

Mémoire

Auteur : Korostovskaya, Anna

Promoteur(s) : Vandewalle, Nicolas

Faculté : Faculté des Sciences

Diplôme : Master en sciences physiques, à finalité approfondie

Année académique : 2020-2021

URI/URL : <http://hdl.handle.net/2268.2/12352>

Avertissement à l'attention des usagers :

Tous les documents placés en accès ouvert sur le site le site MatheO sont protégés par le droit d'auteur. Conformément aux principes énoncés par la "Budapest Open Access Initiative"(BOAI, 2002), l'utilisateur du site peut lire, télécharger, copier, transmettre, imprimer, chercher ou faire un lien vers le texte intégral de ces documents, les disséquer pour les indexer, s'en servir de données pour un logiciel, ou s'en servir à toute autre fin légale (ou prévue par la réglementation relative au droit d'auteur). Toute utilisation du document à des fins commerciales est strictement interdite.

Par ailleurs, l'utilisateur s'engage à respecter les droits moraux de l'auteur, principalement le droit à l'intégrité de l'oeuvre et le droit de paternité et ce dans toute utilisation que l'utilisateur entreprend. Ainsi, à titre d'exemple, lorsqu'il reproduira un document par extrait ou dans son intégralité, l'utilisateur citera de manière complète les sources telles que mentionnées ci-dessus. Toute utilisation non explicitement autorisée ci-avant (telle que par exemple, la modification du document ou son résumé) nécessite l'autorisation préalable et expresse des auteurs ou de leurs ayants droit.



Liège Université

TRAVAIL PRÉSENTÉ EN VUE DE L'OBTENTION DU
DIPLOME DE MASTER EN SCIENCES PHYSIQUES

Auto-assemblages dirigés par l'interaction capillaire

Auteure :

Anna KOROSTOVSKAYA

Comité de lecture :

Prof. Eric OPSOMMER

Prof. Alejandro SILHANEK

Prof. John MARTIN

Promoteur :

Prof. Nicolas VANDEWALLE

Année Académique 2020-2021

Remerciements

Je voudrais exprimer ma gratitude envers toutes les personnes qui ont contribué au succès de ce mémoire, de près ou de loin.

J'aimerais tout d'abord remercier mon promoteur, Prof. Nicolas VANDEWALLE, pour le temps qu'il m'a consacré, sa patience et pour ses conseils précieux qui m'ont guidée dans la réalisation et la rédaction de ce mémoire.

Ensuite, je tiens à remercier toute l'équipe pédagogique de l'Université de Liège qui m'a non seulement apporté beaucoup de connaissances mais qui m'a également beaucoup appris et permis d'évoluer.

J'aimerais également exprimer ma gratitude envers l'équipe du GRASP avec laquelle j'ai eu la chance de collaborer et d'échanger.

Je souhaiterais exprimer ma gratitude envers le Dr. BURETTE, qui a accepté de me poser un plâtre plus petit, libérant ainsi mes doigts pour la rédaction du manuscrit. J'aimerais aussi remercier le comité de lecture : Prof. Eric OPSOMMER, Prof. Alejandro SILHANEK et Prof. John MARTIN, ainsi que le président du jury Prof. Philippe GHOSEZ, pour leur compréhension face à cette situation.

Merci à Sigrid ALEXANDRE pour ses relectures et corrections.

Je remercie aussi mes parents et mes frères, pour le soutien émotionnel apporté tout au long de mon parcours académique et surtout pour m'avoir appris à surmonter toutes les difficultés.

Je tiens à remercier tout particulièrement mon copain pour tout son soutien, ses conseils à la rédaction ainsi que son aide lors des quelques soucis techniques rencontrés lors des simulations.

Enfin, un tout grand merci à mes amis qui m'ont apporté un soutien tant intellectuel que moral tout au cours de l'année.

Table des matières

| | | |
|----------|---|-----------|
| 1 | Introduction | 3 |
| 1.1 | Contexte | 3 |
| 1.2 | Motivations | 4 |
| 2 | État de l’art | 5 |
| 2.1 | Effet Cheerios | 5 |
| 2.2 | Interactions capillaires | 7 |
| 2.2.1 | Potentiel capillaire | 8 |
| 2.2.2 | Développement multipolaire capillaire | 11 |
| 2.3 | Auto-assemblages capillaires | 14 |
| 3 | Simulations numériques | 17 |
| 3.1 | Modélisation du système | 17 |
| 3.1.1 | Brin capillaire | 17 |
| 3.1.2 | Particules | 21 |
| 3.1.3 | Interactions | 23 |
| 3.2 | Algorithme du recuit simulé | 24 |
| 3.3 | Résultats | 29 |
| 3.3.1 | Arène circulaire neutre | 29 |
| 3.3.2 | Reconnaissance de code | 32 |
| 3.4 | Discussion | 37 |
| 4 | Développements théoriques | 39 |
| 4.1 | Métastabilité | 39 |
| 4.2 | Effets d’orientation | 40 |
| 5 | Conclusion et perspectives | 45 |

1 Introduction

1.1 Contexte

Depuis la nuit des temps, la vie sur terre ne cesse d'évoluer. Via des processus de mutations et de sélection naturelle, cette évolution nous permet aujourd'hui d'étudier des phénomènes complexes tels que les mouvements de foule, ou encore des comportements d'auto-organisation. Ces derniers sont notamment observés pour des nuées d'oiseaux ou des bancs de poissons, voir Fig.1 [1, 2]. À une échelle plus petite il est également possible d'observer ce type de comportement émergent, par exemple avec les auto-assemblages moléculaires. Ces auto-assemblages moléculaires ont de sérieuses conséquences puisqu'ils sont à la base de la réplication de l'ADN et de la synthèse des protéines [3, 4].



(a)



(b)

Fig. 1. (a) Nuée d'oiseaux et (b) banc de poissons. Dans les deux cas on observe que le comportement de chaque individu donne lieu à une organisation à l'échelle du groupe [2].

L'ingrédient nécessaire aux auto-assemblages est la présence d'interactions dans le système. Par exemple, à l'échelle macroscopique, les animaux qui forment des assemblées communiquent entre eux. À l'échelle microscopique, les molécules interagissent via des liaisons chimiques comme les liaisons Hydrogène ou les forces de van der Waals. Il est également possible de réaliser de l'auto-assemblage à une échelle intermédiaire, en utilisant des interactions capillaires. Il s'agit d'interactions dirigées par la tension superficielle d'un fluide. Il est donc possible de créer des structures contrôlables à partir de particules passives placées à l'interface d'un fluide et ainsi créer des micro-robots [5, 6, 7].

Il serait intéressant d'exploiter la possibilité de réaliser de l'auto-assemblage capillaire pour imiter d'autres comportements. Par exemple, il est possible de fabriquer des circuits électriques à l'aide d'auto-assemblages [8]. Il serait donc théoriquement possible de créer une machine de Turing à partir de particules à la surface d'un fluide. On pourrait également imiter les phénomènes de réplication de l'ADN et de synthèse des protéines.

1.2 Motivations

Les différents débouchés offerts par les auto-assemblages capillaires sont prometteurs mais nécessitent une compréhension plus approfondie de ceux-ci. Le but de ce travail est de se rapprocher de ces objectifs en réalisant de la reconnaissance de code à l'échelle capillaire. C'est à dire de créer un mécanisme qui permettrait à une particule de détecter un segment particulier parmi un brin de code capillaire.

Dans le chapitre suivant, je vais présenter les interactions capillaires. Ensuite, ces interactions seront exploitées pour modéliser un système capable de réaliser de la détection de code. Enfin, des développements théoriques seront présentés afin d'étayer les résultats obtenus lors des simulations numériques.

2 État de l’art

Dans ce chapitre, nous allons présenter les principes physiques utiles pour la suite du travail. Les interactions capillaires qui entrent en jeu y seront décrites. En effet, le système étudié est principalement soumis à ces interactions capillaires, qui peuvent, dans certaines conditions, donner lieu à des interactions multipolaires, qui seront également présentées.

2.1 Effet Cheerios

L’effet Cheerios est un phénomène qui se produit lorsqu’on place des particules ou des objets à l’interface séparant deux fluides. Ces objets auront tendance à se repousser ou à s’attirer via des interactions capillaires. Ces effets sont visibles dans la vie de tous les jours, par exemple lorsque les bulles à la surface d’un café forment des agrégats et vont se coller aux bords de la tasse. On peut également observer ce phénomène lorsqu’on mange des céréales dans un bol de lait. Les céréales présentes à l’interface lait/air vont former des clusters et formeront une structure bien définie. C’est ce dernier phénomène qui est à l’origine du nom d’*effet Cheerios*, voir Fig.2a [9]. Cet effet se base sur une déformation de l’interface entre deux fluides lorsqu’on y place un objet. Ces déformations engendrent ce qu’on appelle des interactions capillaires. Avant de s’intéresser aux détails des principes qui régissent ces interactions, il est important de comprendre l’effet Cheerios dans son ensemble. Les différentes études relatives à ce phénomène seront donc présentées dans la suite de cette section.

Tout d’abord, les mécanismes de base des interactions capillaires ont été investigués pour toutes sortes de particules flottantes. Par exemple, le paysage énergétique d’interaction pour des paraboloides hyperboliques a été calculé numériquement par Fournier et al. [10]. Il a été observé que ces particules peuvent s’assembler pour former des structures stables. Ensuite, des études de Vella et Mahadevan ont permis de mettre ces interactions en équation pour des sphères flottantes, ce qui a permis de définir la notion de charge capillaire [9]. Les charges capillaires seront présentées en détail dans la suite. L’interaction de base entre deux cylindres a également été étudiée. En effet, Cooray et al. ont déterminé l’expression analytique de cette force d’interaction en résolvant l’équation de Laplace-Young [11].

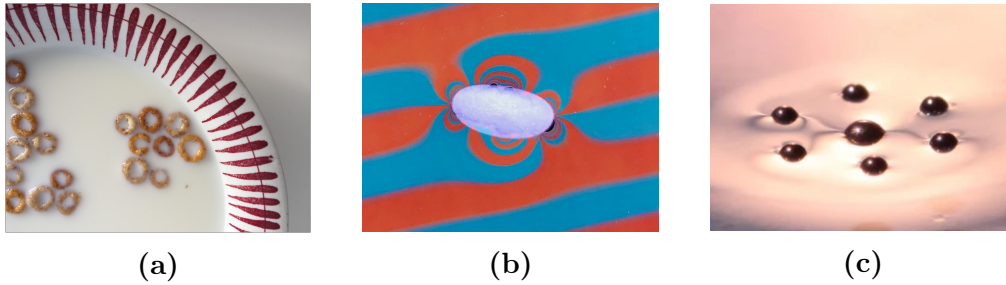


Fig. 2. (a) Céréales dans un bol de lait. On observe des agrégats. (b) Photo de particules en forme de chips posées sur de l'eau. Le pattern de couleurs indique une déformation de la surface de l'eau sous forme d'un quadripôle. Photo prise par Megan Delens. (c) Assemblage de billes soumises à des interactions magnétocapillaires à la surface de l'eau [21].

De plus, il a été remarqué que certains objets déforment la surface du liquide d'une manière plus complexe. Cela peut être dû à la ligne de contact du liquide sur l'objet. Cette ligne de contact, ainsi que ses effets, ont été étudiés sur des ellipsoïdes. Il en a été déduit que pour ce type de particules, la déformation de la surface génère un dipôle ou un quadripôle capillaire [12, 13]. Un multipôle capillaire, par analogie avec l'électrostatique, serait un objet formé de plusieurs charges capillaires. Un exemple de telles particules est représenté sur la Fig.2b. Ce type d'étude a également été réalisée avec des particules anisotropes de diverses formes formant des multipôles capillaires. Il a été montré qu'à longue portée, tout multipôle se comporte comme un quadripôle alors qu'à courte portée l'interaction dépend fortement de la forme de la particule étudiée [14]. Par exemple, une étude a été menée sur la répulsion entre particules dont les ondulations de la ligne de contact ont une longueur d'onde significativement plus petite que la taille caractéristique de la particule. Cette étude numérique et expérimentale a permis de mettre en évidence une distance d'équilibre entre particules de différente longueur d'ondulation [15].

Il est également possible d'associer les effets capillaires à d'autres effets. C'est ainsi qu'il a par exemple été possible de recréer des charges capillaires à partir de gouttelettes en lévitation par effet Leidenfrost [16]. Un autre type de phénomène apparaît lorsqu'on ajoute des interactions magnétiques aux

interactions capillaires. En utilisant des matériaux adaptés et en appliquant un champ magnétique vertical, il est possible de créer une répulsion entre les particules. La combinaison d'une attraction capillaire et d'une répulsion magnétique donne lieu à un équilibre. On parle alors de magnéto-capillarité. C'est ainsi qu'il a par exemple été possible de faire une mesure expérimentale de la force capillaire entre deux disques [17].

De plus, il est possible d'exploiter les effets magnétiques pour former des structures stables mais non rigides. Ainsi, un système formé de trois billes soumis à des interactions magnéto-capillaires peut montrer un comportement tel que la nage [18, 19]. Ce phénomène de nage a également été observé pour un nombre varié de billes identiques [20]. D'autres comportements à bas Nombre de Reynolds ont été observés. Par exemple, en utilisant des billes de taille différente, il est possible de créer des structures imitant le mouvement des organismes ciliés, voir Fig.2c [21].

La section suivante sera consacrée à un approfondissement des interactions capillaires telles que décrites ci-dessus.

2.2 Interactions capillaires

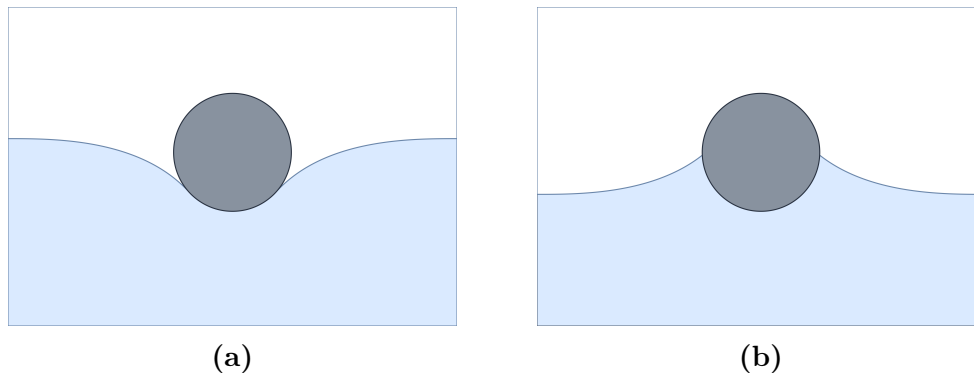


Fig. 3. Schéma de billes à la surface d'un liquide. Le liquide forme un ménisque avec les billes. (a) La ligne de contact est en dessous du niveau du liquide. (b) La ligne de contact est formée au dessus du niveau du liquide.

Tout objet flottant à la surface d'un liquide crée une distorsion. En effet, la ligne de contact entre l'objet et le liquide présente un ménisque qui a pour

effet de baisser ou d'élever localement le niveau du liquide, comme on peut le voir sur la Fig.3. Cette ligne de contact va créer ce qu'on appelle une charge capillaire [9]. Cette charge capillaire sera un élément clé et sera décrite plus en détail dans la suite.

2.2.1 Potentiel capillaire

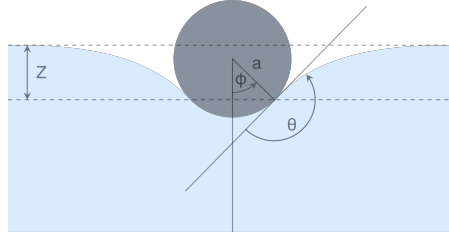


Fig. 4. Déformation de la surface par une bille de rayon a , z est la différence entre le niveau de la ligne de contact et le niveau du liquide, θ est l'angle de contact et ϕ est l'angle de la ligne de contact par rapport à la verticale.

Décrivons le cas où nous avons deux objets sphériques présents à la surface d'un liquide. L'énergie d'interaction, en fonction de l'inter-distance r , est donnée par

$$U_c(r) = -2\pi\gamma a_1 a_2 B_1 \Sigma_1 B_2 \Sigma_2 K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \quad (1)$$

où γ est la tension superficielle, a_1 et a_2 sont les rayons de la première et de la seconde sphère, λ est la longueur capillaire donnée par

$$\lambda = \sqrt{\gamma/\rho g} \quad (2)$$

pour un liquide de densité ρ et g l'accélération gravifique. La longueur capillaire représente une longueur caractéristique de déformation de l'interface soumise à la gravité. K_0 est la fonction de Bessel de deuxième espèce, à l'ordre zéro. B_i est le Nombre de Bond de la sphère i , donné par $B_i = \sqrt{\rho g a_i^2/\gamma}$ et Σ_i est un paramètre sans dimension qui permet de comparer les effets de gravité aux effets de tension superficielle. Nous avons pour la bille i

$$B_i \Sigma_i = z'_c \sin \phi_c \quad (3)$$

où z'_c est la différence de niveau entre la ligne de contact et le liquide, ϕ_c est donné par $\phi_c = \pi - \theta + \arctan z'_c$, où θ est l'angle de contact, voir Fig.4 [9]. La quantité $a_i B_i \Sigma_i$ peut être vue comme la charge capillaire de la bille i [22]. On remarque alors que différentes situations donnent lieu à des charges capillaires de signes différents, voir Fig.3. Nous pouvons donc réécrire le potentiel d'interaction (1) entre deux billes sous la forme suivante

$$U_c(r) = -2\pi\gamma q_1 q_2 K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \quad (4)$$

ce qui va nous permettre de rationaliser les interactions entre charges capillaires simples. En analysant le potentiel d'interaction présenté plus haut, nous pouvons tirer des premières conclusions sur le comportement d'un système composé de deux charges capillaires simples. Dans un premier temps, nous remarquons que le potentiel d'interaction entre deux charges capillaires dépend de la distance r entre ces deux charges. Plus précisément, il s'agit d'une fonction de Bessel modifiée de deuxième espèce, à l'ordre zéro. Cette fonction est représentée dans la Fig.5. Il s'agit d'un potentiel qui décroît très rapidement avec la distance. La rapidité de la décroissance dépend du milieu dans lequel est plongé notre système, au travers de la longueur capillaire λ . C'est à dire que pour une longueur capillaire relativement "petite", nous aurons un potentiel qui décroît très vite, alors que pour une longueur capillaire relativement grande, le potentiel décroît plus lentement. Nous pouvons interpréter cette longueur capillaire comme une portée d'interaction pour les charges. En effet, pour une grande longueur capillaire, cette portée sera grande et permettra à deux charges éloignées d'interagir de manière plus efficace. À l'inverse, lorsque la longueur capillaire est petite, la portée est plus restreinte, deux charges éloignées n'interagiront que très peu. Une deuxième chose importante à remarquer est le signe des charges capillaires. Celles-ci ont également déjà été présentées dans la partie précédente. Vu l'expression de l'équation (4), on remarque que deux charges de même signe donnent lieu à un potentiel négatif donc attractif alors que deux charges de signes opposés donnent lieu à un potentiel positif donc répulsif. Nous pouvons interpréter ce comportement de la manière suivante : deux charges de signes positifs (resp. négatifs) vont présenter un ménisque qui augmente (resp. abaisse) localement le niveau d'eau. D'un point de vue énergétique, il est plus favorable de réduire la distance entre les charges afin de minimiser la tension capillaire. Dans le cas de deux charges opposées, il serait donc plus favorable de les éloigner.

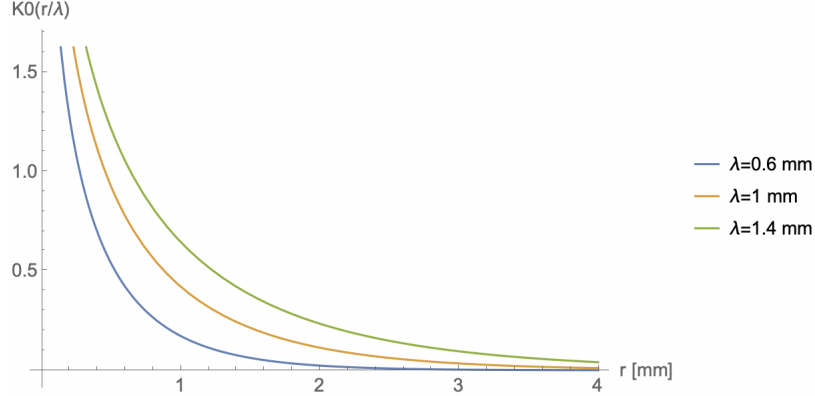


Fig. 5. Fonction de Bessel de deuxième espèce, à l'ordre zéro, en fonction du rapport r/λ . On remarque que différentes longueurs capillaires λ donnent lieu à des décroissances différentes. À une distance r fixe, on voit que la valeur de la fonction est plus importante pour de grandes longueurs capillaires.

Nous pouvons remarquer que ce type d'interaction, bien que de nature tout à fait différente, présente des analogies avec un potentiel électrostatique. En effet, l'énergie d'interaction entre deux particules chargées est donné par

$$U_e = \frac{q_1 q_2}{4\pi\epsilon_0 r} \quad (5)$$

où q_1 et q_2 sont les charges respectives, ϵ_0 est la permittivité électrique du vide et r est la distance entre les deux charges [23]. Lorsque nous comparons cette équation à l'équation (4), nous remarquons que toutes les deux sont de la forme $U = kq_1 q_2 f(r)$. Les deux différences fondamentales résident donc dans la fonction de l'interdistance $f(r)$ et dans le préfacteur k . D'une part, la fonction $f(r)$ dicte l'intensité d'interaction en fonction de la distance. Dans l'équation (5), cette fonction est la fonction inverse $f(r) = 1/r$ alors qu'il s'agit d'une fonction de Bessel qui décroît bien plus vite. Une différence capitale supplémentaire réside dans le fait que l'interaction capillaire présente une longueur caractéristique donnée par la longueur capillaire. Il sera démontré dans la suite que cette longueur capillaire a une forte influence sur le comportement d'un système soumis des interactions capillaires, contrairement au cas des interactions électrostatiques. D'autre part, le préfacteur k , ou plutôt son signe, dicte la nature de l'interaction. Puisque dans l'équation (4), ce préfacteur est négatif, couplé au signe négatif de la fonction de Bessel, deux charges de même signe donneront lieu à un potentiel attractif alors que dans

le cas de l'équation (5), c'est l'inverse. Ainsi, les deux types d'interactions sont relativement comparables. Il serait donc commode de s'inspirer des développements et des résultats bien connus de l'électrostatique afin d'étudier les interactions capillaires de manière plus complète.

Notre but étant d'étudier le comportement d'objets plus complexes, composés de plusieurs charges, nous pouvons réaliser un développement multipolaire capillaire. Un tel développement nous sera utile dans la compréhension des auto-assemblages complexes étudiés dans la suite.

2.2.2 Développement multipolaire capillaire

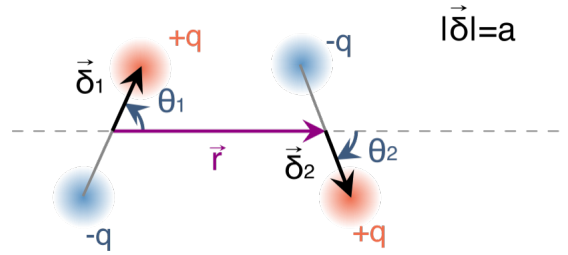


Fig. 6. Deux dipôles en interaction, séparés d'une distance r et orientés par rapport à l'axe d'interaction via des angles θ_1 et θ_2 . La taille du dipôle est $|\vec{\delta}| = a$.

Comme présenté dans la section ci-dessus, les interactions capillaires sont, dans une certaine mesure, comparables à des interactions électrostatiques. Dans cette section, ces similitudes seront exploitées afin de réaliser un développement multipolaire. En effet, en s'inspirant de l'électrostatique, il est possible de former des dipôles et quadrupôles capillaires afin d'en étudier les interactions. Considérons donc le cas où deux charges capillaires de signes opposés forment un dipôle et étudions la manière dont interagissent ces dipôles.

Le potentiel d'interaction entre deux dipôles est donné par

$$\begin{aligned}
U(\vec{r}) = & -2\pi\gamma q^2 K_0\left(\frac{|\vec{r} + \vec{\delta}_1 + \vec{\delta}_2|}{\lambda}\right) \\
& -2\pi\gamma q^2 K_0\left(\frac{|\vec{r} - \vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2|}{\lambda}\right) \\
& +2\pi\gamma q^2 K_0\left(\frac{|\vec{r} + \vec{\delta}_1 - \vec{\delta}_2|}{\lambda}\right) \\
& +2\pi\gamma q^2 K_0\left(\frac{|\vec{r} - \vec{\delta}_1 + \vec{\delta}_2|}{\lambda}\right)
\end{aligned} \tag{6}$$

où \vec{r} est le vecteur reliant le centre des dipôles et $\vec{\delta}_1$ et $\vec{\delta}_2$ sont les vecteurs directeurs des deux dipôles respectifs, voir Fig.6. Nous pouvons réécrire la fonction de Bessel sous la forme suivante

$$K_0\left(\frac{|\vec{r} \pm \vec{\delta}_1 \pm \vec{\delta}_2|}{\lambda}\right) = K_0\left(\frac{r}{\lambda}\sqrt{1 + 2\alpha x + 2\beta x^2}\right) \tag{7}$$

où $\alpha = \pm \cos\theta_1 \pm \cos\theta_2$, $\beta = \pm \cos(\theta_1 - \theta_2)$ et où $x = a/r$ est une variable réduite. Lorsque la distance entre les objets est grande ($x \ll 1$), nous obtenons le développement en série de Taylor suivant

$$\begin{aligned}
K_0\left(\frac{r}{\lambda}\sqrt{1 + 2\alpha x + 2\beta x^2}\right) \approx & K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) - \alpha\left(\frac{r}{\lambda}\right) K_1\left(\frac{r}{\lambda}\right) x \\
& + \frac{1}{2}\left[\alpha^2\left(\frac{r}{\lambda}\right)^2 K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) + 2(\alpha^2 - \beta)\left(\frac{r}{\lambda}\right) K_1\left(\frac{r}{\lambda}\right)\right] x^2 + \dots
\end{aligned} \tag{8}$$

Lorsque nous introduisons ce développement dans l'équation (6), tous les termes dominants se simplifient sauf celui en $x^2 r^2$. L'interaction entre deux dipôles est donc approchée par l'expression suivante

$$U(r, \theta_1, \theta_2) = 8\pi\gamma q^2 \left(\frac{a}{\lambda}\right)^2 K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \cos\theta_1 \cos\theta_2 \tag{9}$$

valable à longue portée. Cette expression nous permet de tirer plusieurs conclusions. Premièrement, nous pouvons constater que le signe de l'interaction dépend de l'orientation des dipôles. Le potentiel pourrait donc être

attractif ou répulsif. Ensuite, ce potentiel dépend de l'orientation des dipôles et admet un minimum lorsque les deux dipôles sont orientés de manière orthogonale, avec $\theta_1 = 0$ et $\theta_2 = \pi$ ou lorsque $\theta_1 = \pi$ et $\theta_2 = 0$. Ce résultat n'est valable qu'à longue portée puisqu'à courte portée, la configuration parallèle est la configuration la plus stable [24]. Enfin, le facteur $(a/\lambda)^2$ nous indique que le rapport entre la taille du dipôle et la longueur capillaire a toute son importance. En effet, des dipôles de taille plus importante ressentiront les interactions de manière plus importante et auront donc plus tendance à se réorienter.

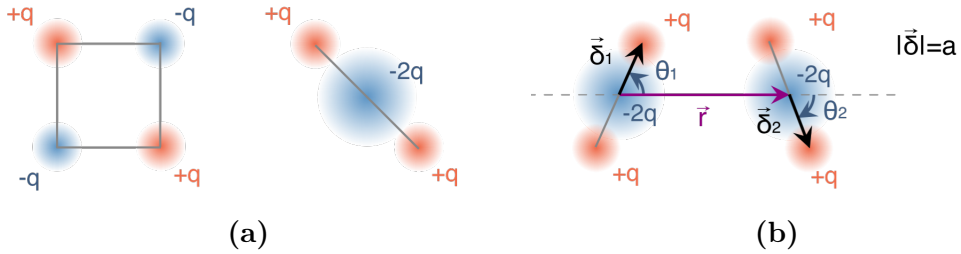


Fig. 7. (a) Représentation d'un quadrupôle normal et aplati. (b) Deux quadrupôles en interaction, séparés d'une distance r et orientés par rapport à l'axe d'interaction via des angles θ_1 et θ_2 . La taille du quadrupôle est $|\vec{\delta}| = a$.

Dans le cas où deux dipôles s'assemblent, ils forment ce qu'on appelle un quadrupôle. Afin de simplifier l'expression des équations, il est possible de réduire la dimension du quadrupôle en l'aplatissant comme représenté sur la Fig.7a. Dans ce cas, un développement quadrupolaire permet d'approximer l'expression de l'énergie d'interaction entre deux quadrupôles, à longue portée. En effet, en sommant sur les paires de charges des deux quadrupôles, nous avons l'expression suivante pour l'énergie potentielle

$$\begin{aligned}
U = & -2\pi\gamma q^2 \left[4K_0 \left(\frac{r}{\lambda} \right) \right. \\
& + \sum_{\text{paires}} K_0 \left(\frac{|\vec{r} \pm \vec{\delta}_1 \pm \vec{\delta}_2|}{\lambda} \right) \\
& - 2 \sum_{\text{paires}} K_0 \left(\frac{|\vec{r} \pm \vec{\delta}_1|}{\lambda} \right) \\
& \left. - 2 \sum_{\text{paires}} K_0 \left(\frac{|\vec{r} \pm \vec{\delta}_2|}{\lambda} \right) \right]
\end{aligned} \tag{10}$$

où le premier terme correspond à l'interaction des deux charges centrales, le deuxième terme correspond à l'interaction des extrémités et les deux derniers termes représentent l'interaction des extrémités avec la charge centrale opposée. Ainsi, en réalisant un développement en série semblable à celui présenté précédemment, et en sommant sur les termes en $x^4 r^4$, nous obtenons le potentiel d'interaction suivant

$$U(r, \theta_1, \theta_2) = -2\pi\gamma q^2 \left(\frac{a}{\lambda} \right)^4 K_0 \left(\frac{r}{\lambda} \right) \cos^2(\theta_1) \cos^2(\theta_2). \tag{11}$$

Ce potentiel est toujours attractif, peu importe l'orientation des quadrupôles. Nous pouvons également remarquer la présence du facteur $(a/\lambda)^4$ qui indique une forte dépendance à la taille du quadrupôle, comme dans le cas des dipôles.

Nous nous rendons compte que lorsque plusieurs charges sont présentes, les effets d'orientation sont tout aussi importants que les effets purement attractifs ou répulsifs. De manière générale, la formation de ce type de structures est en réalité une manifestation d'un phénomène bien plus large : les auto-assemblages. Ce phénomène sera le sujet de la section suivante.

2.3 Auto-assemblages capillaires

L'auto-assemblage est un processus selon lequel un système désordonné s'organise afin de créer une structure selon des règles bien particulières. Ce

processus intrigue les chercheurs depuis de nombreuses années puisqu'il permettrait d'élucider de grands mystères de la science comme l'émergence de la vie sur terre. En effet, lorsqu'on observe de plus près, nos cellules sont formées d'organites, eux-mêmes formés de composés organiques. Ces composés, tels que les protéines, sont déjà à leur échelle, le résultat d'auto-assemblages de molécules et d'atomes plus simples [3, 25].

Un auto-assemblage capillaire serait donc une structure formée par des composants qui interagissent entre eux via des interactions capillaires. De telles structures ont été présentées dans une des sections précédentes avec les systèmes de nageurs dirigés par des interactions magnéto-capillaires. Ce type d'auto-assemblage est dit dynamique. Il est cependant possible d'étudier la stabilité de telles structures dans le cas statique. Un ensemble de billes soumises à des interactions magnéto-capillaires créent une déformation de la surface à l'échelle de l'agrégat. Une étude sur la stabilité d'un agrégat de deux billes a montré que la présence de billes voisines permettrait une certaine stabilité à la surface du liquide alors que, isolées, les billes auraient tendance à couler [26]. De plus, l'équilibre et la stabilité de déformation d'un fluide par un cluster de particules en présence d'une force extérieure, ont été étudiés théoriquement et numériquement par Guzowski et Gim [27]. Les instabilités ont été étudiées en détail par Lee et al. [28]. Il a aussi été montré que pour un grand nombre de particules, la déformation de la surface à l'échelle de l'agrégat entraîne des défauts dans la structure, créant ainsi une symétrie pentagonale [29]. Ce même type de structure est obtenu en plaçant des particules Janus magnétiques à la surface d'une gouttelette [30].

Comme dans le cas de l'effet Cheerios, diverses formes ont été étudiées en auto-assemblage. C'est par exemple le cas pour des particules elliptiques. Il a été montré que le facteur d'aspect des ellipses joue un rôle important dans la structure formée à plus grande échelle [31]. En effet, certaines conditions donnent lieu à des structures pointe-à-pointe alors que dans d'autres cas, on observe des structures côte-à-côte. Une étude similaire est actuellement menée au laboratoire du GRASP. Celle-ci vise à déterminer les conditions qui favorisent l'une ou l'autre configuration, pour des paraboloides hyperboliques, voir Fig.8a. Il s'agit en fait des structures qu'on peut apercevoir dans la nature lorsqu'on observe par exemple des oeufs de moustiques ou des coléoptères à la surface de l'eau comme représentés sur la Fig.8b. Ces derniers ont été étudiés par Voise et al. [32].

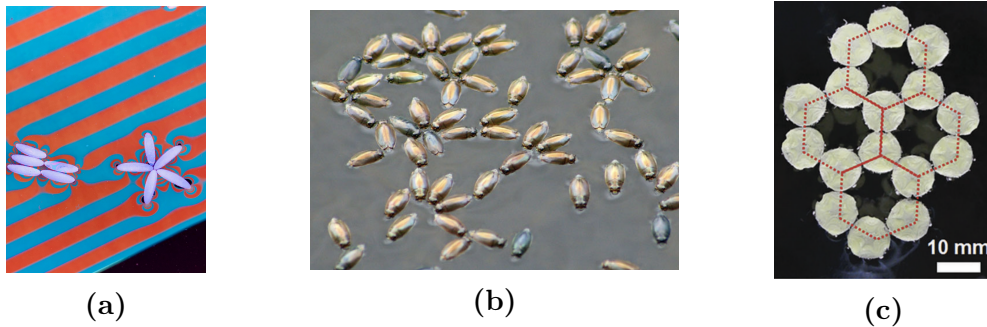


Fig. 8. (a) Photo de particules en forme de paraboloïde hyperbolique formant des structures côte-à-côte et pointe-à-pointe à la surface de l'eau. Photo prise par Megan Delens. (b) Structures similaires obtenues par des coléoptères flottant à la surface de l'eau [32]. (c) Structures hexagonales obtenues par des particules non rigides en forme de disques déformés [34].

Il est également possible de réorganiser des structures déjà existantes, par exemple en manipulant la densité des fluides, ce qui permet aux particules de se séparer et de se ré-assembler selon d'autres géométries [33]. Une autre manière de réorganiser la structure est de créer des particules programmables. C'est ce qui a été fait pour des particules non rigides en forme de disques déformés, formant des multipôles, voir Fig.8c. La forme de ces particules peut être contrôlée par la température [34] ou par un champ magnétique tournant [35].

De telles structures programmables peuvent être considérées comme des micro-robots, pouvant prendre différentes formes et s'assembler selon des structures qui leur permettent de réaliser des tâches bien précises comme la nage ou la capture d'autres particules [36]. De la même manière que les fourmis, de telles particules peuvent également servir à transporter des particules plus grosses par effet de groupe et ainsi avoir de nombreuses applications en médecine [37, 38].

3 Simulations numériques

Afin de simuler les processus d'auto-assemblages capillaires et de comprendre tous les principes sous-jacents, deux méthodes ont été mises en place. D'une part, des simulations numériques ont permis d'explorer différents comportements du système ainsi que de manipuler et maîtriser tous les paramètres qui entrent en jeu. D'autre part, des calculs théoriques ont été réalisés afin de soutenir les résultats obtenus par les simulations. Ce chapitre met en avant les méthodes numériques utilisées ainsi que les résultats obtenus.

3.1 Modélisation du système

Puisque l'objectif est de mettre en évidence un auto-assemblage programmé, nous allons construire un système composé d'un brin de code capillaire ainsi que d'un objet dont la mission est de détecter un segment de code particulier sur le brin. Dans cette section, ce système sera décrit avec précision et les différents paramètres qui entrent en jeu seront présentés.

3.1.1 Brin capillaire

L'objectif étant de faire de la reconnaissance de code capillaire, il est particulièrement utile de commencer par la construction d'un code capillaire binaire. Vu les propriétés des charges capillaires présentées dans le chapitre précédent, nous pouvons construire un brin d'information capillaire globalement neutre mais composé de charges $q = \pm 1$. Si nous voulions réaliser ce type de dispositif en milieu expérimental, il suffirait de créer une ligne de contact qui ondule, permettant de former des charges capillaires alternées positives et négatives. Nous pouvons définir une longueur qui va caractériser la taille des charges capillaires donnée par la demi longueur d'ondulation. Dans la suite, nous parlerons de rayon puisque les charges seront représentées par des billes. Le rayon de ces charges, à lui tout seul n'a pas beaucoup de sens. En effet, vu l'expression (4), il est intéressant d'utiliser une grandeur sans dimensions, donnée par le rapport a/λ comme paramètre du système, a étant le rayon des charges. Ce paramètre donne donc le rapport entre la taille du système et la longueur caractéristique de déformation du fluide. En temps normal, il serait logique de fixer la valeur de λ et de faire varier la taille du système. En effet, pour un fluide donné, la longueur capillaire est

fixée et il serait expérimentalement plus simple de fabriquer le système en plusieurs tailles différentes. Cependant, dans le cadre des simulations, afin de faciliter la représentation du système dans différentes situations, c'est le rayon des charges a qui a été fixé. Dans la suite, lorsque nous ferons varier la longueur capillaire λ , il faut plutôt voir ça comme une variation de la taille du système. Ainsi, nous fixons le rayon des charges à $a = 0.3 \text{ mm}$ et nous ferons varier λ de 0.2 mm à 1.1 mm . Expérimentalement, si on utilise de l'eau ($\lambda = 2.7 \text{ mm}$), cela reviendrait à étudier des objets dont le rayon des charges varie de 4 mm à 0.7 mm . On peut dès lors imaginer qu'un assemblage de charges vont former un brin et donc créer un code capillaire. On pourrait envisager plusieurs géométries pour ce brin. Ces différentes géométries seront présentées et discutées dans les paragraphes suivants.

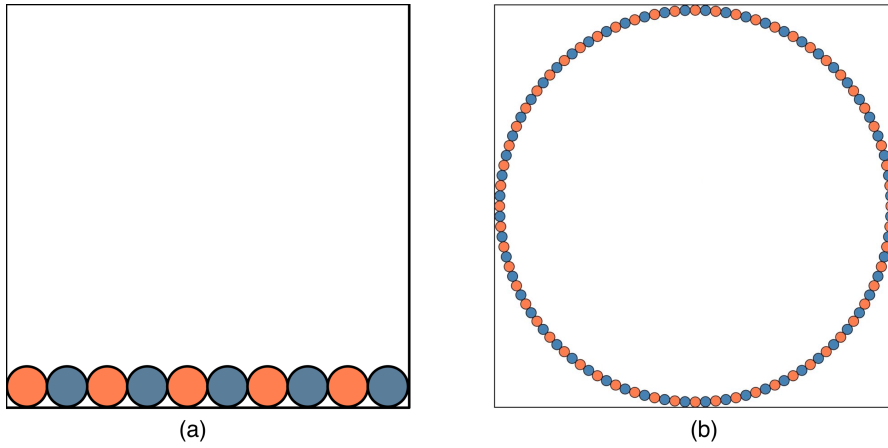


Fig. 9. Brins construits à partir de charges capillaires positives (orange) et négatives (bleu) (a) Brin linéaire présentant des charges alternées. (b) Arène circulaire neutre.

Un premier choix pour la géométrie du brin serait un segment de droite. Il s'agit d'un choix naturel et facilement réalisable en laboratoire. L'avantage qu'aurait une géométrie linéaire est la facilité de modélisation. En effet, si nous travaillons avec un brin linéaire horizontal, il suffit de fixer son ordonnée. Chaque charge j composant le brin aura alors les coordonnées suivantes dans le plan :

$$\vec{r}_j = (a(2j + 1), y_B) \quad (12)$$

où y_B est l'ordonnée qu'on a fixée pour le brin. Nous pouvons fixer le signe de chaque charge afin de créer un code. Un code neutre est choisi en prenant une succession de charges de signes opposés comme représentée sur la Fig.9.a. Ce type de géométrie a été exploré dans le cadre de ce travail mais il est important de préciser que ce type de géométrie possède un inconvénient non négligeable : le segment n'est pas de longueur infinie et pourrait donc induire des effets de bords. Afin de contourner ce problème, on pourrait envisager une topologie cylindrique ou appliquer des conditions périodiques de Born-von Karman, c'est à dire utiliser la topologie d'un tore. On pourrait également implémenter un brin suffisamment long afin de pouvoir négliger les effets de bords. Une seconde solution serait la construction d'un brin circulaire.

Une telle arène circulaire, construite à partir d'une succession de charges de signes opposés, est représentée sur la Fig.9.b. Cette géométrie présente de nombreux avantages. Premièrement, elle permet d'éviter les effets de bords discutés précédemment. Ensuite, elle est facile à modéliser numériquement. En effet, chaque charge j aura comme coordonnées $(R_a \cos \frac{2j\pi}{N_c}, R_a \sin \frac{2j\pi}{N_c})$, où N_c est le nombre de charges constituant l'arène et R_a est le rayon de l'arène donné par $R_a = \frac{a}{\tan(\pi/N_c)}$. Il faut cependant prendre en considération les effets de la courbure du brin, notamment sur la précision de détection de code. Afin de limiter ces effets, nous pouvons augmenter le rayon de courbure en considérant un nombre important de charges. Dans le cadre de ce travail, j'ai considéré 120 charges pour l'arène capillaire, nombre qui semble être un bon compromis entre complexité de calcul et courbure. Ces 120 charges pourront alors chacune abriter un défaut afin d'être détecté par la suite. Enfin, une telle géométrie permettrait à priori de mieux mettre en évidence l'exactitude lors de la détection de code. En effet, si nous plaçons n'importe quelle particule chargée au centre, celle-ci subit un potentiel sphérique et ressent une force moyenne nulle. Ce type de brin, portant un code alterné, formerait donc une arène neutre. Il suffirait d'y introduire un défaut qui serait alors détectable.

Les brins de code capillaire étant composés de charges binaires ± 1 , il suffit d'inverser une charge du brin pour introduire un défaut. Il y a donc deux types de défauts possibles : une charge -1 qui devient une charge $+1$, que nous appellerons défaut P pour *Positif* et une charge $+1$ qui devient -1 , que nous appellerons défaut N pour *Négatif*. Étant donné que les charges succes-

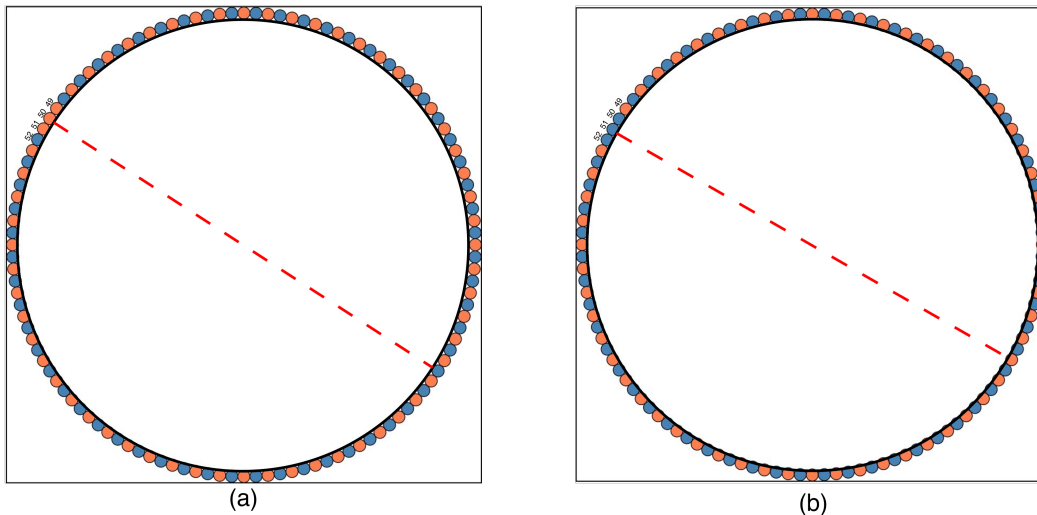


Fig. 10. Arène circulaire présentant un défaut (a) positif à l’emplacement 50, (b) négatif à l’emplacement 51. En rouge, l’axe de symétrie de l’arène circulaire.

sives des brins sont de signes opposés, la présence d’un défaut entraîne une suite de trois charges identiques comme on peut le voir sur la Fig.10. Afin de pouvoir placer un défaut, il faut pouvoir inverser le signe de la charge déjà existante. Pour ce faire, chaque charge a été implémentée avec un signe négatif et le signe de chaque charge a ensuite été corrigé en lui mettant un exposant pair ou impair. L’exposant choisi correspond au numéro de la charge dans le brin en commençant par un exposant nul pour la première charge. Ainsi, les charges portant un numéro impair sont positives et les charges portant un numéro pair sont négatives. Il suffit dès lors d’incrémenter l’exposant de la charge désirée afin d’en changer le signe. Dans la suite, les défauts seront désignés par un nombre allant de 1 à 120, correspondant au numéro de la charge dont on inverse le signe. Dès lors, un défaut pair représente une charge négative transformée en positive et fait référence à un défaut P. De la même manière, un défaut impair représente une charge positive transformée en négative et fait donc référence à un défaut N. Il est bien entendu possible d’ajouter plusieurs défauts et de créer des codes plus complexes mais une étude plus extensive d’un défaut unique a été privilégiée dans le cadre de ce travail. Les objets permettant de détecter ces défauts seront présentés dans la section suivante.

3.1.2 Particules

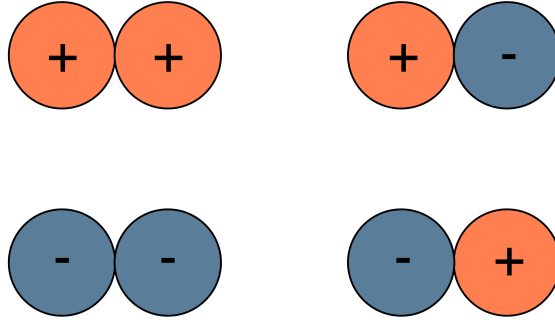


Fig. 11. Les quatre combinaisons possibles pour un code à deux bits.

Afin de réaliser de la reconnaissance de code, nous avons construit le brin d'information contenant un défaut. C'est justement ce défaut que nous cherchons à détecter. Il est important que l'objet construit soit compatible avec n'importe quelle section du brin. En effet, si l'objet a la possibilité de s'assembler avec n'importe quelle section du brin mais privilégie la section contenant le défaut, l'objectif sera atteint. Il faut, pour cela, construire un objet capable de détecter tous les types de codes à deux bits possibles, en supposant que l'assemblage se fasse selon un réseau carré. Il existe quatre combinaisons possibles, voir Fig.11. Il faut donc construire un objet constitué d'au moins quatre faces afin de pouvoir s'assembler à tout type de code possible. L'hexagone de type $(+, +, -, -, +, -)$ ainsi que son symétrique, représentés sur la Fig.12, sont des candidats parfaits. En effet, chaque hexagone possède les faces nécessaires pour s'associer à n'importe quelle combinaison de deux charges capillaires. On peut également construire un carré de type $(-, -, +, +)$. Les deux polygones ont été étudiés dans le cadre de ce travail. Avant de présenter les différents paramètres nécessaires à la simulation de ces objets, il est nécessaire d'analyser les deux chiralités de l'hexagone.

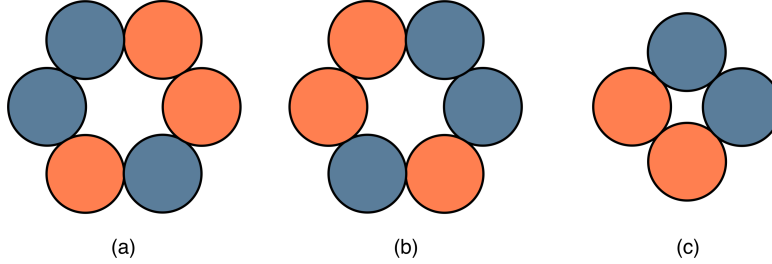


Fig. 12. Objet hexagonal (a) de chiralité droite et (b) de chiralité gauche. (c) Objet carré.

Bien qu'il existe deux chiralités pour l'hexagone, seulement la première (dite droite sur la Fig.12) a été étudiée dans le cas d'une arène capillaire. En effet, une arène, contenant un défaut P ou N, présente une symétrie axiale par rapport à l'axe qui lie le centre de l'arène au défaut, voir Fig.10. Dans ce cas, les deux hexagones, de chiralité droite ou gauche, plongés au centre d'une arène capillaire présentant un défaut, forment deux systèmes complètement symétriques. Nous pouvons suivre le même raisonnement dans le cas d'une arène capillaire neutre. Pour cette arène, chaque axe liant le centre de l'arène à une charge est un axe de symétrie. On peut donc se satisfaire de l'étude d'un seul des deux hexagones lorsqu'on travaille dans une arène capillaire. En ce qui concerne l'objet carré, celui-ci est symétrique. Nous pouvons noter que tous les objets définis ici sont globalement neutres. Ce détail étant éclairci, nous pouvons passer à la présentation des paramètres de ces objets.

Chaque objet défini précédemment sera placé dans un plan, à l'interface entre deux fluides. La position de chaque objet sera donnée par les coordonnées du centre du polygone (X, Y) ainsi que de l'angle α formé entre l'horizontale et la droite liant le centre de l'objet à la première charge. L'ordre des charges, représenté sur la Fig.12 a été choisi de manière arbitraire mais est fixé pour toutes les simulations. Chaque objet est donc défini par une liste ordonnée de charges et par ses coordonnées dans le plan $\vec{r} = (X, Y, \alpha)$. Le système présente donc trois degrés de liberté. Chaque charge i aura donc les

coordonnées suivantes

$$\vec{r}_i = \left(X + R \cos\left(\frac{2i\pi}{N_{sym}} + \alpha\right), Y + R \sin\left(\frac{2i\pi}{N_{sym}} + \alpha\right) \right)$$

où N_{sym} est l'ordre du polygone considéré (6 pour l'hexagone et 4 pour le carré) et R est le rayon du polygone. Ce rayon est donné par $R = \frac{a}{\sin(\pi/N_{sym})}$ avec a le rayon de la charge.

On pourrait envisager la réalisation de tels objets dans un contexte expérimental, par exemple en déformant un disque, en choisissant une géométrie telle que les charges soient respectées. Dans ce cas, l'objet en lui-même aurait une masse qui déformerait la surface. Nous pouvons modéliser cette déformation par une charge globale positive puisque le poids de l'objet a généralement tendance à enfoncer l'objet dans le liquide. Nous pourrions cependant imaginer qu'un tel objet forme une charge globale négative si on le garde en suspension. La charge globale peut donc être vue comme une simple superposition de notre polygone avec une charge centrale. Il s'agira en fait de calculer les interactions entre le brin et l'objet, tout en considérant la charge centrale. La manière dont les interactions ont été calculées sera présentée dans la partie suivante.

3.1.3 Interactions

Afin de conclure la présentation du système étudié, il est intéressant de discuter de l'interaction entre les différents éléments ainsi que de la manière dont ces interactions ont été modélisées.

Le système étant composé de charges capillaires, elles vont interagir selon le potentiel présenté à l'équation (4). Afin de simplifier le problème, nous considérons une énergie adimensionnée. Ainsi, pour les simulations, le potentiel d'interaction entre deux charges i et j est donné par

$$U_{ij} = -q_i q_j K_0 \left(\frac{d_{ij}}{\lambda} \right) \quad (13)$$

où d_{ij} est la distance centre à centre des deux charges. Cette interaction est calculée entre chaque charge du brin d'information et chaque charge de l'objet. L'énergie capillaire du système sera calculée en prenant la somme de tous

ces potentiels. Nous pouvons remarquer que la longueur capillaire présentée dans le chapitre précédent joue un rôle capital dans la valeur de l'énergie du système. Elle aura donc un impact sur le paysage énergétique et sera étudiée par la suite.

Les interactions capillaires ne sont pas les seules interactions présentes dans ce système. Puisque nous considérons que les charges capillaires sont en réalité des billes à l'interface de deux fluides, et ne sont pas des charges ponctuelles, nous devons tenir compte des forces de contact. Ces contacts seront modélisés par un potentiel de sphères dures. Ainsi, à chaque pas, une énergie de contact sera calculée entre les charges de l'objet et tous les autres éléments du système (c'est à dire les charges du brin d'information). Lorsqu'une charge de l'objet se chevauche avec un autre élément du système, le potentiel d'interaction de la charge prend une valeur "infiniment grande" afin d'éviter tout recouvrement.

L'énergie totale du système est dès lors calculée en prenant la somme de toutes les interactions capillaires et de contact. La position de l'objet est alors optimisée afin de minimiser cette énergie totale. Ainsi, le système se retrouve dans sa position d'équilibre. L'algorithme permettant de minimiser l'énergie totale du système sera présenté dans la section suivante.

3.2 Algorithme du recuit simulé

Idéalement, afin de simuler le comportement de notre système, nous devrions opter pour une minimisation du Lagrangien. Cela aurait pour effet de simuler la trajectoire réelle du système. Cependant, cette approche nécessite la connaissance de l'impulsion du système, ce qui a pour effet de complexifier le problème. Nous allons donc nous restreindre à une minimisation du potentiel, qui ne dépend que de la position et de l'orientation de la particule. Il faut cependant noter que la trajectoire obtenue en prenant les positions d'équilibre successives ne représente la trajectoire réelle de l'objet que si on imagine un cas quasi-statique, par exemple en prenant un fluide très visqueux.

Le but est de modéliser un système qui, se trouvant dans un état initial quelconque et soumis à des interactions capillaires, se retrouve au final dans son état de plus basse énergie, c'est à dire à l'équilibre. Il s'agit d'un problème

d'optimisation. L'algorithme du recuit simulé semble convenir parfaitement à cette tâche. En effet, cet algorithme, inspiré de la métallurgie, permet d'atteindre un état d'équilibre du système par un refroidissement progressif. Bien que le principe de base soit le même, il existe une pléthore de versions et de modifications différentes de cet algorithme. Dans le cadre de ce travail, l'algorithme a été adapté et optimisé au système étudié et sera présenté dans le paragraphe suivant.

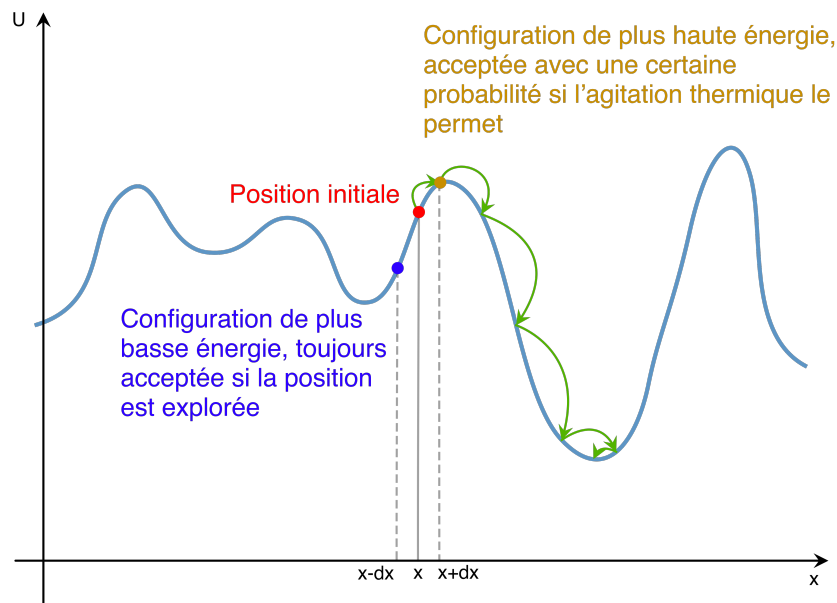


Fig. 13. Illustration de l'algorithme du recuit simulé sur un paysage énergétique présentant plusieurs minima locaux et un minimum global. En rouge : la position initiale, à une énergie initiale U_i . En bleu : une position dont l'énergie U_f est plus petite que U_i , cette configuration a une probabilité égale à 1 d'être choisie si la position $x - dx$ est explorée. En jaune : une position dont l'énergie U_f est plus grande que U_i , si la position $x + dx$ est explorée, la probabilité d'accepter cette configuration décroît lorsque la température décroît. En vert : un chemin possible vers le minimum global.

Afin de mieux présenter la méthode d'optimisation choisie, prenons directement l'exemple du système étudié. Chaque charge de l'objet va interagir avec chaque charge du brin. Le potentiel que va ressentir la particule est un

potentiel très complexe, présentant plusieurs minima. Un exemple à 1 dimension d'un tel paysage énergétique est représenté sur la Fig.13. À chaque étape de l'algorithme, la particule se trouve initialement à une énergie U_i et sera déplacée d'une distance relative aléatoirement petite comprise entre $+\delta$ et $-\delta$ pour chacune de ses coordonnées, elle aura donc une énergie finale notée U_f . Les deux énergies seront ensuite comparées. Là où un algorithme plus simple imposerait le choix de la configuration de plus basse énergie, l'algorithme du recuit simulé tient compte de l'agitation thermique. En effet, à l'étape j , le système se trouvant à température T_j adimensionnelle, l'état de plus haute énergie est choisi si

$$p \geq e^{-\frac{\Delta E}{\Delta U_{moy} T_j}},$$

où p est un nombre aléatoire compris entre 0 et 1, $\Delta U = |U_f - U_i|$ et ΔU_{moy} est la moyenne arithmétique des ΔU recalculée à chaque étape. À chaque itération, la température du système est multipliée par un facteur de refroidissement $c \leq 1$, qui a pour effet de refroidir le système : $T_{j+1} = cT_j$. En d'autres termes, partant d'une température initiale suffisamment élevée, le système optimise son énergie en traversant des barrières de potentiel. Au fur et à mesure, la température du système diminue et la probabilité de franchir les barrières de potentiel devient de plus en plus faible. Cet algorithme est particulièrement adapté aux systèmes dont le paysage énergétique présente de nombreux minima tel que le système étudié ici puisqu'il a été prouvé que cet algorithme converge presque sûrement vers le minimum global de l'espace exploré si celui-ci est fini [39].

Il est important de noter que la température présentée ici ne représente pas la température réelle du système mais plutôt une agitation imposée par l'algorithme qui s'estompe au fur et à mesure par rapport au potentiel dans lequel est plongée la particule. En effet, puisque, initialement, le système se trouve à haute "température", il a une probabilité plus importante de franchir les barrières de potentiel. Aussi, puisque la direction de déplacement à chaque étape est choisie aléatoirement, le mouvement initial du système ressemble à un mouvement Brownien. À l'étape j , la température est donnée par $T_j = c^j T_i$, la décroissance est donc exponentielle. En imaginant que la température resterait constante, nous pouvons, à chaque étape, définir le déplacement quadratique moyen qu'aurait la particule au cours du temps. Dans notre cas, chaque pas de temps est unitaire. Ainsi, à chaque étape, nous pouvons définir un *rayon de diffusion* qui représentera le déplacement

quadratique moyen que ferait la particule après un pas de temps. Puisque le déplacement quadratique moyen est proportionnel au coefficient de diffusion, il est proportionnel à la température, le rayon de diffusion décroît donc également de manière exponentielle au cours de la simulation. Notons qu'il ne s'agit pas d'un mouvement Brownien à proprement parler puisque les accroissements (représentés ici par le rayon de diffusion) de la série temporelle sont indépendants mais pas stationnaires et le déplacement aléatoire relatif $\pm\delta$ de chaque coordonnée suit une loi uniforme sur $[-0.0005, 0.0005]$ et non une loi normale.

Dans le cadre de ce travail, les différents paramètres de simulation ont été adaptés afin d'optimiser le temps de calcul, la précision ainsi que l'exactitude de l'état final par rapport au défaut. En effet chaque paramètre a son influence sur le déroulement des simulations. Il est donc important de comprendre l'effet de chaque paramètre afin de l'ajuster au mieux au système étudié. Les différents paramètres présents sont :

1. **Le facteur de refroidissement c** est le paramètre qui, comme son nom l'indique, influence la vitesse de refroidissement du système. Plus ce facteur sera proche de 1, plus le refroidissement sera lent et plus le rayon de diffusion va décroître lentement, la particule va avancer plus vite. Cela va permettre une convergence plus rapide. Plus ce facteur sera proche de 0, plus le système se refroidit rapidement, plus le rayon de diffusion va décroître rapidement et plus le système sera précis en terme de minimisation du potentiel. Une valeur de $c = 0.99$ a été choisie ici puisque la motivation finale (c'est à dire la reconnaissance de code) ne nécessite pas autant de précision que d'exactitude : on veut que le système explore une multitude de configurations pour trouver le défaut et aller s'y coller, peu importe la manière dont il s'y colle.
2. **La température initiale T_i** est une grandeur qui prend toute son importance lorsque le facteur de refroidissement est proche de 1. En effet, vu la décroissance exponentielle, peu importe la température initiale, celle-ci va décroître extrêmement vite lorsque c n'est pas suffisamment proche de 1. Cette température fixe l'amplitude initiale du rayon de diffusion. Une température initiale trop importante, couplée à un refroidissement trop lent (c'est à dire c proche de 1) donnent lieu à une "agitation thermique" qui l'emporte sur le potentiel dans lequel est plongée la particule. L'algorithme met alors plus de temps

à converger vers un minimum. Au contraire, une température initiale trop petite empêche le système de franchir des barrières de potentiel et demande un nombre important d'itérations pour trouver une configuration voisine qui minimise en effet l'énergie. Suite à de nombreux tests, une valeur de $T_i = 100$ a été choisie.

3. **Le temps de simulation** est aussi un paramètre de l'algorithme. Celui-ci peut soit être mesuré en secondes ou en nombre d'itérations maximales. L'optimisation de l'énergie du système se déroule en trois phases. La première consiste en un mouvement Brownien, lorsque l'agitation thermique imposée par l'algorithme l'emporte sur le potentiel attractif ou répulsif auquel est soumise la particule. Cette phase permet au système d'explorer différents états et différentes configurations et garantit une certaine exactitude. La durée de cette phase dépend des deux paramètres présentés ci-dessus. La seconde phase est la phase de minimisation de l'énergie, elle débute une fois que la température de simulation est suffisamment faible. Cette phase augmente la précision ainsi que l'exactitude de l'état final. Comme pour la première phase, sa durée dépend des deux paramètres présentés ci-dessus mais aussi des différents paramètres intervenant dans le potentiel d'interaction. Par exemple, une longueur capillaire petite tend à réduire globalement la valeur du potentiel comme expliqué dans le chapitre précédent. Il en découle donc que ces deux premières phases demandent plus de temps de calcul. Au contraire, lorsque la longueur capillaire est grande, le temps de calcul de ces deux premières phases est réduit. Enfin, la dernière phase débute lorsque l'agitation thermique de l'algorithme est quasiment nulle. Le système évolue alors au ralenti pour descendre lentement dans le fin fond du puits de potentiel dans lequel il se trouve, comme s'il était congelé. Il s'agit d'une phase d'ajustement de précision de l'état final et peut nécessiter un temps presque infini. Au total, le temps de simulation a été adapté manuellement en fonction des paramètres du système afin de garantir l'arrivée en phase 3. Le temps de calcul typique allait de 20 à 300 secondes de simulation et le nombre d'itérations était de l'ordre de 10^6 .

Ces différents paramètres ont été adaptés et choisis de manière empirique. Les deux premiers paramètres ont alors été fixés afin de garder une certaine cohérence lors des différentes simulations. La convergence était alors à chaque fois atteinte en adaptant le temps de simulation.

3.3 Résultats

Le système ainsi que la manière dont il est modélisé ayants été définis, nous pouvons analyser les résultats des simulations.

3.3.1 Arène circulaire neutre

Avant de passer à l'étude de la détection de code capillaire créé par un défaut, il est essentiel d'étudier le comportement du système en absence de défaut. Pour cela, le système composé d'un objet hexagonal a été simulé pour des valeurs de λ allant de 0.2 mm à 1.1 mm , par pas de 0.1 mm . Rappelons que ces valeurs ne prennent de sens que lorsqu'elles sont comparées à la taille du système comme expliqué dans la section précédente. Afin de réaliser une étude statistique, l'expérience a été répétée 10 fois pour chaque longueur capillaire. La durée de chaque simulation était fixée à 120 secondes.

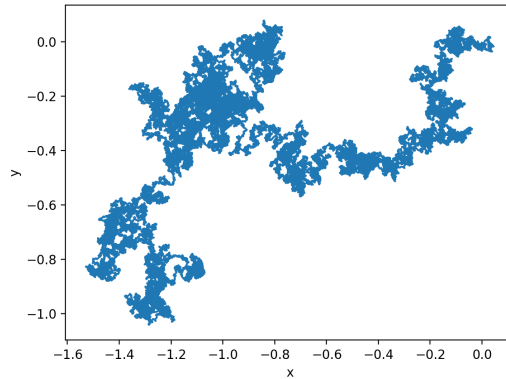


Fig. 14. Trajectoire d'une particule hexagonale dans une arène neutre, avec $\lambda = 1.1\text{ mm}$.

La figure Fig.14 montre la trajectoire d'une particule hexagonale lorsque $\lambda = 1.1\text{ mm}$ pour l'un des 10 essais. Nous pouvons voir que cette trajectoire ressemble à un mouvement Brownien. Afin de s'en convaincre, il serait intéressant d'étudier le déplacement quadratique moyen, donné par la formule

suivante :

$$\langle d^2(t) \rangle = 4\mathcal{D}t \quad (14)$$

où \mathcal{D} est le coefficient de diffusion et t le temps. Ici, nous allons nous intéresser au caractère linéaire de ce déplacement quadratique moyen, en négligeant les préfacteurs. De plus, il est nécessaire de remarquer que dans notre cas, le temps est discret et représente les étapes successives de la simulation. Ainsi, en commençant par $t = 1$, on calcule le déplacement quadratique $d^2(t)$ fait entre t étapes successives. On en prend la moyenne sur toute la longueur de simulation. Ainsi, en faisant varier le pas t , on obtient les courbes représentées sur la figure Fig.15, où les différentes courbes représentent les 10 expériences réalisées dans les mêmes conditions.

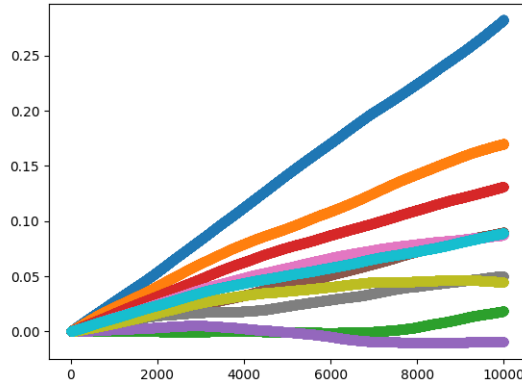


Fig. 15. Déplacement quadratique moyen calculé pour 10 trajectoires réalisées dans les mêmes conditions, avec $\lambda = 1.1 \text{ mm}$.

La tendance linéaire qu'ont les courbes de la figure Fig.15 montre clairement le caractère diffusif du système lorsque le brin est neutre. Notons que les pentes différentes sont dues à des fluctuations statistiques pouvant être causées par la nature aléatoire de l'algorithme. Pour chaque pas t , nous allons donc considérer la valeur moyenne du déplacement quadratique moyen, sur les 10 expériences. Ainsi, pour un pas de temps fixé, nous pouvons étudier l'influence de la longueur capillaire λ sur le comportement du système.

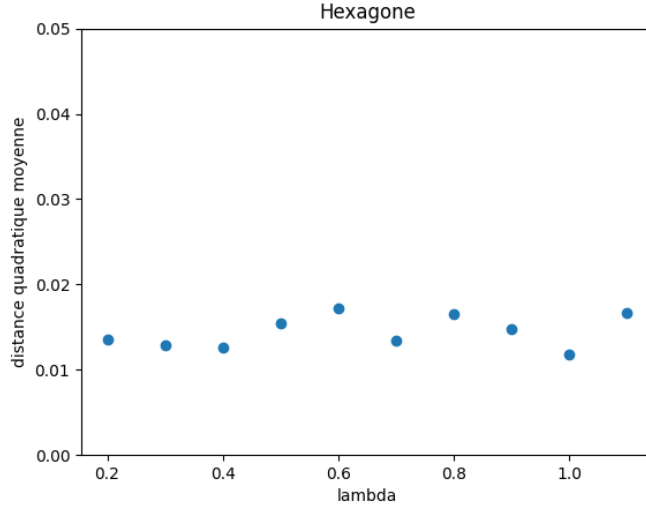


Fig. 16. Moyenne statistique du déplacement quadratique moyen pour $t = 1000$, en fonction de la longueur capillaire λ .

Ces effets sont représentés sur la figure Fig.16. Bien que les fluctuations statistiques soient importantes, la longueur capillaire ne semble avoir aucune influence significative sur le comportement de la particule hexagonale. Ce résultat justifie l’hypothèse de neutralité de l’arène circulaire. En effet, si l’arène interagissait d’une quelconque manière avec la particule, l’intensité de l’interaction serait proportionnelle à la longueur capillaire, vu l’équation (13). Des résultats similaires sont obtenus pour l’objet carré.

Ces résultats ne sont en rien surprenants. En effet, si on place une charge capillaire au centre d’une telle arène, on s’attend à ce que toutes les forces subies dans chaque direction s’annulent. De plus, dans notre cas, l’objet qu’on place au centre a une charge globale neutre. On peut dès lors faire l’approximation qu’à longue portée, l’objet perçoit un champ moyen nul. Nous pouvons, encore une fois, faire le rapprochement avec l’électromagnétisme et la loi de Gauss qui implique que le champ électrique à l’intérieur d’une sphère chargée en surface est nul. L’arène circulaire constituée de 120 charges + et – successives étant donc neutre, nous pouvons poursuivre l’étude du système en y ajoutant des défauts.

3.3.2 Reconnaissance de code

Maintenant que le comportement du système a été déterminé dans le cas d'une arène neutre, nous pouvons explorer les possibilités que nous offrent les défauts. Dans la suite de cette section, nous étudierons le comportement du système lorsqu'on place un défaut sur l'arène neutre, tel que décrit précédemment.

Un total de 1200 simulations ont été réalisées afin d'étudier le système. En effet, chaque défaut a été considéré de manière isolée pour des valeurs de longueur capillaire allant de 0.2 mm à 1.1 mm , par pas de 0.1 mm . Pour chaque simulation, à chaque pas, la position et l'angle de la particule, l'énergie totale du système ainsi que la position du défaut ont été enregistrés. Ce qui nous permet d'observer la trajectoire et l'orientation de l'objet, l'évolution de l'énergie du système ainsi que la distance au défaut au cours de la simulation. La distance est ici mesurée entre la position du défaut et le centre de l'objet.

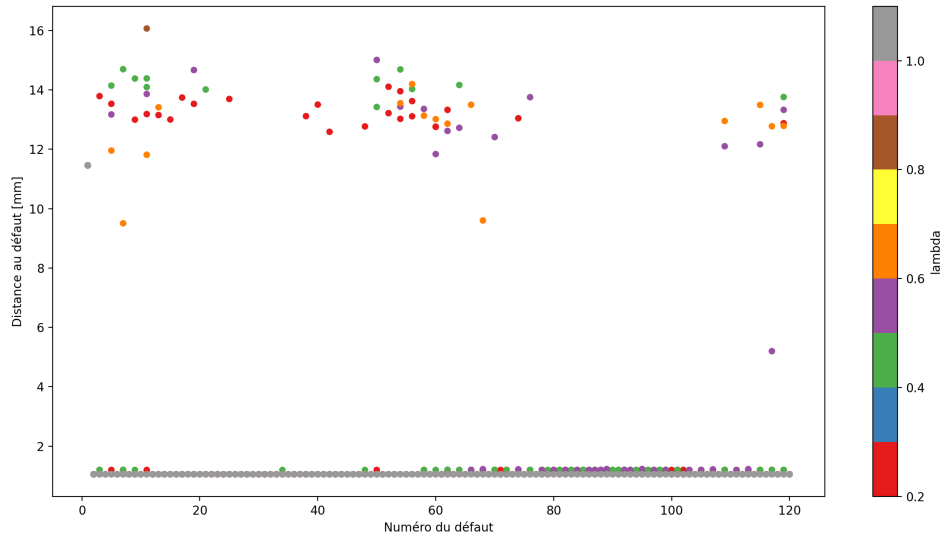
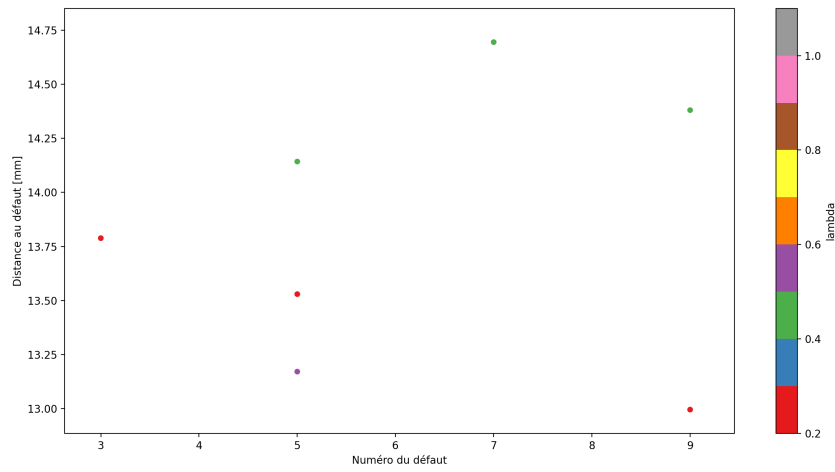


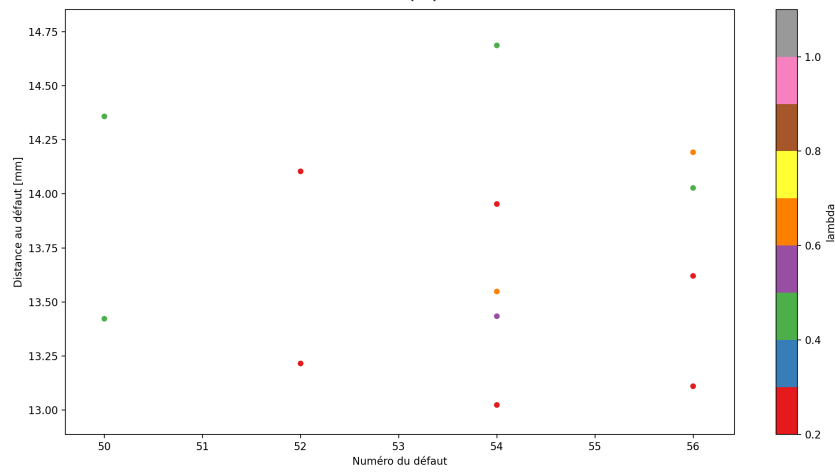
Fig. 17. Résultat des simulations. Chaque point représente la distance finale au défaut pour différentes valeurs de longueur capillaire λ . On distingue trois zones de points. Les deux premières sont les nuages de points à grande distance du défaut. La troisième est celle des points proches du défaut.

Les résultats des simulations sont présentées sur la Fig.17. Chaque point correspond à la configuration finale d'une simulation. Le graphique montre donc la distance finale au défaut de chaque simulation, pour tous les défauts possibles. La longueur capillaire est donnée par la couleur du point. Nous pouvons remarquer la présence de trois zones de points sur le graphique. Deux de ces zones sont données par des nuages de points dont la distance finale au défaut est importante. La troisième zone de points étant celle dont la distance finale au défaut est relativement petite. Analysons les trois zones.

Tout d'abord, en zoomant sur la première zone, voir Fig.18a, nous pouvons remarquer que celle-ci contient des points uniquement pour des défauts impairs. Ce sont donc des défauts N. Nous pouvons également remarquer, par la couleur des points, que ceux-ci correspondent à des valeurs de longueur capillaire relativement faibles. À noter que cette première zone est définie pour des défauts allant de 1 à 25 environs et de 105 à 120. Remarquons qu'il est possible de voir cette situation sous deux points de vue différents. Le premier point de vue est celui où nous plaçons l'hexagone dans une position initiale fixée pour chaque simulation et le numéro du défaut correspond à la place du défaut dans l'arène. Pour mieux comprendre les choses, nous pouvons adopter un second point de vue. Celui-ci consiste à placer le défaut, P ou N, à un endroit fixe et de changer l'orientation initiale de l'hexagone. Le numéro du défaut donne alors, si on le multiplie par trois, l'angle initial de l'hexagone en degrés. Ainsi, on se rend compte, vu la distance finale aux défauts, que cette zone représente une interaction quasi nulle, voir légèrement répulsive, pour des angles allant de -45° à 75° avec des défauts N, lorsque la longueur capillaire est faible. En analysant les détails de la seconde zone, voir Fig.18b, nous remarquons que la situation est semblable à celle de la première zone, si ce n'est que les défauts sont pairs, ce qui représente des défauts P pour des angles allant de 105° à 225° environs, encore une fois pour des longueurs capillaires faibles. Pour comprendre ce résultat, il suffit de se rendre compte que ces deux zones représentent les cas où les doublets de charges de l'hexagone sont initialement orientés vers un défaut de signe opposé, voir Fig.19.



(a)



(b)

Fig. 18. (a) Zoom sur la première zone de points de la Fig.17. On voit que les points éloignés du défaut ne sont présents que pour des défauts impairs. (b) Zoom sur la seconde zone de points de la Fig.17. On voit que les points éloignés du défaut ne sont présents que pour des défauts pairs.

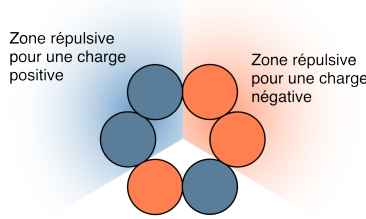


Fig. 19. Représentation de la particule hexagonale. La zone orange représente la zone répulsive pour des charges négatives et la zone bleue représente la zone répulsive pour des charges positives.

En ce qui concerne la troisième zone, il s'agit des points dont la distance finale au défaut est faible. Cela signifie que l'objectif de détection est atteint pour ces simulations. Cependant, nous pouvons noter que dans certains cas, la distance au défaut est légèrement plus importante, voir Fig.20. Il est important de remarquer que la seconde ligne de points, ceux dont la distance finale au défaut est plus importante, est uniquement composée de points dont la longueur capillaire est faible. Afin de comprendre cette observation, il est utile d'étudier plus en détail le déroulement des différentes simulations. Prenons l'exemple du défaut n° 93 et regardons ce qu'il se passe pour des valeurs de $\lambda = 0.4\text{ mm}$ et $\lambda = 0.9\text{ mm}$. Pour bien comprendre le système, nous pouvons nous restreindre à l'étude de la distance au défaut, de l'orientation ainsi que de l'énergie du système au cours de la simulation. Les résultats sont représentés sur la Fig.21. Nous observons que dans les deux cas, l'évolution du système est différente. En effet, dans le cas où $\lambda = 0.9\text{ mm}$, l'hexagone voit son angle changer de manière significative alors que cette réorientation est clairement moins marquée dans le cas où $\lambda = 0.4\text{ mm}$. De plus, on observe que l'énergie finale du système est bien plus importante dans le cas d'une longueur capillaire plus grande. Enfin, la différence de distance finale au défaut, bien que très faible, trouve sa justification lorsqu'on observe la configuration de l'état final, voir Fig.22. On comprend non seulement la différence d'angle mais aussi la distance au défaut plus importante lorsque la longueur capillaire est plus faible.

Les résultats présentés ci-dessus, ainsi que leurs implications, seront discutés dans la section suivante.

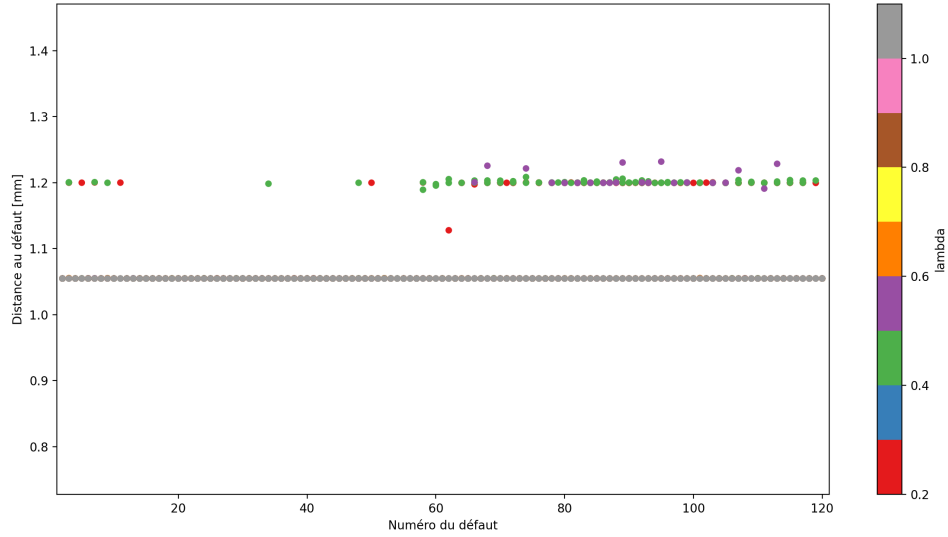


Fig. 20. Zoom sur la troisième zone de points de la Fig.17. On voit que les points proches du défaut peuvent se situer à deux distances légèrement différents, ce qui semble indiquer l'existence de plusieurs configurations finales.

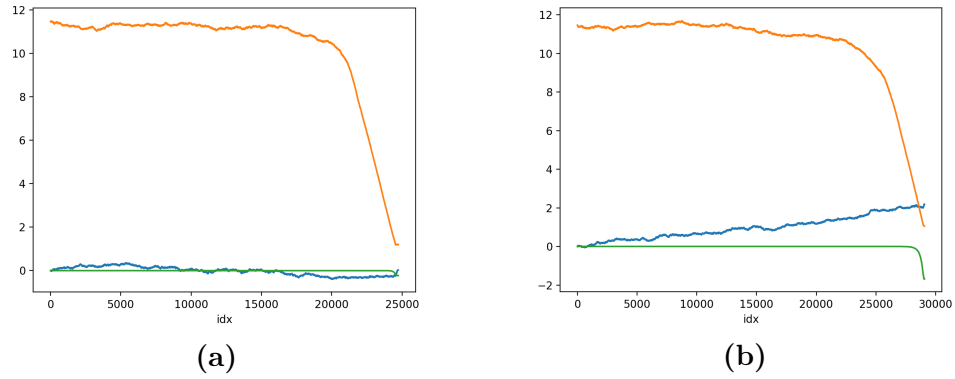


Fig. 21. Représentation de l'orientation en radians de la particule hexagonale (bleu), de la distance au défaut (orange) et de l'énergie totale du système (vert) au cours de la simulation. (a) Simulation pour le 93^e défaut et $\lambda = 0.4 \text{ mm}$. (b) Simulation pour le 93^e défaut et $\lambda = 0.9 \text{ mm}$.

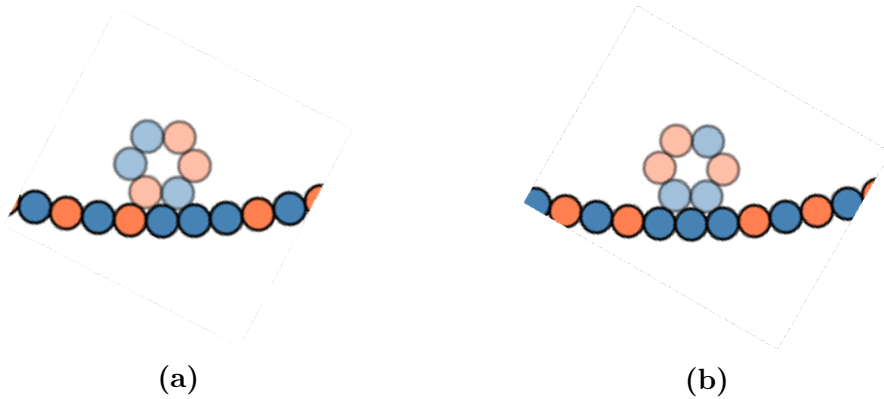


Fig. 22. Configurations finale pour les simulations représentées sur les figures (a) Fig.21a et (b) Fig.21b. On voit que l'orientation et la distance au défaut est différente dans les deux cas.

3.4 Discussion

Au vu des résultats obtenus dans la section précédente, nous constatons que le système peut se comporter de trois manières différentes. Dans le cas où la longueur capillaire est grande par rapport à la taille du système, l'objet s'oriente et se déplace afin de venir se coller au défaut. En d'autres termes, l'objet peut servir à faire de la reconnaissance de code. Dans le cas où la longueur capillaire est relativement faible par rapport à la taille du système, la réorientation semble être beaucoup moins présente. En effet, si l'orientation initiale n'est pas défavorable, l'objet a quand-même tendance à venir se coller au défaut sans se réorienter. Lorsque l'orientation initiale est défavorable, c'est à dire si le défaut fait face au doublet de charges de signe opposé au défaut, les interactions semblent être presque totalement négligeables.

Dans le cas d'une longueur capillaire faible, lorsque l'objet ne s'oriente pas mais vient se coller au défaut on observe une configuration qui semble contre-intuitive. En effet, ce n'est pas la configuration qui minimise au plus l'énergie du système. Il serait raisonnable de penser qu'il s'agit d'un état métastable. Une manière de vérifier cette hypothèse et de retomber dans l'état fondamental du système est de pratiquer le quenching. Il s'agit d'une technique qui vise à ajouter des perturbations dans le système afin de se débarrasser de toutes métastabilités. Cette technique a été implémentée dans le cadre de ce travail, en réalisant plusieurs recuits simulés successifs, en redémarrant à

une température un peu plus importante. On pourrait ainsi espérer pouvoir décoller l'objet du défaut et lui fournir assez d'énergie pour qu'il puisse se réorienter. L'efficacité de cette technique n'a été observée que pour des objets carrés, au bout de 5 cycles de recuit simulé. C'est là la seule différence de résultat entre l'hexagone et le carré. Pour l'hexagone, malgré un grand nombre de cycles, le quenching ne semble pas fonctionner et le système reste piégé dans l'état métastable.

Les simulations mettent donc en évidence la possibilité de faire de la reconnaissance de code capillaire lorsqu'on introduit un seul défaut dans l'arène, à condition d'avoir un système suffisamment petit par rapport à la longueur capillaire. Afin d'anticiper la suite logique de ce travail, des essais ont été réalisés avec des codes capillaires un peu plus complexes. Ainsi, il a été observé de manière qualitative que la présence de plusieurs défauts successifs donne lieu à un comportement de reconnaissance plus stable. C'est à dire observé pour toutes les valeurs de longueur capillaires testées. Ces observations, bien que prometteuses, méritent de plus amples investigations.

Les différents résultats obtenus dans ce chapitre montrent des comportements intéressants et nécessitent une étude plus approfondie. En effet, les simulations permettent de décrire le comportement du système étudié mais ne sont pas suffisantes à la compréhension des différentes dynamiques qui entrent en jeu. Dès lors, le chapitre suivant sera consacré à une étude théorique du système. La métastabilité ainsi que les effets d'orientation y seront mis en avant.

4 Développements théoriques

Ce chapitre vise à interpréter les résultats obtenus dans le chapitre précédent, cette fois à l'aide d'une approche analytique. Tout d'abord, nous allons tester l'hypothèse de la métastabilité. Ensuite nous discuterons des effets d'orientation en considérant notre hexagone comme un quadrupôle.

4.1 Métastabilité

Dans le chapitre précédent, nous avons obtenu deux configurations possibles pour l'état final lorsque la particule hexagonale atteint le défaut, comme représenté sur la Fig.22. L'énergie du système pour les deux configurations n'étant pas la même, la présence de la configuration de plus haute énergie semble indiquer la présence de métastabilité. Afin de vérifier s'il peut effectivement s'agir de métastabilité, nous considérons le segment de brin contenant un défaut N comme étant linéaire et de taille restreinte à neuf charges. Le cas où le défaut est positif est symétrique.

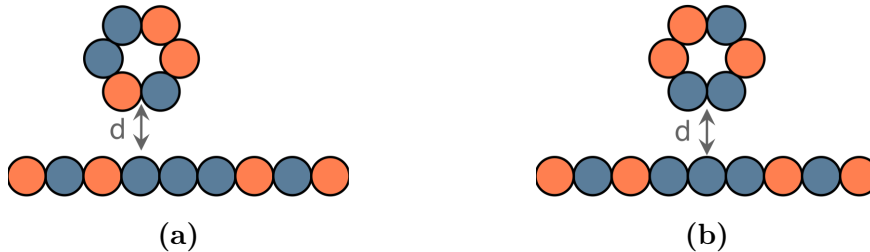


Fig. 23. Système étudié pour les configurations (a) A et (b) B. Dans les deux cas, l'abscisse de la particule et son orientation sont fixées, d est la distance entre la particule hexagonale et le brin contenant le défaut.

Afin de comparer les deux situations, le système est étudié en fixant l'orientation et la position de la particule par rapport au défaut tels qu'observés dans les configurations A et B. On décolle ensuite la particule afin d'analyser le paysage énergétique des deux configurations et en fonction de la longueur capillaire, voir Fig.23. L'énergie du système est calculée en considérant les interactions entre chaque charge du brin et chaque charge de l'hexagone, selon l'équation (13).

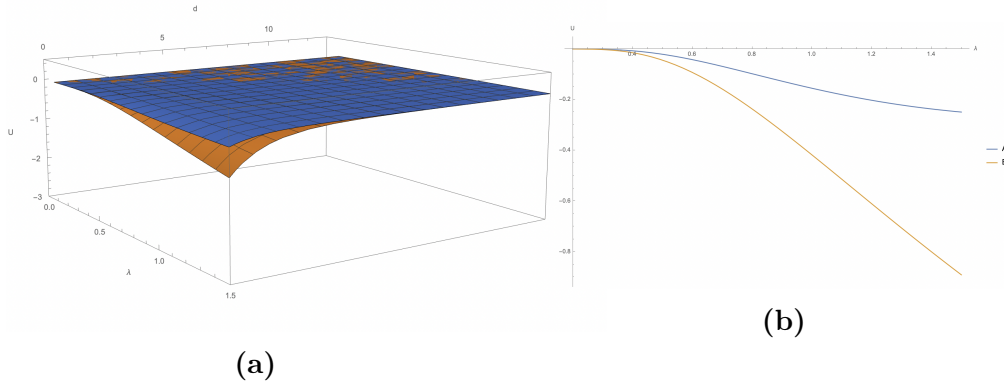


Fig. 24. (a) Paysage énergétique des deux configurations en fonction de la longueur capillaire λ et de la distance au brin. (b) Coupe dans le premier graphique avec $d = 0$. Les courbes bleues représentent le cas A et les courbes oranges représentent le cas B.

Les résultats sont représentés sur la Fig.24. On voit que pour des valeurs de longueur capillaire relativement grandes, il y a un détachement plus important de l'énergie des deux configurations. Cela signifie que pour des longueurs capillaires grandes par rapport à la taille du système, on aurait plus facilement tendance à retomber à une énergie plus basse. Ce résultat colle aux simulations puisque pour $\lambda \geq 0.6$ on n'observe que la configuration B. Pour des longueurs capillaires plus petites, on voit que la différence d'énergie entre les deux configurations n'est pas aussi marquée. De plus, on peut voir dans ce cas qu'à grande distance, l'énergie est sensiblement la même pour les deux configurations. Il est donc possible d'observer les deux états, comme montré par les simulations numériques. Il s'agit donc bien de métastabilité.

4.2 Effets d'orientation

Étudions dès à présent les effets d'orientation de la particule par rapport au défaut. Pour ce faire, inspirons nous des développements multipolaires capillaires réalisés plus tôt. Tout d'abord, remarquons que l'arène circulaire présentant un défaut peut être vue comme la superposition d'une arène neutre avec une charge double. Puisqu'on a montré au chapitre précédent qu'une

telle arène neutre n'interagit pas avec la particule, nous pouvons la négliger et considérer seulement la double charge. Ensuite, la particule hexagonale étudiée précédemment peut être vue comme un quadrupôle asymétrique. Le système considéré ici est représenté sur la Fig.25.

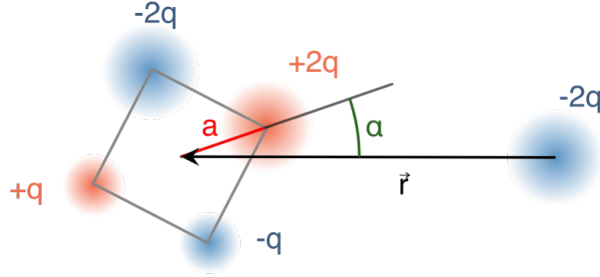


Fig. 25. Quadrupôle de taille a , représentant la particule hexagonale, interagissant avec une charge située à distance r . L'orientation du quadrupôle par rapport à la charge est donné par α .

En reprenant les notations utilisées dans le développement multipolaire, le potentiel d'interaction du système est donné par

$$\begin{aligned}
 U(\vec{r}) = -4\pi\gamma q^2 \left[\right. & - 2K_0 \left(\frac{r}{\lambda} \sqrt{1 - 2 \cos \alpha x + x^2} \right) \\
 & - K_0 \left(\frac{r}{\lambda} \sqrt{1 + 2 \cos \alpha x + x^2} \right) \\
 & + K_0 \left(\frac{r}{\lambda} \sqrt{1 - 2 \sin \alpha x + x^2} \right) \\
 & \left. + 2K_0 \left(\frac{r}{\lambda} \sqrt{1 + 2 \sin \alpha x + x^2} \right) \right] \quad (15)
 \end{aligned}$$

où r est la distance entre le défaut et le quadrupôle, α est l'orientation du quadrupôle par rapport au défaut et $x = a/r$, a étant la taille du quadrupôle. En reprenant l'expression (8), lorsque la distance entre le quadrupôle et la double charge est suffisamment grande, nous obtenons l'approximation au

second ordre suivante

$$\begin{aligned}
U \approx & 4\pi\gamma q^2 r \frac{x}{\lambda} K_1\left(\frac{r}{\lambda}\right) (\cos \alpha + \sin \alpha) \\
& - 6\pi\gamma q^2 \frac{x^2}{\lambda^2} \left[-\cos^2 \alpha r^2 K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) + \sin^2 \alpha r^2 K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) \right. \\
& \left. - 2\cos^2 \alpha \lambda r K_1\left(\frac{r}{\lambda}\right) + 2\sin^2 \alpha \lambda r K_1\left(\frac{r}{\lambda}\right) \right] + \dots
\end{aligned} \tag{16}$$

que nous pouvons réécrire sous la forme suivante en remplaçant x par a/r

$$\begin{aligned}
U \approx & 2\pi\gamma q^2 \frac{a}{\lambda} \left[2K_1\left(\frac{r}{\lambda}\right) (\cos \alpha + \sin \alpha) \right. \\
& + 3\frac{a}{\lambda} K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) \\
& \left. + 6aK_1\left(\frac{r}{\lambda}\right) (\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) \right] + \dots \\
\approx & 2\pi\gamma q^2 \frac{a}{\lambda} [*] + \dots
\end{aligned} \tag{17}$$

et puisque nous avons $(\cos^2 \alpha - \sin^2 \alpha) = (2\cos^2 \alpha - 1)$, le terme $(*)$ nous donne

$$\begin{aligned}
(*) & = 2K_1\left(\frac{r}{\lambda}\right) (\cos \alpha + \sin \alpha) + 3a (2\cos^2 \alpha - 1) \left[\frac{1}{\lambda} K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) + 2K_1\left(\frac{r}{\lambda}\right) \right] \\
& = 2K_1\left(\frac{r}{\lambda}\right) (\cos \alpha + \sin \alpha) + 6a \cos^2 \alpha \left[\frac{1}{\lambda} K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) + 2K_1\left(\frac{r}{\lambda}\right) \right] \\
& \quad - 3a \left[\frac{1}{\lambda} K_0\left(\frac{r}{\lambda}\right) + 2K_1\left(\frac{r}{\lambda}\right) \right].
\end{aligned} \tag{18}$$

Les deux premiers termes de cette expression sont des termes d'orientation puisqu'ils dépendent de l'angle α de la particule par rapport au défaut. Ces termes peuvent être attractifs ou répulsifs. Le troisième terme est un terme purement attractif qui ne dépend pas de l'angle. De manière générale, la fonction de Bessel modifiée de seconde espèce à l'ordre 1 prend des valeurs plus grandes que celle à l'ordre 0. Ainsi, pour des longueurs capillaires

suffisamment grandes par rapport à la taille du système (typiquement a), le premier terme l'emporte sur les deux autres. Ce qui signifie que pour minimiser son potentiel, le système a tout intérêt à se réorienter. Cependant, si la longueur capillaire devient suffisamment petite par rapport à la taille du système et sous certaines conditions d'orientation, le terme purement attractif l'emporte sur les deux autres. Cela veut dire que le système aura plus tendance à se rapprocher du défaut sans forcément se réorienter. Ce qui explique le comportement observé lors des simulations numériques.

Enfin, nous pouvons également comprendre le comportement des particules en analysant le paysage énergétique dans le cas des approximations réalisées ci-dessus. Le résultat est donné sur la Fig.26. L'énergie du système est représentée en couleur en fonction de l'orientation et de la distance au défaut. Il est important de noter que les angles représentés ici en radians ne sont pas les vrais angles qu'on aurait pour la particule hexagonale puisqu'on a considéré un quadrupôle non symétrique par rapport aux charges mais symétrique par rapport à sa géométrie. Si nous voulions rester fidèle à la réalité, le quadrupôle devrait être légèrement aplati, ce qui rendrait les calculs beaucoup plus complexes.

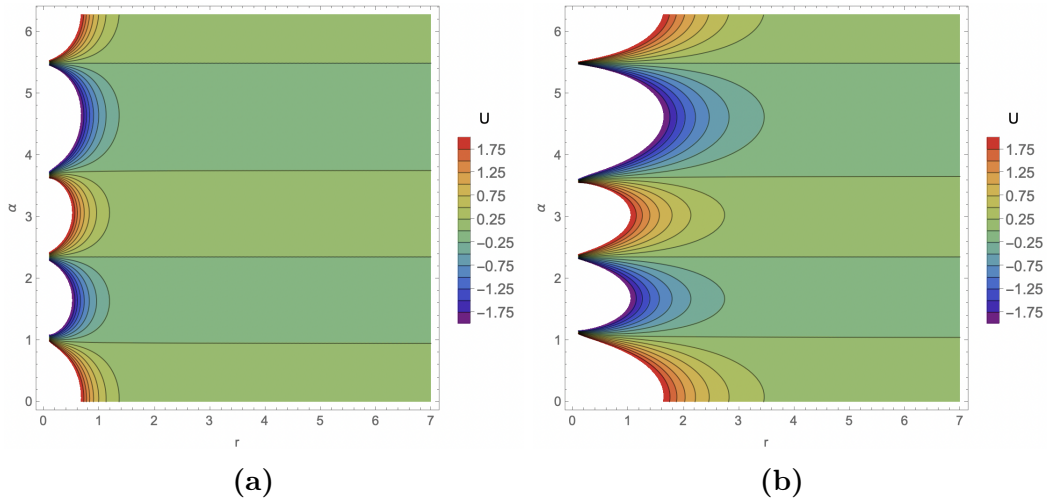


Fig. 26. Paysage énergétique de l'interaction entre un quadrupôle asymétrique et une charge, en fonction de l'interdistance r et de l'orientation α du quadrupôle. Cas où (a) $\lambda = 0.4 \text{ mm}$ et (b) $\lambda = 1.1 \text{ mm}$.

Imaginons qu'on se place à une distance de 6 mm du défaut, dans la région proche des 0° . Dans le cas de la petite longueur capillaire, on remarque que la pente est très faible alors que pour la longueur capillaire plus élevée, on remarque que la pente est bien plus importante. Ainsi, dans le cas où $\lambda = 1.1\text{ mm}$, le système aura tendance à se réorienter et se rapprocher du défaut alors que ce n'est pas forcément le cas lorsque $\lambda = 0.4\text{ mm}$.

5 Conclusion et perspectives

L'objectif principal de ce travail était de réaliser de la reconnaissance de code en exploitant les auto-assemblages capillaires. Ce but a été atteint en réalisant des simulations numériques d'un système composé d'une arène capillaire neutre dans laquelle on a introduit un défaut. On a ensuite placé une particule hexagonale assimilable à un quadrupôle capillaire au centre de l'arène. L'étude numérique a montré qu'en fonction du rapport entre la taille du système et la longueur capillaire, on observe des comportements différents.

Lorsque la taille du système est petite par rapport à la longueur capillaire, il a été montré que la particule s'oriente vers le défaut et s'en rapproche jusqu'à s'y coller. Il s'agit de la configuration la plus stable possible pour un tel système. Lorsque la taille de la particule est relativement grande par rapport à la longueur capillaire, il a été remarqué que les effets d'orientation sont fortement atténués. Dès lors, en fonction de l'orientation initiale de la particule, il est possible de faire de la détection de code, donnant parfois lieu à un état métastable. Cependant, dans le cas où l'orientation initiale n'est pas favorable, les interactions semblent trop faibles que pour donner lieu à de la reconnaissance de code. Tous ces résultats sont étayés par des développements théoriques.

Différentes architectures pour le système ont été testées. D'une part, un brin linéaire a été implémenté mais les effets de bords induits par celui-ci donnent lieu à un trop grand nombre d'états métastables, ce qui complexifie grandement la tâche. D'autre part, différentes géométries de particules ont été testées, donnant lieu à des observations globalement similaires. La seule différence étant que la particule carrée, assimilable à un dipôle capillaire, a montré une sensibilité au quenching (méthode qui vise à retomber dans l'état fondamental à partir d'un état métastable). Enfin, afin d'anticiper une étude ultérieure plus approfondie, un code capillaire plus complexe a été testé. Cela a été fait en insérant plusieurs défauts successifs dans le système. Bien qu'un code capillaire plus complexe donnerait intuitivement lieu à un comportement plus complexe, l'inverse a été observé. En effet, tous les tests effectués ont donné lieu à un même résultat final, peu importe les conditions initiales et la taille du système. Cette piste nécessite cependant une étude plus poussée.

De nombreuses autres pistes et idées ont été envisagées mais n'ont malheureusement pas vu le jour. Par exemple, nous aurions pu explorer d'autres géométries pour le brin d'information capillaire ainsi que pour la particule. Nous aurions également pu introduire plusieurs particules n'interagissant pas entre elles, afin de s'assembler à plusieurs défauts dans l'arène. Il aurait également été intéressant de considérer des interactions magnéto-capillaires à la place des charges capillaires. Il aurait ainsi été possible de réaliser quatre types de charges puisqu'à chacune des deux charges capillaires, nous aurions pu associer deux moments magnétiques. Cela aurait formé des charges $((+ \uparrow), (+ \downarrow), (- \uparrow), (- \downarrow))$ qui ne sont attractives que par paires de même signe capillaire et de moment magnétique opposé. Ce mécanisme serait alors un système non plus binaire mais quaternaire, comme pour les nucléotides A, C, G et T du code génétique.

Un tel rapprochement avec la biologie donne lieu à des perspectives futures plus que ambitieuses. En effet, à partir d'un code quaternaire, il serait éventuellement possible de modéliser un système imitant la réplication et la transcription de l'ADN. Une telle construction en laboratoire permettrait peut-être même de créer des analogues de processus du vivant.

Références

- [1] T.Vicsek, *A question of scale*, Nature. 411, 421, (2001).
- [2] V.Lecheval, C.Sire et G.Theraulaz, *La danse organisée des bancs de poissons*, La Recherche. 537-538, 40-45, (2018).
- [3] G.M.Whitesides et B.Grzybowski, *Self-Assembly at All Scales*, Science. 295, 2418-2421, (2002).
- [4] S.Zhang, *Emerging biological materials through molecular self-assembly*, Biotechnology Advances. 20, 321 - 339, (2002).
- [5] T.Yao, N.G. Chisholm, E.B. Steager, et K.J. Stebe, *Directed assembly and micro-manipulation of passive particles at fluid interfaces via capillarity using a magnetic micro-robot*, Applied Physics Letters. 116, 043702, (2020).
- [6] R.R.A.Syms, E.M.Yeatman, V.M.Bright et G.M.Whitesides, *Surface tension-powered self-assembly of microstructures - the state-of-the-art*, Journal of Microelectromechanical Systems. 12, 387-417, (2003).
- [7] S.Roh, L.B.Okello, N.Golbasi, J.P.Hankwitz, J.A.-C.Liu, J.B.Tracy et O.D.Velev, *3D-Printed Silicone Soft Architectures with Programmed Magneto-Capillary Reconfiguration*, Advanced Materials Technologies. 4, 1800528, (2019).
- [8] M.Cook, P.W.K.Rothmund et E.Winfrey, *Self-Assembled Circuit Patterns*, Springer. 2943, (2004).
- [9] D.Vella et L.Mahadevan, *The “Cheerios effect”*, American Journal of Physics. 73, 817–825, (2005).
- [10] J.-B. Fournier et P.Galatola, *Anisotropic capillary interactions and jamming of colloidal particles trapped at a liquid-fluid interface*, Phys. Rev. E. 65, 031601, (2002).
- [11] H.Cooray, P.Cicuta et D.Vella, *The capillary interaction between two vertical cylinders*, J. Phys. : Condens. Matter. 24, 284104, (2012).
- [12] J.-C.Loudet, A.G.Yodh, et B.Poulligny, *Wetting and Contact Lines of Micrometer-Sized Ellipsoids*, Physical Review Letters. 97, 018304, (2006).
- [13] G.B.Davies, T.Krüger, P.V.Coveney, J.Harting et F.Bresme, *Assembling Ellipsoidal Particles at Fluid Interfaces Using Switchable Dipolar Capillary Interactions*, Adv.Mater. 26, 6715–6719, (2014).

- [14] L.Botto, E.P.Lewandowski, M.Cavallaro, et K.J.Stebe, *Capillary interactions between anisotropic particles*, Soft Matter. 8, 9957, (2012).
- [15] L.Yao, L.Botto, M.Cavallaro, B.J.Bleier, V.Garbin et K.J.Stebe *Near field capillary repulsion*, Soft Matter. 9, 779, (2013).
- [16] A.Gauthier, D.van der Meer, J.H.Snoeijer et G.Lajoinie, *Capillary orbits*, Nature Communication. 10, 3947, (2019).
- [17] I.Ho, G.Pucci et D.M.Harris, *Direct Measurement of Capillary Attraction between Floating Disks*, Phys. Rev. Lett. 123, 254502, (2019).
- [18] R.Chinomona, J.Lajeunesse, W.H.Mitchell, Y.Yao et S.E.Spagnolie, *Stability and dynamics of magnetocapillary interactions*, Soft Matter. 11, 1828–1838, (2015).
- [19] A.Sukhov, S.Ziegler, Q.Xie, O.Trosman, J.Pande, G.Grosjean, M.Hubert, N.Vandewalle, A.-S.Smith, et J.Harting, *Optimal motion of triangular magnetocapillary swimmers*, The Journal of Chemical Physics. 151, no. 12, 124707, (2019).
- [20] G.Lumay, N.Obara, F.Weyer et N.Vandewalle, *Self-assembled magnetocapillary swimmers* Soft Matter. 9, 2420-2425, (2013).
- [21] Y.Collard, G.Grosjean et N.Vandewalle, *Magnetically-powered metachronal waves induce locomotion in self-assemblies*, Commun. Phys. 3, 112, (2020).
- [22] G.Grosjean, M.Hubert et N.Vandewalle, *Magnetocapillary self-assemblies : Locomotion and micromanipulation along a liquid interface*, Advances in Colloid and Interface Science, 255, 84-93, (2018).
- [23] J.D.Jackson, *Classical electrodynamics*, John Wiley and Sons, (1962).
- [24] M.Delens, *Simulations numériques de l'auto-assemblage de particules anisotropes : interactions capillaires et magnéto-capillaires*, Travail de fin d'études, Liège université. (2020).
- [25] G.M.Whitesides et M.Boncheva, *Beyond molecules : Self-assembly of mesoscopic and macroscopic components*, Proceedings of the National Academy of Sciences. 99, 4769-4774, (2002).
- [26] H.Cooray, P.Cicuta, et D.Vella, *Floating and Sinking of a Pair of Spheres at a Liquid-Fluid Interface*, Langmuir. 33, 1427–1436, (2017).
- [27] J.Guzowski et B.Gim, *Particle clusters at fluid-fluid interfaces : equilibrium profiles, structural mechanics and stability against detachment*, Soft Matter. 15, 4921-4938, (2019).

- [28] D.-G.Lee, P.Cicutab et D.Vella, *Self-assembly of repulsive interfacial particles via collective sinking*, Soft Matter. 13, 212, (2017).
- [29] N.Vandewalle, L.Clermont, D.Terwagne, S.Dorbolo, E.Mersch and G.Lumay, *Symmetry breaking in a few-body system with magnetocapillary interactions*, Phys. Rev. E. 85, 041402, (2012).
- [30] Q.Xie, G.B.Davies et J.Harting, *Direct Assembly of Magnetic Janus Particles at a Droplet Interface*, ACS Nano. 11, 11232-11239, (2017).
- [31] L.Ricketson, S.Jung, et J.Bush, *Capillary Self-Assembly of Floating Bodies*, APS Division of Fluid Dynamics Meeting Abstracts. 60, (2007).
- [32] J.Voise, M.Chindler, J.Casas et E.Raphaël, *Capillary-based static self-assembly in higher organisms*, Journal of the Royal Society. 8, 1357-66, (2011).
- [33] C.Mao, V.R.Thalladi, D.B.Wolfe, S.Whitesides et G.M.Whitesides, *Dissections : Self-Assembled Aggregates That Spontaneously Reconfigure Their Structures When Their Environment Changes*, J. Am. Chem. Soc. 124, 14508-14509, (2002).
- [34] J.Bae, N.P.Bende, A.A.Evans, J.-H.Na, C.D.Santangelo et R.C.Hayward, *Programmable and reversible assembly of soft capillary multipoles*, Mater. Horiz. 4, 228-235, (2017).
- [35] W.Wang, J.Giltinan, S.Zakharchenko et M.Sitti, *Dynamic and programmable self-assembly of micro-rafts at the air-water interface* Sci. Adv. 3, 1602522, (2017).
- [36] T.Xu, J.Zhang, M.Salehizadeh, O.Onaizah et E.Diller, *Millimeter-scale flexible robots with programmable three-dimensional magnetization and motion*, Sci. Robot. 4, 4494, (2019).
- [37] H.Xie, M.Sun, X.Fan, Z.Lin, W.Chen, L.Wang, L.Dong et Q.He, *Reconfigurable magnetic microrobot swarm : Multimode transformation, locomotion, and manipulation*, Sci. Robot. 4, 8006, (2019).
- [38] J.Garcia-Torres, C.Calero, F.Sagués, I.Pagonabarraga et P.Tierno, *Magnetically tunable bidirectional locomotion of a self-assembled nanorod-sphere propeller*, Nature Communications. 9, 1663, (2018).
- [39] V.Granville, M.Krivanek et J.Rasson, *Simulated annealing : a proof of convergence*, IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence, 16, no. 6, 652-656, (1994).