

Croissance de domaines en modèles d'Ising en 2D sans et avec désordre gelé

Alberto Sicilia

Stage de recherche. Master en Physique Théorique des Systèmes Complexes

Encadrant : Leticia F. Cugliandolo

Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies

Résumé. Dans ce travail nous étudierons le processus de croissance de domaines dans trois variations du modèle d'Ising ferromagnétique en dimension deux. À l'aide de simulations numériques nous obtiendrons les distributions de probabilité pour les tailles des domaines au cours du temps. Nous trouvons pour les queues de ces distributions une loi d'échelle universel, indépendant de la température et du désordre.

1. Introduction

L'étude des processus d'évolution vers l'équilibre est une des branches des plus actives et passionnantes de la Physique Statistique. Malgré les progrès des dernières années, beaucoup de questions restent encore ouvertes.

Imaginons un système en équilibre qui, postérieurement, est soumis à une variation rapide des paramètres thermodynamiques. Le système évoluera jusqu'à l'état d'équilibre qui correspondra aux nouvelles valeurs de ces paramètres. Dans certains cas, nous pouvons constater que cette évolution se fait à travers d'un phénomène appelé "croissance de domaines" ou, *coarsening*. Notre travail sera consacré à son étude.

Pour illustrer ce procès, nous utiliserons un exemple familier. Soit un système magnétique simple dont l'état thermodynamique est décrit par deux grandeurs : la température et la magnétisation. Dans son diagramme de phases, il existe un point critique : à l'équilibre, pour les températures plus grandes que T_C , la magnétisation vaut zéro, et, pour des températures plus basses, la magnétisation est non nul et dépend, au signe près, de la température.

Supposons que notre système se trouve à l'équilibre dans un état de température $T_I > T_C$. Maintenant, imaginons que, d'une manière instantanée, on diminue la température jusqu'à T_F (où $T_F < T_C$). Notre système va évoluer soit vers l'état d'équilibre de magnétisation positive $m_{eq}^+(T_F)$, soit vers celui de magnétisation négative $m_{eq}^-(T_F)$. Supposons que, dans notre cas, l'état choisi est le premier. Nous pouvons observer, dans la Fig. 1, des images du système pendant le procès d'évolution vers l'équilibre, qui est au centre de la problématique de ce travail. En regardant la séquence, nous remarquons que cette évolution se produit par le développement et la croissance des structures de magnétisation homogène (domaines).

Les mélanges à deux composants X et Y sont aussi des systèmes qui présentent croissance de domaines et qui ont été l'objet des nombreuses études expérimentales et théoriques [1]. A l'équilibre, pour les hautes températures, le système est complètement homogène et, pour les températures d'au dessous de la température critique, le mélange présente deux phases différentes : l'une est composée des molécules X et l'autre des molécules Y. Dans le cas où l'on descend subitement la température d'un système initialement homogène, on atteint la séparation des phases par la croissance des domaines enrichis par chacun des composants.

Ce phénomène peut être appliqué aux divers processus technologiques : la maîtrise de la croissance des régions avec des différentes polarisations c'est la clé du développement des plusieurs dispositifs électroniques [2]. Des problèmes similaires se posent dans la sidérurgie et dans l'industrie de l'alimentation.

D'un point de vue théorique, la croissance de domaines pourrait être le mécanisme caché dans les systèmes avec des dynamiques extrêmement lentes comme les verres. Ainsi, le *coarsening* est un phénomène commun pour une vaste famille des problèmes qui se trouvent dans plusieurs sphères de la physique.

Revenons à la Fig. 1. Si nous l'observons en détail, nous pouvons déduire une

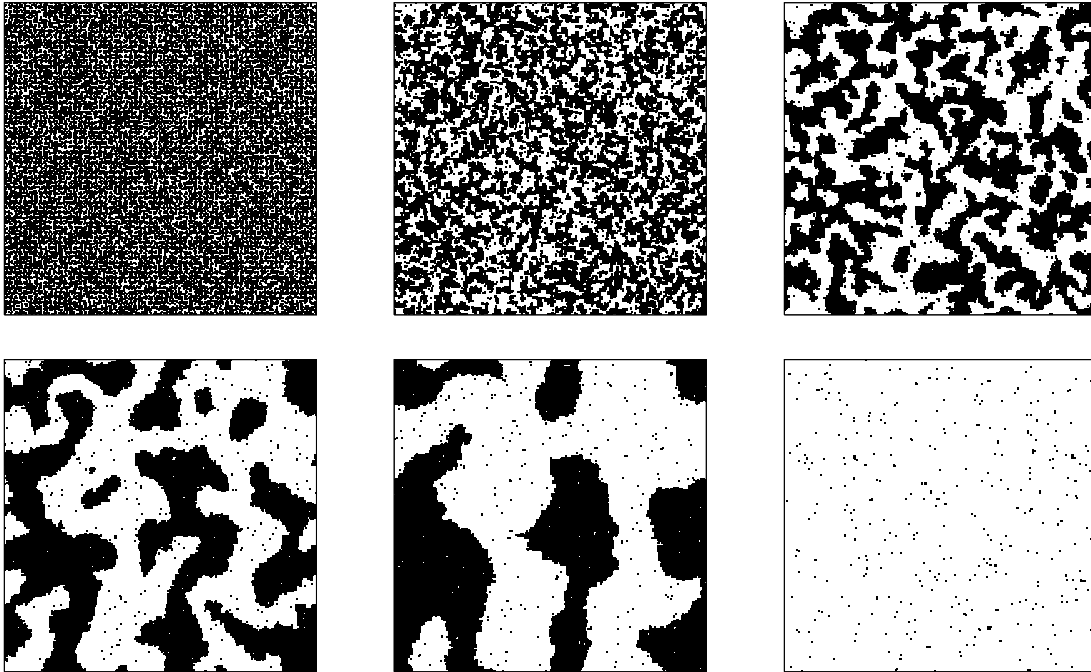


FIG. 1. *Snapshots* du modèle d'Ising avec 250^2 spins à $T = 1.5$ et temps (de gauche à droite, et de haut en bas) $t = 0, 4, 32, 256, 1024, 16384$ MCs. Nous observons tout le procès qui suit le système après un *quench* depuis un état de haute température ($t=0$) jusqu'à un état d'équilibre ferromagnétique ($t=16384$). En noire, régions de magnetization positive, en blanc celles de magnetization negative

des caractéristiques fondamentales de la croissance de domaines : c'est un phénomène d'échelle. La structure des domaines reste la même au cours du temps, à un facteur d'échelle près. Il existe une longueur caractéristique $R(t)$ associée au phénomène. Des différentes procédures indirectes pour sa mesure sont décrites dans la littérature. Dans notre travail, nous présenterons une méthode numérique qui nous permettra de trouver d'une façon directe $R(t)$. Nous étudierons à l'aide de simulations numériques le processus de croissance de domaines dans trois variations du modèle d'Ising ferromagnétique en dimension deux : le modèle pur avec des interactions homogènes, le cas avec des interactions désordonnées mais toujours positives, et le modèle avec des champs magnétiques locales aléatoires. Pendant la durée de notre stage nous avons étudié aussi le cas $d = 1$, que nous publierons en [19]. Nous avons considéré plus approprié centrer ce rapport sur le cas $d = 2$, qui nous donne des résultats très intéressants.

Ce rapport s'articule autour du plan suivant : dans la Sect. 2 nous introduisons les modèles et nous passons brièvement en revue les résultats connus pour leurs processus de *coarsening*. En Sect. 3, nous présentons les méthodes numériques utilisées. En Sect. 4, nous décrivons nos résultats. Finalement, en Sect. 5, nous exposons nos conclusions ainsi que plusieurs projets.

2. Les modèles et l'état de l'art

Dans cette Section, nous introduisons les modèles à étudier et nous décrivons les plus importants résultats déjà connus.

2.1. Les modèles

Le modèle d'Ising, présenté il y a 80 ans comme un modèle simple pour les transitions de phase magnétiques, est devenu un modèle-paradigme de la physique statistique. Avec des légères modifications, ce modèle peut reproduire l'essentiel du comportement de systèmes très différents et complexes.

Dans le modèle d'Ising, chaque spin S_i n'est que dans un des deux états possibles $S_i = \pm 1$ et interagit avec ses voisins les plus proches à travers les constants de couplage J_{ij} . On peut ajouter aussi dans chaque site un champ h_i . Dans notre travail, les N_s spins sont situés sur les noeuds d'un réseau carré en deux dimensions de longueur latérale L , ($N_s = L^2$), avec des conditions de frontières périodiques. Ainsi, le hamiltonien de notre système sera :

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} S_i S_j + \sum_{i=1}^{N_s} h_i S_i(t) . \quad (1)$$

où $\langle i, j \rangle$ indique la somme pour tous les couples de proches voisins (i, j) .

Aucun matériel n'est parfaitement homogène : des impuretés de différents types y sont aléatoirement distribués. Pour les cas auxquelles nous allons nous intéresser, nous pourrons faire une hypothèse que ces impuretés ne bougent pas au cours du temps. C'est cela que l'on appelle "désordre gelé". L'effet du désordre gelé peut être modélisé en considérant les champs h_i , ou les constants de couplage J_{ij} comme des variables aléatoires. (Les J_{ij} et les h_i restent fixes au cours du temps pour chaque réalisation du désordre). Nous nous limiterons au cas où tous les constants de couplage ont le signe positif (ferromagnétique). Un exemple extrême du système désordonné est un verre de spin, où les J_{ij} peuvent prendre des valeurs positives et négatives.

Dans notre travail, nous nous concentrons sur trois systèmes qui, dans la région subcritique (au dessous de sa température et de son champ critiques), présentent une phase d'équilibre ferromagnétique :

- Le modèle pur, où tous les $J_{ij} = 1$ et les $h_i = 0$.
- Le modèle des couplages aléatoires (RBIM), où les $h_i = 0$ et les J_{ij} sont des nombres aléatoires sortis d'une distribution de probabilité uniforme entre $1 - \frac{\epsilon}{2}$ et $1 + \frac{\epsilon}{2}$. La largeur de l'intervalle, ϵ , qu'on considérera toujours plus petit que 2, sera un nouveau paramètre.
- Le modèle des champs aléatoires (RFIM), où les $J_{ij} = 1$ et les h_i sont des nombres aléatoires sortis d'une distribution de probabilité bimodal $p(h_i = \pm h) = 0.5$. La force du champ, h , sera un paramètre du système.

2.2. Resultats connus

Depuis le travail pionnier de Lifshitz [3], de nombreux articles expérimentaux, numériques et analytiques ont été consacrés au problème de *coarsening*. D'excellentes revues se trouvent dans [1], [4], [5].

La croissance de domaines dans le cas pur a été assez vite comprise [4], [6]. Le procès est mené par la tension de surface qui tend à réduire la surface du domaine. Des arguments semblables à ceux qu'on utilise pour l'étude de la nucléation des gouttes mènent à la loi de croissance dite de "Lifshitz-Allen-Cahn" (LAC), $R(t) \sim t^{1/2}$, pour la taille typique des domaines au temps t après le *quench*. On observe aussi que toute la dépendance temporelle des fonctions de corrélation s'exprime en fonction de $R(t)$. Ce phénomène est lié à la propriété d'invariance d'échelle du problème.

Dans les systèmes avec le désordre gelé, comme le ferromagnétique avec des interactions aléatoires ou le modèle avec des champs magnétiques aléatoires, le mécanisme pour la croissance des domaines est différent [7], [8], [9], [10]. Initialement, la tension de surface domine et la croissance est caractérisée par la loi LAC. Plus tard, les parois des domaines sont attrapées par le désordre. Ces pièges commencent à devenir actifs pour une longueur de *crossover* qui est inversement proportionnelle à l'amplitude du désordre. Une fois que la frontière d'un domaine est coincée dans un état métastable, elle ne peut sortir qu'à l'aide de l'activation thermique. Les fluctuations thermiques mènent donc la dynamique pour les temps asymptotiques. Ceci est complètement différent du cas pur où l'effet des fluctuations thermiques est négligeable. Même si la loi de croissance de domaines, $R(t)$, dépend fortement des interactions, la propriété d'invariance d'échelle (maintenant statistique) est encore valable et on retrouve que toutes les fonctions de corrélation dépendent du temps à travers $R(t)$.

Dans la littérature, on trouve plusieurs calculs indirects pour $R(t)$. En général, on utilise l'hypothèse d'échelle : on calcule une fonction de corrélation, disons C , et on cherche le $R(t)$ pour que C satisfasse la propriété d'échelle.

Presque tous les auteurs décrivent le procès de *coarsening* en étudiant uniquement $R(t)$. Pourtant, à chaque pas temporel, la structure des domaines est bien plus compliquée. On trouve des domaines de tailles différentes, intriqués les uns dans les autres, *etc.* La description précise du processus de croissance de domaines et en particulier des fluctuations spatio-temporelles, peut nécessiter la connaissance de l'évolution temporelle de la distribution de probabilité des tailles des domaines, ses propriétés géométriques, *etc.* Très peu est connu sur ces quantités. Le but de notre étude est de caractériser les configurations mésoscopiques pendant la croissance des domaines et, plus précisément, nous nous consacrons à la mesure des distributions de probabilité des tailles des domaines au cours du temps. Bien évidemment, après avoir connu la distribution de probabilité des tailles des domaines on peut aussi calculer sa moyenne (cette fois-ci d'une façon directe).

3. Méthodologie

Comme il a été dit auparavant, le but de notre travail est d'identifier et de caractériser les distributions des tailles des domaines.

Il y a deux manières générales de s'attaquer au problème de la dynamique de croissance des domaines. Dans le premier cas, on peut construire une description continue en se servant d'un paramètre d'ordre coarse-grainé et utiliser une équation appropriée pour l'évolution temporelle de ce paramètre d'ordre. Dans le deuxième cas, on peut faire une simulation numérique de type Monte Carlo en ajoutant au hamiltonien (1), une règle dynamique pour le *spin flip*. C'est de cette deuxième façon que nous allons procéder.

Nous devons donc identifier les domaines au niveau microscopique, ce que nous faisons à l'aide de l'algorithme de Hoshen-Kopelman [13], et, également, réduire l'effet des fluctuations thermiques, ce que nous faisons à l'aide de l'algorithme d'Antoni et Hinrichsen [17]. Nous présentons ces techniques numériques dans la suite.

3.1. L'évolution temporelle : l'algorithme de Heat Bath

Nous réaliserons les *spin flip* en utilisant la dynamique appelée de *Heat Bath* (HBD). Dans chaque pas de la HBD on actualise un spin S_i choisi au hasard, qui essaie de s'orienter en direction de son champ local $h_i^{loc}(t)$ avec une probabilité $p_i(t)$:

$$S_i(t+1) = \text{sgn}[p_i(t) - z_i(t)] \quad (2)$$

$$p_i(t) = \frac{e^{h_i^{loc}(t)/k_B T}}{e^{h_i^{loc}(t)/k_B T} + e^{-h_i^{loc}(t)/k_B T}} \quad h_i^{loc}(t) = \sum_{j \in V_i} S_j(t) + h_i(t)$$

où les $z_i(t)$ sont des nombres aléatoires $\in [0, 1)$ et V_i c'est l'ensemble des plus proches voisins de S_i . Notre unité de temps pour les simulations sera le "pas de Monte Carlo par spin" (MCS) qui correspond à l'actualisation de N_s spins.

La HBD appartient à une famille infinie des règles dynamiques équivalentes [11]. Toutes ces règles sont également légitimes et il n'y a aucune raison pour préférer l'une à l'autre. Pourtant, pour les simulations réalisées sur plusieurs répliques (Comme nous expliquerons plus tard, on aura besoin des trois) qui évoluent sur le même bruit thermique, par exemple, dans l'étude du *damage spreading* [12], on peut démontrer que la HBD est une des règles dynamiques qui se comporte mieux.

3.2. Population des domaines : l'algorithme de Hoshen et Kopelman

Depuis la présentation des premiers problèmes de percolation dans les années 1950, un des plus importants défis qui s'est présenté consistait à déterminer le nombre des sites qui appartenaient à chaque domaine. Au premier abord, ce travail aurait pu apparaître comme une facilité mais il ne l'était pas : les algorithmes naïfs existant à l'époque exigeaient une complexité de calcul qui croissait plus vite que le carré du nombre total des sites. Pour des grands systèmes, c'était une tâche irréalisable. En 1976, Hoshen et

Kopelman (HK) [13] ont proposé un algorithme révolutionnaire qui l'a converti en un problème de complexité linéaire. Un seul balayage sur le réseau est suffisant pour faire les mesures de population.

L'algorithme HK est très puissant pour calculer la taille des domaines mais il ne nous donne pas d'information sur leurs structures géométriques. En 1997, a été publiée une généralisation du HK qui permettait d'évaluer d'autres grandeurs pour caractériser les domaines tels que le radio de giration [14]. Vu que le rapport présent est limité en extension, nous omettons l'explication détaillée des algorithmes et nous envoyons le lecteur aux références [15] et [16].

3.3. Elimination des fluctuations thermiques : l'algorithme d'Antoni et Hinrichsen

Il est important de prêter l'attention au fait que, dans notre système, il y aura deux types des domaines : les petites "îles" créées par les fluctuations thermiques et les "vrais" domaines formés par les procès de *coarsening*. Etant donné que nous sommes intéressés à caractériser ces deuxièmes, nous devons utiliser une procédure pour distinguer les uns des autres.

Antoni et Hinrichsen [17], en généralisant un algorithme proposé par Derrida [18], ont développé une méthode qui permet d'identifier les spins qui sont sur les parois des "vrais" domaines. Cette idée peut être expliquée de la manière suivante : on considère trois répliques A , B et C du système. La réplique A , qui est notre système original, où la croissance de domaines aura lieu, part dans un état initial aléatoire $S_i^A(t=0) = v_i$, avec $p(v_i = \pm 1) = 0.5$. Les répliques B et C commencent avec tous leurs spins en haut et en bas respectivement $S_i^B(t=0) = +1$ et $S_i^C(t=0) = -1$. On applique la règle dynamique (2) aux trois systèmes. À chaque pas de l'actualisation on considère le *flip* du même spin dans les trois systèmes et on y utilise la même valeur pour le nombre aléatoire $z_i(t)$. Ainsi, les spins à l'intérieur des domaines de magnétisation positive de la réplique A exhiberont les mêmes fluctuations thermiques que les spins de la copie B . D'une façon pareille, les fluctuations thermiques des spins qui sont à l'intérieur des domaines de magnétisation négative en A sont synchronisées aux celles des spins de la copie C . Pourtant, sur les spins qui sont aux parois des domaines, existent des fluctuations qui n'apparaissent ni dans la réplique A ni dans la réplique B . En détectant ces fluctuations-ci à l'aide d'un observable $\Delta_i(t)$ il devient possible de déterminer les frontières des domaines.

$$\Delta_i(t) = \left(1 - \prod_{\Omega_i} \frac{1 + S_j^A(t)S_j^B(t)}{2}\right) \left(1 - \prod_{\Omega_i} \frac{1 + S_j^A(t)S_j^C(t)}{2}\right), \quad (3)$$

où $\Delta_i(t) = 1$ si le spin i appartient aux parois d'un domain pour le temps t . Soient (x, y) les coordonnées du spin i . Dans l'algorithme original de Hinrichsen et Antoni, Ω_i c'est l'ensemble formé par le spin i et les voisins des coordonnées $(x \pm 2, y)$ et $(x, y \pm 2)$. Dans notre travail, nous allons modifier légèrement l'observable (3) en utilisant une famille différente des voisins : ceux qui ont les coordonnées $(x \pm 1, y)$ et $(x, y \pm 1)$.

On peut comparer les frontières originales à celles qui ont été obtenues avec la variante dans la Fig. 2. Le nombre des spins qui sont identifiés comme appartenant à

la frontière est plus petit. Nous obtenons ainsi une meilleure précision pour déterminer les parois. Par contre, avec notre définition, le nombre des frontières ouvertes peut être majeur, mais cela ne nous posera aucun problème pour le comptage des domaines.

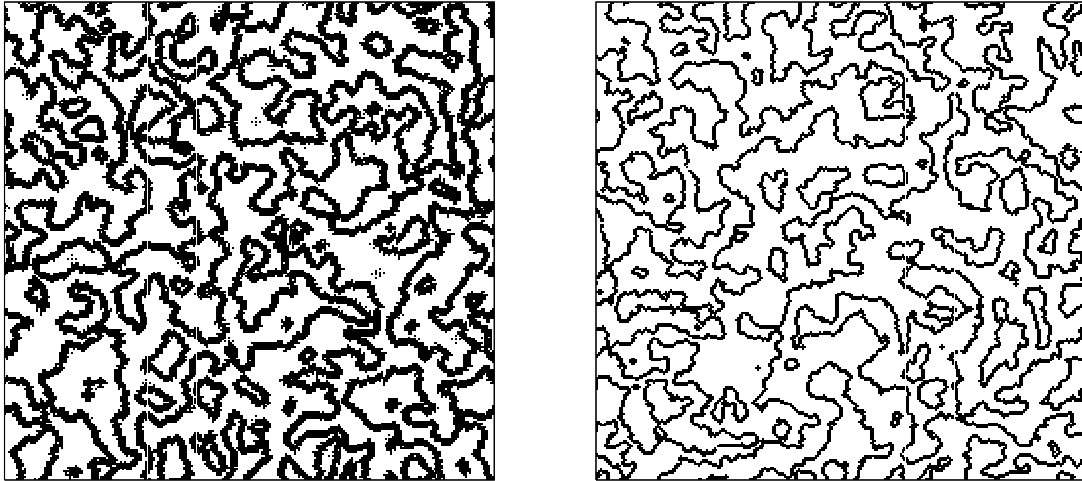


FIG. 2. A gauche, les frontières trouvées avec l'algorithme original de Hinrichsen et Antoni pour le modèle d'Ising avec $L=256$ et $T=1.5$ en $t=32$ MCS. A droite celles que l'on obtient avec la modification de l'observable $\Delta(i)$

L'algorithme de Hinrichsen et Antoni permet d'identifier les parois des domaines mais pas les fluctuations thermiques. Pour ceci il faudra faire quelques hypothèses additionnelles. On considérera comme spins thermiques (et on les renversera avant de faire les mesures des domaines), ceux qui sont à l'intérieur des domaines ($\Delta_i(t) = 0$) et ne sont pas alignés avec son champ local.

Dans la Fig. 3 on représente le système avant et après avoir enlevé les fluctuations thermiques : presque toutes sont éliminées, mais ils en restent encore quelques unes. Notre méthode ne nous permet pas d'éliminer quelques îles thermiques de taille plus grande que trois. Elle sera seulement valide pour les températures basses, quand ces géométries sont très peu probables.

4. Résultats

Dans cette Section nous présentons nos résultats.

4.1. Caractéristiques générales des simulations

L'intervalle de températures qu'on peut utiliser dans nos simulations est limité par l'inexactitude de la procédure pour éliminer les domaines thermiques. Après avoir réalisé quelques tests sur les modèles désordonnés et pur (l'un desquels nous montrerons dans la Fig. 5), nous avons déterminé que pour des températures plus grandes que $T > 1.3$, les résultats ne seront pas fiables.

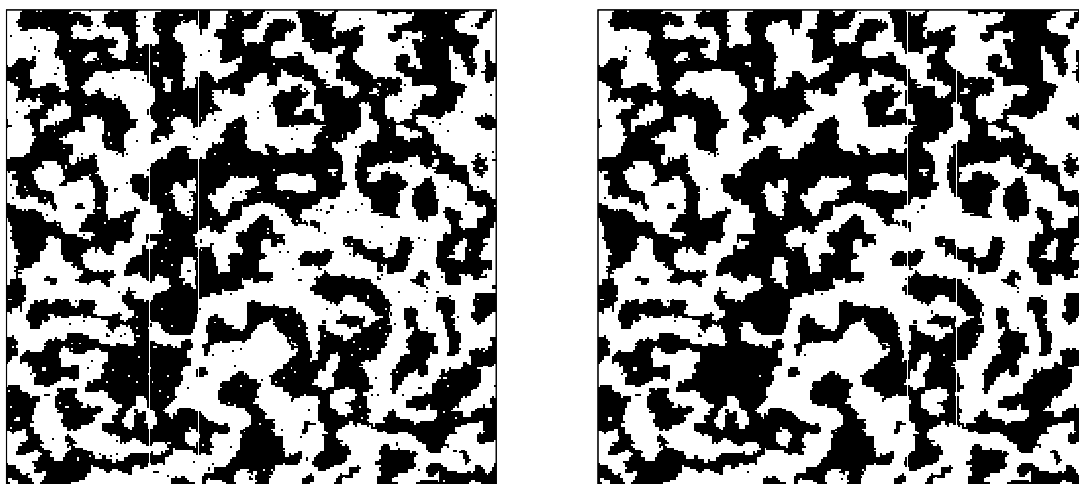


FIG. 3. A gauche, *snapshot* du model d'Ising avec $L=256$ et $T=1.5$ a l'instant $t = 32$ MCS de la simulation. A droite, après avoir enlevé les fluctuations thermiques avec la méthode présentée.

Les effets de taille finie ne sont pas importants pour les températures avec lesquelles nous allons travailler. Nous ne voyons pas de différences significatives pour systèmes qui ont $L = 1000, 2000, 3000$.

Pour chaque modèle et chaque choix des paramètres que nous soumettons à l'étude, nous faisons la simulation sur au moins trente échantillons avec des différentes configurations initiales et réalisations du désordre.

Considérant que nous sommes intéressés aux distributions de la taille des domaines, nous allons nous limiter au temps courts ($t < 256$ MCS). Pour les temps au-delà, dans le système pur, il apparaîtront deux domaines percolants et la statistique sera très mauvaise. Pour les systèmes avec désordre, la dynamique est beaucoup plus lente, on peut obtenir les distributions pour des temps plus grands. Mais, comme notre objectif est de déterminer l'effet du désordre, et ensuite, comparer avec le cas pur, nous avons pris aussi cette limite temporelle pour tous les systèmes simulés.

Les calculs ont été réalisés sur le réseau de 8 processeurs Bi-Pentium IV disponibles au LPTHE.

4.2. Modèle d'Ising pur

Dans Fig. 4, nous pouvons observer les distributions de probabilité $p(N, t)$, pour la population des domaines pour différents temps à deux températures $T = 0.2$ et $T = 1.3$. Pour les temps très courts *e.g.* $t = 2$, la distribution de probabilité est une fonction qui décroît d'une manière monotone avec la taille des domaines. Le système garde la mémoire de son état initial. Pour les temps suivants, il y a un plateau qui se développe sur les tailles intermédiaires et qui devient de plus en plus large. Pour les très grandes populations la distribution de probabilité tombe avec une queue vers zéro. Cette

queue est très bien décrite par une loi de puissance sur trois décades pour l'axe x et quatre pour l'axe y . Les données suggèrent une très lente décroissance de son exposant avec le temps.

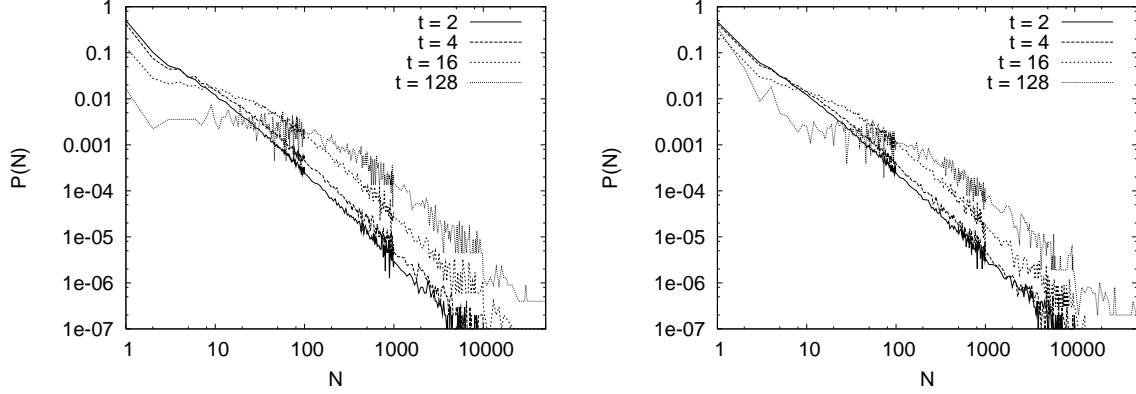


FIG. 4. Distributions de probabilité pour la population des domaines pour différents temps dans le modèle d'Ising avec $L = 1000$. A gauche, $T = 0.2$ et à droite, $T = 1.3$

Il faut aussi prêter l'attention au fait que pour des temps grands le bruit dans l'histogramme est de plus en plus important. Cela est dû à la rapidité du phénomène de croissance dans le système pur.

L'augmentation de la température provoque le ralentissement du procès. Le plateau se développe plus tard et le temps de vie des petits domaines est notablement prolongé.

En utilisant les distributions des populations, nous calculons la population moyenne des domaines

$$\langle N \rangle(t) = \int dN p(N, t) N \quad (4)$$

D'ici, on peut déduire d'une façon directe la longueur caractéristique des domaines \ddagger à travers la relation $R(t) \equiv \sqrt{\langle N \rangle(t)}$

Dans la Fig. 5, on présente l'évolution temporelle de $R(t)$ calculé en prenant en considération la procédure d'élimination des fluctuations thermiques. Nous voyons que pour les températures $T < 1.4$ les systèmes suivent la loi de croissance prédite par la théorie (LAC). Pour les températures plus hautes, les fluctuations thermiques deviennent trop nombreuses et notre procédure n'est pas suffisante pour les enlever. Cette figure représente un bon test pour notre algorithme et nous dit que nous ne pourrons pas aller plus loin que $T \equiv 1.3$ dans les simulations.

Nous utilisons $\langle N \rangle(t)$, défini par (4), comme l'échelle naturelle pour normaliser la distribution des populations des domaines et présentons $\langle N \rangle(t)p(N, t)$ contre $N/\langle N \rangle(t)$ dans la Fig. 6. Les courbes pour les différents temps collapsent dans la région des grands domaines $N/\langle N \rangle(t) > 0.1$. C'est qui est encore plus merveilleux est que, même si l'on varie la température, le collapse se produit vers exactement la même fonction.

\ddagger Pour l'instant, on considère des domaines compacts. Cette hypothèse peut être étudiée en détail avec le même algorithme

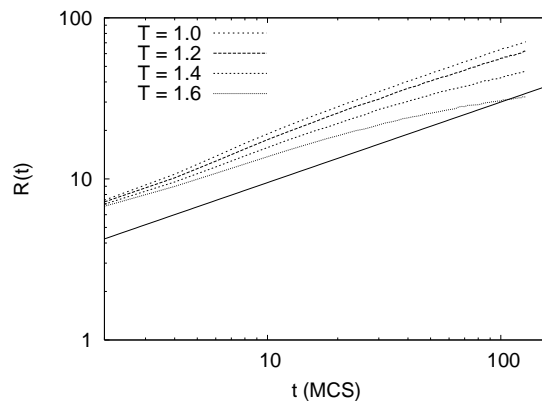


FIG. 5. Évolution temporelle de la longueur caractéristique des domaines, $R(t)$, dans le modèle d'Ising avec $L = 1000$ pour différentes valeurs de la température. La ligne continue représente la loi $R(t) \sim t^{1/2}$

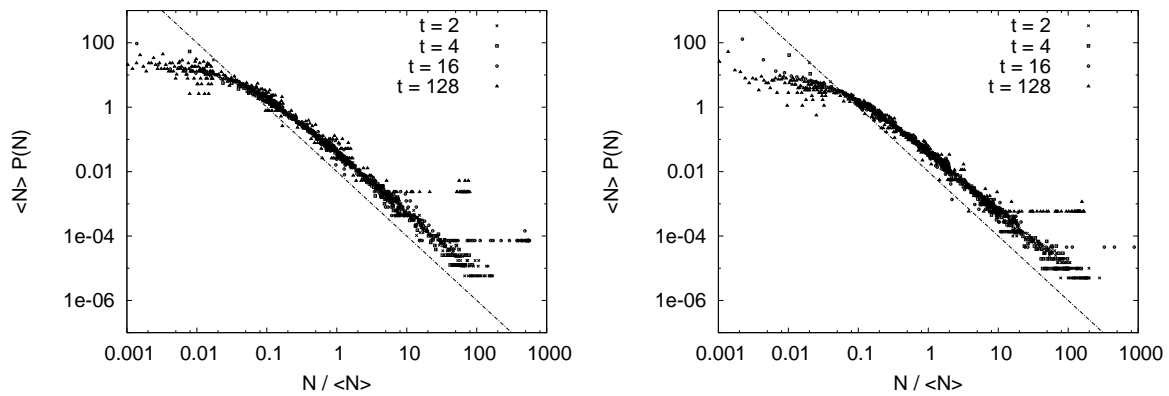


FIG. 6. Distributions de probabilité pour la population des domaines pour différents temps dans le modèle d'Ising avec $L = 1000$. Normalisées avec la population moyenne $N(t)$. A gauche, $T = 0.2$ et à droite, $T = 1.3$. La ligne droite représente une loi de puissances d'exposant -2

La queue est ainsi bien décrite par la loi de puissance :

$$\langle N \rangle(t) p(N, t) \sim \left(\frac{N}{\langle N \rangle(t)} \right)^{-2}. \quad (5)$$

La Fig. 7 montre un mécanisme pour la contraction d'un domaine (en noir) dû à la croissance des ses voisins (en blanc). La région péninsulaire est séparée du domaine original et donne naissance à un domaine séparé. C'est la raison pour laquelle dans les systèmes à 2D il y a toujours une quantité importante de "vrais" domaines de petites tailles, même si le procès de croissance est bien développé. Il est important de remarquer que cet effet n'est pas présent en une dimension. Les $p(N, t)$ que nous avons calculé aussi pour $d = 1$ durant le stage [19] sont très différents pour les N petits des celles pour $d = 2$.

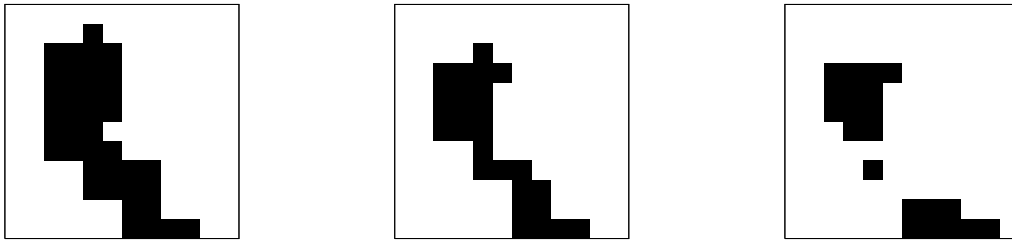


FIG. 7. Zoom d'une région 12x12 d'un modèle d'Ising $L=256$ à $T=0.5$. De gauche à droite, *snapshots* du système à trois instants consécutifs du procès de croissance. La péninsule noire fait partie d'un domaine plus grand.

4.3. RBIM

Le modèle RBIM possède une transition de phase ferromagnétique paramagnétique pour une température critique qui dépend de la distribution de probabilité suivie par les constants des couplages J_{ij}

Nous présentons les fonctions $p(N, t)$ pour une température fixe dans la figure Fig. 4.3. Pour les petites valeurs de ϵ , le système se comporte d'une manière assez semblable au système pur, en développant un plateau pour les tailles intermédiaires. Par contre, pour un ϵ grand (à droite) on perd le plateau et si on laisse le système évoluer, on observe la formation d'un maximum autour de $N = 10$. Au cours du temps, la position du maximum ne change pas, mais le pic devient de plus en plus pointu. Il est important de signaler que la valeur du maximum ne coïncide pas avec la valeur moyenne de population.

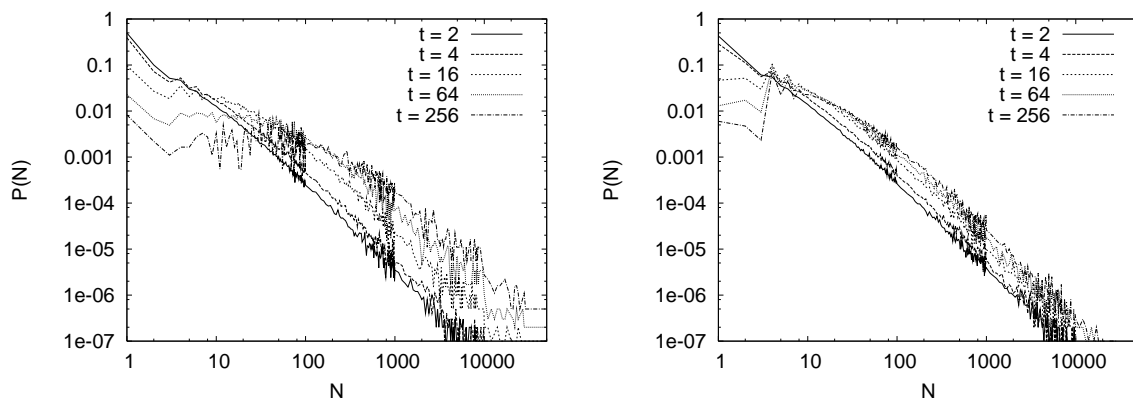


FIG. 8. Distributions de probabilité pour la population des domaines pour différents temps dans le $L = 1000$ RBIM avec $T = 0.5$. A gauche, $\epsilon = 0.5$ et à droite, $\epsilon = 2$

La température joue un rôle inverse comme nous le voyons dans la Fig. 9. Pour une température très basse (à gauche) et pour des temps assez courts, la distribution de probabilité développe un minimum très remarquable. Ce fait est facilement explicable : pour une température très basse, les fluctuations thermiques ne sont pas suffisantes pour

faire sauter le système sur les barrières énergétiques et les domaines restent coincés dans un état métastable. Pour les hautes températures (à droite), la dynamique de la croissance ne se distingue pas de celle du système pur : les états métastables sont éclipsées par l'énergie thermique.

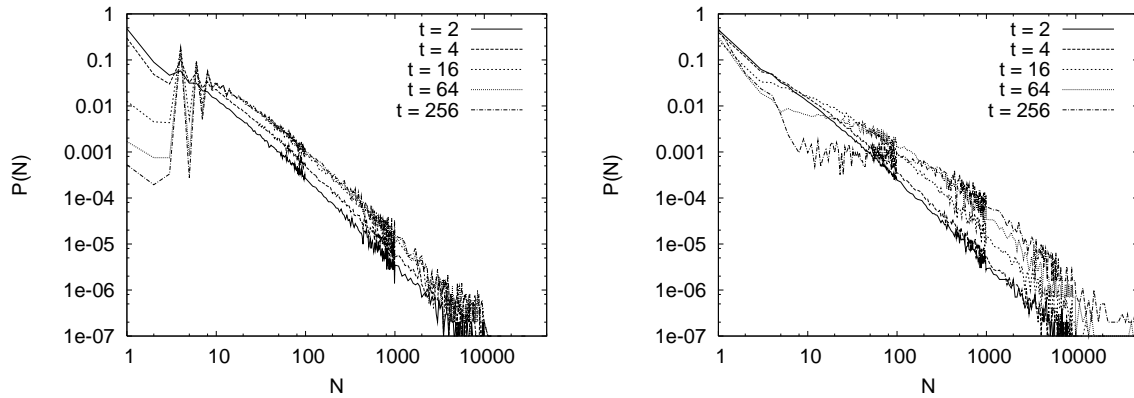


FIG. 9. Distributions de probabilité pour la population des domaines pour différents temps dans le $L = 1000$ RBIM avec $\epsilon = 1$. A gauche, $T = 0.1$ et à droite, $T = 1.3$

En utilisant (4) nous obtenons la loi de croissance $R(t)$ pour le RBIM, qui est dans la Fig. 4.3. Nous constatons que pour les temps courts $t < 10$ MCS les systèmes suivent la loi LAC (évoluent comme le modèle d'Ising pur). Mais, pour les temps plus grands, la longueur caractéristique continue à croître seulement si la température est suffisamment élevée. Pour la température $T = 0.1$, nous observons un blocage subit d'où le système ne pourra pas sortir pendant, au moins, le temps de nos simulations.

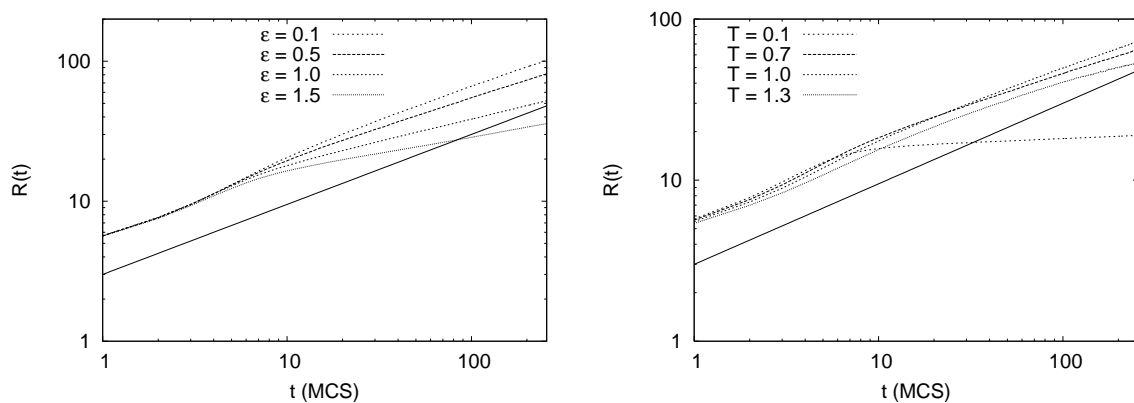


FIG. 10. Evolution temporel de la longueur caractéristique des domaines $R(t)$ dans le $L = 1000$ RBIM pour différentes valeurs des paramètres. A gauche $T = 0.5$, à droite $\epsilon = 1$. La ligne continue représente la loi pour le système pur $R(t) \sim t^{1/2}$

Nous normalisons les distributions de probabilité avec les populations moyennes $\langle N \rangle(t)$. Les résultats sont montrés dans la Fig. 11. Son analyse nous mène à une conclusion importante : la forme de la queue est exactement la même pour toutes les

valeurs des températures et des ϵ que nous avons testées et, aussi, exactement pareille à la loi de puissance obtenue pour le modèle pur normalisé.

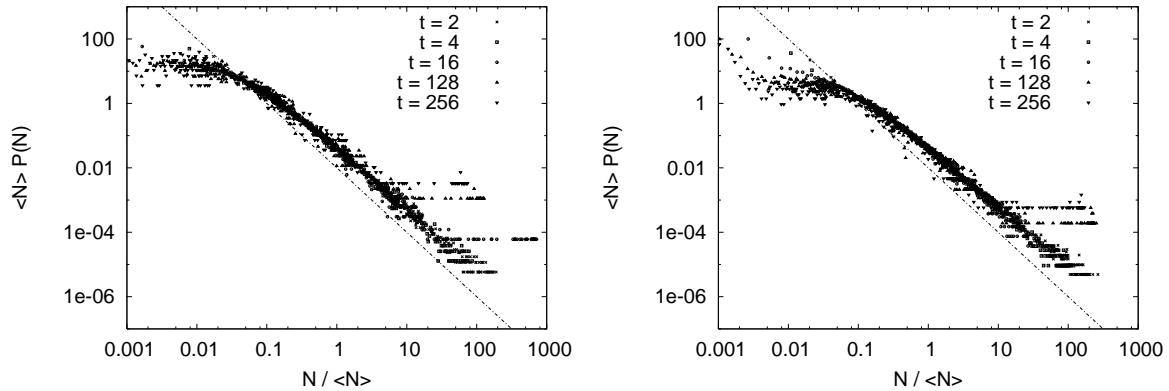


FIG. 11. Distributions de probabilité pour la population des domaines pour différents temps dans le $L = 1000$ RBIM, normalisés avec la population moyenne $N(t)$. A gauche, $\epsilon = 0.5$ et $T = 0.5$, à droite, $\epsilon = 1$ et $T = 1.3$. La ligne droite représente une loi de puissances d'exposant -2

4.4. Modèle d'Ising avec des champs aléatoires

Le RFIM c'est le dernier modèle que nous avons simulé. Parmi les trois, il présente la dynamique la plus lente, même quand le module du champs extérieur, h est très petit.

Dans la Fig. 12, à gauche, nous présentons la distribution des tailles à température constante et pour un petit champ. Pour des temps suffisamment longs ($t > 16$ MCS), apparaît un maximum autour de $N = 10$. La queue pour les grandes tailles tombe vers zéro comme une loi de puissance. A droite, on constate que, quand le champ h est grand, les $p(N, t)$ deviennent stationnaires excepté une toute petite région ($N < 5$). Dans ces diagrammes nous observons, pour la première fois, une queue de distribution qui décroît plus vite qu'une loi de puissance. Une explication possible est que pour le champ considéré ($h = 1.5$) la croissance des domaines est tellement lente que, pendant le temps de simulation, il devient presque impossible de développer des grands domaines.

La série suivante, Fig. 12, montre l'action de la température. Elle influence notablement sur la quantité des petits domaines présents dans le système. La distribution des domaines avec $N > 10$ reste invariable face aux changements thermiques. Nous retrouvons la loi de puissance pour la queue qui avait été perdue dans le cas antérieur.

La loi de croissance pour la longueur typique des domaines, Fig. 14, montre comme prévu, que plus les champs sont forts moins de temps le système reste dans le régime initial décrit par la loi LAC.

Comme dans les modèles précédents, si nous normalisons les distributions de probabilité avec la population moyenne (Fig. 15) nous retrouvons une loi universelle et indépendant des valeurs des paramètres du système.

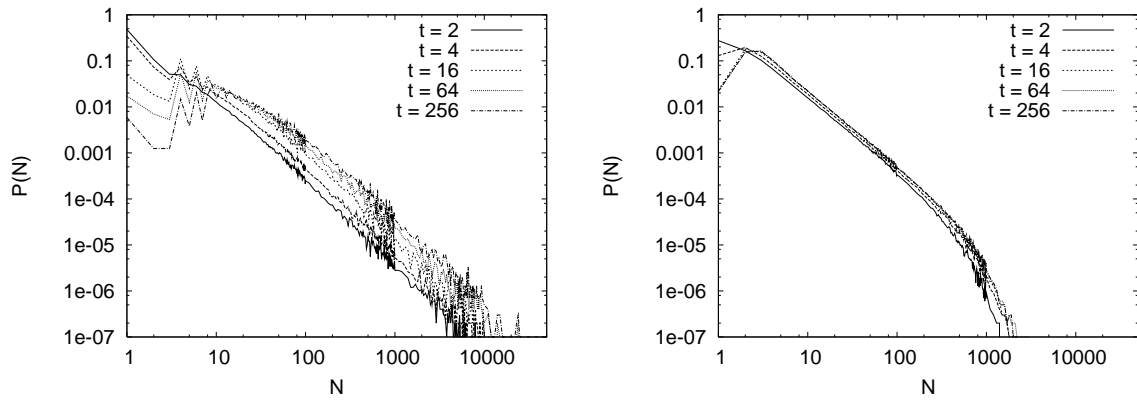


FIG. 12. Distributions de probabilité pour la population des domaines pour différents temps dans le $L = 1000$ RFIM avec $T = 0.63$. A gauche, $h = 0.1$ et à droite, $h = 1.5$

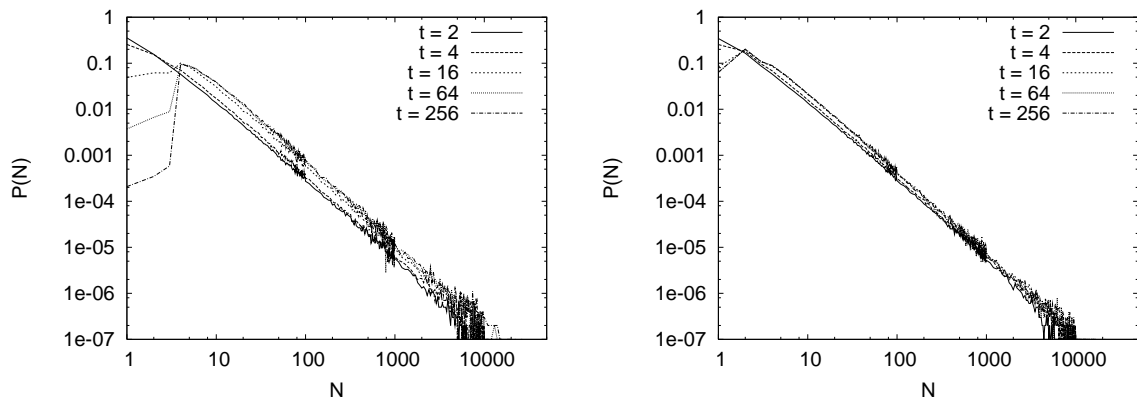


FIG. 13. Distributions de probabilité pour la population des domaines pour différents temps dans le $L = 1000$ RFIM avec $h = 1$. A gauche, $T = 0.1$ et à droite, $T = 1.5$

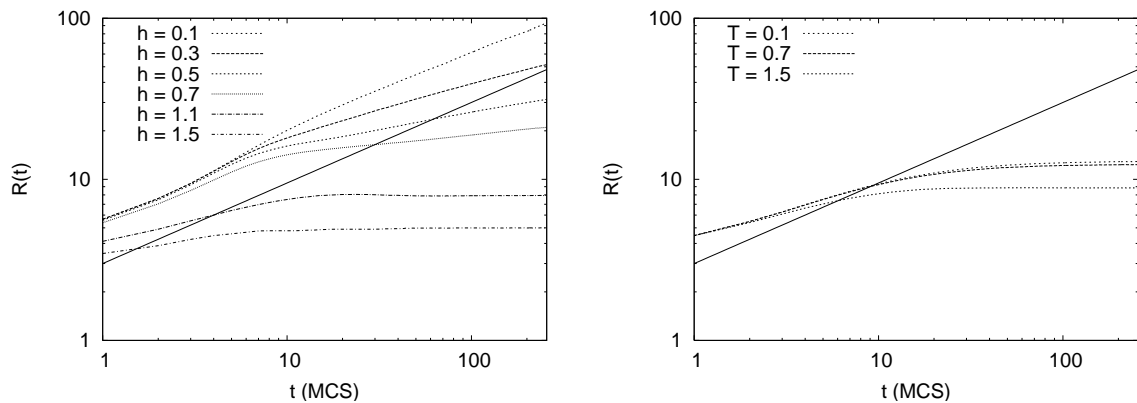


FIG. 14. évolution temporel de la longueur caractéristique des domaines $R(t)$ dans le $L = 1000$ RFIM pour différentes valeurs des paramètres. A gauche $T = 0.63$, a droite $\epsilon = 1$. La ligne continue représente la loi pour le système pur $R(t) \sim t^{1/2}$

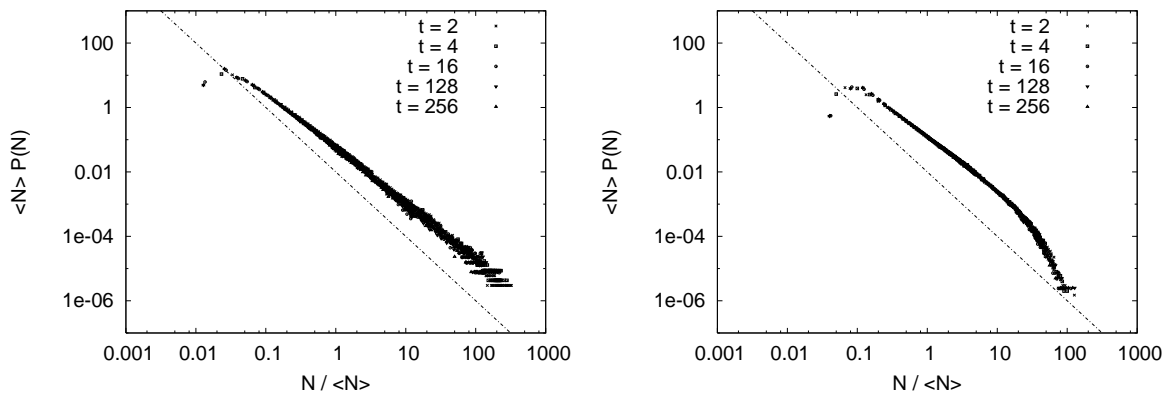


FIG. 15. Distributions de probabilité pour la population des domaines pour différents temps dans le $L = 1000$ RFIM, normalisés avec la population moyenne $N(t)$. À gauche, $h = 1$ et $T = 1.5$, à droite, $h = 1.5$ et $T = 0.63$. La ligne droite représente une loi de puissances d'exposant -2

5. Conclusions et perspectives

Dans ce travail nous avons étudié le *coarsening* dans trois variations du modèle d'Ising ferromagnétique en dimension deux. À l'aide de trois algorithmes bien connus (HBD, Hoshen-Kopelman et Hinrichsen-Antoni) nous avons construit une procédure pour obtenir les distributions de probabilité pour les tailles des domaines au cours du temps. Nous avons trouvé pour les queues de ces distributions une loi d'échelle universel.

Plusieurs lignes de recherches restent ouvertes.

Une étude plus approfondie de la géométrie des domaines dans les cas avec désordre gelé serait souhaitable. En particulier, connaître le caractère régulier ou fractal des volumes et surfaces des domaines est important pour bien comprendre la dynamique des systèmes désordonnés. Si chaque domaine est un objet régulier, son volume, donné par le nombre de spins dans leur intérieur, N , sera en simple rapport avec son périmètre, c'est-à-dire avec le nombre des spins sur la frontière, l : $N \propto l^d$. Au contraire, un objet fractal aurait $N \propto l^{d_f^N}$. De même pour sa surface, $S \propto l^{(d-1)}$ dans le cas régulier ou $S \propto l^{(d_f^S-1)}$ dans le fractal. $d_f^N, d_f^S < d$ sont les dimensions fractales du volumen et de la surface respectivement.

Nous pouvons tester cette hypothèse avec notre algorithme aussi bien en moyenne qu'en distribution. Le calcul du rayon de gyration des domaines, en utilisant, par exemple, l'algorithme en [14] donne aussi accès aux propriétés fractales des domaines.

L'hypothèse d'échelle prédit la dépendance temporelle des fonctions de corrélation et, d'habitude, elle est utilisée pour en déduire la dépendance temporelle de la taille typique des domaines, $R(t)$. Pourtant, avec cette approche, on obtient des fonctions $R(t)$ qui ne sont pas en accord avec les prédictions basées sur les arguments d'activation thermique (voir Sect. 2) pour les systèmes avec désordre gelé. Ce désaccord peut être dû au caractère pre-asymptotique des simulations numériques ou à une raison plus profonde liée à la distribution de barrières énergétiques. Ayant accès à la distribution

de tailles de domaines nous pouvons calculer l'évolution temporelle de la moyenne (voir, par exemple, la Figs. 5 pour le cas pur ou encore la Fig. 4.3 pour un cas désordonné) et tester avec elle l'hypothèse d'échelle dans un régime pré-asymptotique.

Finalement, le but à long terme de nos simulations est de comprendre le rôle des fluctuations dynamiques dans l'évolution vitreuse. Pour cela faire, nous voudrions comprendre dans tous les détails le cas relativement simple des système qui évoluent par croissance des domaines. En particulier, nous voudrions calculer les corrélations et réponses linéaires semi-locales,

$$C_x(t, t') = V_x \sum_{i \in V_x} s_i(t) s_i(t'), \quad R_x(t, t') = V_x \sum_{i \in V_x} \left. \frac{\delta s_i(t)}{h_i(t')} \right|_{h=0}, \quad (6)$$

les comparer aux prédictions théoriques résumées en [20], les mettre en rapport avec les distributions des tailles de domaines, identifier le rôle joué par les parois des domaines, ... et nous attaquer à tant d'autres questions ouvertes.

References

- [1] J. D. Gunton, M. San Miguel et P.S. Sahni, en *Phase Transition and Critical Phenomena* (Academic Press, London, 1983), Vol. 8 p.267
- [2] K. Binder et P. Fratzl, en *Materials Science and Technology* (Wiley-VCH, Weinheim, 2001), Vol 5, p.409
- [3] I. M. Lifshitz, Zh. Eksp. Teor. Fiz. **42**, 1354 (1962)
- [4] A. J. Bray, Adv. Phys. **43**, 357 (1994)
- [5] S. Puri, Phase Transitions, **77**, 469 (2004)
- [6] S. M. Allen et J. W. Cahn, Acta Metall. **27**, 1017 (1979)
- [7] D. A. Huse et C. L. Henley, Phys. Rev. Lett. **54**, 2708 (1985)
- [8] G. F. Mazenko et O. T. Valls, Phys. Rev. B **27**, 6811 (1983)
- [9] S. R. Anderson, Phys. Rev. B **36**, 8435 (1987)
- [10] H. Rieger, G. Schehr et P. Paul *cond-mat/0411234*
- [11] H. Hinrichsen et E. Domany, J. Stat. Phys. **88**, 617 (1997)
- [12] B. Derrida et G. Weisbuch, Europhys. Lett. **4**, 657 (1987)
- [13] J. Hoshen et R. Kopelman, Phys. Rev. B **14**, 3438 (1976)
- [14] J. Hoshen, M. W. Berry et K. S. Minser, Phys. Rev. E **56**, 1455 (1997)
- [15] D. Stauffer et A. Aharony, *Introduction to percolation theory*, (Taylor and Francis, London, 1992)
- [16] F. Babalievski, cond-mat/9711304 buscar donde fuer publicado.
- [17] H. Hinrichsen et M. Antoni, Phys. Rev. E **57**, 2650 (1998)
- [18] B. Derrida et Phys. Rev. E **55**, 3705 (1997)
- [19] J. Arenzon, L. F. Cugliandolo et A. Sicilia. Article en preparation
- [20] C. Chamon et L. F. Cugliandolo, Pramana **64**, 1075 (2005).