K, comme le montre la section 6.5. La gamme de température que l'on considère dans le chapitre 6 pour étudier le mouvement des bulles s'étend donc sur quatre ordre de grandeurs allant de  $10^6$  K à  $10^{10}$  K.

De plus le mouvement des bulles est observé pour différents coefficients de dissipation  $\gamma = 1 \text{ s}^{-1}$  et  $\gamma = 10 \text{ s}^{-1}$ . Ces valeurs sont à comparer avec les durées typiques des simulations de de l'ordre de  $10^5$  s, et aux échelles de temps caractéristiques du problèmes définies par  $d/c \sim 0.1$  s et  $L/c \sim 10$  s (pour  $L = 60$  mm) où  $c$  est la vitesse typique des ondes acoustiques dans le système.

Une caractéristique importante de l'analyse présentée dans ce chapitre concerne la dépendance des coefficients de transport en fonction de la forme des enveloppes continues des bulles. C'est notamment pourquoi l'on fait varier la taille du système en changeant le nombre de particules et la valeur du confinement transverse  $\beta$  afin de modifier les formes des bulles. La gamme de confinement transverse qui permet d'observer des structures en bulles dans les simulations a été décrite au chapitre 3. On restreint donc l'étude dans ce domaine à une certaine gamme de paramètres car la cohérence du calcul de la masse des bulles nécessite que l'extension longitudinale de celles-ci soit beaucoup plus petite que  $L$ . Les domaines restreints d'étude sont donc exprimés en fonction du paramètre de confinement adimensionné  $\epsilon$ , dans ce chapitre les paramètres décrits sont :  $\epsilon \in [0.130, 0.340]$  pour  $N = 16$ ,  $\epsilon \in [0.060, 0.400]$  pour  $N = 32$  et  $\epsilon \in [0.004, 0.130]$  pour  $N = 64$ .

## A.6 Simulations « Interaction entre bulles »

Au cours du chapitre 7 concernant l'interaction entre les structures en bulles une attention toute particulière a été portée à la préparation des conditions initiales du système.

En effet les configurations de paire de bulles que l'on étudie au cours de ce chapitre sont des conditions d'équilibres métastables, il est donc nécessaire de réaliser une trempe rapide du système pour obtenir une telle configuration.

Les configurations d'intérêt ont typiquement été obtenues en simulation à partir de configurations homogènes, réalisées par un confinement transverse donné, et pour laquelle la température a été brusquement variée d'une valeur importante ( $T \sim 10^{11}$ ), permettant au système d'atteindre des configurations très loin de l'équilibre, à une valeur très faible ( $T \sim 10^6$ ) afin que le système relaxe vers un état d'équilibre. Seules les configurations présentant une paire de bulles ont alors été retenues.

Une fois les configurations présentant deux structures en bulles obtenues, nous avons simulé la dynamique des paires de bulles à température nulle mais avec un coefficient de dissipation fini afin de faire converger le système vers une configuration en paire de bulles avec le moins d'énergie cinétique possible acquise par les particules. De cette manière il a été possible de préparer plusieurs conditions initiales correspondant à différentes distances entre bulles pour des systèmes Non-Frustrés et Frustrés. Ensuite ces configurations ont été utilisées comme conditions initiales dans les simulations décrites au cours du chapitre, aussi bien à température nulle sans dissipation qu'à température non nulle et avec dissipation.

Afin de calculer l'évolution moyenne de l'énergie au cours des deux processus de retour à l'équilibre discutés dans le chapitre nous avons simulé plusieurs fois le devenir des bulles en partant d'une même condition initiale. Il a ensuite été possible de calculer l'évolution de l'énergie de la configuration du système en fonction du temps et, prenant comme origine des temps l'instant de la fusion ou de la disparition d'une des bulles, nous avons pu moyenniser l'évolution de l'énergie de la configuration du système sur toutes les réalisations. De cette manière les fluctuations aléatoires de l'énergie avec le bruit thermique ont pu être moyennées.

## A.7 Simulations « Chaîne dans un potentiel périodique »

Pour les résultats présentés dans le chapitre 9 il est important de préciser la prise en compte des fluctuations de position du potentiel extérieur dans les simulations. De manière générale le potentiel extérieur qu'il soit quadratique, quartique ou sinusoïdal peut s'écrire sous la forme  $U(x + y(t))$  où  $y(t)$  correspond à la fluctuation en position. Cette fluctuation est tirée aléatoirement selon une distribution Gaussienne dont la largeur  $\sigma$  est variée. Nous verrons également que cette fluctuation en position du potentiel  $y(t)$ , correspondant au mouvement d'ensemble de la chaîne créant le potentiel extérieur, peut être modélisée par un équation de Langevin d'une particule libre avec la masse de l'ensemble de la chaîne extérieure pour masse. De cette manière on trouve que la position du potentiel diffuse aux temps longs entraînant avec lui, sous certaines conditions, la chaîne de particules.

# Annexe B

## Détails sur les expériences

### Sommaire

---

<b>B.1 Principe de l'expérience</b>	<b>210</b>
B.1.1 Vue d'ensemble du montage	210
B.1.2 Description des interactions entre billes	211
B.1.3 Détermination de la température effective	212
<b>B.2 Confinement quasi-uni dimensionnel annulaire des particules</b>	<b>213</b>
B.2.1 Cellules à confinement solide	213
B.2.2 Cellules à confinement électrostatique	215

---

Parrallèlement à ces études théoriques et ces simulations nous avons mené quelques expériences permettant de vérifier les résultats obtenus pour des systèmes physiques réels, ayant notamment des particules de taille finie. Nous présentons ici le montage expérimental utilisé et les améliorations que nous y avons apporté pour pouvoir contrôler la valeur du potentiel de confinement. Certaines expériences sont présentées sur le site internet [1].

Le dispositif expérimental décrit dans cet annexe est un système macroscopique bidimensionnel de billes métalliques millimétriques en interaction électrostatique soumises à une agitation mécanique. Ce dispositif expérimental permet de faire varier l'intensité des interactions entre particules simplement en modifiant leur charge électrique et de contrôler l'amplitude de l'agitation mécanique jouant le rôle du bain thermique, afin de contrôler la température effective du système. De plus la taille macroscopique des billes permet une observation optique directe du mouvement des particules.

La première section présente une vue d'ensemble du dispositif, au travers du montage expérimental, de la détermination de l'interaction entre particules et de l'estimation de la température effective appliquée aux particules. Au cours de la seconde section nous reviendrons sur deux méthodes de confinement du système en cellule annulaire quasi-uni dimensionnelle. Nous montrerons notamment qu'il est possible de varier facilement le confinement de la chaîne annulaire de particules à l'aide d'un confinement électrostatique.

## B.1 Principe de l'expérience

### B.1.1 Vue d'ensemble du montage

Ce montage a été mis initialement au point et caractérisé par Gwennou Coupier [23], puis a été adapté à l'étude de la « Single File Diffusion » par Jean Baptiste Delfau [30] pour leurs thèses. Nous allons montrer ici comment nous avons modifié la méthode de confinement des particules pour faire varier l'intensité du confinement transverse.

La figure B.1 est un schéma du dispositif expérimental. Le système est composé de billes en acier monodisperses, de 0.40 mm de rayon et de masse  $m = 2.15$  mg, placées au contact de l'électrode inférieure d'un condensateur.

Nous utilisons un « wafer » poli de silicium dopé comme électrode inférieure. Ce matériau permet la transmission de l'agitation mécanique aux particules et offre un frottement solide entre l'électrode et les billes pas trop important. Enfin l'électrode est suffisamment dure pour que sa surface ne soit pas endommagée par le mouvement des particules.

Dans le montage initial un cadre de matériau conducteur (en laiton) est posé en contact électrique avec l'électrode inférieure afin d'assurer le confinement latéral des billes au sein du condensateur. Il est isolé électriquement de l'électrode supérieure par un fin film de Mylar. L'épaisseur du cadre en laiton et de la feuille de Mylar définit l'épaisseur du condensateur dans lequel les particules se déplacent.

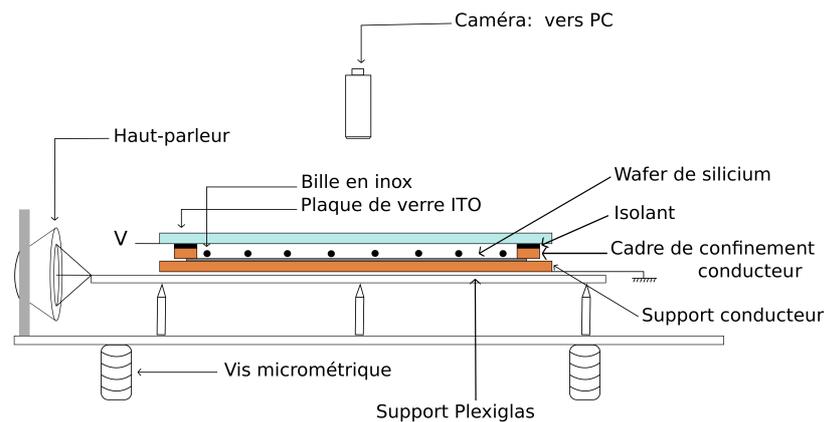


FIGURE B.1 – Schéma du dispositif expérimental.

Afin de permettre une visualisation du système par le dessus, nous utilisons comme électrode supérieure des plaques de verre d'épaisseur 1.1 mm dont la face inférieure est recouverte d'une très fine couche d'un alliage métallique<sup>1</sup>, ce qui la rend conductrice sans affecter sa transparence.

1. Les plaques sont recouvertes par épitaxie de  $9.5 \pm 0.5 \times 10^{-2} \mu\text{m}$  d'ITO (Indium-Tin-Oxyde) dont la résistivité

La méthode que nous avons développée isole électriquement certaines zones de cette électrode supérieure en enlevant localement l'alliage métallique par des techniques de gravures. On peut ainsi appliquer localement des potentiels différents de manière à créer des canaux de confinement et des « courants » pour les particules comme nous le verrons sous-section B.2.2.

L'ensemble du condensateur repose sur une plaque isolante (en Plexiglas) fixée à la membrane de deux haut-parleurs. Les haut-parleurs sont alimentés par deux bruits blancs indépendants, dont la fréquence est comprise entre 0 et 200 Hz et dont l'amplitude  $A$  est ajustable. Les vibrations des membranes sont transmises aux billes contenues dans le condensateur.

### B.1.2 Description des interactions entre billes

Lors de la mise sous tension du système l'électrode supérieure est portée à un potentiel  $V_0$  tandis que l'électrode inférieure, les billes et le cadre de confinement sont maintenus à un potentiel électrostatique nul. Les billes et le cadre de confinement se chargent électriquement, ce qui se traduit par des forces répulsives entre billes et entre les billes et le cadre de confinement [voir figure B.2].

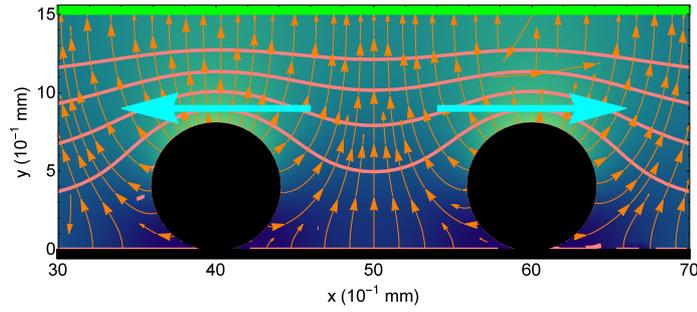


FIGURE B.2 – Représentation en échelle de couleur de la résolution numérique des équations de Laplace bidimensionnelles à l'intérieur du condensateur. L'échelle de couleur correspond à la valeur du potentiel électrique et les lignes roses aux équipotentielles. Les flèches oranges correspondent aux lignes de champs. L'électrode supérieure en vert est au potentiel  $V_0 = 1000$  V, et l'électrode inférieure et les billes en noir sont à la masse. Les flèches cyans indiquent la force de répulsion entre particules.

Il est possible d'évaluer le potentiel d'interaction entre deux billes en estimant la différence d'énergie électrostatique stockée dans le condensateur en présence ou en l'absence de ces deux billes [55, 23]. En faisant l'hypothèse que le condensateur est infini et qu'il ne contient que deux billes, on obtient comme potentiel d'interaction  $U_{\text{int}}$  :

$$U_{\text{int}}(r) = E_0(V_0)K_0(r/\lambda_0) \quad (\text{B.1})$$

$E_0(V_0)$  correspond à l'énergie caractéristique d'interaction. Elle dépend quadratiquement de la tension aux bornes du condensateur et peut s'écrire :

$$E_0 = \epsilon V_0^2 \quad (\text{B.2})$$

où  $\epsilon$  est une constante qui dépend des caractéristiques géométriques du système billes-condensateur et qui vaut pour notre système  $9.42 \times 10^{-15} \text{ J.V}^{-2}$  [55].  $K_n(r)$  désigne la fonction de Bessel modifiée

---

est de l'ordre de  $0.5 \text{ m}\Omega.\text{cm}^{-1}$ .

de deuxième espèce d'indice  $n$ .  $\lambda_0$  est une longueur caractérisant la portée du potentiel d'interaction et valant  $0.48 \text{ mm}$ <sup>2</sup>. Cette expression a été testée lors d'études antérieures et s'est avérée en très bon accord avec les observations expérimentales [55]. Le comportement de  $U_{\text{int}}$  correspond exactement à l'interaction s'exerçant entre deux vortex dans un supraconducteur de type II [29].

### B.1.3 Détermination de la température effective

Dans le montage que nous venons de décrire le rôle du bain thermique est joué par la vibration de l'ensemble du dispositif expérimental à l'aide des haut parleurs. Dans cette sous-section nous allons rappeler rapidement les nombreuses expériences qui ont été réalisées pour vérifier que cette vibration jouait bien un rôle équivalent à un bain thermique pour les particules, mais également pour caractériser la température effective ressentie par les particules.

Les expériences que nous allons décrire permettent d'établir une correspondance entre la température effective de notre système et l'amplitude  $A$  du signal envoyé dans les haut-parleurs, elles ont été présentées en détails dans la thèse de Gwennou Coupier [23].

#### B.1.3.1 Par l'étude des distributions de positions

Pour cette première méthode, on considère un système constitué d'une bille unique confinée dans un cadre de confinement carré. L'ensemble du montage est incliné d'un angle  $\alpha$  par rapport à l'horizontal de telle sorte que la bille rebondit contre la paroi du cadre sous son poids. Aucune tension n'est ici appliquée de telle sorte que le choc entre la bille et le cadre de confinement soit élastique.

Il est alors possible de déterminer la densité de probabilité pour la position de la bille dans la direction verticale à partir de la loi de Boltzmann. Puis en comparant la distribution de position prise par la particule en fonction de l'amplitude de l'agitation  $A$ , il est possible d'ajuster la forme de cette distribution à celle attendue et d'estimer la valeur de la température effective.

Cette méthode permet donc de montrer que la distribution d'équilibre des positions de la bille suit bien un loi de Boltzmann. Il est possible d'extraire de cette manière une courbe de caractérisation de la température effective  $T_{\text{eff}}$  du système en fonction de l'amplitude d'agitation  $A$ . De manière similaire, il est possible de déterminer la température effective du système sans devoir l'incliner. En effet si l'on considère de nouveau un système constitué d'une bille unique cette fois-ci confinée dans une cellule circulaire de rayon très faible (typiquement  $0.5 \text{ cm}$ ), alors en appliquant une tension au système, la particule se trouve piégée dans un potentiel harmonique bidimensionnel. On peut reprendre alors la méthode décrite précédemment pour le plan incliné, en déterminant la densité de probabilité de présence attendue et en ajustant cette densité à la distribution en position de la particule.

---

2. On notera que la portée des interactions  $\lambda_0 = 0.48 \text{ mm}$  est toujours très inférieure à la taille du système  $L$ . De plus, elle est également toujours inférieure à la distance moyenne entre particules  $d$ . On a en effet typiquement  $d \approx 0.64 \text{ mm}$  pour les systèmes les plus denses. Les deux approximations de ce calcul consistant à ne considérer que deux particules dans un condensateur infini sont donc raisonnables.

Cette méthode est préférée à la précédente car elle permet une mesure *in situ* de la température du système.

### B.1.3.2 Par le comportement balistique aux temps courts

Pour la seconde méthode de mesure de la température effective, on s'intéresse aux propriétés du mouvement des particules aux temps courts. En effet selon le formalisme de Langevin qui permet de décrire le mouvement des billes, on s'attend à ce que aux temps courts le mouvement des particules soit balistique, de telle sorte que le déplacement quadratique moyen d'une particule évolue quadratiquement en temps avec un coefficient de proportionnalité qui s'écrit  $H \equiv k_B T/m$ . Il est donc possible de mesurer directement le DQM d'une particule dans l'expérience pour en extraire la température effective à partir du comportement aux temps courts.

Cette méthode est particulièrement simple et elle permet de mesurer directement la température effective à l'intérieur du montage expérimental de manière non invasive. Cependant celle-ci nécessite un taux d'acquisition très important, impliquant l'utilisation d'une caméra rapide.

Les résultats obtenus à l'aide de cette méthode ont été trouvés en bon accord avec les mesures réalisées à partir des distributions d'équilibre au cours de la thèse de Jean Baptiste Delfau [30].

## B.2 Confinement quasi-uni dimensionnel annulaire des particules

### B.2.1 Cellules à confinement solide

Cette première méthode de confinement mise en place au cours de la thèse de Jean-Baptiste Delfau [30] consiste à évider dans le cadre de confinement une cellule annulaire au sein de laquelle on viendra placer les billes. Le cadre de confinement est une plaque de laiton de dimension  $12 \times 12$  cm et d'épaisseur  $h = 1.5 \pm 5 \times 10^{-2}$  mm.

Nous présentons ici uniquement un type de cellule en forme annulaire, cependant il est tout à fait possible de travailler avec d'autres cellules en forme des canaux longitudinaux, en forme circulaire ou en forme hexagonale [24, 25, 26, 55, 31, 32].

La figure B.3 présente une images typique du système dans une cellule annulaire. On peut noter en haut à droite sur la figure B.3 la présence d'une bille confinée dans une cellule circulaire et qui joue le rôle de « thermomètre *in situ* ». Sa fonction sert à estimer la température effective du système en même temps que l'étude du mouvement des particules dans la cellule annulaire.

On s'intéresse ici au confinement transverse pour une cellule de confinement annulaire. Nous avons vu dans la sous-section B.1.3 que le système obéissait à la loi de Boltzmann. Par conséquent, le potentiel de confinement transverse peut être évalué grâce à la formule suivante :

$$U_c^\perp(r) = -k_B T \ln P(r) \quad (\text{B.3})$$

où  $P(r)$  désigne la distribution des positions radiales d'une particule confinée dans une cellule annulaire.  $P(r)$  pouvant être mesurée expérimentalement, on obtient  $U_c^\perp(r)$  à partir de l'équation B.3.

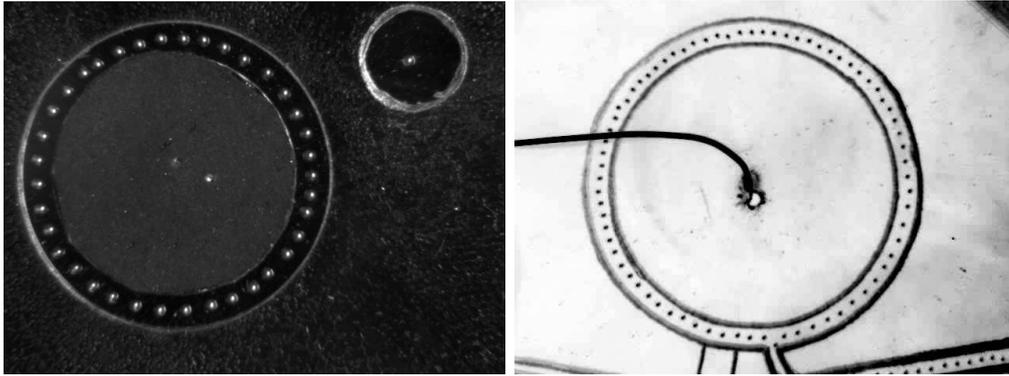


FIGURE B.3 – À gauche : Image d'une cellule annulaire à confinement solide contenant  $N = 37$  billes chargées pour une température effective  $T = 10.2 \times 10^{11}$  K et une tension  $V_0 = 1000$  V. Le rayon intérieur  $R_{\text{int}}$  du confinement vaut 8 mm et le rayon extérieur  $R_{\text{ext}} = 10$  mm. La bille confinée dans la cellule circulaire en haut à droite correspond au thermomètre *in situ* décrit dans la section B.1.3. À droite : Image d'une cellule annulaire à confinement électrostatique, en couleur inversée, contenant  $N = 37$  billes chargées pour une tension  $V_0 = 1000$  V à l'intérieur de l'anneau et  $V_1 = 0$  V à l'extérieur. Le rayon intérieur  $R_{\text{int}}$  du confinement vaut 8 mm et le rayon extérieur  $R_{\text{ext}} = 10$  mm.

La figure B.4 représente le potentiel de confinement transverse  $U_c^\perp(r)$  pour différentes tensions  $V_0$  aux bornes du condensateur. On voit que  $U_c^\perp(r)$  est quadratique, quelle que soit la tension  $V_0$  et que la raideur du puits augmente avec la tension  $V_0$ . On trouve bien que le potentiel de confinement est harmonique avec une raideur croissante avec la tension aux bornes du condensateur  $V_0$  [25]. Cette mesure expérimentale du comportement quadratique du confinement radial vient confirmer l'utilisation d'un potentiel de confinement harmonique tout au long du manuscrit.

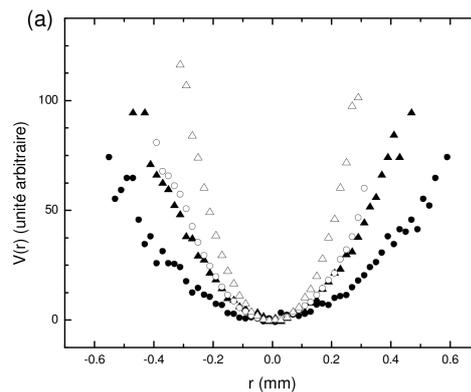


FIGURE B.4 – Potentiels radiaux de confinement  $U_c^\perp$  (noté ici  $V(r)$ ) d'une cellule de confinement annulaire obtenus à partir de la distribution des rayons des billes, pour deux nombres de billes différents et deux tensions  $V_0$  : 1 bille,  $V_0 = 800$  V (ronds pleins) ; 1 bille ;  $V_0 = 1000$  V (triangles pleins) ; 12 billes,  $V_0 = 800$  V (ronds vides) ; 12 billes,  $V_0 = 1000$  V (ronds vides). (Figure 10.2 (a) de la Thèse de G. Coupier [23])

Toutefois pour un tel confinement, la modification de la raideur du potentiel n'est possible qu'en changeant le potentiel  $V_0$  appliqué à l'électrode supérieur [voir figure B.4], cependant cette

modification entraîne également le changement de la force d'interaction entre particules [voir équation (B.2)]. Il n'est donc pas possible de faire varier indépendamment le confinement de la chaîne et l'interaction entre particules, comme on le souhaiterait pour étudier l'évolution de la configuration du système en fonction du confinement.

## B.2.2 Cellules à confinement électrostatique

### B.2.2.1 Remplissage de la cellule

Nous avons donc développé une seconde méthode de confinement avec pour objectif de pouvoir varier le confinement de la chaîne de particules tout en gardant inchangée l'interaction entre particules. Pour cela nous avons réalisé un confinement électrostatique en venant simplement graver sur l'électrode supérieure la forme annulaire du canal souhaité afin de pouvoir appliquer un confinement différent à l'intérieur du canal et à l'extérieur de celui-ci.

De plus afin de contrôler précisément l'injection des particules, nous avons gravé deux autres zones distinctes. L'une correspondant à un réservoir et l'autre correspondant à un canal d'acheminement [voir figure B.5].

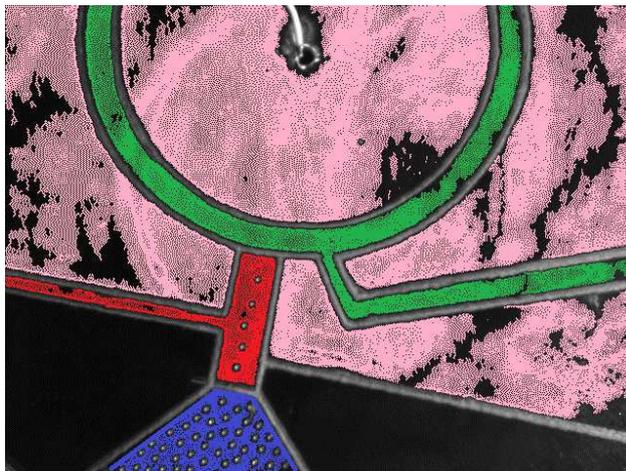


FIGURE B.5 – Image d'une cellule annulaire de confinement électrostatique en fausse couleur. Les couleurs indiquent les zones isolées de l'électrode supérieure, les zones en noir sont à la masses, celle en bleue correspond au réservoir, celle en rouge au canal d'acheminement et un vert au canal annulaire de confinement. La zone en rose permet de contrôler le confinement appliqué sur l'anneau.

En appliquant des potentiels différents adaptés à chacune de ces zones, on exerce une force sur les particules qui induit un courant acheminant les particules du réservoir à l'anneau de confinement.

La figure B.6 présente une résolution numérique des équations de Laplace bidimensionnelle à l'intérieur du condensateur pour une succession de potentiels croissants de gauche à droite appliqués sur l'électrode supérieure. Les lignes d'équipotentiels indiquent que la particule subit alors une force de gauche à droite, les particules se déplaceront donc des potentiels appliqués plus faibles vers les plus élevés.

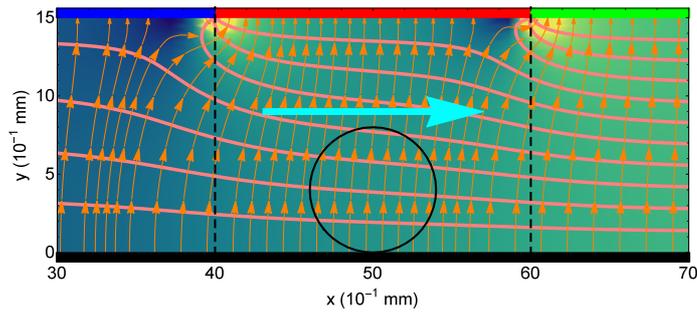


FIGURE B.6 – Représentation en échelle de couleur de la résolution numérique des équations de Laplace bidimensionnelles à l’intérieur du condensateur. L’échelle de couleur correspond à la valeur du potentiel électrique, les lignes roses aux équipotentielles et les flèches oranges aux lignes de champs. Les couleurs sur l’électrode supérieure indiquent différentes valeurs de potentiels en bleu  $V_0 = 800$  V, en rouge  $V_0 = 900$  V, en vert  $V_0 = 1000$  V, et l’électrode inférieure en noir est à la masse. Les flèches cyans indiquent la force qui s’appliquerait sur la particules, attention toutefois celle-ci n’est pas prise en compte dans la résolution numérique <sup>3</sup>.

### B.2.2.2 Évolution du confinement

Maintenant que nous venons de décrire la méthode de remplissage du canal de confinement, nous pouvons nous intéresser à l’évolution du confinement avec la modification du potentiel appliqué à l’extérieur de l’anneau. La figure B.7 montre deux résolutions numériques des équations de Laplace bidimensionnelles. Cette fois-ci pour une valeur de potentiel  $V_0$  appliqué sur une zone finie de l’électrode supérieure entourée d’une zone à un potentiel  $V_1$ . Sur la figure de gauche, pour laquelle  $V_0 = 1000$  V et  $V_1 = 0$  V, les lignes de champs électrique autour de la particule sont fortement courbées ce qui implique que le confinement sur la particule est beaucoup plus important que sur la figure de droite, où  $V_0 = 1000$  V et  $V_1 = 500$  V. On trouve alors qu’en faisant varier le potentiel appliqué sur la zone entourant l’anneau, il est possible de faire varier le confinement de la chaîne de particules.

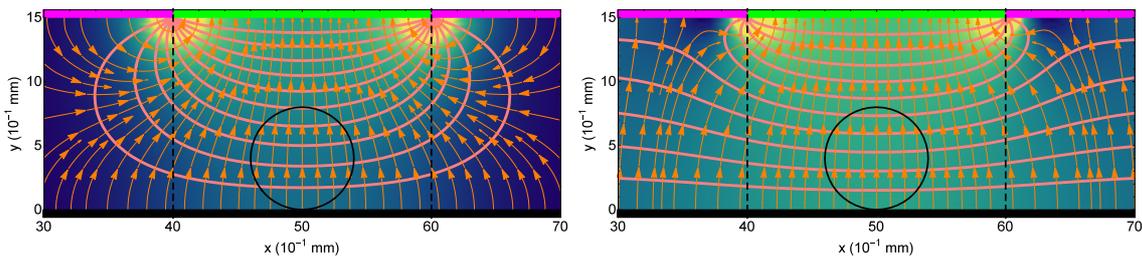


FIGURE B.7 – Représentation en échelle de couleur de la résolution numérique des équations de Laplace bidimensionnelles à l’intérieur du condensateur. L’échelle de couleur correspond à la valeur du potentiel électrique, les lignes roses aux équipotentielles et les flèches oranges aux lignes de champs. Les couleurs sur l’électrode supérieure indique différentes valeurs de potentiels, à gauche : en rose  $V_0 = 0$  V et en vert  $V_0 = 1000$  V et à droite : en rose  $V_0 = 500$  V et en vert  $V_0 = 1000$  V. L’électrode inférieure, en noir est à la masse. Attention la particule en cercle noir n’est pas prise en compte dans la résolution numérique <sup>3</sup>.

3. Pour ces représentations il a été choisi de résoudre les équations de Laplace bidimensionnelles en l’absence de bille métallique afin de mieux visualiser les distorsions des lignes de champs liées aux différences de potentielles

---

sur l'électrode supérieure. La bille étant chargée négativement dans le condensateur, celle-ci subit une force dans la direction des potentiels décroissants.



# Bibliographie

- [1] Voir [<http://www.msc.univ-paris-diderot.fr/spip.php?rubrique70&lang=fr>] pour visualiser des films sur le déplacement et l'interaction entre bulles, réalisés expérimentalement et en simulation. **20**, **134**, **140**, **209**
- [2] M. Abramowitz and I. A. Stegun. Handbook of Mathematical Functions. National Bureau of Standards, Washington, D.C., 1972. **98**
- [3] G. Agez, M.G. Clerc, and E. Louvergneaux. Universal shape law of stochastic supercritical bifurcations : Theory and experiments. Phys. Rev. E, 77 :026218, 2008. **72**
- [4] G. Agez, M.G. Clerc, E. Louvergneaux, and R. G. Rojas. Bifurcations of emerging patterns in the presence of additive noise. Phys. Rev. E, 87 :042919, 2013. **72**, **81**
- [5] G. Agez, C. Szwaj, E. Louvergneaux, and P. Glorieux. Noisy precursors in one-dimensional patterns. Phys. Rev. A, 66 :063805, 2002. **72**
- [6] NV Agudov and B Spagnolo. Noise-enhanced stability of periodically driven metastable states. Physical Review E, 64(3) :035102, 2001. **86**
- [7] N.W. Ashcroft and N.D. Mermin. Solid State Physics. Saunders College, Philadelphia, 1976. **175**
- [8] G.E. Astrakharchik, G. De Chiara, G. Morigi, and J. Boronat. Thermal and quantum fluctuations in chains of ultracold polar molecules. J. Phys. B., 42 :154026, 2009. **15**
- [9] M. Bandyopadhyay, S. Dattagupta, and M. Sanyal. Diffusion enhancement in a periodic potential under high-frequency space-dependent forcing. Phys. Rev. E, 73 :051108, 2006. **189**
- [10] L. Bellon, L. Fourtune, V. T. Minassian, and M. Rabaud. Wave-number selection and parity-breaking bifurcation in directional viscous fingering. Phys. Rev. E, 58 :565, 1998. **15**
- [11] D. Bensimon, B.I. Shraiman, and V. Croquette. Nonadiabatic effects in convection. Phys. Rev. A, 38 :5461, 1988. **15**
- [12] G. Birkl, S. Kassner, and H. Walther. Multiple-shell structures of laser-cooled  $^{24}\text{Mg}^+$  ions in a quadrupole storage ring. Nature, 357 :310, 1992. **13**
- [13] M Block, A Drakoudis, H Leuthner, P Seibert, and G Werth. Crystalline ion structures in a paul trap. Journal of Physics B : Atomic, Molecular and Optical Physics, 33(11) :L375, 2000. **13**
- [14] George EP Box, Mervin E Muller, et al. A note on the generation of random normal deviates. The annals of mathematical statistics, 29(2) :610–611, 1958. **205**

- [15] Oleg M Braun and Yuri S Kivshar. Nonlinear dynamics of the frenkel–kontorova model. Physics Reports, 306(1) :1–108, 1998. [106](#), [171](#)
- [16] Scott M Braxton. Synthesis and use of a novel class of ATP carbamates and a ratchet diffusion model for directed motion in muscle. Washington State University, 1988. [170](#)
- [17] Ralf Bubeck, Paul Leiderer, and Clemens Bechinger. Fluctuation-induced order in two-dimensional colloidal clusters. EPL (Europhysics Letters), 60(3) :474, 2002. [184](#)
- [18] B. Caroli, C. Caroli, and S. Fauve. On the phenomenology of tilted domains in lamellar eutectic growth. J. Phys. I, 2 :281, 1992. [16](#), [52](#), [60](#), [62](#)
- [19] R Córdoba, TI Baturina, J Sesé, A Yu Mironov, JM De Teresa, MR Ibarra, DA Nasimov, AK Gutakovskii, AV Latyshev, I Guillamón, et al. Magnetic field-induced dissipation-free state in superconducting nanostructures. Nature communications, 4 :1437, 2013. [170](#)
- [20] C. Coste, J.-B. Delfau, C. Even, and M. Saint Jean. Single file diffusion of macroscopic charged particles. Phys. Rev. E, 81 :051201, 2010. [13](#), [32](#), [73](#)
- [21] P. Coulet, R.E. Goldstein, and G.H. Gunaratne. Parity-breaking transition of modulated patterns in hydrodynamic systems. Phys. Rev. Lett., 63(18) :1954, 1989. [62](#)
- [22] P. Coulet and G. Iooss. Instabilities of one-dimensional cellular patterns. Phys. Rev. Lett., 64(8) :866, 1990. [62](#)
- [23] G. Coupier. Elasticité et ancrage dans des cristaux de Wigner macroscopiques : un système modèle pour l'étude du piégeage faible. PhD thesis, Université Paris 6 - Université Paris 7, October 2006. [19](#), [182](#), [210](#), [211](#), [212](#), [214](#)
- [24] G. Coupier, C. Guthmann, Y. Noat, and M. Saint Jean. Local symmetries and order-disorder transitions in small macroscopic wigner islands. Phys. Rev. E, 71 :046105, 2005. [19](#), [43](#), [213](#)
- [25] G. Coupier, M. Saint Jean, and C. Guthmann. Single file diffusion in macroscopic wigner rings. Phys. Rev. E, 73 :031112, 2006. [173](#), [213](#), [214](#)
- [26] G. Coupier, M. Saint Jean, and C. Guthmann. Single file diffusion enhancement in a fluctuating modulated quasi-1d channel. EPL, 77 :60001, 2007. [19](#), [182](#), [213](#)
- [27] M.C. Cross and P.C. Hohenberg. Pattern formation outside of equilibrium. Rev. Mod. Phys., 65(3) :851–1112, 1993. [125](#), [126](#)
- [28] G. De Chiara, A. del Campo, G. Morigi, M.B. Plenio, and A. Retzker. Spontaneous nucleation of structural defects in inhomogeneous ion chains. New J. Phys., 12 :115003, 2010. [13](#), [15](#)
- [29] P.G. de Gennes. Superconductivity of metals and alloys. W.A. Benjamin, 1966. [43](#), [212](#)
- [30] J.-B. Delfau. Diffusion et corrélations de particules confinées en interaction à longue portée (in French). Phd thesis, Université Paris Diderot, 2013. [14](#), [15](#), [17](#), [23](#), [26](#), [28](#), [52](#), [53](#), [148](#), [167](#), [210](#), [213](#)
- [31] J.-B. Delfau, C. Coste, C. Even, and M. Saint Jean. Single-file diffusion of interacting particles in a finite-sized channel. Phys. Rev. E, 82 :031201, 2010. [17](#), [43](#), [73](#), [213](#)
- [32] J.-B. Delfau, C. Coste, and M. Saint Jean. Single file diffusion of particles with long-ranged interactions : Damping and finite size effects. Phys. Rev. E, 84 :011101, 2011. [13](#), [17](#), [26](#), [32](#), [35](#), [114](#), [148](#), [155](#), [178](#), [213](#)

- [33] J.-B. Delfau, C. Coste, and M. Saint Jean. Enhanced fluctuations of interacting particles confined in a box. Phys. Rev. E, 85 :041137, 2012. [140](#)
- [34] J.-B. Delfau, C. Coste, and M. Saint Jean. Noisy zigzag transition, fluctuations, and thermal bifurcation threshold. Phys. Rev. E, 87 :062135, 2013. [14](#), [72](#)
- [35] J.-B. Delfau, C. Coste, and M. Saint Jean. Transverse single-file-diffusion near the zigzag transition. Phys. Rev. E, 87 :032163, 2013. [13](#), [14](#), [26](#), [35](#), [62](#), [148](#), [151](#), [156](#), [167](#)
- [36] T. Dessup, C. Coste, and M. Saint Jean. Hysteretic and intermittent regimes in the subcritical bifurcation of a quasi-one-dimensional system of interacting particles. Phys. Rev. E, 93 :012105, Jan 2016. [72](#)
- [37] T. Dessup, C. Coste, and M. Saint Jean. Subcriticality of the zigzag transition : A nonlinear bifurcation analysis. Phys. Rev. E, 91 :032917, 2015. [14](#), [15](#), [52](#), [88](#)
- [38] T. Dessup, C. Coste, and M. Saint Jean. Thermal motion of a nonlinear localized pattern in a quasi-one-dimensional system. Phys. Rev. E, 94 :012217, 2016. [107](#)
- [39] T. Dessup, T. Maimbourg, C. Coste, and M. Saint Jean. Linear instability of a zigzag pattern. Phys. Rev. E, 91 :022908, 2015. [15](#), [31](#), [62](#), [66](#)
- [40] W. Dieterich, I. Peschel, and W. R. Schneider. Diffusion in periodic potentials. Z. Physik B, 27 :177–187, 1977. [117](#), [118](#), [169](#)
- [41] S. Douady, S. Fauve, and O. Thual. Oscillatory phase modulation of parametrically forced surface waves. Europhys. Lett., 10(4) :309, 1989. [15](#), [62](#)
- [42] D. Perchak and J.H. Weiner. Local-mode approximations in the frenkel-kontorova or sine-gordon chain. Phys. Rev. B, 22(6) :2683, 1980. [179](#)
- [43] Philip G Drazin and Robin S Johnson. Solitons : an introduction, volume 2. Cambridge university press, 1989. [126](#)
- [44] C. Elphick, G.R. Ierley, O. Regev, and E.A. Spiegel. Interacting localized structures with Galilean invariance. Phys. Rev. A, 44 :1110, 1991. [126](#)
- [45] C. Elphick, E. Meron, and E.A. Spiegel. Spatiotemporal complexity in traveling patterns. Phys. Rev. Lett., 61(5) :496, 1988. [126](#)
- [46] C. Elphick, E. Meron, and E.A. Spiegel. Patterns of propagating pulses. SIAM J. Appl. Math., 50(2) :490, 1990. [91](#), [126](#), [128](#), [130](#), [131](#), [132](#)
- [47] G. Faivre, S. De Cheveigne, C. Guthmann, and P. Kurowski. Solitary tilt waves in thin lamellar eutectics. Europhys. Lett., 9 :779, 1989. [16](#)
- [48] S. Fauve. Nonlinear dynamics of coupled oscillators. Ann. Phys. Fr., 19 :691, 1994. [16](#), [52](#), [62](#)
- [49] S. Fauve, S. Douady, and O. Thual. Comment on "Parity-breaking transition of modulated patterns in hydrodynamic systems". Phys. Rev. Lett., 65(3) :385, 1990. [16](#), [52](#)
- [50] Richard Feynman, Robert Leighton, and Matthew Sands. The feynmen lectures on physics : Volume 1, volume 1 of the feynman lectures on physics, 1963. [170](#)
- [51] A. Fiasconaro, B. Spagnolo, and S. Boccaletti. Signatures of noise-enhanced stability in metastable states. Physical Review E, 72(6) :061110, 2005. [86](#)

- [52] S. Fishman, G. De Chiara, T. Calarco, and G. Morigi. Structural phase transitions in low-dimensional ion crystals. Phys. Rev. B, 77 :064111, 2008. [13](#), [15](#), [24](#), [38](#), [40](#), [42](#), [66](#)
- [53] P. Fulde, L. Pietronero, W.R. Schneider, and S. Strässler. Problem of brownian motion in periodic potential. Phys. Rev. Lett., 35 :1776, 1975. [169](#)
- [54] P. Fulde, L. Pietronero, W.R. Schneider, and S. Strässler. Problem of brownian motion in periodic potential (errata). Phys. Rev. E, 36 :832, 1976. [169](#)
- [55] P. Galatola, G. Couplier, M. Saint Jean, J.-B. Fournier, and C. Guthmann. Determination of the interactions in confined macroscopic wigner islands : theory and experiments. Eur. Phys. J. B, 50 :549–557, 2006. [43](#), [73](#), [211](#), [212](#), [213](#)
- [56] J. E. Galvan-Moya and F. M. Peeters. Ginzburg-Landau theory of the zigzag transition in quasi-one-dimensional classical Wigner crystals. Phys. Rev. B, 84 :134106, 2011. [13](#), [15](#), [24](#)
- [57] S. L. Gilbert, J. J. Bollinger, and D. J. Wineland. Shell-structure phase of magnetically confined strongly coupled plasmas. Phys. Rev. Lett., 60 :2022, 1988. [13](#)
- [58] Daniel T. Gillespie. The mathematics of brownian motion and johnson noise. Am. J. Phys., 64 :225, 1996. [205](#)
- [59] H. Goldstein. Classical Mechanics. Addison Wesley, Reading, MA, 1980. [62](#), [107](#)
- [60] Jeffrey Goldstone, Abdus Salam, and Steven Weinberg. Broken symmetries. Physical Review, 127(3) :965, 1962. [27](#)
- [61] I.S. Gradshteyn and I.M. Ryzhik. Table of Integrals, Series, and Products. Academic Press, San Diego, 2007. [93](#)
- [62] L. Gunther, M. Revzen, and Amiram Ron. Mobility in a periodic potential : A simple derivation. Physica A, 95 :367–369, 1979. [171](#)
- [63] J.-P. Hansen and I.R. McDonald. Theory of Simple Liquids. Academic Press, 2006. [204](#)
- [64] T. E. Harris. Diffusion with "collisions" between particles. J. Appl. Prob., 2 :323–338, 1965. [17](#), [151](#)
- [65] E. Heinsalu, M. Patriarca, and F. Marchesoni. Dimer diffusion in a washboard potential. Phys. Rev. E, 77 :021129, 2008. [170](#)
- [66] S. Herrera-Velarde and R. Castaneda-Priego. Structure and dynamics of interacting brownian particles in one-dimensional periodic substrate. J. Phys. Condens. Matter, 19 :226215, 2007. [172](#)
- [67] S. Herrera-Velarde and R. Castañeda-Priego. Superparamagnetic colloids confined in narrow corrugated substrates. Phys. Rev. E, 77 :041407, 2008. [172](#)
- [68] A.L. Hodgkin and R.D. Keynes. The potassium permeability of a giant nerve fibre. J. Physiol., 128 :61–88, 1955. [13](#)
- [69] J. P. Home, D. Hanneke, J. D. Jost, D. Leibfried, and D. J. Wineland. Normal modes of trapped ions in the presence of anharmonic trap potentials. New J. Phys., 13 :073026, 2011. [14](#)
- [70] E. Infeld and G. Rowlands. Nonlinear Waves, Solitons and Chaos. Cambridge University Press, Cambridge, 1990. [88](#), [130](#)

- [71] A. J. Simon, J. Bechhoefer, and A. Libchaber. Solitary modes and the Eckhaus instability in directional solidification. Phys. Rev. Lett., 61 :2574, 1988. 16
- [72] M. Kollmann. Single-file diffusion of atomic and colloidal systems : Asymptotic laws. Phys. Rev. Lett., 90(18) :180602, 2003. 17
- [73] P. Kolodner, D. Bensimon, and C. M. Surko. Travelling wave convection in an annulus. Phys. Rev. Lett., 60(17) :1723, 1988. 15
- [74] XG Koss, OF Petrov, MI Myasnikov, KB Statsenko, and MM Vasiliev. Melting of small clusters with yukawa interaction potential. In Journal of Physics : Conference Series, volume 653, page 012135. IOP Publishing, 2015. 43
- [75] H. A. Kramers. Brownian motion in a field of force and the diffusion model of chemical reactions. Physica, 7 :284, 1940. 83, 160
- [76] David G. Levitt. Dynamics of a single file pore : non-fickian behavior. Phys. Rev. A, 8(6) :3050, 1973. 17
- [77] Binhua Lin, Bianxiao Cui, Ji-Hwan Lee, and J. Yu. Hydrodynamic coupling in diffusion of quasi-one-dimensional brownian particles. EPL, 57 :724, 2002. 151
- [78] Binhua Lin, Mati Meron, Bianxiao Cui, Stuart A. Rice, and H. Diamant. From random walk to single-file diffusion. Phys. Rev. Lett., 94 :216001, 2005. 151
- [79] B. Liu and J. Goree. Phonons in a one-dimensional Yukawa chain : Dusty plasma experiment and model. Phys. Rev. E, 71 :046410, 2005. 13
- [80] D Lucena, JE Galván-Moya, WP Ferreira, and FM Peeters. Single-file and normal diffusion of magnetic colloids in modulated channels. Physical Review E, 89(3) :032306, 2014. 151
- [81] P. Manneville. Dissipative Structure and Weak Turbulence. Academic Press, New York, 1990. 131
- [82] A. Melzer. Zigzag transition of finite dust clusters. Phys. Rev. E, 73 :056404, 2006. 13, 15
- [83] M. Mielenz, J. Brox, S. Kahra, G. Leschhorn, M. Albert, T. Schaeetz, H. Landa, and B. Reznik. Trapping of topological-structural defects in Coulomb crystals. Phys. Rev. Lett., 110 :133004, 2013. 13
- [84] Y. Nambu. Quasi-Particles and Gauge Invariance in the Theory of Superconductivity. Physical Review, 117 :648–663, February 1960. 27
- [85] J. J. Niemela, G. Ahlers, and D. S. Cannell. Localized traveling wave states in binary-fluid convection. Phys. Rev. Lett., 64 :1365, 1990. 15
- [86] M. Oikawa and N. Yajima. Interactions of solitary waves. a perturbation approach to nonlinear systems. J. Phys. Soc. Japan, 34(4) :1093, 1973. 126
- [87] Michel Peyrard and Thierry Dauxois. Physique des solitons. EDP Sciences, 2004. 106
- [88] G. Piacente, G. Q. Hai, and F. M. Peeters. Continuous structural transitions in quasi-one-dimensional classical Wigner crystals. Phys. Rev. B, 81 :024108, 2010. 13
- [89] G. Piacente, I. V. Schweigert, J. J. Betouras, and F. M. Peeters. Generic properties of a quasi-one-dimensional classical Wigner crystal. Phys. Rev. B, 69 :045324, 2004. 13, 15, 24

- [90] M. Rabaud, S. Michalland, and Y. Couder. Dynamical regimes of directional viscous fingering : Spatiotemporal chaos and wave propagation. Phys. Rev. Lett., 64 :184, 1990. **16**
- [91] M. G. Raizen, J. M. Gilligan, J. C. Bergquist, W. M. Itano, and D. J. Wineland. Ionic crystals in a linear paul trap. Phys. Rev. A, 45 :6493, 1992. **13**
- [92] P. Reimann, C. Van den Broeck, H. Linke, P. Hänggi, J. M. Rubi, and A. Pérez-Madrid. Giant acceleration of free diffusion by use of tilted periodic potentials. Phys. Rev. Lett., 87 :010602, 2001. **117, 170**
- [93] Peter Reimann. Brownian motors : noisy transport far from equilibrium. Physics reports, 361(2) :57–265, 2002. **170**
- [94] H. Risken and T. Frank. The Fokker-Planck Equation. Methods of Solution and Applications. Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 1989. **117, 149**
- [95] J. P. Schiffer. Phase transitions in anisotropically confined ionic crystals. Phys. Rev. Lett., 70 :818, 1993. **13**
- [96] S. Seidelin, J. Chiaverini, R. Reichle, J. J. Bollinger, D. Leibfried, J. Britton, J. H. Wesenberg, R. B. Blakestad, R. J. Epstein, D. B. Hume, W. M. Itano, J. D. Jost, C. Langer, R. Ozeri, N. Shiga, and D. J. Wineland. Microfabricated surface-electrode ion trap for scalable quantum information processing. Phys. Rev. Lett., 96 :253003, 2006. **13**
- [97] T. E. Sheridan and A.L. Magyar. Power law behavior for the zigzag transition in a Yukawa cluster. Phys. Plasmas, 17 :113703, 2010. **13, 15, 32, 43**
- [98] T. E. Sheridan and K. D. Wells. Dimensional phase transition in small Yukawa clusters. Phys. Rev. E, 81 :016404, 2010. **13, 15, 32, 43**
- [99] TE Sheridan. Dusty plasma ring model. Physica Scripta, 80(6) :065502, 2009. **13**
- [100] E. Shimshoni, G. Morigi, and S. Fishman. Quantum zigzag transition in ion chains. Phys. Rev. Lett., 106 :010401, 2011. **15, 24**
- [101] Marian Smoluchowski. Experimentell nachweisbare, der üblichen thermodynamik widersprechende molekularphänomene. Pisma Mariana Smoluchowskiego, 2(1) :226–251, 1927. **170**
- [102] B. Spagnolo, N. V. Agudov, and A. A. Dubkov. Noise Enhanced Stability. Acta Physica Polonica B, 35 :1419, April 2004. **86**
- [103] A. V. Straube, R. P. A. Dullens, L. Schimansky-Geier, and A. A. Louis. Zigzag transitions and nonequilibrium pattern formation in colloidal chains. J. Chem. Phys., 139 :134908, 2013. **14, 15**
- [104] A. Taloni and M.A. Lomholt. Langevin formulation for single-file diffusion. Phys. Rev. E, 78 :051116, 2008. **17, 151**
- [105] A. Taloni and F. Marchesoni. Single-file diffusion on a periodic substrate. Phys. Rev. Lett., 96 :020601, 2006. **171**
- [106] Henk van Beijeren, K. W. Kehr, and R. Kutner. Diffusion in concentrated lattice gases. III. tracer diffusion on a one-dimensional lattice. Phys. Rev. B, 28(10) :5711, 1983. **151**
- [107] N.G. van Kampen. Stochastic processes in physics and chemistry. North-Holland, Amsterdam, 1992. **81, 82**

- 
- [108] OS Vaulina, XG Koss, and SV Vladimirov. The dynamics of formation of monolayer dust structures in a confining electric field. Physica Scripta, 79(3) :035501, 2009. 43
- [109] E.T. Whittaker and G.N. Watson. A Course of Modern Analysis. Cambridge University Press, Cambridge, 1920. 93