Rubrique

Températures effectives

La température est un concept intuitif qui a pourtant résisté à la compréhension des physiciens jusqu'à la fin du XIX$^{\text{ième}}$ siècle et l'émergence de la physique statistique. Celle-ci a conduit à une définition rigoureuse et physique de la température pour les systèmes à l'équilibre. Depuis quelques années, les physiciens tentent de généraliser la notion de température pour certains systèmes fortement hors d'équilibre. Cette température effective, mesurable par l'observation de certaines fonctions de corrélation et de réponse temporelles, obéit aux propriétés attendues pour une telle quantité.

La température a été un concept insaisissable jusqu'au début du développement de la thermodynamique et de la mécanique statistique. Le fait qu'une quantité caractérise la sensation de chaleur ou de froid est connu depuis les temps anciens. Pourtant, la température restait un concept mal défini, habituellement confondu avec la chaleur.

La thermométrie n'a commencé qu'à la fin du XVI$^{\text{ième}}$ siècle, en Italie. La première évocation d'un instrument de mesure de la température remonte aux "Commentaires sur Galeno", de Sartorio di Padova (1612), mais l'on pense que Galilée avait déjà inventé le thermomètre à air aux alentours de 1592. La thermodynamique est une théorie empirique basée sur quatre lois (ou postulats) fondamentales qui a été développée pour déterminer certaines propriétés des "systèmes" sans connaître leurs détails. Un système est un objet macroscopique formé par un grand nombre de degrés de liberté (par exemple représentant les positions et les vitesses des molécules dans un liquide). Un système isolé n'interagit pas avec son environnement. Après un certain temps caractéristique, un système isolé et de taille finie arrive à un état d'équilibre. Cet état macroscopique n'évolue plus et il est décrit par un petit nombre de paramètres, les variables d'état. La température est l'un de ces paramètres. La loi zéro de la thermodynamique exprime le comportement des systèmes qui échangent de la chaleur (en contact thermique). Elle affirme que si deux systèmes sont séparément à l'équilibre avec un tiers, ils sont aussi à l'équilibre entre eux. La température est déterminée par le biais d'une mesure auxiliaire. On place un thermomètre en contact thermique avec le système, on attend que tous les échanges de chaleur entre thermomètre et système se soient produits (équilibre établi) et on détermine la température par calibration de la mesure du thermomètre. Si on reproduit le processus de mesure avec un deuxième système, équilibré avec le premier, la première loi de la thermodynamique indique que le thermomètre sera, lui-aussi, équilibré avec le nouveau système. Sa lecture donnera, en conséquence, la même température : on en déduit que tous les systèmes en équilibre mutuel ont la même température. La première loi de la thermodynamique exprime la conservation de l'énergie après avoir établi l'équivalence entre chaleur et énergie.

La mécanique statistique établit un pont entre la description du mouvement des constituants microscopiques du système et son comportement macroscopique. Comme l'exprime Wannier, elle "tourne autour du concept de température et elle donne un sens précis à cette quantité". Prenons un système isolé à l'équilibre dans l'ensemble microcanonique, ayant donc une énergie interne U strictement fixé. L'entropie du système est définie par $S(U) = \ln \Omega(U)$ où $\Omega(U)dU$ est le nombre d'états accessibles d'énergie entre U et $U + dU$ (on prend la constante de Boltzmann k_B égale à 1 ici et dans la suite). La température "microcanonique" est alors définie par $1/T \equiv \partial S(U)/dU$. Le développement de la mécanique statistique permet de montrer que cette définition est équivalente à la définition thermodynamique. On peut également la retrouver dans le formalisme canonique (conservation de U seulement exprimée en moyenne via le multiplicateur de Lagrange $\beta = 1/T$) ou grand canonique (conservation en moyenne de U et du nombre N de particules).

Les paragraphes précédents traitent des systèmes à l'équilibre. Que peut-on dire sur les systèmes hors d'équilibre ? Peut-on aussi définir une température pour ceux-ci ? Si cela est possible, peut-on utiliser cette définition comme un premier pas vers le développement d'une thermodynamique et d'une mécanique statistique hors d'équilibre ? Dans la suite nous introduirons un certain nombre de problèmes hors d'équilibre pour déterminer la classe de systèmes sur laquelle on pourra espérer développer ces deux approches. Nous discuterons une définition de "température effective" et nous présenterons les tests qu'elle a déjà passés avec succès ainsi que quelques résultats expérimentaux. Nous continuerons en discutant brièvement comment cette température effective apparaît dans quelques tentatives récentes d'aller au-delà de la thermodynamique et de la mécanique statistique traditionnelles.

Systèmes hors d'équilibre

Pour plusieurs types de systèmes dynamiques (en contact avec un bain thermique ou suffisamment chaotiques), on peut définir une quantité qui peut être interprétée naturellement comme une production d'entropie. Pour un système en relaxation, cette quantité est donnée par $\dot{S} \equiv dS/dt$ avec $S \equiv \int d\mathcal{C} P(\mathcal{C},t)[T \ln P(\mathcal{C},t) + H(\mathcal{C})]$ où $H(\mathcal{C})$ est l'énergie du système et $P(\mathcal{C},t)$ est la distribution de probabilité de la configuration $\mathcal{C}$ à l'instant t. Pour un système forcé et devenu stationnaire, la production d'entropie peut-être associée au travail fait par les forces externes. La production d'entropie s'annule à l'équilibre, et $P(\mathcal{C},t) \sim \exp -H(\mathcal{C})/T$ devient la distribution de Gibbs-Boltzmann. Elle nous permet de distinguer différents systèmes hors d'équilibre et de déterminer ceux d'entre eux pour lesquels nous pourrons essayer de définir une température effective. Dans la suite nous discuterons le comportement de plusieurs systèmes thermostatés, autrement dit, en contact avec un bain thermique à température T.

Un système fini, qui évolue avec une dynamique générique, où toutes les forces dérivent d'une énergie potentielle tend vers la distribution de Gibbs-Boltzmann dans la limite des temps longs. Une petite perturbation changera peu son état et, une fois celle-ci éliminée, le système relaxera vers l'équilibre de façon rapide, typiquement exponentielle. Ce qui est communément appelé mécanique statistique hors d'équilibre s'occupe du retour à l'équilibre de ce type de système.

Au contraire, un système suffisamment grand, préparé dans un état loin de l'équilibre, peut rester loin de l'équilibre pendant des périodes très longues qui dépassent les plus longs temps accessibles expérimentalement. Dans la limite de temps longs, un tel système est donc caractérisé par une distribution de probabilité $P(\mathcal{C},t)$ qui ne peut pas être décrite comme une petite perturbation de la distribution de Gibbs-Boltzmann. On peut séparer ces systèmes en deux groupes majeurs. D'abord, de nombreux systèmes évoluent avec une forte production d'entropie, un exemple étant les fluides turbulents. Bien que ces systèmes soient souvent très intéressants et physiquement importants, ils sont encore loin d'être compris en profondeur, et nous ne les considérerons pas ici. Il existe aussi un grand nombre de systèmes d'intérêt en physique qui évoluent avec une faible production d'entropie. Ce sont ces systèmes que nous décrivons maintenant et pour lesquels nous tenterons de définir la température hors d'équilibre.

Les cas les plus simples à visualiser sont les systèmes qui évoluent par *croissance de domaines*. Leurs propriétés sont, à tout temps fini, déterminées par la dépendance temporelle du rayon moyen des domaines, $r(t)$, et par sa vitesse de croissance, $\dot{r}(t)$. Le temps t, ou "l'âge" du système, est mesuré à partir de l'instant initial de préparation, faite typiquement par une trempe rapide de la phase désordonnée (haute température) à celle ordonnée (basse température). Dans le cas d'un ferromagnétique pur trempé sous sa température critique T_c, les domaines sont des régions localement à l'équilibre où l'aimantation vaut localement $+m(T)$ ou $-m(T)$ (où $m(T)$ est l'aimantation d'équilibre). L'évolution est caractérisée par la croissance de ces domaines intriqués de taille linéaire typique $r(t) \approx t^{1/2}$. A l'équilibre ($r(t) \gg L$ soit $t \gg \sqrt{L}$, pour un volume fini $V = L^d$), il ne subsistera plus qu'un seul domaine d'aimantation $+m(T)$ ou $-m(T)$. La vitesse de déplacement des parois entre domaines décroît avec l'âge du système, $\dot{r}(t) \approx t^{-1/2}$, ce qui est une loi beaucoup plus lente que l'exponentielle. Si l'on rajoute du désordre, sous la forme de centres d'ancrage où les parois peuvent s'accrocher, l'évolution de $r(t)$ peut devenir encore plus lente. Le paradigme des systèmes où l'on observe un fort ralentissement dû au désordre est un système ferromagnétique dans un champ magnétique local aléatoire.

Une autre famille de systèmes en évolution lente hors d'équilibre est fournie par les *systèmes vitreux* : les verres polymériques ou les plastiques, les verres de spin, les verres structuraux, groupe auquel appartient l'exemple le plus naturel, le verre des fenêtres, etc. Les verres structuraux sont typiquement créés par refroidissement d'un liquide. D'abord, à vitesse de refroidissement suffisamment rapide, la transition de cristallisation est évitée et le liquide entre dans une phase de "liquide surfondu". Au fur et à mesure que l'on réduit la température du thermostat, le liquide devient très rapidement de plus en plus visqueux. Typiquement, pour un changement de température d'une centaine de degrés, la viscosité croît d'une dizaine d'ordres de grandeur. La température de transition vitreuse entre le liquide surfondu et le verre, T_g, est définie, par convention, comme la valeur où la viscosité arrive à 10^{13} Poise. Contrairement à ce qui se produit à la transition ferromagnétique, la transition vitreuse n'est pas accompagnée d'un changement de structure connu. Le temps d'équilibration au dessus de T_g est accessible expérimentalement et l'on étudie les propriétés dynamiques des liquides surfondus à l'équilibre (métastable par rapport au cristal quand celui-ci existe). Au contraire, le temps d'équilibration pour $T < T_g$ dépasse la fenêtre expérimentale et les mesures sont effectuées dans un régime de dynamique lente hors d'équilibre, caractérisé par les effets de vieillissement. Une façon de rendre cette description plus précise consiste à comparer la configuration du système au temps d'attente t_w, écoulé après préparation, avec celle atteinte à un temps ultérieur t, en mesurant une fonction de corrélation $C(t_w, t)$ entre les deux temps. Une caractérisation encore plus riche de la dynamique est donnée par les fonctions de réponse $R(t_w, t)$: on perturbe le système à un temps t_w et on observe la déviation ultérieure par rapport à l'évolution du même système non perturbé. Dans la phase vitreuse, on observe que les fonctions de corrélation et de réponse dépendent non seulement de la différence entre les temps de mesure (i.e. $t - t_w$), comme d'habitude à l'équilibre, mais aussi du temps d'attente t_w en phase ordonnée, où la mesure de référence a été effectuée.

Les cas mentionnés ci-dessus ont purement une dynamique de relaxation. Qu'arrive-t-il dans le cas de la croissance de domaines, pour un liquide dense ou un verre, si on perturbe faiblement ces systèmes avec une force non conservative ? La croissance de domaines peut être arrêtée par une force non conservative comme un cisaillement homogène. Un exemple très familier est celui d'un mélange d'huile et d'eau. Si on laisse le système reposer, on observera la séparation de phases qui conduit à une configuration avec des gouttes (domaines) de rayon moyen croissant comme $r(t) \sim t^{1/3}$. Si, au contraire, on fait tourner le fluide mixte avec une fourchette, on obtiendra un mélange avec de petites gouttelettes d'huile dans l'eau. Plus on remue rapidement, plus les gouttelettes seront petites. Ainsi, les forces non conservatives ont un effet important sur les systèmes vieillissants : un système qui aurait librement vieilli peut être maintenu dans un état stationnaire de relative jeunesse, mais encore loin de l'équilibre, en lui injectant une petite quantité d'énergie par le biais d'une telle force. Cet exemple illustre une famille de *systèmes faiblement sollicités*, avec une dynamique stationnaire mais très lente et hors d'équilibre, à laquelle nous nous intéresserons dans la suite.

Finalement, la dynamique des *systèmes granulaires* sous faible sollicitation reçoit, en ce moment, une attention renouvelée. Les systèmes granulaires sont constitués d'un grand nombre de grains de taille macroscopique. L'énergie potentielle nécessaire pour déplacer un grain d'une distance égale à son diamètre, $E_p = mgd$, est beaucoup plus grande que l'énergie thermique caractéristique, $k_B T$. En conséquence, en l'absence d'un forçage externe, les systèmes granulaires sont bloqués dans des configurations métastables de basse densité. Cependant, quand l'énergie est progressivement injectée dans le système sous la forme d'un cisaillement, d'une vibration ou d'un "tapping", les transitions entre différentes configurations sont possibles et le système relaxe lentement vers des configurations de plus grande densité. Plusieurs similitudes entre la dynamique de la matière granulaire et celle des verres ont été identifiées récemment.

Aucun des systèmes introduits dans les quatre paragraphes précédents ne peut être décrit par un état stationnaire caractérisé par la distribution de Gibbs-Boltzmann, ou même par une petite perturbation autour de celle-ci. Pourtant, dans la limite de long temps d'attente, ou quand on les perturbe faiblement, ils évoluent dans une limite de faible production d'entropie. Pour de tels systèmes hors d'équilibre, on ne peut pas utiliser la thermodynamique et la mécanique statistique usuelles, et la définition ordinaire de la température n'a donc pas de sens.

Définition des températures effectives

Le fait que l'on puisse définir une "température effective" pour les systèmes hors d'équilibre avec une dynamique lente a été suggéré par la solution exacte d'une famille de modèles (voir Encadré 1). Ces modèles simplifiés ont été proposés pour décrire le comportement des verres de spin et des verres structuraux. Ils décrivent des spins avec des interactions aléatoires figées dans le temps, et sont traités en champ moyen : chaque spin interagit avec tous les autres spins au contraire de spins sur un réseaux qui interagissent seulement avec leurs proches voisins.

Avant d'aborder la notion de températures effectives, rappelons une des relations fondamentales de la physique statistique à l'équilibre : le théorème de fluctuation – dissipation (TFD). Sous sa forme statique (à fréquence nulle), il exprime qu'une susceptibilité est proportionnelle aux fluctuations de sa variable extensive associée. Deux exemples classiques du TFD statique sont les relations de proportionnalité entre la susceptibilité magnétique d'un système magnétique et l'écart quadratique moyen de l'aimantation, ou entre la chaleur spécifique d'un système et les fluctuations de l'énergie (au coefficient $1/T$ près dans les deux cas). Sous sa forme dynamique, il exprime la relation de proportionnalité entre l'intégrale χ de la fonction de réponse linéaire R et la fonction de corrélation d'une observable : $\chi = (1 - C)/T$ (avec $C = 1$ à temps égaux). Le coefficient de proportionnalité est précisément l'inverse de la température. Par exemple, la relation d'Einstein reliant le coefficient de diffusion et la mobilité d'une particule brownienne découle du TFD entre corrélation de position et réponse à une force appliquée. Hors d'équilibre, cette relation n'a *a priori* aucune raison de subsister. Pourtant, la résolution des modèles solubles cités ci-dessus suggère que le TFD persiste sous une forme modifiée. Dans la limite asymptotique d'un temps d'attente long pris *après* la limite thermodynamique, la réponse intégrée sur le temps $\chi(t,t_w) \equiv \int_{t_w}^{t} ds\, R(t,s)$ approche en effet une limite :

$$\lim_{\substack{t_w \to \infty \\ C(t,t_w)=C}} \chi(t,t_w) = \chi(C), \quad (1)$$

où on prend la limite de grands temps t_w en ajustant $t > t_w$ de façon à garder $C(t,t_w) = C$ constant. Par simple dérivation de cette relation par rapport au temps d'attente t_w, on trouve que l'opposé de l'inverse de la pente de la courbe $\chi(C)$ est un paramètre (dépendant de C) qui remplace la température dans la relation FD (voir Encadré 1). Donc, en utilisant l'équation (1), on définit une température effective,

$$T_{eff}(C) \equiv -(\chi'(C))^{-1} , \quad (2)$$

qui peut dépendre de la corrélation. Dans la Section suivante, nous montrerons que cette quantité peut avoir les propriétés d'une température dans le sens décrit dans l'Introduction.

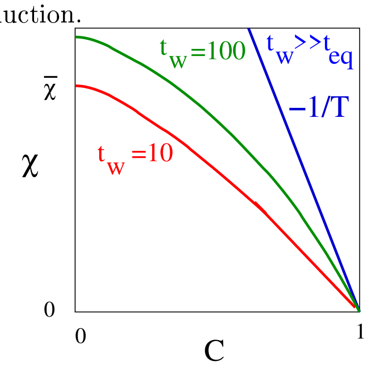

Figure 1 – *L'approche vers le comportement asymptotique de la courbe paramétrique de la réponse intégrée en fonction de la corrélation est illustrée. Pour tout temps d'attente t_w plus long que le temps d'équilibration, la courbe limite est une ligne droite de pente $-1/T$, où T est la température d'équilibre du système.*

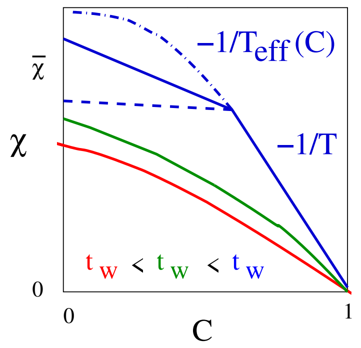

Figure 2 – *La construction de la figure précédente pour un cas hors d'équilibre dans la limite de faible production d'entropie. Pour tout temps d'attente t_w suffisamment long la courbe asymptotique existe et peut prendre trois formes, selon le système considéré. Les trois cas ont une première partie linéaire avec une pente $-1/T$ pour $q_{ea} < C < 1$, et une deuxième partie qui a pour pente, pour $C < q_{ea}$, a) 0 (ligne pointillée), b) $-1/T^*$ avec T^* indépendant de C (ligne continue), c) $-1/T_{eff}(C)$ variant continûment avec C (ligne en traits mixtes).*

Le théorème de fluctuation – dissipation et sa modification sont faciles à comprendre de façon graphique. Prenons un temps d'attente t_w égal à, par exemple, 10 unités de temps après la préparation du système et traçons la courbe $\chi(t,t_w)$ en fonction de $C(t,t_w)$ en utilisant t comme un paramètre (t varie entre t_w et l'infini). Si l'on prend une corrélation normalisée à 1 à temps égaux, la courbe paramétrique part du point $(C(t_w,t_w) = 1, \chi(t_w,t_w) = 0)$ et elle arrive au point $(C(t \to \infty, t_w) \to 0, \chi(t \to \infty, t_w) = \overline{\chi})$. Sans perte de généralité, on a supposé que la corrélation décroît à zéro. Cette première courbe est tracée en rouge sur les Figs. 1 et 2. Maintenant, on choisit un temps d'attente plus long, disons $t_w = 100$ unités de temps, et on reproduit la construction de la courbe paramétrique. On trouve les courbes vertes des Figs. 1 et 2. Si l'on fait cette construction pour un temps d'attente suffisamment long, la courbe paramétrique approche une courbe limite $\chi(C)$, représentée par les courbes bleues. Si le système s'équilibre avec son environnement, la construction s'approche d'une ligne droite de pente $-1/T$. C'est la situation de la Fig. 1 et l'expression même du TFD. Par contre, les systèmes loin de l'équilibre qui évoluent avec une faible production d'entropie tendent vers une courbe asymptotique $\chi(C)$ différente d'une simple droite. Pour les modèles solubles on distingue trois formes, dessinées sur la Fig 2, qui correspondent respectivement à un ferromagnétique, aux verres structuraux et aux verres de spin. Plusieurs études numériques effectuées avec des modélisations plus réalistes des trois cas ont confirmé que la limite existe et que le comportement asymptotique ressemble aux prédictions des modèles en champ moyen.

Les courbes asymptotiques de la Fig. 2 ont une forme particulière. Elles ont une partie linéaire avec la pente $-1/T$ entre $C(t_w,t_w) = 1$ et une valeur de la corrélation qu'on appellera q_{ea}. Ensuite, la courbe s'écarte de cette droite. La séparation entre les deux parties est nette quand il existe une claire séparation d'échelles temporelles de relaxation. Cette séparation est facile à visualiser dans le cas d'une croissance de domaines dans un ferromagnétique. Si les temps t et t_w sont très proches, les parois de domaines ne se déplacent presque pas entre t_w et t et on observe la dynamique due aux fluctuations thermiques à l'intérieur des domaines. Cette dynamique ressemble à celle de l'équilibre, car le système total est une juxtaposition de domaines des deux états d'équilibre. Au contraire, si les temps t et t_w s'éloignent, les domaines ont le temps de croître et la dynamique est celle des parois. La courbe paramétrique asymptotique est donné par la ligne bleue en pointillé de la Fig. 2 avec les pentes $-1/T$ et $-1/(T^* \to \infty)$. Dans le cas des verres, on observe aussi une séparation d'échelles temporelles dans la relaxation des fonctions de corrélation qui, tracées en fonction de $t - t_w$, ont un plateau à la valeur q_{ea} (si l'axe des temps est en échelle logarithmique). Le comportement asymptotique pour les verres est celui de la courbe pleine bleue de la Fig. 2, c'est-à-dire une pente indépendante de la valeur de la corrélation. Finalement, les verres de spin (en champ moyen) approchent la courbe bleue en traits mixtes qui correspond à une succession d'échelles temporelles, chacune avec une température $T^*(C)$. La raison profonde pour laquelle chaque système se comporte de cette manière reste encore mal comprise.

Le comportement des systèmes faiblement sollicités est légèrement simplifié par rapport aux systèmes vieillissants : leur relaxation devient stationnaire, c'est-à-dire que fonctions de corrélation et de réponse dépendent seulement de la différence des temps $t - t_w$, mais elle maintient la séparation d'échelles temporelles. Par exemple, la corrélation d'un liquide surfondu sous cisaillement homogène approche un état stationnaire hors d'équilibre et la construction paramétrique ressemble aux courbes de la Fig. 2, où la dépendance en temps d'attente est remplacée par une dépendance en l'amplitude de la perturbation. Une perturbation plus forte permet d'obtenir un système plus "jeune", comme dans l'exemple précèdent du mélange eau-huile. Ainsi, la courbe rouge correspond à un assez fort cisaillement, la verte à un cisaillement d'amplitude intermédiaire tandis que la courbe pleine bleue correspond à la limite de cisaillement nul. On observe également l'apparition de modification du TFD du même style pour des systèmes aussi exotiques que les verres de spin quantiques et certains modèles de matière granulaire.

Les discussions précédentes montrent que les échelles temporelles jouent un rôle très important. Pour les systèmes en relaxation, nous avons argumenté que la courbe asymptotique apparaît à condition de prendre la limite $t_w \to \infty$ après la limite de volume infini. En effet, pour un système de taille grande mais finie, le temps d'équilibration est aussi fini. En conséquence, la courbe limite $\chi(C)$ aura un temps de vie borné par le temps d'équilibration. Pour les temps d'attente de cet ordre la courbe $\chi(C)$ commencera lentement à varier pour s'approcher de l'asymptote d'équilibre, la ligne droite de pente $-1/T$.

Tests thermodynamiques

La pente de la courbe paramétrique $\chi(C)$ est donc identifiée, par analogie avec le TFD à l'équilibre, comme une température effective dépendant de la valeur de la corrélation. Mais, peut-on vraiment appeler cette quantité "température" ? Dans la suite, nous détaillons les propriétés de la définition (2) qui nous permettent d'affirmer que cette quantité est une vraie température.

Thermométrie

Une température doit pouvoir se mesurer avec un thermomètre. Une réalisation de cette mesure correspond à une généralisation de l'expérience du mouvement brownien de Perrin : on suit l'évolution de l'énergie d'une particule traceur immergée dans le fluide que l'on veut étudier. Si le fluide est à l'équilibre à la température T, au bout d'une courte période d'équilibration, l'énergie cinétique moyenne de la particule approche $dT/2$ (équipartition), où d est la dimension de l'espace. Par contre, si le fluide est un liquide dense hors d'équilibre, on peut choisir la masse du traceur pour examiner la dynamique rapide, ou bien la dynamique lente, du fluide. La particule aura une énergie cinétique moyenne $E_{cin} = dT_{eff}/2$, où T_{eff} est la valeur de la température effective à l'échelle temporelle explorée.

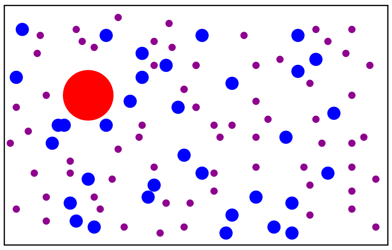

Figure 3 – *Un schéma de la particule traceur (en rouge), immergée dans un liquide binaire de grandes (en bleu) et petites (en magenta) particules.*

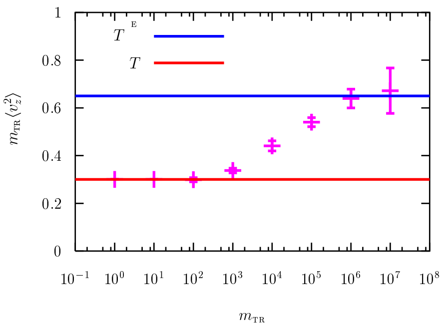

Figure 4 – *La valeur asymptotique de $m_{tr}\langle v_z^2\rangle$ pour le traceur de masse m_{tr} qui se déplace dans un liquide de Lennard-Jones binaire soumis à un cisaillement homogène, en fonction de la masse du traceur. D'après Berthier et Barrat.*

Berthier et Barrat ont réalisé cette mesure numériquement en utilisant comme fluide un liquide dense sous cisaillement homogène en contact avec un bain thermique de température T, et une particule de masse m_{tr} comme traceur. La Fig. 3 représente schématiquement une configuration instantanée du liquide binaire et du traceur. La Fig. 4 montre la valeur asymptotique de la composante transverse au cisaillement de l'énergie cinétique du traceur en fonction de sa masse. On voit clairement comment la température effective $T_{eff} = m_{tr}\langle v_z^2\rangle$ passe de la valeur T à la valeur $T^* > T$ pour les grandes masses. La transition entre les deux valeurs est très douce et se passe sur plusieurs ordres de grandeur. L'interprétation de ce résultat est simple : une traceur léger réagit aux mouvements rapides du liquide, c'est-à-dire à l'échelle rapide qui suit la température du bain thermique T tandis qu'un traceur très lourd suit seulement la relaxation structurelle très lente du liquide qui est contrôlée par T^*.

Equilibrations partielles et flux de chaleur (Loi zéro de la thermodynamique)

On s'attend à ce qu'une température, même si elle est définie hors d'équilibre, contrôle la direction des flux de chaleur et les équilibrations partielles des observables en interaction.

La thermalisation des différents degrés de liberté est bien définie seulement dans la limite des petits échanges de chaleur, c'est-à-dire pour les longs temps d'attente ou bien sous une force non conservative infinitésimale. La thermalisation est possible seulement pour les observables qui évoluent sur les mêmes échelles temporelles. En conséquence, si la notion de température effective est justifiée, des observables différentes en interaction, qui évoluent sur la même échelle temporelle, doivent acquérir la même valeur de la température effective (deux observables sont en interaction si la réponse d'une observable à une perturbation appliquée sur l'autre est différente de zéro). Cette propriété, prouvée pour les modèles de spins discutés dans l'Encadré 1, a été récemment testée numériquement pour des systèmes de particules en interaction. Pour le liquide dense sous cisaillement homogène, la Fig. 5 montre les résultats de la mesure des fonctions de corrélation et de réponse d'une famille d'observables indexée par un vecteur d'onde. Le fait que toutes les courbes soient parallèles montre l'équilibration partielle de la dynamique lente.

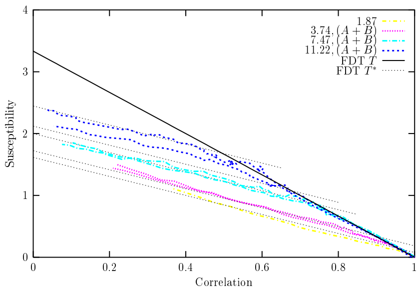

Figure 5 – *Étude de la température effective d'un liquide binaire sous cisaillement homogène. La figure montre la courbe paramétrique entre la réponse linéaire intégrée sur un intervalle temporel de longueur $t - t_w$, $\chi_k(t - t_w)$, et la corrélation $C_k(t - t_w)$ pour $k = 1.87, 3.74, 7.47, 11.22$ (voir Encadré 1). La droite de pente $-1/T$ attendue à l'équilibre est représentée par une ligne noire, tandis que la pente des lignes pointillées parallèles permet d'obtenir la valeur de T^* (égale à celle montrée en Fig. 4). D'après l'étude numérique de Berthier et Barrat.*

On peut aussi vérifier que les échanges de chaleur s'effectuent des hautes températures effectives vers les plus basses. Pourtant, le fait qu'on puisse avoir une équilibration partielle à une valeur de température effective plus haute que celle des deux observables indépendantes, comme il a été observé pour certains modèles en champ moyen, reste mystérieux.

Expériences

Plusieurs expériences pour mesurer la température effective ont été réalisées et quelques unes sont en cours. Nous présentons dans la Fig. 6 les résultats de Hérisson et Ocio pour un verre de spin appelé thiospinel : la relation FD est illustrée par la courbe paramétrique de susceptibilité en fonction de la corrélation.

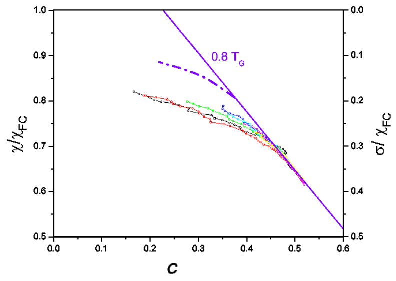

Figure 6 – *Étude de la température effective dans un verre de spin isolant, trempé à une température inférieure à la température de transition T_G. Les différentes courbes correspondent à différents temps d'attente t_w à $T < T_G$. La ligne pointillée indique le comportement asymptotique attendu pour $t_w \to \infty$. D'après Hérisson et Ocio.*

Mécanique statistique

Naturellement, le prochain pas consiste à se demander si on peut utiliser la température effective pour développer une thermodynamique et une mécanique statistique pour les systèmes hors d'équilibre avec une faible production d'entropie. L'usage de potentiels thermodynamiques généralisés avec la température effective comme paramètre supplémentaire a été proposé. Pour les modèles vitreux en champ moyen, on peut donner un sens précis à ces extensions. Pourtant, la compréhension de leurs domaines de validité dans une situation plus réaliste reste un problème ouvert et difficile à valider.

Dans les années 80, S. F. Edwards a énoncé l'hypothèse que les propriétés stationnaires de la matière granulaire dense sous faible sollicitation, sont déterminées par une distribution plate des configuration totalement bloquées (où aucun grain n'a la possibilité de se déplacer ce qui est possible car la température externe est effectivement nulle). En suivant une démarche “microcanonique”, le logarithme du nombre des configurations bloquées à énergie constante définit une entropie et, par dérivation par rapport à l'énergie, on obtient la température d'Edwards. Cette température peut être calculée pour les modèles en champ moyen à température nulle. On trouve qu'elle coïncide avec la valeur de la température effective définie en (2) pour l'échelle de relaxation lente. Ce résultat a poussé beaucoup de chercheurs à essayer de valider la distribution plate d'Edwards, dans une grande variété de modèles vitreux et granulaires en dimension finie. A présent, on a exhibé des modèles pour lesquels la distribution d'Edwards donne de très bons résultats, c'est-à-dire que cette mesure statique permet de prédire des observables dynamiques, et quelques autres où elle échoue, tandis que la définition de température effective reste valable (le modèle d'Ising en champ aléatoire en est un exemple). Ce sujet de recherche est très actif, mais un travail important est encore nécessaire pour déterminer les limites de validité de l'idée d'Edwards.

Remerciements

Je tiens a remercier J. Kurchan et L. Peliti pour notre collaboration sur ce sujet ; J-L Barrat, L.

Berthier, D. Hérisson et M. Ocio pour m'avoir transmis leurs données numériques et expérimentales, et G. Semerjian, C. Sire, et A. Barrat pour leur lecture critique du manuscrit.

POUR EN SAVOIR PLUS

Cugliandolo (L.F.), Kurchan (J.), Peliti (L.), « Energy flow, partial equilibration and effective temperatures in systems with slow dynamics », *Phys. Rev. E 55*, (1997), 3898.

Cugliandolo (L.F.), Kurchan (J.), « A scenario for the dynamics in the small entropy production limit », *J. Phys. Soc. Japan 69*, (2000), 247.

Barrat (J.-L.), Berthier (L.), « Nonequilibrium dynamics and fluctuation-dissipation relation in a sheared fluid », *J. Chem. Phys. 116*, (2002), 6228.

Cugliandolo (L.F.), « Dynamics of glassy systems », *cond-mat/0210312*, Lecture notes, Les Houches, (2002).

Bouchaud (J.-P.), Cugliandolo (L.F.), Kurchan (J.), Mézard (M.), « Out of equilibrium dynamics in spin-glasses and other glassy systems », *cond-mat/9702070 en Spin-glasses and random fields, A. P. Young Ed.*, World Scientific, (1998).

Hérisson (D.), Ocio (M.), « Fluctuation-Dissipation Ratio of a Spin Glass in the Aging Regime », *Phys. Rev. Lett. 88*, (2002), 257202.

Article proposé par : Leticia F. Cugliandolo
Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Énergies, Université P. & M. Curie, 4, Place Jussieu (Tour 24 ; 5ième étage), 75252 Paris Cedex 05, email : leticia@lpt.ens.fr.
L. Cugliandolo est membre junior de l'Institut Universitaire de France.

Encadré 1

LES MODÈLES

Modèles solubles : Les résultats analytiques ont été d'abord obtenus pour une famille de modèles définis par le hamiltonien

$$H_J[\mathbf{s}] = \sum_{i_1<\ldots<i_p} J_{i_1<\ldots<i_p}\, s_{i_1}\ldots s_{i_p} \qquad (3)$$

où $J_{i_1<\ldots<i_p}$ sont des couplages aléatoires tirés avec une distribution gaussienne, $\mathbf{s} = (s_1,\ldots,s_N)$ est un vecteur de spins qui peut être sphérique ($s_i \in \mathbb{R}$, avec la contrainte globale $s^2 = N$), ou bien d'Ising, ($s_i = \pm 1$), et p est un paramètre, $p \geq 2$. On a aussi montré que ce type de modèles peut décrire de manière effective (après resommation infinie d'une théorie de perturbation) des modèles plus réalistes de spins ou de particules avec des interactions à portée finie, sous l'hypothèse de séparation d'échelles temporelles.

Simulations de liquides simples : Les résultats numériques ont été obtenus dans le cadre de divers modèles de verres et de matière granulaire. Par exemple, le comportement des liquides simples, formés par des particules sphériques, est bien décrit par un mélange binaire de particules interagissant par un potentiel de Lennard-Jones :

$$V(\mathbf{r}_{ij}) = 4\epsilon_{ij}\left[\left(\frac{\sigma_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|}\right)^{12} - \left(\frac{\sigma_{ij}}{|\mathbf{r}_{ij}|}\right)^{6}\right], \qquad (4)$$

où ϵ_{ij} donne l'échelle d'énergie d'interaction, σ_{ij} est la moyenne des diamètres des particules i et j et $\mathbf{r}_{ij} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ la différence entre les positions de ces particules. Le système est formé par N_A (N_B) particules de masse m_A (m_B). Un choix approprié des paramètres conduit à une transition numérique à T_g où le temps de relaxation dépasse celui accessible par la simulation.

Théorème fluctuation-dissipation : En choisissant le couple d'observables $A_k(t) = N_A^{-1}\sum_{j=1}^{N_A}\epsilon_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}_j(t)}$ et $B_k(t) = 2\sum_{j=1}^{N_A}\epsilon_j\cos(\mathbf{k}\mathbf{r}_j(t))$, où $\mathbf{k}$ est un vecteur d'onde donné, on construit la fonction de corrélation $C_k(t,t_w) \equiv [\langle A_k(t)B_k(t_w)\rangle]$, la moyenne étant prise sur les histoires thermiques et sur les variables aléatoires $\epsilon_i = \pm 1$, avec probabilité 1/2. Si on perturbe le fluide à l'équilibre avec une force $\mathbf{F}_i(\mathbf{k},t) \equiv -\frac{\partial}{\partial \mathbf{r}_i}(-hB_k(t))$ agissant sur chaque particule A pendant la période $[t_w,t]$, à l'équilibre, la réponse intégrée de l'observable A_k (moyennée, comme C_k) est reliée à la corrélation C_k par le TFD *:*

$$\chi_k(t,t_w) = \frac{1}{T}\left(C_k(t_w,t_w) - C_k(t,t_w)\right). \qquad (5)$$

Hors d'équilibre, pour $T < T_g$, cette relation n'est plus valable.