

EQUILIBRE ET CROISSANCE D'UNE SURFACE

A. MORPHOLOGIE D'EQUILIBRE D'UNE INTERFACE

Dans ce premier tutorat traitant de la morphologie des interfaces, nous allons modéliser une interface d'équilibre entre deux milieux, par exemple un liquide et une vapeur. Dans un prochain tutorat, on traitera du problème de la croissance d'une interface - hors équilibre par définition - sous une action extérieure (déposition de particules, application d'une force, etc...).

Dans un souci de simplicité, nous nous placerons à deux dimensions, où l'interface est une ligne, que nous allons modéliser ici de deux manières: tout d'abord (partie I) en adoptant un formalisme continu, puis (partie II) dans un formalisme discret où l'interface sépare deux domaines d'aimantations opposées.

I. MODELISATION CONTINUE D'UNE INTERFACE

Nous allons modéliser l'interface comme une ligne continue et dérivable $y(x)$. Nous la supposons presque plate, c'est-à-dire $(dy/dx)^2 \ll 1$. L'énergie de l'interface est proportionnelle à sa longueur totale \mathcal{L} : $H = \alpha\mathcal{L}$, où α est une constante positive, appelée tension de ligne.

1. Soit L la longueur de l'interface projetée sur l'axe des x , exprimer \mathcal{L} en fonction de L et de $(dy/dx)^2$.
2. Montrer qu'en choisissant comme conditions aux limites périodiques: $y(0) = y(L) = 0$, la décomposition de Fourier de $y(x)$ peut s'écrire:

$$y(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right)$$

Les A_n représentent maintenant les degrés de liberté indépendants du système, et varient de $-\infty$ à $+\infty$.

Montrer que H s'écrit, à une constante additive près:

$$H = \frac{\alpha\pi^2}{4L} \sum_{n=1}^{\infty} n^2 A_n^2$$

Que peut-on dire de cette décomposition?

3. Que vaut, à une constante multiplicative près, la probabilité d'observer la valeur A_n pour le mode n ? Quelle est la probabilité jointe $P(A_n, A_m)$ entre

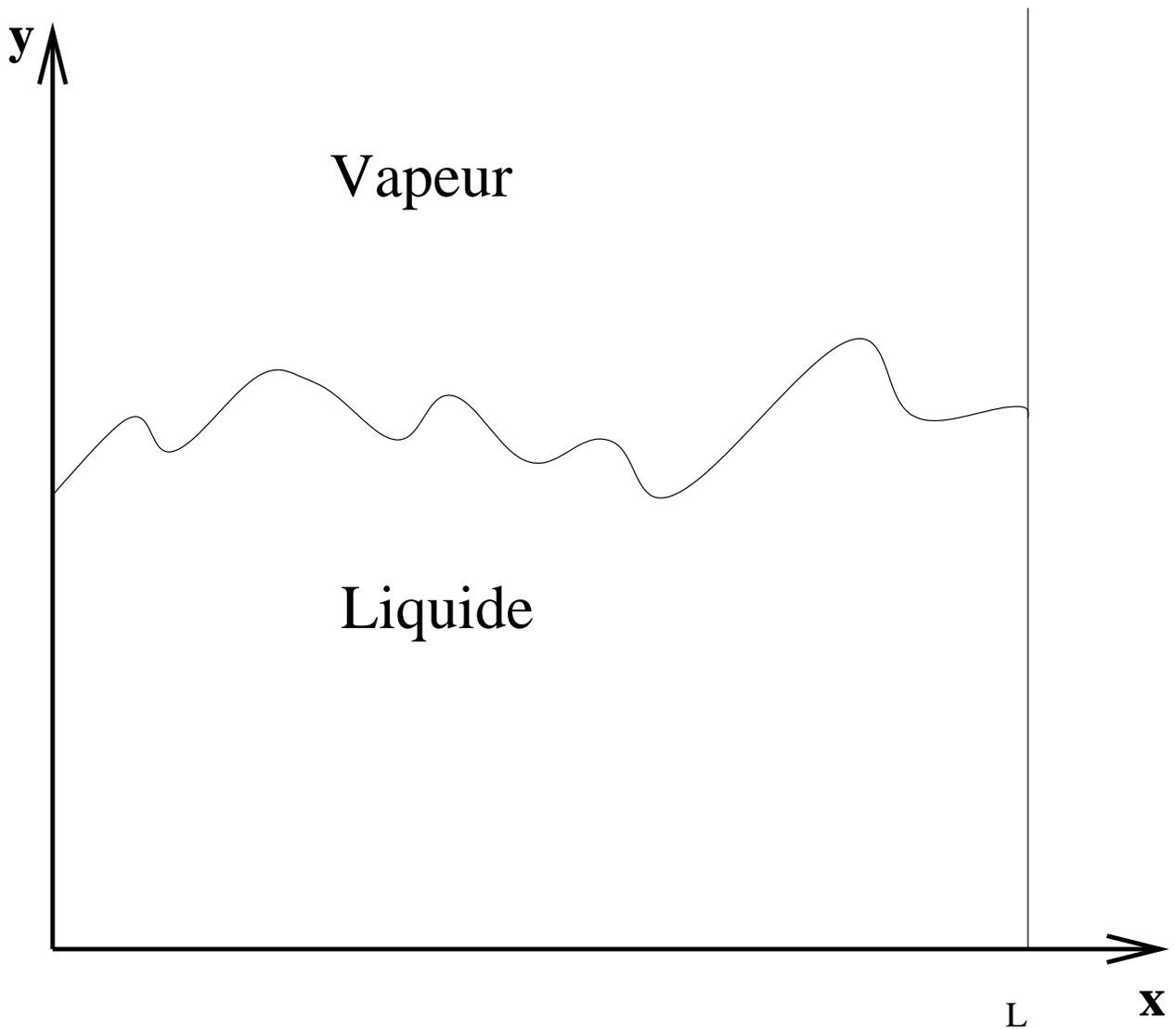


Fig. 1. Interface liquide/vapeur à deux dimensions. L est la longueur projetée de l'interface, \mathcal{L} sa longueur développée.

deux modes n et m ? On en déduira les valeurs moyennes $\langle A_n \rangle$ et $\langle A_n A_m \rangle$. Montrer qu'on retrouve le théorème d'équipartition de l'énergie.

4. Déduire de ces résultats la valeur moyenne du produit $\langle y(x)y(x') \rangle$, par exemple pour $x' \geq x$, en utilisant la propriété:

$$\sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^2} \cos nx = \frac{\pi^2}{6} - \frac{\pi|x|}{2} + \frac{x^2}{4} \quad 0 \leq x \leq 2\pi$$

On pose: $\Delta y = y(x') - y(x)$ la différence d'ordonnées entre deux points d'abscisses x et x' . Quand x et x' sont éloignés, $\langle \Delta y^2 \rangle^{1/2}$ peut être considérée comme l'épaisseur de l'interface.

Déduire de l'expression de $\langle y(x)y(x') \rangle$ calculée plus haut celle de $\langle \Delta y^2 \rangle$. Que vaut $\langle \Delta y^2 \rangle$ lorsque $|x' - x| \ll L$? Montrer que le problème considéré est similaire à celui d'une marche aléatoire (Tut 1) et expliquer pourquoi. Que vaut ici le coefficient de diffusion? Pour quelle valeur de $|x' - x|$ la fluctuation de Δy est-elle maximale ? Comment se comporte l'épaisseur de l'interface en fonction de L ?

II. MODELISATION DISCRETE DE L'INTERFACE

Nous allons maintenant procéder à une modélisation discrète, et supposer que l'interface sépare deux zones d'aimantations positive (voir Fig. 2, la phase du bas est constituée de spins d'Ising pointant vers le haut) et négative (Fig. 2, la phase du haut est constituée de spins d'Ising pointant vers le bas). Chaque spin est supposé se trouver à un noeud d'un réseau carré de maille élémentaire $a = 1$. On supposera l'échantillon carré, de taille $L = N$ dans les deux directions. On a donc N^2 spins.

Le Hamiltonien de ce système s'écrit:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad S_i, S_j = \pm 1$$

où la somme des interactions n'est étendue qu'aux plus proches voisins (ce qu'on note par $\langle ij \rangle$), et J est une constante positive.

1. Quelle est l'énergie associée à une interface plane (état fondamental) ? Montrer que lorsque l'interface n'est plus rectiligne, sa longueur développée est égale à :

$$\mathcal{L} = \sum_{p=1}^N (1 + |y_p|)$$

où y_p est la hauteur de la marche au point d'abscisse x_p . En déduire que l'énergie en excès par rapport au niveau fondamental peut s'écrire:

$$H = 2NJ + 2J \sum_{p=1}^N |y_p|$$

pour la configuration comportant des marches de hauteur y_p .

2. On suppose que l'extrémité gauche de l'interface est fixe, et que son extrémité droite est libre de se positionner n'importe où. Les hauteurs de marche sont supposées être des variables aléatoires indépendantes pouvant prendre toutes les valeurs entières entre $-\infty$ et $+\infty$. Montrer que la fonction de partition Z de l'interface peut se factoriser, et qu'on a:

$$Z = \zeta^N$$

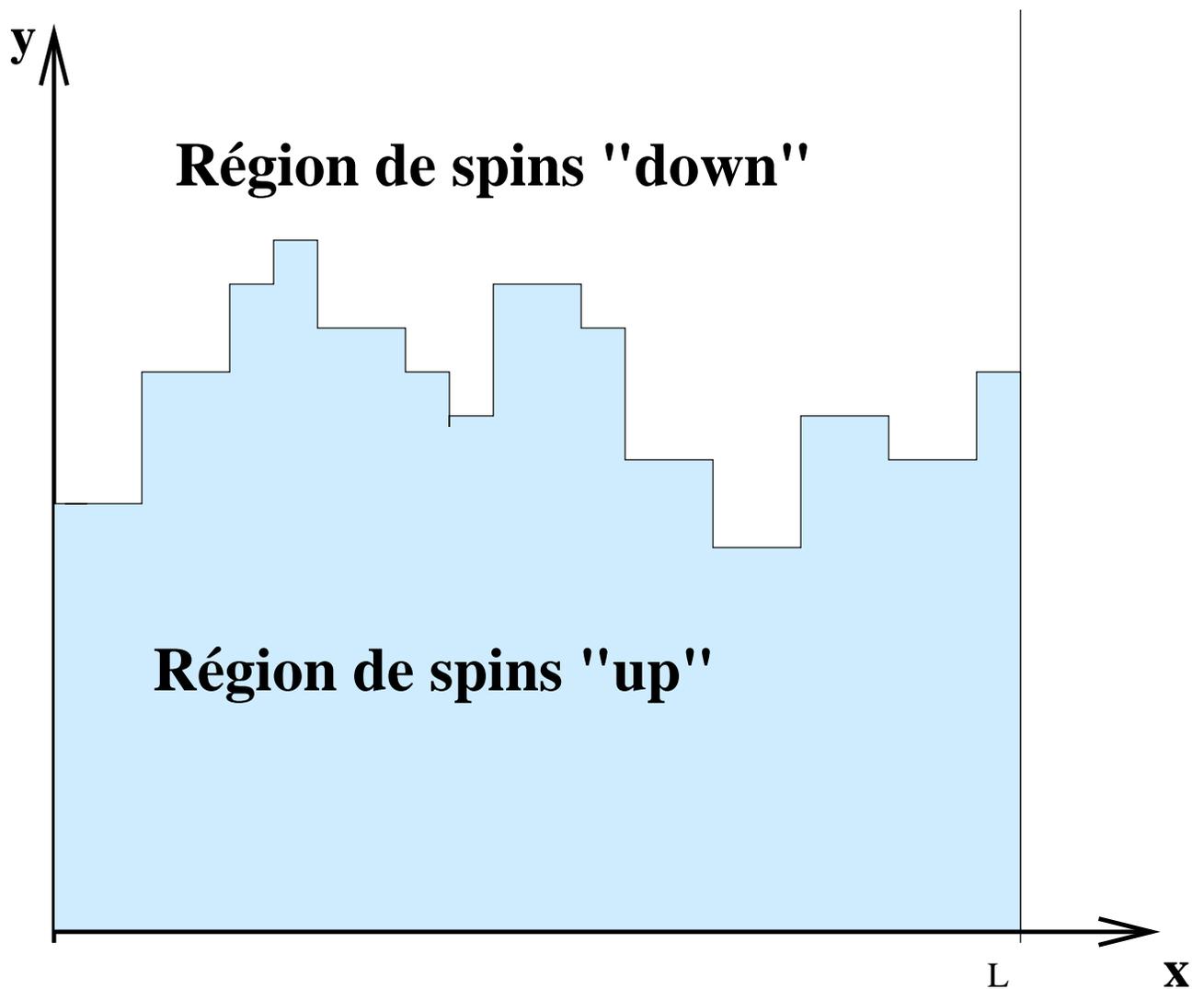


Fig. 2. Interface entre la région du bas, d'aimantation positive, et la région du haut d'aimantation négative, à deux dimensions. $L = N$ est la taille du système, la longueur projetée de l'interface, le pas du réseau étant choisi égal à 1.

où ζ est la fonction de partition d'une marche:

$$\zeta = e^{-2\beta J} \coth(\beta J)$$

avec $\beta = 1/kT$, où k est la constante de Boltzmann.

Calculer l'énergie moyenne par unité de longueur de l'interface: $\epsilon = \bar{E}/N$ et la tension de ligne f (égale à l'énergie libre par unité de longueur: $f = F/N$). Quelles sont les limites de ϵ et de f à basse et haute température?

3. Montrer que la probabilité pour qu'une marche soit de hauteur p , ascendante

ou descendante, est égale à :

$$\mathcal{P}(|y| = p) = \frac{2e^{-2\beta J(1+p)}}{\zeta}$$

En déduire que :

$$\langle |y| \rangle = \frac{1}{\sinh 2\beta J}$$

et vérifier que :

$$\epsilon = 2J(1 + \langle |y| \rangle)$$

Montrer aussi que :

$$\langle y^2 \rangle = \frac{1}{2(\sinh \beta J)^2}$$

4. Soit Δy la différence de hauteurs entre deux points de l'interface d'abscisses x_p et x_{p+q} :

$$\Delta y = \sum_{i=p+1}^{p+q} y_i$$

Utiliser le théorème de la limite centrale (les y_p sont des variables aléatoires indépendantes) pour relier la variance $\sigma_{\Delta y}^2$ de la distribution des Δy à celle, σ_y^2 de la distribution des y . On remarquera que $\sigma_y^2 = \langle y^2 \rangle$ puisque $\langle y \rangle = 0$. En déduire $\langle (\Delta y)^2 \rangle^{1/2}$, qui peut être considérée comme l'épaisseur de l'interface lorsque q est grand. Montrer que l'on retrouve, dans cette limite, le résultat établi lors de l'approche continue :

$$\langle (\Delta y)^2 \rangle \propto q \propto |x' - x|$$

Que vaut α dans ce modèle ?