

Master 2 Systèmes Dynamiques et Statistique de la Matière Complexe

Parcours Physique Théorique des Systèmes Complexes

Responsables de stage : CUGLIANDOLO Leticia et SICILIA Alberto

Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies

CROISSANCE DES DOMAINES EN PARAMETRE D'ORDRE CONSERVÉ

SARRAZIN Yoann
yoann.sarrazin@hotmail.fr

13 juin 2008

Table des matières

1	Introduction	3
2	Le modèle d'Ising en paramètre d'ordre conservé (COP)	4
2.1	Rappels sur le modèle d'Ising (paramètre d'ordre non conservé)	4
2.2	Transition Gaz-coexistence Liquide/Gaz	5
2.3	Mélange de deux liquides : mélange binaire	9
3	Présentation de l'algorithme	12
3.1	L'algorithme de Kawasaki	12
3.2	Un algorithme plus efficace	14
3.3	Algorithme en temps continu	14
3.3.1	Variation d'énergie du système lors de l'échange de deux spins	14
3.3.2	L'algorithme	15
3.3.3	Renormalisation du temps	17
3.4	La diffusion des particules	17
3.4.1	La diffusion en volume	17
3.4.2	La diffusion en surface	18
3.4.3	Un algorithme pour la diffusion en volume	18
4	Etude numérique et analytique de la croissance des domaines	22
4.1	Snapshots	22
4.2	Echelle caractéristique	23
4.2.1	Estimation à partir de l'énergie	23
4.2.2	Estimation à partir de la fonction de corrélation	24
4.2.3	Explication par la théorie statistique des champs	25
4.2.4	Comparaison avec le cas Non Conservé	29
4.3	Loi d'échelle pour la densité des aires	30
4.3.1	Le cas Non Conservé	30
4.3.2	Retour au cas conservé	32
4.3.3	La loi d'échelle $h(x)$	33
4.4	La géométrie des domaines	34
4.5	Loi d'échelle pour la densité des périmètres	35
4.5.1	Le cas Non Conservé	35
4.5.2	Retour au cas conservé	36
4.6	Conclusion	37

Chapitre 1

Introduction

Lorsqu'un mélange d'eau et d'huile est porté à haute température, la concentration en huile du système est totalement homogène.

Par expérience, on sait qu'à température ambiante, si l'on mélange de l'eau et de l'huile, les deux entités se séparent en deux nappes, l'une étant essentiellement de l'huile et l'autre essentiellement de l'eau.

Il existe donc une température critique T_c telle que pour $T > T_c$, le système est homogène et pour $T < T_c$, il y a coexistence de deux phases.

Le but du stage est d'étudier analytiquement et numériquement la géométrie de la croissance des domaines, composés essentiellement d'eau ou d'huile, lorsque l'on refroidit brutalement un mélange binaire (composé de 50% d'eau et 50% d'huile) porté à température infinie jusqu'à une température inférieure à T_c .

Pour étudier l'évolution de ces systèmes, on utilisera le modèle d'Ising à aimantation fixée (paramètre d'ordre localement conservé). On explique, dans le Chapitre 2, comment un modèle magnétique peut décrire les systèmes binaires.

Le problème de la dynamique des systèmes binaires est qu'elle est régie par la diffusion, elle est donc extrêmement lente. Pour pouvoir étudier l'évolution, il faudra construire un algorithme "rapide", celui-ci est donné dans le Chapitre 3.

Le stage a commencé par la programmation de cet algorithme. Les premiers chapitres ne sont donc présents que pour la compréhension du lecteur quant à la physique étudiée et l'algorithme utilisé.

Cet algorithme nous permet d'observer les lois d'échelles dynamiques, on essaiera donc d'expliquer la forme analytique de ces lois, dans la dernière partie, en faisant référence aux résultats numériques.

Chapitre 2

Le modèle d'Ising en paramètre d'ordre conservé (COP)

Le modèle d'Ising en paramètre d'ordre conservé n'est autre que l'étude d'un matériau magnétique décrit par le modèle d'Ising "classique" dont on a fixé l'aimantation. L'idée est d'utiliser nos connaissances sur le modèle d'Ising classique (expliquant la transition Ferromagnétisme-Paramagnétisme) afin d'étudier les phénomènes de croissance de domaines lors de la démixtion d'un système binaire ou lors de la condensation d'un gaz composé d'un corps pur.

Dans ce chapitre, on explique l'équivalence de ces problèmes avec le modèle d'Ising en paramètre d'ordre conservé.

2.1 Rappels sur le modèle d'Ising (paramètre d'ordre non conservé)

Le modèle d'Ising est le modèle le plus simple permettant de prédire la transition Ferromagnétisme-Paramagnétisme de certains matériaux.

Il consiste à placer sur chaque noeud du réseau cristallin un spin de valeur ± 1 selon que le spin soit dirigé vers le haut ou vers le bas. Chaque spin est en interaction avec ses plus proches voisins.

En considérant un matériau homogène, le Hamiltonien du système prend la forme suivante :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \sum_i h_i^{ext} s_i, \quad (2.1)$$

où h_i^{ext} est le champ magnétique extérieur appliqué au site i , $\langle i, j \rangle$ signifie que l'on somme sur les paires de plus proches voisins et J représente l'énergie d'interaction entre les plus proches voisins. Celle-ci est favorable si les spins sont alignés et défavorable sinon.

L'état minimisant l'énergie du système en champ extérieur nul est celui où tous les spins sont alignés.

L'énergie thermique, quant à elle, favorise des états excités, c'est-à-dire des paires de spins anti-alignés. Par exemple, à température infinie, le système possède 50% de spins up et 50% de spins down.

Il y a donc une compétition entre l'agitation thermique et l'énergie d'interaction des spins

du système.

Ainsi, l'étude du modèle d'Ising permet de comprendre l'apparition d'une aimantation spontanée non nulle, pour certains matériaux, à des températures inférieures à une température critique T_c (voir Fig. 2.1). Pour un réseau carré 2D, $\frac{k_B T_c}{J} = 2,269$.

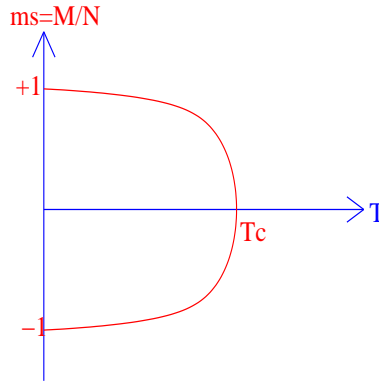


FIG. 2.1 – Prédiction par le modèle d'Ising de l'aimantation spontanée par spin ms en fonction de la température. M est l'aimantation totale du matériau et N est le nombre de spins.

2.2 Transition Gaz-coexistence Liquide/Gaz

Un gaz sur réseau est un modèle simple dans lequel les particules (atomes ou molécules) évoluent sur les noeuds d'un réseau.

Dans notre modèle, on suppose les particules sans inertie, évoluant sur les noeuds du réseau sous l'influence de l'agitation thermique et vérifiant les conditions suivantes :

1. Le réseau comporte N sites (qui sont les noeuds du réseau) dont une fraction ρ est occupée par les particules. Cette fraction doit évidemment être constante au cours du temps (conservation de la matière). Si une particule disparaît d'un site à un instant donné sous les effets de la température, alors elle doit réapparaître au même instant sur un autre site.
2. Un site contient au plus une particule à chaque instant. Cette règle est similaire aux effets de répulsion des sphères dures et permet d'introduire le plus simplement possible les interactions répulsives entre les particules.
3. Si deux particules occupent des sites voisins, elles ressentent une énergie négative $-\varepsilon$. Ce terme énergétique retranscrit les interactions attractives entre les particules.

Ce modèle est simpliste, notamment dans le fait que les interactions attractives et répulsives ont une longueur de portée du même ordre de grandeur. En réalité, les interactions attractives ont une longueur de portée beaucoup plus grande que les interactions répulsives, comme le prédit le modèle de Van der Waals.

Cependant, ce modèle décrit correctement la transition de phase entre le gaz homogène et la coexistence vapeur/solide au passage de la température critique, comme on le verra à la fin de ce paragraphe. Les grandeurs quantitatives telles que la température critique sont évidemment différentes dans le système physique, mais en vertu des phénomènes d'universalité, la description qualitative et les lois d'échelles sont justes.

On décrit le système à l'aide des variables :

$$\sigma_i = \begin{cases} 1 & \text{si le site est occupé} \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.2)$$

situées aux noeuds du réseau (donc i variant de 1 à N).

Avec cette définition, la règle 2 est automatiquement satisfaite et la règle 1 est équivalente à la condition suivante :

$$\sum_i \sigma_i = \rho N \quad (2.3)$$

qui est une constante. La règle 3, quant à elle, définit le Hamiltonien du système :

$$H = -\varepsilon \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.4)$$

où $\langle i, j \rangle$ désigne les paires de plus proches voisins.

L'équivalence avec le modèle d'Ising est effectuée en réalisant le changement de variable suivant : $s_i = 2\sigma_i - 1$ où s_i est le spin du modèle d'Ising qui prend la valeur 1 si le site est occupé et -1 sinon. Le Hamiltonien, exprimé en fonction des nouvelles variables, est :

$$H = -\frac{1}{4}\varepsilon \sum_{\langle i,j \rangle} (s_i + 1)(s_j + 1) = -\frac{1}{4}\varepsilon \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \frac{1}{2}z\varepsilon \sum_i s_i - \frac{1}{2}z\varepsilon N, \quad (2.5)$$

où z est le nombre de coordination (c'est à dire le nombre de sites plus proches voisins de chaque site, voir Fig. 2.2). De même, (2.3) se réécrit en :

$$\sum_i s_i = N(2\rho - 1), \quad (2.6)$$

que l'on injecte dans (2.5) pour obtenir :

$$H = -\frac{1}{4}\varepsilon \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - z\varepsilon N\rho. \quad (2.7)$$

Le second terme étant une constante pour un problème donné (on fixe le réseau et le nombre de particules), et le Hamiltonien étant défini à une constante près, on le redéfinit comme suit :

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j \text{ avec } J = \frac{\varepsilon}{4}. \quad (2.8)$$

Ce nouveau Hamiltonien est identique à celui d'Ising (donné au paragraphe précédent) en champ extérieur nul. La différence avec les matériaux magnétique est qu'ici, l'«*aimantation*» du système

$$M = N(2\rho - 1), \quad (2.9)$$

est fixée (elle représente l'occupation en volume des particules de gaz par rapport au volume accessible). C'est pour cette raison que l'on appelle le problème *modèle d'Ising en paramètre d'ordre conservé*. On traite donc le gaz sur réseau par le modèle d'Ising.

On va maintenant insister sur la différence avec le modèle magnétique due à la fixation de l'aimantation :

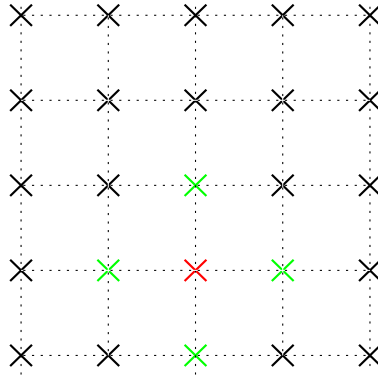


FIG. 2.2 – Exemple du nombre de coordination z pour un réseau carré 2D. Chaque site est représenté par une croix.

Chaque site (par exemple celui en rouge) est entouré de 4 sites (en verts) donc $z=4$ dans cet exemple.

Pour le modèle magnétique, il n'y a qu'un paramètre que l'on fait varier (dans le cas où le champ extérieur est nul) qui est la température et l'aimantation est l'observable du système (voir la Fig. 2.1 du paragraphe précédent).

Pour le gaz sur réseau, la densité de particules du gaz est un paramètre que l'on peut faire varier (en gardant à l'esprit que l'on change le système quand on change ρ). Il y a donc deux paramètres pour le système : la température et la densité moyenne de particules ρ (qui représente l'aimantation en terme d'Ising par (2.9)).

On réécrit (2.9) pour exprimer la densité moyenne de particules en fonction de l'aimantation par spin ms :

$$\rho = \frac{1}{2}\left(1 + \frac{M}{N}\right) = \frac{1}{2}(1 + ms). \quad (2.10)$$

Comme on l'a vu au paragraphe précédent, ms a deux valeurs d'équilibre pour des températures inférieures à T_c , l'une positive, l'autre négative (voir Fig. 2.1). Il y aura donc ici deux densités privilégiées énergétiquement :

$$\rho_+ = \frac{1}{2}(1 + |ms|), \quad \rho_- = \frac{1}{2}(1 - |ms|) \quad (2.11)$$

(voir Fig. 2.3).

Supposons que $T < T_c$ et que l'on prépare le système avec une densité moyenne ρ telle que $\rho_-(T) < \rho < \rho_+(T)$. Le système peut alors faire évoluer la densité locale de particules en chaque région du réseau vers l'une ou l'autre des valeurs préférentielles (ρ_+ ou ρ_-) en effectuant des séparations de phases. Il y a donc création de domaines possédant des densités différentes. A l'équilibre, il y a coexistence de deux domaines, l'un de faible densité (ρ_-) : le gaz, et l'autre de densité plus élevée (ρ_+) : «le solide» (son nom est du à la périodicité imposée par le réseau, mais on peut généraliser au cas d'un liquide).

Supposons maintenant que l'on prépare le système avec une densité moyenne hors de l'intervalle $[\rho_-(T), \rho_+(T)]$, par exemple $\rho < \rho_-$. Le système peut concentrer les particules dans certaines régions pour atteindre ρ_- qui est une densité privilégiée. Le problème est que ce processus déstabilise les autres régions du système où la densité locale s'éloigne encore

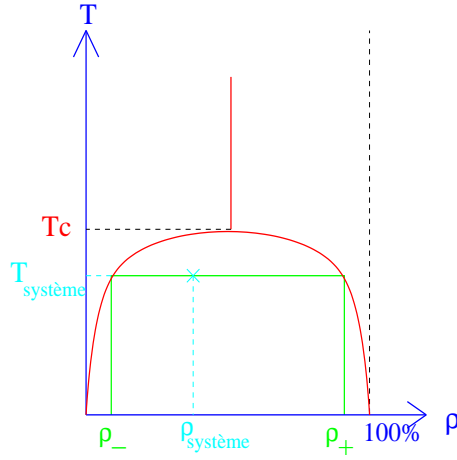


FIG. 2.3 – Représentation des densités privilégiées $\rho_+(T)$ et $\rho_-(T)$.

plus de ρ_- . Ce phénomène est énergétiquement défavorable et le système reste homogène. D'où le diagramme des phases donné en Fig. 2.4.

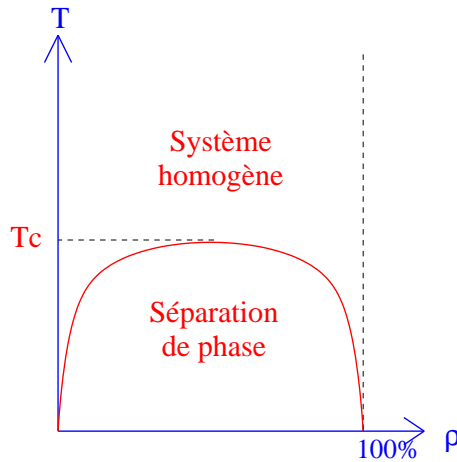


FIG. 2.4 – Diagramme des phases pour la transition entre le gaz et la coexistence gaz/phase condensée (liquide ou solide).

Pour montrer que ce modèle est qualitativement correct pour décrire la transition entre le gaz et la coexistence gaz/solide ou gaz/liquide, on va tenter d'expliquer les courbes de saturations. On prend le modèle du gaz parfait pour la phase gazeuse. On a ainsi $P = \rho_{\text{gaz}} k_B T$, soit $P_S = \rho_-(T) k_B T$ si $T < T_C$. On obtient ainsi les courbes de saturations données en Fig. 2.5. On peut les comparer avec le diagramme des phases de l'eau (voir Fig. 2.6). On voit que les courbes de saturations, autant pour la coexistence avec le solide qu'avec le liquide, sont qualitativement correctes.

Ce modèle est très simple et il semble très bien décrire qualitativement l'état d'équilibre pour la coexistence gaz/phase condensée. Notre but est d'étudier la dynamique de cette coexistence à l'aide de ce modèle.

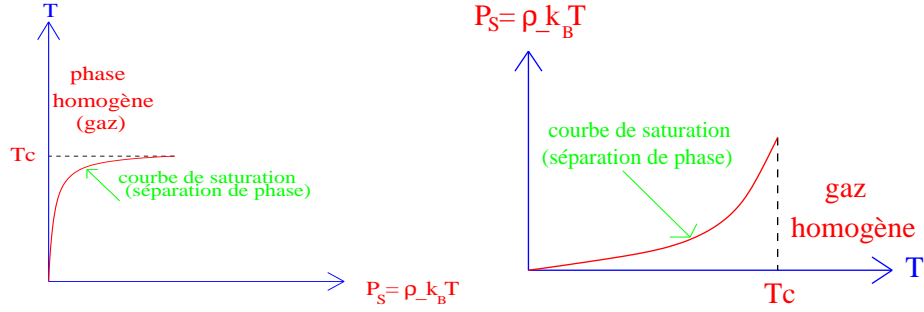


FIG. 2.5 – Courbes de saturations obtenues à partir de notre modèle.

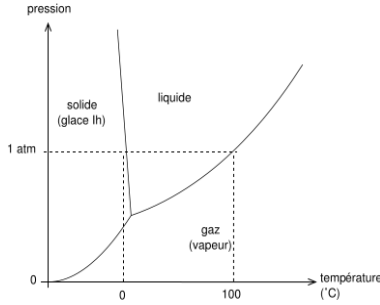


FIG. 2.6 – Diagramme des phases de l'eau (obtenu expérimentalement).

Les courbes de saturations sont les courbes qui délimitent les phases gaz/solide et gaz/liquide.

2.3 Mélange de deux liquides : mélange binaire

Le but de ce paragraphe est d'élargir la discussion de la section précédente au cas d'un mélange binaire composé de particules A et B.

Les particules évoluent toujours sur les noeuds d'un réseau sous l'influence de l'agitation thermique. Les variables que l'on considère sont

$$n_i^\alpha = \begin{cases} 1 & \text{si le site contient une particule de type } \alpha \\ 0 & \text{sinon} \end{cases} \quad (2.12)$$

où α représente l'espèce de la particule (A ou B) et i le site considéré. Les trois règles du cas précédent peuvent alors se généraliser comme suit :

1. Il n'y a pas de réaction chimique donc les nombres de particules de type A et B sont conservés :

$$\sum_i n_i^\alpha = N^\alpha = \text{constante avec } \alpha = A \text{ ou } B. \quad (2.13)$$

2. On est dans le cas d'un mélange de deux liquides, donc chaque site est occupé. Ainsi, chaque site contient une et une seule particule (interaction répulsive) :

$$\forall i \in [1, N], n_i^A + n_i^B = 1 \quad (2.14)$$

3. On associe les énergies d'interactions $-\varepsilon^{\alpha\beta}$ pour les particules plus proche voisines qui caractérisent les interaction attractives.

Le Hamiltonien de ce modèle est donc :

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} [\varepsilon^{AA} n_i^A n_j^A + \varepsilon^{BB} n_i^B n_j^B + \varepsilon^{AB} (n_i^A n_j^B + n_i^B n_j^A)] \quad (2.15)$$

La description à l'aide du modèle d'Ising est permise par le changement de variable suivant : $s_i = 2n_i^A - 1 = 1 - 2n_i^B$, où s_i est le spin du modèle d'Ising qui prend la valeur 1 si le site est occupé par une particule de type A et -1 s'il est occupé par une particule de type B. Le Hamiltonien prend la forme suivante :

$$H = - \left(\frac{\varepsilon^{AA} + \varepsilon^{BB} - 2\varepsilon^{AB}}{4} \right) \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - \frac{z(\varepsilon^{AA} - \varepsilon^{BB})}{4} \sum_{i=1}^N s_i - \frac{Nz}{8} (\varepsilon^{AA} + \varepsilon^{BB} + 2\varepsilon^{AB}) \quad (2.16)$$

En changeant l'origine de l'énergie, on retrouve le modèle d'Ising en champ extérieur h constant avec :

$$J = \frac{\varepsilon^{AA} + \varepsilon^{BB} - 2\varepsilon^{AB}}{4} \text{ et } h = \frac{z(\varepsilon^{AA} - \varepsilon^{BB})}{4} \quad (2.17)$$

L'«aimantation» du système est :

$$M = \sum_i s_i = 2 \sum_i n_i^A - N, \text{ avec } N = N^A + N^B \text{ et } \sum_i n_i^A = N^A \quad (2.18)$$

d'où l'aimantation par spin :

$$ms = 2c^A - 1, \quad (2.19)$$

où c^A est la concentration moyenne en particule A.

Par la suite , on se restreint au cas particulier où les particules de même type s'attirent de la même manière ($\varepsilon^{AA} = \varepsilon^{BB} = 1$) et les particules de type opposés se répulsent avec $\varepsilon^{AB} = -1$. Dans ce modèle, le champ extérieur h est nul et $J = 1$. On en déduit donc le diagramme des phases à l'équilibre du système binaire par équivalence avec le problème précédent : Fig. 2.7. Pour $T < T_c$ et $c_-^A(T) < c^A < c_+^A(T)$, il y a ségrégation de deux phases : l'une riche en particules A et l'autre en particules B.

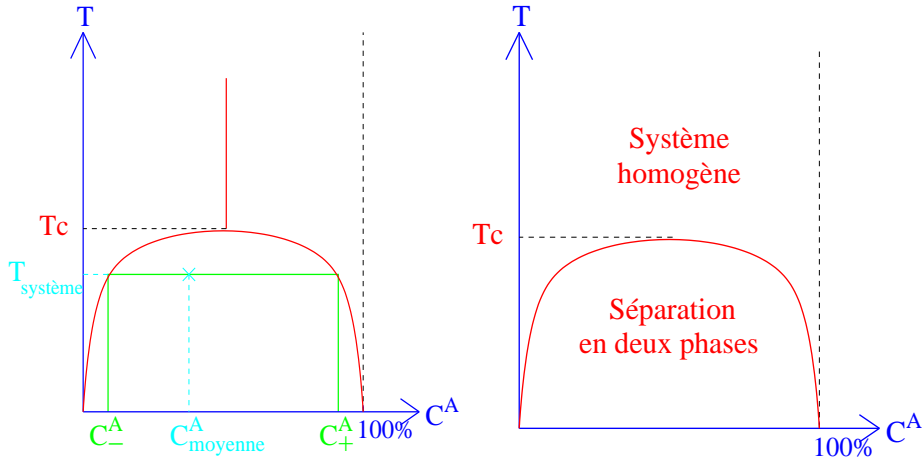


FIG. 2.7 – Diagramme des phases des mélanges binaires obtenu pour notre modèle.

Nous allons étudier la dynamique de la ségrégation de ces deux phases lorsque le système est refroidit brutalement de la température infinie à une température inférieure à T_c pour

des concentrations moyennes égales : $c^A = c^B = 0.5$. On verra que des petits domaines de concentration locales $c_+^A(T)$ et $c_-^A(T)$ se forment et se développent jusqu'à atteindre l'état d'équilibre où il ne reste que deux domaines. C'est ce que l'on appelle la croissance des domaines.

Gardons en tête les limites du modèle :

1. On considère que les interactions de type A-A et B-B sont identiques
2. On néglige l'inertie des particules (et donc la gravité)
3. On se restreint, par la suite, à un réseau carré 2D qui ne modélise pas l'isotropie présente dans les liquides en apesanteur.
4. On impose des conditions aux limites périodiques pour simplifier l'algorithme.

Chapitre 3

Présentation de l'algorithme

La croissance des domaines dans les mélanges binaires peut provenir de deux phénomènes physiques :

1. La coalescence de petits domaines pour en former un plus gros
2. La diffusion des particules. Supposons un domaine d'huile entouré d'eau, le gradient de concentration va engendrer une diffusion des particules d'huile et le domaine va diminuer.

C'est le second processus que l'on souhaite étudier. La diffusion étant un phénomène très lent, il va falloir mettre en place un algorithme *rapide*.

3.1 L'algorithme de Kawasaki

L'algorithme de Kawasaki (1965) est l'algorithme le plus simple permettant de décrire la dynamique du modèle d'Ising en paramètre d'ordre conservé : On choisit au hasard une paire de spins plus proche voisins sur le réseau et on échange leurs valeurs avec une probabilité d'acceptation qui dépend de la différence d'énergie entre l'état initial et l'état final ΔE :

$$\Delta E = E_\nu - E_\mu, \text{ où } \nu \text{ est l'état final et } \mu \text{ est l'état initial.} \quad (3.1)$$

Rappelons que dans l'exemple des mélanges binaires, chaque spin up correspond à une particule de type A et chaque spin down à une particule de type B.

La probabilité d'acceptation de l'échange des deux spins $A(\mu \rightarrow \nu)$ est donnée par un algorithme classique de Métropolis :

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \begin{cases} e^{-\beta\Delta E} & \text{si } \Delta E > 0 \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.2)$$

Les avantages de cet algorithme sont nombreux

- Il est très simple
- Il conserve le nombre de particules (paramètre d'ordre conservé)
- Il semble décrire la physique microscopique mise en jeu :
c'est une dynamique locale où les particules les plus proches peuvent échanger leur place pour minimiser l'énergie totale du système.
- L'ergodicité est vérifiée : chacune des particules peut explorer l'ensemble des sites en un temps fini.

- Le bilan détaillé est vérifié :
pour le réseau carré 2D auquel on se restreint, le nombre d'interactions (nombre de paires de spins plus proche voisins) est $2N$. La probabilité de choisir une interaction à un pas de l'algorithme donné est $g(\mu \rightarrow \nu) = \frac{1}{2N}$. Cette probabilité étant indépendante du pas, on trouve un ratio pour les probabilités d'échange tel que

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\mu \rightarrow \nu)A(\mu \rightarrow \nu)}{g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta\Delta E}. \quad (3.3)$$

Le problème de cet algorithme est sa lenteur : à chaque fois que l'on tire une interaction dont les deux spins sont alignés (particules de même type), on ne change pas l'état final du système et l'algorithme *perd* du temps. De plus, le nombre d'interactions entre spins antialignés diminue avec le temps. Pour le comprendre, on peut supposer l'existence d'une longueur caractéristique R que l'on verra au début du Chapitre 4 (elle caractérise la taille typique des domaines). Une croissance des domaines implique que $R = R(t)$ croissante avec le temps. La surface des domaines évolue en R^{d-1} , où d est la dimension de l'espace. Le volume des domaines évolue en R^d . Il y a donc une évolution du rapport surface/volume en $\frac{1}{R(t)}$ qui diminue avec le temps. Comme les interactions entre spins antialignés se trouvent à la surface des domaines alors que les interactions entre spins alignés se trouvent au coeur des domaines (volume), il y a effectivement diminution du nombre d'interactions entre spins antialignés et augmentation du nombre d'interactions entre spins alignés. Comme on se place dans le cas où $d = 2$, la surface des domaines est en fait un périmètre et le volume des domaine est une surface. On peut illustrer ce phénomène sur la Fig. 3.1

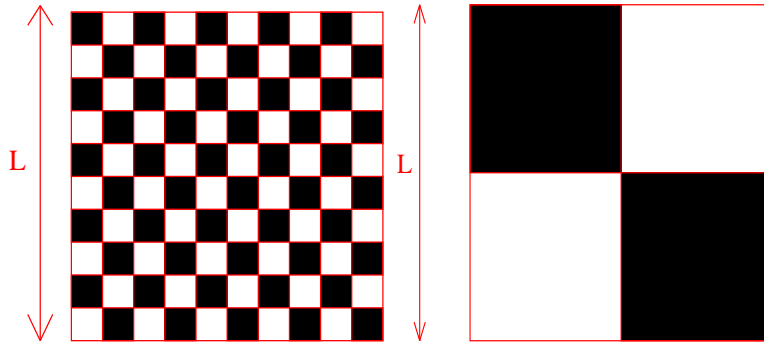


FIG. 3.1 – Les domaines sont représentés en noir et blanc. Le système considéré est un réseau carré 2D de dimension $L \times L$. On considère des conditions aux limites périodiques.

Dans le premier cas, qui correspond aux temps courts, le périmètre total des domaines vaut $100(4\frac{L}{10}) = 40L$. Il y a $20L$ interactions entre spins antialignés.

Dans le second cas, qui correspond à un temps plus long, le périmètre total des domaines a diminué et vaut $4(4\frac{L}{10}) = 8L$. Il y a $4L$ interactions entre spins antialignés.

Il est donc plus judicieux de ne considérer que les interactions où les spins sont antialignés. Le problème est que le nombre d'interactions où les spins sont antialignés change au cours de l'évolution, comme on vient de le préciser. Ceci a pour conséquence que $g(\mu \rightarrow \nu) \neq g(\nu \rightarrow \mu)$ et il faut donc construire un nouvel algorithme permettant de ne considérer que les interactions où les spins sont antialignés (particules de types différents) tout en vérifiant le bilan détaillé. C'est le sujet du paragraphe suivant.

3.2 Un algorithme plus efficace

Le principe de cet algorithme est de ne considérer que les interactions entre spins antialignés et de renormaliser le temps pour simuler l'échange des spins alignés qui ne changent pas l'état du système mais qui ont lieu en réalité. On va compter le temps écoulé en pas de Monte-Carlo par interaction (en MCS par interaction), c'est à dire qu'un pas écoulé lors de l'algorithme de Kawasaki correspond à un intervalle de temps $\Delta t = \frac{1}{2N}$. Supposons qu'au pas considéré, il y ait m interactions entre spins antialignés, la probabilité de tirer une telle interaction est $\frac{m}{2N}$ et la probabilité par unité de temps est donc $\frac{\frac{m}{2N}}{\frac{1}{2N}} = m$. Il suffit donc de renormaliser le temps écoulé lors d'un pas par $\frac{1}{m}$ pour obtenir la dynamique voulue en ne considérant que les interactions entre spins antialignés.

Pour cela, il faut créer, à l'origine, une liste contenant les interactions de paires de spins antialignés, puis à chaque pas, l'algorithme effectue les opérations suivantes :

1. On tire une paire au hasard parmi celles présentes dans la liste. On calcule le ΔE puis on effectue l'échange des deux spins selon la probabilité d'acceptation de Kawasaki $[A(\mu \rightarrow \nu)]$.
2. Le temps écoulé lors du pas considéré, exprimé en MCS par interaction, est $\Delta t = \frac{1}{m}$.
3. Si les spins ont effectivement échangé leur place, il faut mettre à jour la liste ainsi que m .

On peut à présent reprendre les arguments du début du paragraphe pour voir que cet algorithme vérifie bien le bilan détaillé. La probabilité par unité de temps de choisir une interaction entre spins antialignés est $\frac{1}{m\Delta t} = 1$ qui est indépendant de m donc du pas considéré ! Le ratio pour les probabilités d'échanges par unité de temps est donc donné par le ratio des probabilités d'acceptation et on a :

$$\frac{P(\mu \rightarrow \nu)}{P(\nu \rightarrow \mu)} = e^{-\beta\Delta E} \quad (3.4)$$

3.3 Algorithme en temps continu

Le problème de l'algorithme précédent est le rejet dû à la probabilité d'acceptation qui est une *perte* de temps. On va donc construire un nouvel algorithme (appelé algorithme de Monte-Carlo en temps continu) basé sur le concept du paragraphe précédent afin que chaque pas contribue à l'évolution du système.

3.3.1 Variation d'énergie du système lors de l'échange de deux spins

On suppose une interaction entre deux spins antialignés. Les spins considérés sont sur les sites i et j voisins. On décrit le problème à l'aide des *coordinances* k_α où α représente le site. La coordinance est le nombre de spins voisins alignés avec le spin sur le site considéré. En général, pour le réseau 2D carré considéré, la coordinance varie entre 0 et 4 mais comme on considère que les deux spins sont opposés, leurs coordinances est entre 0 et 3 (voir les spins en vert Fig. 3.2).

Lors de l'échange des deux spins, les seules interactions qui sont modifiées sont les 6 interactions plus proches voisines de l'interaction considérée (voir Fig. 3.2). L'énergie initiale de ces 6 interactions est

$$E_\mu = -J(k_i + k_j - (z - k_i - 1) - (z - k_j - 1)), \quad (3.5)$$

où z est le nombre de coordination et vaut 4 pour le réseau 2D carré.

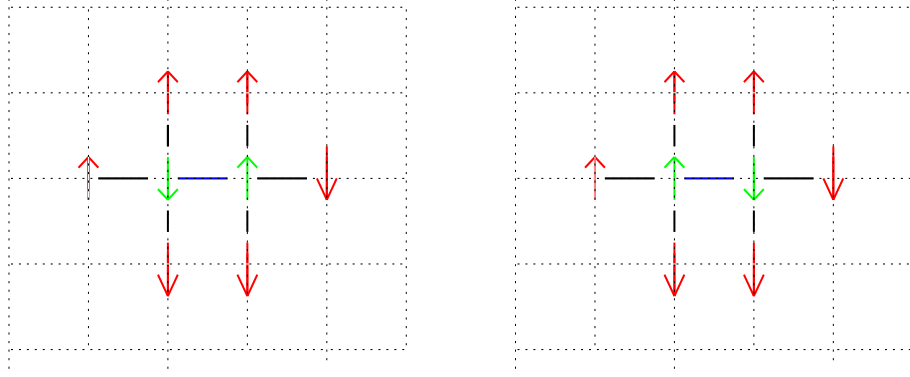


FIG. 3.2 – Exemple d’interaction entre spins antialignés pour un réseau 2D carré. Lorsque l’échange des deux spins (en vert) est effectué, on se retrouve dans la configuration de droite. Les seules interactions susceptibles de changer sont celles représentées en noir. L’interaction choisie (en bleu) n’est pas modifiée. La coordinance des deux sites en vert a évolué.

Après l’échange des deux spins, les coordinances des sites i et j changent de valeurs (voir Fig. 3.2) :

$$\begin{cases} k_i & \text{devient } k'_i = z - k_i - 1 \\ k_j & \text{devient } k'_j = z - k_j - 1 \end{cases} \quad (3.6)$$

L’énergie finale est donc

$$E_\nu = -J[(z - k_i - 1) + (z - k_j - 1) - k_i - k_j], \quad (3.7)$$

d’où la variation d’énergie du système lors de l’échange des deux spins :

$$\Delta E = 4J(k_i + k_j - z + 1) = 4J(l - z + 1). \quad (3.8)$$

L’entier $l = k_i + k_j$ varie entre 0 et 6 selon l’interaction entre spins antialignés choisie. Il existe donc 7 classes d’interactions caractérisées par l .

3.3.2 L’algorithme

On construit, au début, un tableau à 7 listes comportant toutes les interactions entre spins antialignés rangées selon l’entier l les caractérisant. Chaque liste correspond à une classe d’interactions entre spins antialignés et comporte m_l interactions. Chaque pas de l’algorithme effectue les opérations suivantes :

1. On choisit une liste l au hasard avec des probabilités proportionnelles à $m_l A_l$ où

$$A_l = \begin{cases} e^{-4J\beta(l-z+1)} & \text{si } l > z - 1 \\ 1 & \text{sinon} \end{cases} \quad (3.9)$$

2. On choisit une interaction au hasard (et uniformément) dans la liste l
3. La valeur des deux spins est échangée

4. Le temps écoulé lors du pas considéré, exprimé en MCS par interaction, est

$$\Delta t = \frac{1}{\sum_{i=0}^6 m_i A_i} \text{ (voir le paragraphe suivant)} \quad (3.10)$$

5. Le tableau contenant les interaction est mis à jour.

Comme précédemment, on peut vérifier le bilan détaillé :

La probabilité de choisir la liste l est

$$\frac{m_l A_l}{\sum_i m_i A_i} \quad (3.11)$$

donc la probabilité de choisir la paire considérée est

$$\frac{1}{m_l} \frac{m_l A_l}{\sum_i m_i A_i} = \frac{A_l}{\sum_i m_i A_i}. \quad (3.12)$$

La probabilité d'échange par unité de temps est donc

$$P(\text{change}) = \frac{A_l}{\sum_i m_i A_i} \frac{1}{\Delta t} = A_l \quad (3.13)$$

qui est indépendant des m_i .

La probabilité de retour à l'état précédent par unité de temps une fois l'échange effectué est : $P(\text{return}) = A_p$, où $p = k'_i + k'_j$ qui sont les nouvelles valeurs des coordinances des sites i et j . Ces valeur sont données par (3.6) d'où $p = 2(z-1) - k_i - k_j = 2(z-1) - l$.

Si $l > z-1$, alors $p < z-1$ et on a

$$\frac{P(\text{change})}{P(\text{return})} = \frac{A_l}{A_p} = \frac{e^{-\beta \Delta E}}{1} = e^{-\beta \Delta E}. \quad (3.14)$$

Si $l < z-1$, alors $p > z-1$ soit

$$A_p = e^{-4J\beta(k'_i+k'_j-z+1)} = e^{-4J\beta(2(z-1)-k_i-k_j-z+1)} = e^{4J\beta(k_i+k_j-z+1)} \quad (3.15)$$

d'où

$$\frac{P(\text{change})}{P(\text{return})} = \frac{A_l}{A_p} = \frac{1}{A_p} = e^{-\beta \Delta E}. \quad (3.16)$$

Pour le cas particulier où $l = z-1 = p$, $\Delta E = 0$ donc $A_l = A_p = 1$ soit

$$\frac{P(\text{change})}{P(\text{return})} = \frac{A_l}{A_p} = 1 = e^{-\beta \Delta E}. \quad (3.17)$$

En généralisant l'algorithme du paragraphe précédent, on a construit un algorithme qui "suit" la dynamique du système de manière continue d'où son nom de Monte-Carlo en temps continu.

3.3.3 Renormalisation du temps

On considère un cas très particulier pour expliquer un peu mieux d'où vient la formule (3.10) de renormalisation du temps.

On suppose un système à très basse température et proche de l'équilibre. Ces systèmes où la dynamique est extrêmement lente sont un réel problème pour la méthode de Monte-Carlo classique. Supposons que le système soit à l'équilibre, il va passer une grande partie de son temps dans l'état fondamental avant d'évoluer vers l'un des premiers états excités. Une méthode de Monte-Carlo classique exécuterait peut être des milliers de pas avant que le système change d'état pour atteindre le premier état excité (ceci est dû à la faible valeur des probabilités d'acceptation pour $\Delta E > 0$ à faible température).

On propose ici d'évaluer l'ordre de grandeur du temps passé dans l'état fondamental, exprimé en MCS, avant que le système évolue vers un état excité quelconque. Soit μ l'état fondamental, $P(\mu \rightarrow \mu)$ la probabilité de rester dans l'état fondamental lors d'un MCS, et t le temps écoulé en MCS. On a :

$$[P(\mu \rightarrow \mu)]^t = e^{t \ln(P(\mu \rightarrow \mu))}. \quad (3.18)$$

On voit apparaître un temps caractéristique Δt qui correspond au temps moyen passé par le système dans l'état fondamental avant d'évoluer vers un état excité. Son expression, compte tenu du cas particulier où μ est l'état fondamental et la température est faible, est :

$$\Delta t = -\frac{1}{\ln(P(\mu \rightarrow \mu))} = -\frac{1}{\ln(1 - \sum_{\nu \neq \mu} P(\mu \rightarrow \nu))} \sim \frac{1}{\sum_{\nu \neq \mu} P(\mu \rightarrow \nu)}, \quad (3.19)$$

où ν est l'ensemble des états accessibles du système à partir de l'état μ .

La justification de la généralisation de la formule (3.19) à l'algorithme précédent (dynamique hors d'équilibre loin de l'état fondamental) est uniquement la vérification du bilan détaillé à partir de (3.10).

3.4 La diffusion des particules

Jusqu'ici, on s'est efforcé de trouver un algorithme efficace pour la simulation des ségrégations de phases en paramètre d'ordre conservé, sans changer la dynamique du modèle. On a déjà vu que deux processus contribuent à la croissance des domaines : la coalescence (due à la *diffusion en surface*) et la diffusion des particules (*diffusion en volume*). Dans ce chapitre, on détaille les deux processus et on explique comment diminuer le premier afin de pouvoir étudier plus en détail le second.

3.4.1 La diffusion en volume

La diffusion en volume est le nom que l'on donne aux mouvements des particules lorsqu'elles quittent un domaine de leur type pour en rejoindre un autre en passant par un domaine de type différent (voir Fig. 3.3).

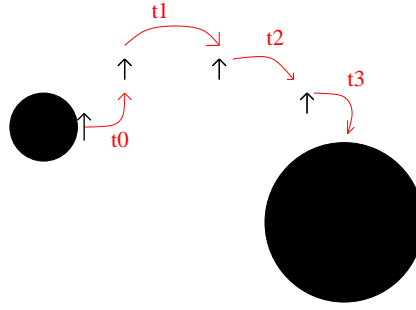


FIG. 3.3 – Illustration de la diffusion en volume.

Les cercles noirs représentent deux domaines de spins up séparés par un domaine de spins down (en blanc). Un spin se détache du premier domaine pour atteindre le deuxième. L'évolution est telle que $t_0 < t_1 < t_2 < t_3$.

3.4.2 La diffusion en surface

La diffusion en surface est le nom donné aux mouvements des particules qui évoluent sur la surface du domaine auquel elles appartiennent (voir Fig. 3.4). Ce phénomène a pour conséquence que les petits domaines peuvent se déplacer. Lorsque deux petits domaines de même type se rencontrent, ils en forment un plus gros (voir Fig. 3.5) et ce processus contribue à la croissance des domaines.

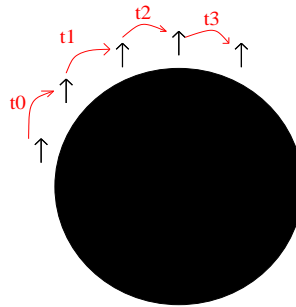


FIG. 3.4 – Illustration de la diffusion en surface.

L'évolution est telle que $t_0 < t_1 < t_2 < t_3$. On voit que *l'environnement* du spin déplacé ne change pas au cours du temps : il n'y a pas d'énergie d'activation nécessaire pour effectuer ce mouvement.

3.4.3 Un algorithme pour la diffusion en volume

Au sens énergétique, le phénomène de diffusion en surface est prépondérant sur celui de diffusion en volume. La raison est qu'aucune énergie n'est nécessaire pour bouger un spin le long de la surface d'un domaine (voir Fig. 3.4) alors que séparer un spin de son domaine demande une certaine énergie (*énergie d'activation*).

De plus, aux temps courts, on est proche de la configuration initiale, qui correspond à une température infinie. Les bords des domaines occupent donc une très grande partie de l'espace (voir Fig. 3.6) et la diffusion en surface est largement dominante. Comme on l'a expliqué précédemment, la croissance des domaines implique une diminution de l'espace occupé par les bords des domaines jusqu'à ce que la diffusion en volume soit prédominante.

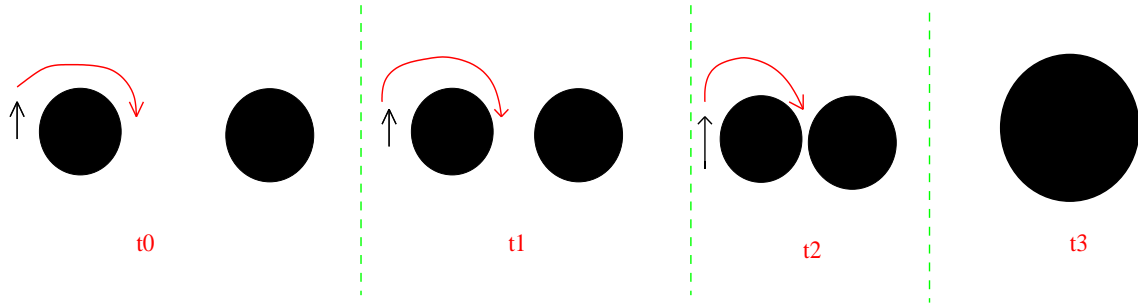


FIG. 3.5 – Contribution à la croissance des domaines de la diffusion en surface. L'évolution est telle que $t_0 < t_1 < t_2 < t_3$.

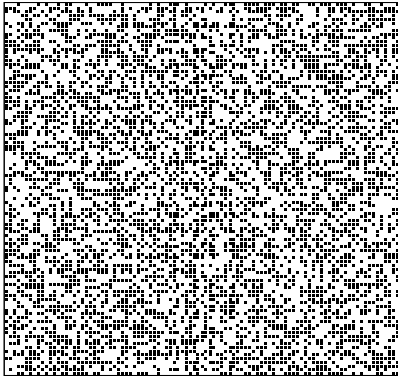


FIG. 3.6 – Photo à température infinie, pour un réseau 2D carré, de taille 100*100. Il y a 50% de spin up (en noir) et 50% de spins down (en blanc).

Nous voulons diminuer la diffusion en surface afin d'étudier la diffusion en volume. Bien sur, il faudra garder en tête l'approximation effectuée lors de l'analyse des données et se souvenir qu'aux temps courts, la dynamique de notre algorithme diffère de la réalité. Par contre, une fois que l'espace occupé par les bords des domaines a suffisamment diminué, la dynamique suivie par ce nouvel algorithme est juste.

Cette diminution de la diffusion en surface au profit de la diffusion en volume est rendue possible en changeant la valeur des probabilités d'acceptation et ainsi imposer une *énergie d'activation* fictive à la diffusion en surface. La nouvelle probabilité d'acceptation de passer de l'état μ à l'état ν est

$$A_{(k_i, k_j)} = \frac{e^{-4\beta J k_i} + e^{-4\beta J k_j}}{2} \leq 1, \quad (3.20)$$

où k_i et k_j sont les coordonnées des sites i et j dans l'état initial. On voit que la classe de l'interaction n'est plus caractérisée par $l = k_i + k_j$ mais par le couple (k_i, k_j) . L'algorithme est donc en tout point identique au précédent, il suffit de construire le tableau des interactions en fonction de (k_i, k_j) (au lieu de l) et de remplacer m_l par $m_{(k_i, k_j)}$ et A_l par $A_{(k_i, k_j)}$.

On vérifie le bilan détaillé en repartant de (3.14) :

$$\frac{P(\text{change})}{P(\text{return})} = \frac{A_{(k_i, k_j)}}{A_{(k'_i, k'_j)}}, \quad (3.21)$$

d'où en utilisant (3.6) et (3.20) :

$$\begin{aligned} \frac{P(\text{change})}{P(\text{return})} &= \frac{e^{-4\beta J k_i} + e^{-4\beta J k_j}}{e^{-4\beta J(z-1-k_i)} + e^{-4\beta J(z-1-k_j)}} \\ &= e^{4\beta J(z-1)} \left(\frac{e^{-4\beta J k_i} + e^{-4\beta J k_j}}{e^{4\beta J k_i} + e^{4\beta J k_j}} \right) \\ &= e^{4\beta J(z-1)} \left(\frac{e^{-4\beta J \frac{k_i+k_j}{2}}}{e^{4\beta J \frac{k_i+k_j}{2}}} \right) \left(\frac{e^{-4\beta J \frac{k_i-k_j}{2}} + e^{-4\beta J \frac{k_j-k_i}{2}}}{e^{4\beta J \frac{k_i-k_j}{2}} + e^{4\beta J \frac{k_j-k_i}{2}}} \right) \\ &= e^{-4\beta J(k_i+k_j-z+1)} \\ &= e^{-\beta \Delta E}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Pour se convaincre de la diminution de la diffusion de surface, il suffit de remarquer que pour les sites aux bords des domaines, la coordinance est non nulle, donc la probabilité d'acceptation d'un mouvement en surface est strictement inférieure à 1 et d'autant plus faible que la température est faible. Par contre, dans le cas précédent, la probabilité d'acceptation de la diffusion en surface pouvait être égale à 1 !

De plus, ces nouvelles probabilités d'acceptation ne modifient que très peu la diffusion en volume (pour s'en convaincre, voir Fig. 3.7 à 3.10).

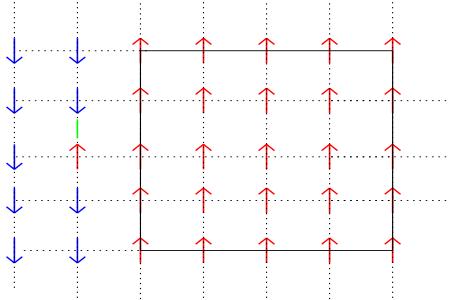


FIG. 3.7 – On suppose une diffusion en surface le long d'un domaine de spins up (carré noir). L'interaction considérée est en vert.

On appelle A_1 la probabilité d'acceptation sans approximation et A_2 la probabilité d'acceptation pour la diffusion en volume. $A_1 = 1$ mais $k_i = 1$ et $k_j = 2$ donc $A_2 < 1$ et d'autant plus faible que la température est faible. On diminue considérablement la diffusion en surface.

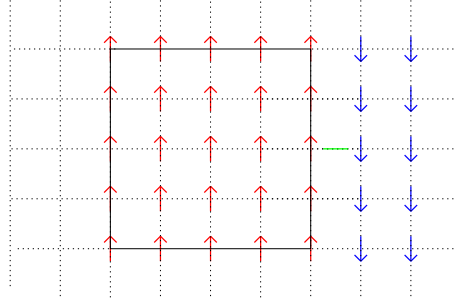


FIG. 3.8 – On suppose maintenant la diffusion en volume.
 On considère, sur cette figure, le début d’une telle diffusion. L’interaction considérée est représentée en vert.
 $k_i = 3$ et $k_j = 3$ donc $A_1 = A_2 = e^{-12\beta J}$.

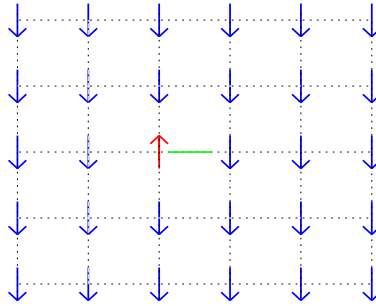


FIG. 3.9 – On considère, sur cette figure, la diffusion en volume, lorsqu’un spin up se propage au sein d’un domaine down. L’interaction considérée est représentée en vert.
 $k_i = 0$ et $k_j = 3$ donc $A_1 = 1$ et $A_2 = (1 + e^{-12\beta J})/2$ qui sont du même ordre de grandeur.

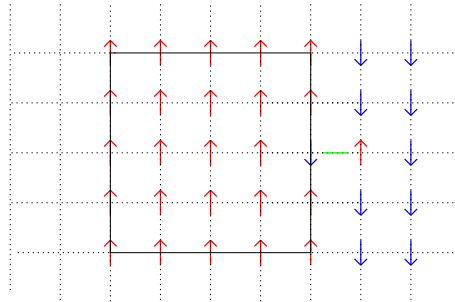


FIG. 3.10 – On considère, sur cette figure, la fin de la diffusion en volume. L’interaction considérée est représentée en vert.
 $k_i = 0$ et $k_j = 0$ donc $A_1 = A_2 = 1$.
 Les nouvelles probabilité d’acceptation ne changent donc que très peu la dynamique de la diffusion en volume.

Chapitre 4

Etude numérique et analytique de la croissance des domaines

4.1 Snapshots

On rappelle le problème : on étudie, à l'aide d'un algorithme, la croissance des domaines par diffusion de particules dans les mélanges binaires. Pour se faire, le système est porté à température infinie puis, à l'instant $t=0$, on le refroidit instantanément à une température $T < T_c$. Dans notre algorithme, on a posé $k_B = 1 = J$ soit $T_c = 2,269$.

En Fig. 4.1, on montre des snapshots lors de l'évolution d'un système 100×100 refroidit à une température $T = 1$. L'évolution des domaines semble satisfaisante.

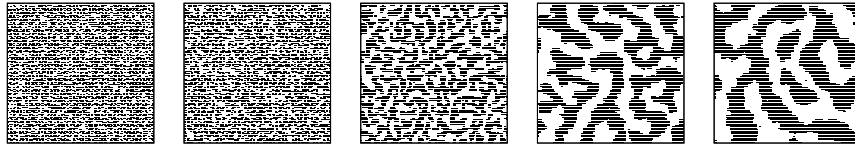


FIG. 4.1 – Evolution d'un système 100×100 refroidit à $T=1$ à l'instant initial. Les temps sont donnés en MCS et augmentent de gauche à droite : $t=0$; $t=2^{10}$; $t = 2^{15}$; $t = 2^{20}$; $t = 2^{22}$.

Sur la Fig. 4.2, on montre les différents états d'équilibre auxquels on parvient lorsque l'on fait évoluer différents échantillons. Ce résultat est aussi satisfaisant : l'état circulaire (qui diminue la surface du bord et donc l'énergie quand l'état up est entouré par l'état down) et l'état en bande (où les deux domaines up et down sont totalement séparés) sont les deux minimums prépondérants de l'énergie.

Supposons que l'état en bande soit le minimum absolu. Si on atteint l'état circulaire, le système attend un temps proche de l'infini avant de passer à l'état en bande. Ceci est dû aux géométries loin de l'état circulaire nécessaires pour atteindre l'état en bande. Il y a nécessité d'une grande énergie d'activation (voir Fig. 4.3).

Dans la suite, on supposera que T est relativement faible devant T_c afin de pouvoir considérer la concentration des domaines proche de 0 ou 1 (conformément à la Fig. 2.7). De plus, on se place à une concentration totale de 50% pour pouvoir utiliser nos connaissances sur la percolation (\sim état initial des domaines), pour avoir un maximum de domaines (donc



FIG. 4.2 – Etats d'équilibre accessibles pour un système 100*100 refroidit à $T=1$. Ces quatre configurations sont obtenues en laissant plusieurs échantillons évoluer jusqu'à $t=2^{28}$.

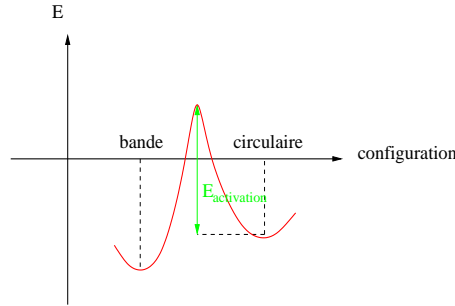


FIG. 4.3 – Représentation de l'énergie d'activation nécessaire afin d'évoluer vers l'état en bande lorsque le système est dans la configuration circulaire.

une bonne statistique) et pour pouvoir comparer avec le modèle magnétique (paramètre d'ordre non conservé).

4.2 Echelle caractéristique

4.2.1 Estimation à partir de l'énergie

Supposons que le système soit à l'équilibre (par exemple dans l'état Fig. 4.4.a). Son énergie E_0 est proche de $-(2N)J$ en négligeant l'énergie de surface devant l'énergie de volume. On obtient ainsi une énergie par spin à l'équilibre $\epsilon_0 \sim -2J$. Cette approximation n'est vraie que proche de l'équilibre où le périmètre total des domaines est négligeable devant le volume total. Durant l'évolution, le système se retrouve dans des configurations proches de Fig. 4.4.b et $E(t) \sim -2JN + 2JD$ où D est le nombre d'interactions entre spins antialignés.

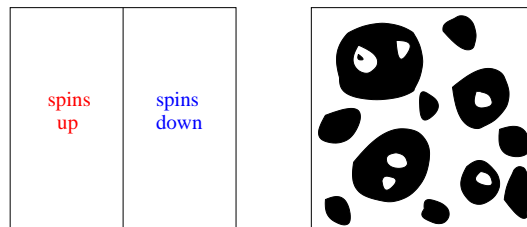


FIG. 4.4 – Sur la figure a de gauche, le système est à l'équilibre.

La figure b de droite représente une configuration du système lors de son évolution. Les spins up sont en noir et les down en blanc.

On obtient donc un nombre moyen d'interactions entre spins antialignés par spin $l(t) \sim \frac{D}{N} \sim \frac{\epsilon(t) - \epsilon_0}{2J}$ où $\epsilon(t)$ est l'énergie par spin du système à l'instant considéré. On prend, comme

ordre de grandeur de la taille des domaines, $R_c(t) \sim \frac{1}{l(t)} \sim \frac{2J}{\epsilon(t) - \epsilon_0}$. On donne une justification graphique Fig. 4.5.

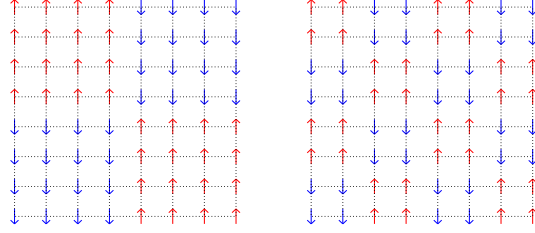


FIG. 4.5 – Sur la figure de gauche, $D = 4 * 8 = 32$, soit $l = \frac{D}{N} = 0.5$. On a donc $R_c = 2$. On peut en effet approximer un domaine par un cercle de rayon 2 fois le pas du réseau, d'où une longueur caractéristique adimensionnée égale à 2.

Sur la figure de droite, $D = 8 * 8 = 64$, soit $l = \frac{D}{N} = 1$. On a donc $R_c = 1$. On peut en effet approximer un domaine par un cercle de rayon le pas du réseau, d'où une longueur caractéristique adimensionnée égale à 1.

L'évolution de la taille caractéristique $R_c(t)$ à partir de la définition de l'énergie est donnée sur la Fig. 4.6. On voit une loi d'échelle apparaître pour des temps suffisamment grands (pour ce système, on voit la loi pour $t \gtrsim 10^6$). Cette loi d'échelle semble être $R_c(t) \sim t^{\frac{1}{3}}$.

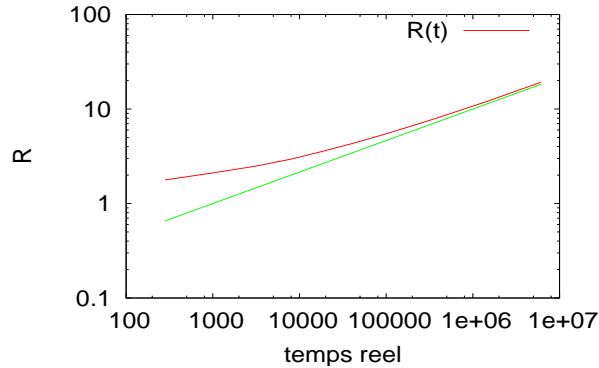


FIG. 4.6 – Evolution de la longueur caractéristique pour un système $1000 * 1000$ à $T=1$. La droite en vert représente une loi en $t^{\frac{1}{3}}$.

Avant de donner une explication à cette loi d'échelle, on va la confirmer par la fonction de corrélation.

4.2.2 Estimation à partir de la fonction de corrélation

L'estimation de la taille caractéristique des domaines peut aussi être effectuée à partir de la fonction de corrélation. Par exemple, en définissant la taille caractéristique comme étant la distance où la fonction de corrélation s'annule pour la première fois.

Au lieu d'effectuer cette analyse, on se propose de vérifier directement l'évolution de la longueur caractéristique $R_c(t) \sim t^{\frac{1}{3}}$. Soit $\phi(\mathbf{x}, t)$ le *champ magnétique moyen coarse-grainé par spin*. La définition de la fonction de corrélation est :

$$C(\mathbf{r}, t) = \langle \phi(\mathbf{x} + \mathbf{r}, t) \phi(\mathbf{x}, t) \rangle \quad (4.1)$$

où $\langle \rangle$ représente la moyenne d'ensemble statistique. L'évolution de la fonction de corrélation est donnée sur la Fig. 4.7. L'existence d'une seule longueur caractéristique $R_c(t)$ implique

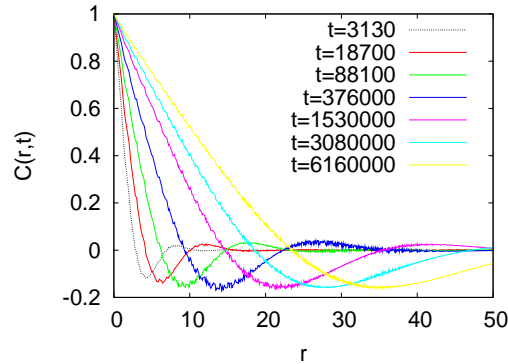


FIG. 4.7 – Evolution de la fonction de corrélation à $T=1$, pour un système 1000×1000 .

que la fonction de corrélation vérifie la loi d'échelle suivante :

$$C(\mathbf{r}, t) = f\left(\frac{r}{R_c(t)}\right) \text{ avec } f(0) = 1 \quad (4.2)$$

La vérification de la loi d'échelle est donnée sur la Fig. 4.8. On voit que ce graphique

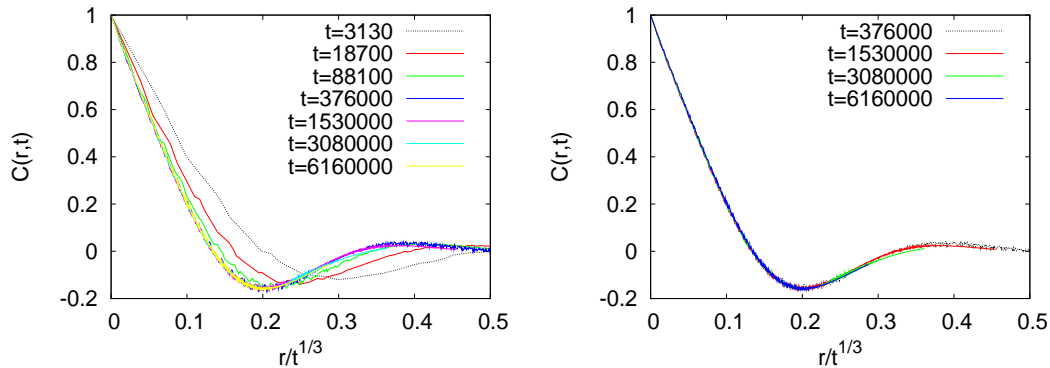


FIG. 4.8 – Loi d'échelle pour la fonction de corrélation à $T=1$, pour un système 1000×1000 .

confirme l'évolution de la taille caractéristique $R_c(t) \sim t^{1/3}$ pour des temps suffisamment élevés. Il y a aussi confirmation du temps caractéristique à partir duquel la loi est vérifiée $t \sim 10^6$ (cette valeur dépend de la taille du système et de la température T).

4.2.3 Explication par la théorie statistique des champs

Le modèle B

On rappelle que la théorie statistique des champs dynamique en paramètre d'ordre conservé, c'est-à-dire que $\int d^2x \phi(x, t)$ est une constante au cours du temps (en dimension 2), est régie par une équation appelée *Modèle B*. Ce modèle provient directement de la conservation de ϕ :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} + \text{div}(\mathbf{J}) = 0 \quad (4.3)$$

où \mathbf{J} est le flux du champ ϕ permettant de minimiser l'énergie totale du système. On construit une relation entre le flux \mathbf{J} et le Hamiltonien H en s'appuyant sur une équation à la Langevin :

$$\mathbf{J} = -\Gamma \nabla \left(\frac{\delta H}{\delta \phi} \right) \quad (4.4)$$

On obtient donc l'équation maîtresse en renormalisant le temps pour s'affranchir de Γ :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = \Delta \left(\frac{\delta H}{\delta \phi} \right). \quad (4.5)$$

On suppose que l'énergie totale du système est une fonctionnelle de Landau dont la forme est :

$$H[\phi] = \int d^2x \left(\frac{1}{2} (\nabla \phi)^2 + V(\phi) \right), \quad (4.6)$$

où $V(\phi)$ possède une structure en double puit permettant de caractériser les deux états privilégiés de l'aimantation $\pm|m|$. On suppose que la température est suffisamment faible (petite devant T_c) pour pouvoir supposer que les deux états privilégiés correspondent à des aimantations par spin ± 1 . On prend donc comme valeur analytique du potentiel $V(\phi) = (1 - \phi^2)^2$ (représenté Fig. 4.9). L'équation (4.5) devient alors :

$$\frac{\partial \phi}{\partial t} = -\Delta (\Delta \phi - V'(\phi)). \quad (4.7)$$

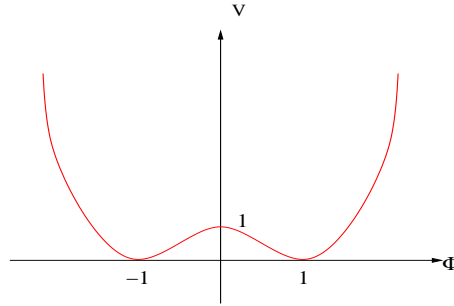


FIG. 4.9 – Représentation du potentiel en fonction du champ. Les valeurs du champ réellement accessibles sont comprises entre -1 et 1.

La tension de surface

Nous allons montrer ici que le premier terme de l'énergie totale du système représente un excès d'énergie localisé sur les parois des domaines.

On suppose un domaine down séparé d'un domaine up par une frontière (voir Fig. 4.10). On appelle g la coordonnée normale à cette frontière. L'évolution du bord (la frontière) est définie par $\frac{\partial \phi}{\partial t} = 0$. L'équation (4.7) donne :

$$\frac{d^2 \phi}{dg^2} = \frac{dV}{d\phi}, \quad (4.8)$$

avec $\phi(\pm\infty) = \pm 1$. En multipliant (4.8) par $\frac{d\phi}{dg}$ puis en intégrant, on trouve

$$\left(\frac{d\phi}{dg} \right)^2 = 2V(\phi). \quad (4.9)$$

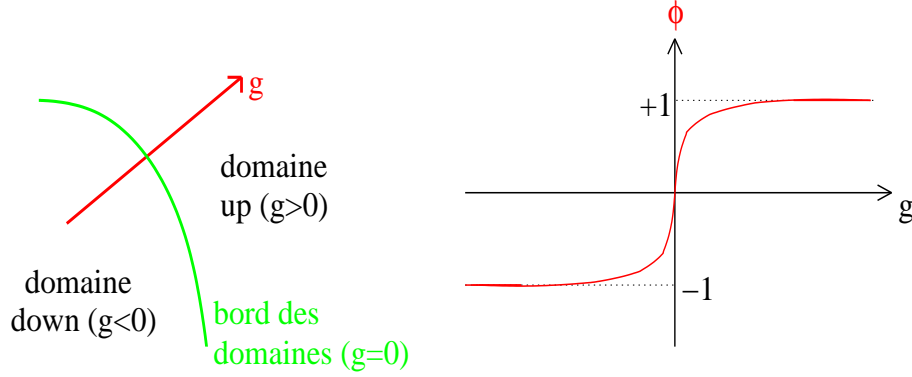


FIG. 4.10 – La frontière est définie par $\phi = 0$. L'origine de g est prise à la frontière.

De plus, ϕ sature exponentiellement (vers ± 1) lorsque l'on s'écarte du bord du domaine (on l'admet). Le gradient de ϕ prend donc des valeurs non nulles proche des frontières et on voit apparaître une énergie par unité de longueur des frontières (l'équivalent à 2D de l'énergie par unité de surface) :

$$\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} dg \left(\frac{d\phi}{dg} \right)^2 = \int_{-1}^{+1} d\phi (2V(\phi))^{\frac{1}{2}}. \quad (4.10)$$

Par abus de langage avec le cas à 3D, σ est appelée tension de surface (ici c'est plutôt une *tension de longueur*). Cette tension de surface traduit le fait que le premier terme de (4.11) en présence du double puit $V(\phi) = (1 - \phi^2)^2$ est une concentration d'énergie sur les parois des domaines.

Evolution de la taille caractéristique

On réécrit le modèle B (4.7) par le système d'équations suivants :

$$\begin{cases} \frac{\partial \phi}{\partial t} = -\nabla \cdot \mathbf{j} \\ \mathbf{j} = -\nabla \mu \\ \mu = V'(\phi) - \Delta \phi \end{cases} \quad (4.11)$$

Où l'on voit le problème comme un problème de diffusion.

Supposons que l'on soit dans un domaine up (loin des bords), on peut écrire le champ comme $\phi = 1 + \varphi$ avec φ négatif et de module petit devant 1. On sait que lorsque l'on s'éloigne des frontières, le champ tend exponentiellement vers 1. On peut donc négliger toute dérivée de ϕ au sein du domaine. La troisième équation du système (4.11) donne donc au sein du domaine :

$$\mu \simeq V'(\phi) \simeq V''(\phi = 1)\varphi \quad (4.12)$$

en effectuant un développement limité de V' autour de $\phi = 1$. Comme on néglige toute dérivée de ϕ à l'intérieur du domaine, on a :

$$\Delta \mu = 0. \quad (4.13)$$

Maintenant, plaçons nous proche de l'interface où le $\nabla \phi$ est non négligeable (et même dominant) :

$$\nabla \phi = \left(\frac{\partial \phi}{\partial g} \right)_t \mathbf{g} \quad (4.14)$$

où \mathbf{g} est le vecteur directeur unitaire de g dans le sens croissant de ϕ . On a alors :

$$\Delta\phi = \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial g^2}\right)_t + \left(\frac{\partial\phi}{\partial g}\right)_t (\nabla \cdot \mathbf{g}). \quad (4.15)$$

La troisième équation du système (4.11) se réécrit donc proche de l'interface :

$$\mu = V'(\phi) - \left(\frac{\partial\phi}{\partial g}\right)_t \kappa - \left(\frac{\partial^2\phi}{\partial g^2}\right)_t, \quad (4.16)$$

où $\kappa = (\nabla \cdot \mathbf{g})$ est la courbure de l'interface à l'endroit considéré. On suppose que μ varie lentement près de la paroi. En multipliant cette dernière équation par $\left(\frac{\partial\phi}{\partial g}\right)_t$ (qui est piquée en $g = 0$), puis en intégrant de part en d'autre de la paroi, on a :

$$\begin{cases} \int \mu \left(\frac{\partial\phi}{\partial g}\right)_t .dg = \mu(\phi(2) - \phi(1)) = \mu\Delta\phi \\ \int \frac{\partial V}{\partial \phi} \cdot \left(\frac{\partial\phi}{\partial g}\right)_t .dg = V(2) - V(1) = \Delta V \\ \int \left(\frac{\partial\phi}{\partial g}\right)_t^2 .dg = \sigma \end{cases} \quad (4.17)$$

On obtient donc, à l'interface : $\mu\Delta\phi = \Delta V - \sigma\kappa$. Dans le cadre de notre problème (voir Fig. 4.11), on a $\Delta V = V(\phi = 1) - V(\phi = -1) = 0$ et $\Delta\phi = 2$. La condition, à l'interface se restreint à $\mu_{interface} = -\sigma\frac{\kappa}{2}$. Le problème est donc un phénomène de diffusion de particules régi par la courbure aux interfaces.

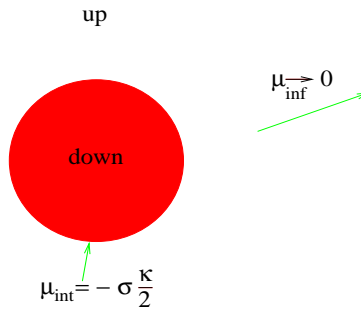


FIG. 4.11 – Représentation du modèle que l'on tente de résoudre théoriquement : un domaine down circulaire au milieu d'un domaine up infini.

On veut étudier le mouvement des interfaces. La vitesse d'une interface est définie par : $v = \frac{\Delta j}{\Delta\phi}$ soit, par la deuxième équation du système (4.11) :

$$v\Delta\phi = j_{out} - j_{int} = -\frac{\partial\mu}{\partial g} = -(\mathbf{g} \cdot \nabla\mu). \quad (4.18)$$

Pour illustrer facilement, on suppose un domaine circulaire de spins down et de rayon R entouré de spins up (voir Fig. 4.11). La définition de μ (troisième équation du système (4.11)) impose que $\mu = 0$ à l'infini. A l'interface, $\mu = -\frac{\sigma}{2R}$. La solution à (4.13) dans les deux domaines qui respecte la symétrie cylindrique du problème et évite la singularité en $r = 0$ est :

$$\mu = \begin{cases} -\frac{\sigma}{2R} & \text{si } r \leq R \\ -\frac{\sigma}{2r} & \text{si } r \geq R \end{cases} \quad (4.19)$$

L'équation (4.18) mène alors à

$$\frac{dR}{dt} = v = -\frac{1}{2} \left[\frac{\partial \mu}{\partial r} \right]_{R-\varepsilon}^{R+\varepsilon} = -\frac{\sigma}{4R^2}, \quad (4.20)$$

d'où une évolution en $R^3(t) = R^3(0) - \frac{3\sigma t}{4}$. On en déduit qu'un domaine de rayon initial $R(0)$ s'évapore sous l'effet de la diffusion des particules régies par la tension de surface en un temps proportionnel à $R^3(0)$. On obtient une diminution de la taille caractéristique des gouttes en $R(t) \sim t^{\frac{1}{3}}$.

On explique, dans le paragraphe suivant, comment un tel comportement conduit à la croissance des domaines.

La Théorie de Lifshitz-Slyozov-Wagner

L'étude précédente n'est juste que dans le cas d'une goutte d'huile dans un bain infini d'eau (ou inversement).

Dans le cas d'une concentration non nulle en huile, on comprend que les gouttes n'évoluent pas indépendamment, il faut une autre théorie.

On ne détaille pas cette nouvelle théorie ici mais on en donne le résultat : l'évolution d'une goutte de rayon R dépend d'un rayon critique $R_c(t)$ qui évolue au cours du temps (il croît en $t^{\frac{1}{3}}$) :

$$\frac{dR}{dt} = \frac{\sigma}{2R} \left(\frac{1}{R_c} - \frac{1}{R} \right) \quad (4.21)$$

Si $R(t) < R_c(t)$ alors la goutte s'évapore en $t^{\frac{1}{3}}$ (tout se passe comme si elle évoluait indépendamment des autres gouttes).

Si $R(t) > R_c(t)$ alors la goutte croît en $t^{\frac{1}{2}}$.

$R_c(t)$ est la longueur caractéristique du système, elle dépend de la tension de surface, de la concentration totale en huile et de la forme du potentiel $V(\phi)$. Le facteur d'évolution dépend de la température : $R_c(t) \sim (\lambda(T)t)^{\frac{1}{3}}$.

En conclusion, on peut dire que les petites gouttes d'huile, qui ont un $\frac{\sigma}{4R^2}$ très grand, s'évaporent très vite sous la tension de surface et peuvent "alimenter" en particules d'huile les gouttes plus grosses, qui ne semblent pratiquement pas évoluer sous leur tension de surface du fait que $\frac{\sigma}{4R^2}$ est petit. La conservation du nombre de particules et les facteurs géométriques à 2D impliquent une évolution des grosses gouttes en $t^{\frac{1}{2}}$. Lors de l'évolution au cours du temps, les petites gouttes ayant disparues (elles se sont évaporées par diffusion) ne peuvent plus "alimenter" les gouttes moyennes. Ces dernières diminuent donc par diffusion au profit des gouttes plus grandes. On comprend ainsi la croissance de la longueur caractéristique avec le temps. La Théorie de Lifshitz-Slyozov-Wagner nous informe sur la loi d'évolution : $R_{c(t)} \sim \lambda(T)t^{\frac{1}{3}}$.

4.2.4 Comparaison avec le cas Non Conservé

Le cas du paramètre d'ordre conservé a déjà été étudié. Il s'agit du modèle d'Ising classique (pour les matériaux magnétiques) : on laisse l'aimantation du système évoluer librement.

Lorsque l'on étudie numériquement la fonction de corrélation, on observe une loi d'échelle (voir Fig. 4.12) telle que :

$$C(\mathbf{r}, t) = f\left(\frac{r}{R_c(t)}\right) \text{ avec } R_c(t) \sim t^{\frac{1}{2}}. \quad (4.22)$$

Dans le cas où l'aimantation n'est pas conservée, les domaines relativement éloignés évoluent

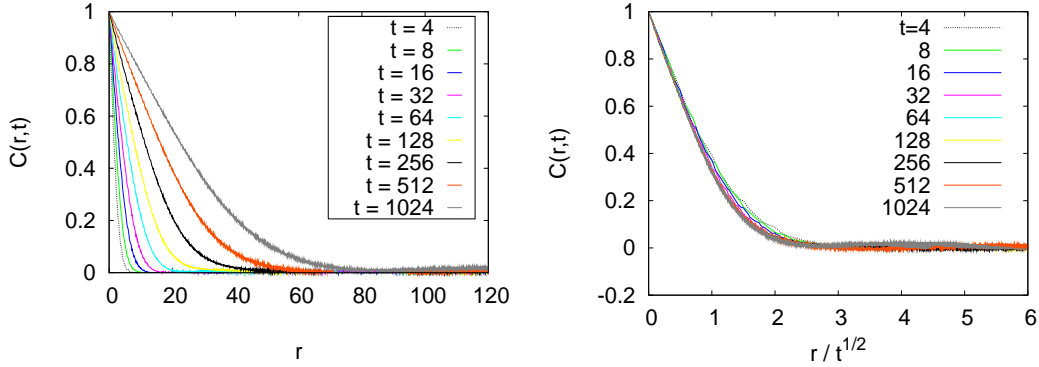


FIG. 4.12 – Sur la figure de gauche, on voit l'évolution de la fonction de corrélation dans le cas Non Conservé à $T=1$ pour un système 1000×1000 .

Sur la figure de droite, on voit la loi d'échelle pour la fonction de corrélation dans le cas Non Conservé.

indépendamment les uns des autres. La croissance des domaines n'est pas régie par la diffusion, il est donc logique de trouver une évolution de la longueur caractéristique différente que dans le cas où l'aimantation est conservée. Deplus, du fait de l'indépendance des domaines à grande distance, la fonction de corrélation reste positive.

4.3 Loi d'échelle pour la densité des aires

4.3.1 Le cas Non Conservé

Par des arguments analogues utilisés dans le cas du modèle B pour obtenir l'équation (4.20), dans le cas non conservé (modèle A), on obtient :

$$v = \frac{-\lambda}{2\pi} \kappa \text{ où } \kappa \text{ est la courbure de la paroi.} \quad (4.23)$$

Par le théorème de Gauss-Bonnet, $\oint \kappa \cdot dl = 2\pi$ où l'intégrale porte sur le contour du domaine (dl est un élément de paroi). On obtient alors :

$$\oint v \cdot dl = \frac{dA}{dt} \text{ où } A \text{ est l'aire du domaine.} \quad (4.24)$$

On a donc une évolution de la surface intérieure à la paroi telle que $A(t) = A_0 - \lambda t$. A_0 représente l'aire considérée à $t=0$ et λ est un coefficient qui représente la rapidité de la dynamique (on peut donc se douter que $\lambda = \lambda(T)$). On montre dès à présent comment une telle loi peut expliquer la croissance des domaines par la Fig. 4.13.

A température infinie, la configuration est proche de la percolation au seuil critique qui est $p_c \sim 0.59$, puisque l'on a 50% de spins up et 50% de spins down distribués aléatoirement



FIG. 4.13 – Le grand domaine up (représenté en noir) contient plusieurs domaines down (en blanc). En un temps Δt , son périmètre *extérieur* (en rouge) contribue à une diminution de sa surface de $\lambda\Delta t$. Son périmètre *intérieur* (en vert) contribue à une augmentation de sa surface de $4\lambda\Delta t$. Au final, l'aire totale du domaine augmente.

(voir Fig. 3.6). Au bout d'un temps très court (2 ou 3 MCS par spins), la distribution des aires est extrêmement bien approximée par celle de la percolation au seuil critique :

$$n_p(A, p_c) \sim_{L \gg A \gg 1} \frac{c}{A^2} \quad (4.25)$$

où $A \gg 1$ signifie que la formule est juste pour des aires plus grandes que la surface d'une maille élémentaire du réseau (les grandeurs sont adimensionnée) et $L \gg A$ signifie que la percolation n'est juste que pour une taille infinie du système, il y aura donc des problèmes d'effets finis pour les grandes surfaces.

La distribution des aires à l'origine (au bout de 2 ou 3 MCS par spins) est donc :

$$n_A(A, t = 0) \sim n_A(A_0) \sim \frac{2c}{A_0^2} \quad (4.26)$$

où le facteur 2 provient du fait que l'on compte les domaines de spins up (comme pour la percolation) mais aussi les domaines de spins down (qui, par symétrie du problème, sont équivalents aux premiers). En exploitant la loi $A(t) = A_0 - \lambda t$, on obtient l'évolution de la densité des aires :

$$n_A(A, t) = n_A(A + \lambda t, 0) = \frac{2c}{(A + \lambda t)^2}. \quad (4.27)$$

Soit la loi suivante :

$$(\lambda t)^2 n_A(A, t) = \frac{2c}{\left(\frac{A}{\lambda t} + 1\right)^2}. \quad (4.28)$$

La vérification de cette loi est donnée sur la Fig. 4.14

Comme on l'a vu précédemment, la taille caractéristique en paramètre d'ordre non conservé évolue en $R_c(t) \sim t^{\frac{1}{2}}$, en utilisant (4.28), on obtient une loi d'échelle pour la densité des aires :

$$R_c(t)^4 n_A(A, t) = g\left(\frac{A}{R_c^2}\right). \quad (4.29)$$

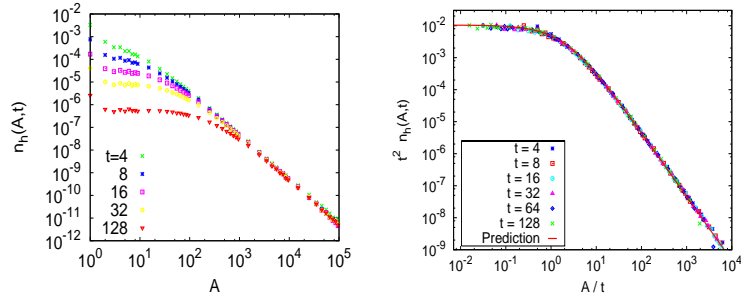


FIG. 4.14 – Sur la figure de gauche, on représente la densité des aires à des instants t différents. Il s’agit d’une échelle logarithmique.

Sur la figure de droite, on voit le collapse des différents instants dû à la loi d’échelle (4.28) pour la densité des aires.

4.3.2 Retour au cas conservé

On espère trouver, pour le cas conservé, une loi d’échelle comme pour le cas non conservé mais dont la fonction caractéristique est différente :

$$R_c(t)^4 n_A(A, t) = h\left(\frac{A}{R_c^2}\right) \quad (4.30)$$

où $h(x) \neq g(x)$. Par contre, dans ce cas, on a une échelle caractéristique qui évolue en $R_c(t) \sim t^{\frac{1}{3}}$ soit une loi d’échelle exprimée en fonction du temps :

$$t^{\frac{4}{3}} n_A(A, t) = h\left(\frac{A}{t^{\frac{2}{3}}}\right). \quad (4.31)$$

Pour pouvoir exploiter de façon simple les résultats de nos simulations, on préfère conserver le pas en MCS par spins de notre algorithme à la place du temps réel. On justifie ce fait en observant une relation linéaire entre le temps réel et le pas en MCS par spin donné Fig. 4.15. Il suffit donc d’intégrer ce coefficient dans le coefficient $\lambda(T)$ et les lois d’échelles sont inchangées à température fixée. Il faudra bien entendu effectuer l’exploitation des résultats avec le temps réel lorsque l’on voudra étudier une variation en température.

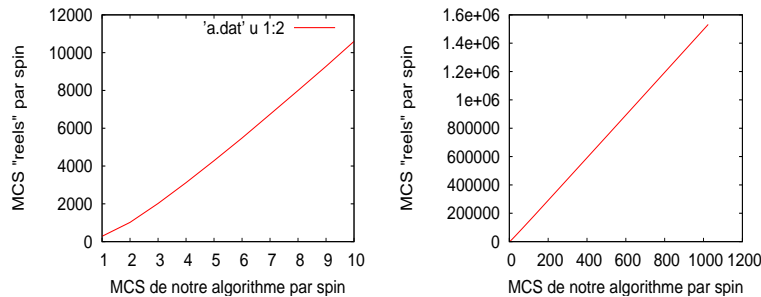


FIG. 4.15 – Représentation du temps réel en fonction du MCS par spin pour un système 1000×1000 à $T=1$.

C’est cette loi proche d’une loi linéaire qui justifie le fait que l’on garde, pour l’instant, les pas du programme au lieu du temps réel dans les graphiques suivants. Le temps caractéristique $t \sim 10^6$ devient, en MCS par spin de l’algorithme, $t \sim 600$.

La vérification de (4.31) est donnée sur la Fig. 4.16. On observe tout de même une contradiction avec les analyses précédentes car on observe la loi d’échelle pour des temps réels nettement inférieur à 10^6 .

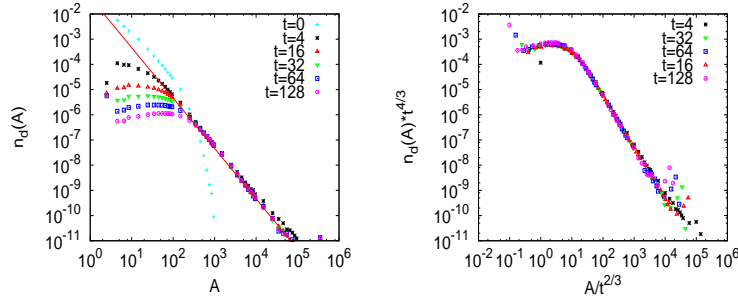


FIG. 4.16 – Sur la figure de gauche, on représente la densité des aires à des instants t différents exprimés en MCS par spin de notre algorithme, pour un système 1000×1000 à $T=1$. Il s’agit d’une échelle logarithmique où la droite en rouge représente deux fois la distribution des aires pour le problème de la percolation.

Sur la figure de droite, on voit le collapse des différents instants dû à la loi d’échelle (4.31) pour la densité des aires. On voit apparaître des effets de taille finie aux grandes surfaces dus au fait que $A_0 \sim L^2$ et la condition initiale due à la percolation est fautive.

4.3.3 La loi d’échelle $h(x)$

On désire trouver la forme analytique de la loi d’échelle comme pour le cas non conservé. On a vu, dans le paragraphe sur la Théorie de Lifshitz-Slyozov-Wagner, que la croissance des domaines dépend de leur taille par rapport à la taille caractéristique $R_c(t)$. On va donc étudier le cas des grands et des petits domaines.

Pour les domaines suffisamment grands, tels que l’aire $A(t)$ du domaine vérifie $A(t) \gg (\lambda(T)t)^{\frac{2}{3}}$, la dépendance en temps de la taille des domaines peut être négligée et la densité des aires reste celle de l’état initial (c’est-à-dire proche de la percolation) :

$$n_A(A, t) \sim_{A(t) \gg (\lambda(T)t)^{\frac{2}{3}}} \frac{2c}{A^2} \quad (4.32)$$

Pour les domaines suffisamment petits, on peut supposer qu’ils évoluent indépendamment des autres domaines (tout se passe comme si une goutte d’huile était au milieu d’une grande étendue d’eau). L’évolution de la densité des aires peut prendre la forme suivante :

$$n_A(A, t) = \int dA_0 \delta(A - A(t, A_0)) n_A(A_0), \quad (4.33)$$

où $n_A(A_0)$ représente la densité initiale et $\delta(A - A(t, A_0))$ représente l’évolution temporelle des aires des petits domaines.

On a donc $n_A(A_0) \sim_{A_0 \gg 1} \frac{2c}{A_0^2}$. De plus, pour les petits domaines tels que $R(t) \ll R_c(t) = (\lambda(T)t)^{\frac{1}{3}}$, l’évolution temporelle des aires suit une loi telle que $A^{\frac{3}{2}}(t, A_0) \sim A_0^{\frac{3}{2}} - \lambda(T)t$. Après calculs, on obtient la loi d’évolution de la densité des aires :

$$(\lambda(T)t)^{\frac{4}{3}} n_A(A, t) = \frac{2c \left(\frac{A}{(\lambda(T)t)^{\frac{2}{3}}} \right)^{\frac{1}{2}}}{\left[\left(\frac{A}{(\lambda(T)t)^{\frac{2}{3}}} \right)^{\frac{3}{2}} + 1 \right]^{\frac{1}{3}}}, \quad (4.34)$$

vraie pour $A \ll (\lambda(T)t)^{\frac{2}{3}}$. En posant $x = \frac{A}{(\lambda(T)t)^{\frac{2}{3}}}$, on obtient, pour $x \ll 1$

$$h(x) = \frac{2c\sqrt{x}}{\left(x^{\frac{3}{2}} + 1\right)^{\frac{5}{3}}} \quad (4.35)$$

Pour les valeurs de $x \gg 1$, on voit que $h(x) \sim \frac{2c}{x^2}$ et on retrouve la loi prévue pour les grands domaines (qui ne vérifient pas les hypothèses de calcul de $h(x)$).

L'exploitation des résultats, donnée Fig. 4.17, semble montrer que cette loi est vérifiée quelle que soit la valeur de $\frac{A}{(\lambda(T)t)^{\frac{2}{3}}}$.

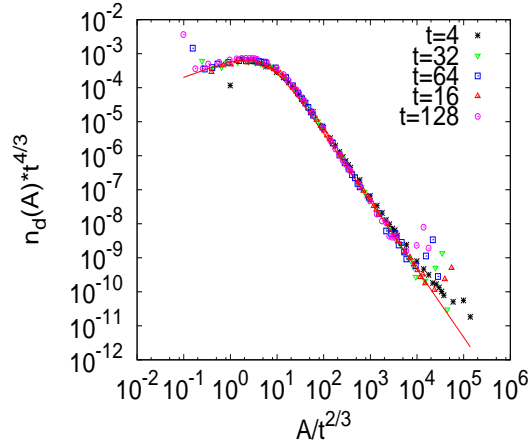


FIG. 4.17 – Collapse des différents instants pour la densité des aires auquel on a ajouté la loi analytique 4.34. Cette loi semble être vérifiée pour tous les domaines, mis à part les effets de taille finie du système.

4.4 La géométrie des domaines

On veut caractériser la géométrie des domaines, c'est-à-dire savoir si leur forme est plutôt allongée (comme dans le cas de la percolation) ou arrondie (forme de gouttelette). Pour se faire, on trace la surface des domaines en fonction du périmètre en renormalisant les distances par rapport à la taille caractéristique. Cela revient à tracer $\frac{A(t)}{t^{\frac{2}{3}}}$ en fonction de $\frac{P(t)}{t^{\frac{1}{3}}}$ qui est donné Fig. 4.18. Le fait que les courbes collapent (pour des temps différents) permet de montrer, une fois de plus, l'échelle caractéristique $R_c(t)$.

On voit 2 régimes apparaître avec une grandeur critique de l'ordre de $\frac{a_0}{t^{\frac{2}{3}}} \sim 10$. Le premier, qui correspond aux grandes aires, est tel que $\frac{A(t)}{t^{\frac{2}{3}}} \sim \frac{P(t)}{t^{\frac{1}{3}}}$. Cet exposant 1 est très proche de l'exposant de la percolation et traduit donc la mémoire de l'état initial du système pour les grandes surfaces. Le deuxième régime, qui correspond aux surfaces plus petites, est tel que $\frac{A(t)}{t^{\frac{2}{3}}} \sim \left(\frac{P(t)}{t^{\frac{1}{3}}}\right)^2$. Cet exposant 2 implique une géométrie des domaines proche de la géométrie circulaire (en tout cas ce ne sont pas des objets fractals contrairement à la percolation). Cet exposant provient du fait que la diffusion en volume est régie par la tension de surface des domaines comme on l'a déjà vu précédemment et le cercle est la géométrie qui minimise la

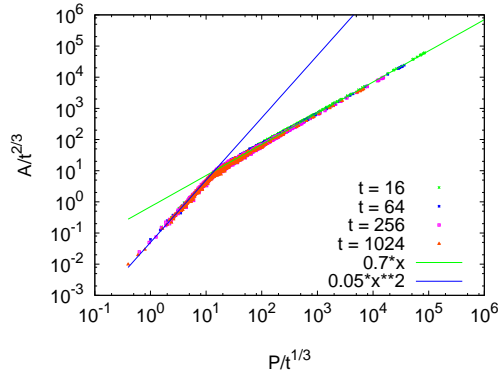


FIG. 4.18 – Aire des domaines en fonction de leur Périmètre pour un système 1000*1000 à T=1.

On trouve des puissances proches de 2 pour les faibles valeurs (compatible avec la dynamique due à la tension de surface) et 1 pour les valeurs plus élevées (compatible avec la percolation).

surface de la goutte (et donc l'énergie).

4.5 Loi d'échelle pour la densité des périmètres

Comme on vient de le voir, il y a une relation bijective entre l'aire d'un domaine et son périmètre. De plus, on a trouvé une loi d'échelle pour la densité des aires, on peut donc s'attendre à une loi d'échelle concernant la densité des périmètres.

La normalisation de ces deux densités donne :

$$\int_0^\infty n_A(A, t) dA = 1 = \int_0^\infty n_P(P, t) dP. \quad (4.36)$$

La bijection entre l'aire d'un domaine et son périmètre ($A = A(P)$) implique que l'on a $n_A(A, t) dA = n_P(P, t) dP$. D'où l'expression de la densité des périmètres en fonction de celle des aires :

$$n_P(P, t) = n_A(A, t) * \frac{dA}{dP}. \quad (4.37)$$

4.5.1 Le cas Non Conservé

Pour le cas non conservé, on reprend (4.28) avec des caractéristiques proches de la percolation (c'est-à-dire vrai pour les temps courts), soit $A(P) = bP$ et $\frac{dA}{dP} = b$ où b est un coefficient. On a donc une densité des périmètres, d'après (4.37) et (4.27) telle que :

$$n_P(P, t) = \frac{2cb}{\lambda t \left(\frac{bP}{(\lambda t)^{\frac{1}{2}}} + 1 \right)^2}. \quad (4.38)$$

On retrouve donc une échelle caractéristique $R_c(t) \sim t^{\frac{1}{2}}$ et une loi d'échelle telle que

$$R_c(t)^2 n_P(P, t) = g_P \left(\frac{P}{R_c(t)} \right). \quad (4.39)$$

4.5.2 Retour au cas conservé

Comme on l'a déjà fait pour la densité des aires, on espère trouver une loi d'échelle comme pour le cas conservé mais dont la fonction caractéristique est différente :

$$R_c(t)^2 n_P(P, t) = h_P \left(\frac{P}{R_c(t)} \right). \quad (4.40)$$

En explicitant l'évolution de l'échelle caractéristique $R_c(t) \sim t^{\frac{1}{3}}$, on trouve une loi d'échelle exprimée en fonction du temps :

$$t \cdot n_P(P, t) = h_P \left(\frac{P}{t^{\frac{1}{3}}} \right). \quad (4.41)$$

On vérifie la loi d'échelle Fig. 4.19.

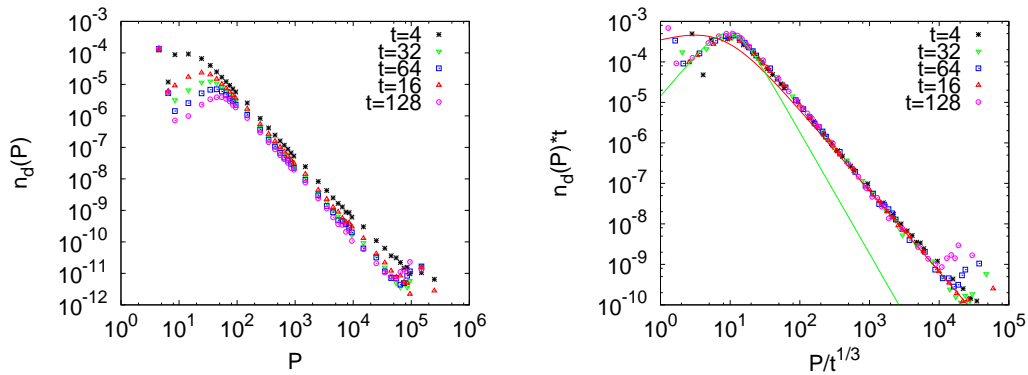


FIG. 4.19 – Sur la figure de gauche, on représente la densité des périmètres à des instants t différents exprimés en MCS par spin de notre algorithme, pour un système 1000×1000 à $T=1$.

Sur la figure de droite, on voit le collapse des différents instants du à la loi d'échelle (4.41) pour la densité des périmètres. On a tracé les lois analytique pour les petits domaines (en vert) et les grands domaines (en rouge). On voit apparaître des effets de taille finie aux grands périmètres.

La loi analytique n'est explicitée que pour les 2 régimes observés lors de l'étude de la géométrie des domaines.

Pour les grandes aires, on a vu que $\frac{A(t)}{(\lambda(T)t)^{\frac{2}{3}}} = z \frac{P(t)}{(\lambda(T)t)^{\frac{1}{3}}}$ (où z représente le coefficient directeur de la droite), soit $A = zP(\lambda(T)t)^{\frac{1}{3}}$.

Par l'équation (4.37), on obtient :

$$\begin{aligned} n_P(P, t) &= \frac{2cz}{A^2} (\lambda(T)t)^{\frac{1}{3}} \\ &= \frac{2c}{z} \frac{1}{\left(\frac{P}{(\lambda(T)t)^{\frac{1}{3}}} \right)^2} \frac{1}{\lambda(T)t} \end{aligned} \quad (4.42)$$

d'où la loi d'échelle pour les périmètres vraie pour les grands domaines :

$$(\lambda(T)t)n_P(P, t) \sim_{x \gg 1} \frac{2c}{z} \frac{1}{\left(\frac{P}{(\lambda(T)t)^{\frac{1}{3}}} \right)^2} \quad (4.43)$$

Pour les petits domaines, on a vu que $\frac{A(t)}{(\lambda(T)t)^{\frac{2}{3}}} = z' \left(\frac{P(t)}{(\lambda(T)t)^{\frac{1}{3}}} \right)^2$, soit $A = z'P^2$. Par l'équation (4.37), on obtient :

$$\begin{aligned} n_P(P, t) &= \frac{2c \left(\frac{A(t)}{(\lambda(T)t)^{\frac{2}{3}}} \right)^{\frac{1}{2}}}{(\lambda(T)t)^{\frac{4}{3}}} 2Pz' \\ &= \frac{4c(z')^{\frac{3}{2}} \left(\frac{P}{(\lambda(T)t)^{\frac{1}{3}}} \right)^2}{\lambda(T)t} \end{aligned} \quad (4.44)$$

d'où la loi d'échelle pour les périmètres vraie pour les petits domaines :

$$(\lambda(T)t)n_P(P, t) \sim_{x \ll 1} 4cz'^{\frac{3}{2}} \left(\frac{P}{(\lambda(T)t)^{\frac{1}{3}}} \right)^2 \quad (4.45)$$

On peut vérifier les lois d'échelles sur la Fig. 4.19.

4.6 Conclusion

Durant ce dernier chapitre, on a mis en évidence l'existence de lois d'échelles lors de la croissance des domaines au sein des système binaires. Notre analyse se limite au cas d'une évolution purement diffusive.

Il faut penser que pour le cas des liquides binaires, il peut y avoir de la convection (hydrodynamique) au sein du système. L'évolution temporelle de la grandeur caractéristique peut être beaucoup plus rapide et diffère de ce que l'on vient d'étudier. Cependant, nos résultats restent valables dans le cas où la convection est négligeable. Deplus, ils sont tout à fait corrects dans le cas des alliages binaires (mélange de deux solides) où seule la diffusion est présente.

Je tiens à remercier Leticia CUGLIANDOLO et Alberto SICILIA pour m'avoir encadré durant ce stage.

Bibliographie :

- S. Puri, *Phase Transitions* **77**, 407 (2004)
- M. E. J. Newman et G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*
- P. Sollich, *Introduction to phase ordering kinetics* (2001)
- A. J. Bray, *Theory of phase ordering kinetics* (2006)
- A. Sicilia, *Physica A* **386**, 674 (2007)