

# Mise en équilibre d'une phase solide par les fluctuations de l'interface.

## ***Motivation.***

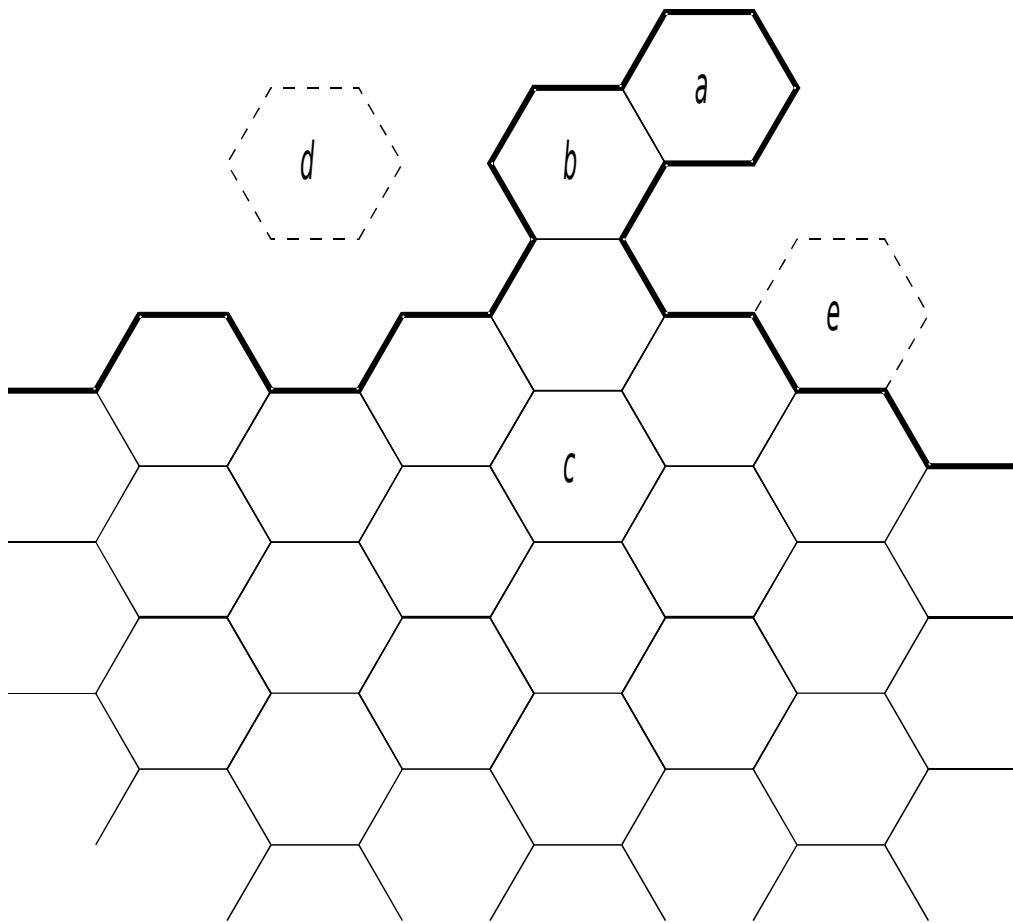
Les structures des cristaux métalliques sont parfois très compliquées (à titre d'exemple, la maille du cristal de Mn dans la phase alpha contient 58 atomes !), ce qui s'explique en partie par la nature complexe de l'interaction effective entre les atomes dans les métaux, surtout dans le cas des métaux de transition. Le nombre d'atomes dans la maille pour les alliages peut facilement atteindre plusieurs centaines, et même devenir formellement infini (dans le cas des quasicristaux). Autrement dit, la complexité de la structure des intermétalliques est comparable à celle des cristaux de nombreuses substances organiques. Mais les mécanismes de formation de la structure dans ces deux cas sont radicalement différents. À l'échelle d'une molécule, la structure des matériaux organiques est déterminée par les liaisons covalentes, et varie très peu entre les différentes phases. Lors de la croissance d'un cristal organique, les molécules existent déjà, il ne reste plus qu'à les assembler dans un réseau cristallin. En revanche, dans la phase liquide des métaux, les « molécules » n'existent pas; en tout cas, les nombreux essais pour trouver dans les métaux liquides des « clusters » d'atomes plus ou moins stables n'ont pas donné de résultats concluants. Lors de la cristallisation d'un alliage, les atomes passent un par un de la phase liquide dans la phase solide. La structure, telle qu'elle apparaît derrière le front de croissance, est gelée tout de suite après sa formation. En l'absence de dynamique dans la phase solide, on ne peut plus *a priori* garantir la stabilité par des arguments de physique statistique. Néanmoins, il existe une hypothèse [1] selon laquelle la mise en équilibre dans ces circonstances est toujours possible grâce aux fluctuations du front de croissance. Malheureusement, les arguments en faveur de cette hypothèse sont de caractère qualitatif; en particulier, ils ne permettent pas de prédire comment la longueur de corrélation dépend de la vitesse de croissance. Pour mieux comprendre ce mécanisme de mise en équilibre, on a recours à la modélisation numérique.

## ***La modélisation.***

Le but du projet étant l'étude de phénomènes de croissance, on choisit un modèle simplifié pour la structure de la phase solide. Tous les détails de la structure sont décrits par un paramètre d'ordre réel, et l'énergie libre de la phase solide contient un terme quadratique en gradient de ce paramètre:

$$F = K_{ij} (\partial_i \varphi) (\partial_j \varphi)$$

La modélisation numérique nécessite aussi une discrétisation convenable de l'espace. Compte tenu du choix de la forme de l'énergie libre, ceci revient à considérer un modèle gaussien sur un réseau. Les fluctuations du front de croissance peuvent causer la formation de lacunes ou d'îlots isolés, ce qui complique inutilement le modèle. Ce phénomène peut être évité dans le cas du réseau hexagonal, comme montre le dessin ci-dessous.



**Figure 1.** La continuité du front de croissance peut être assurée localement. Ici, on a le droit de détacher la plaquette  $a$  ou d'attacher la plaquette  $e$ , mais l'état des plaquettes  $b$ ,  $c$  et  $d$  ne peut pas être modifié.

Le paramètre d'ordre a donc une valeur définie sur chaque plaquette du réseau hexagonal, et l'énergie libre est donnée par la formule suivante:

$$F = \sum_{\langle i, j \rangle} \frac{(\varphi_i - \varphi_j)^2}{2} + \sigma L,$$

où la somme est faite sur toutes les paires de plaquettes  $i$  et  $j$  voisines et  $L$  est la longueur du front de croissance (  $\sigma$  étant un coefficient de tension superficielle).

La cinétique de croissance est déterminée par les probabilités d'attachement d'une nouvelle plaquette avec une valeur du paramètre d'ordre donnée, ou de détachement d'une plaquette existante. Ces probabilités dépendent des valeurs du paramètre d'ordre sur les plaquettes voisines, ainsi que de la configuration locale du front de croissance. La seule condition qu'on impose sur ces probabilités est que la distribution de Gibbs satisfasse l'équilibre en détails (balance détaillée). Un des choix possibles pour les probabilités est décrit dans l'article [2] (disponible sur le site web du module), mais on peut aussi essayer d'autres équations cinétiques.

## ***L'algorithme.***

La difficulté principale de simulation numérique tient à ce que la vitesse de croissance varie beaucoup. En effet, si les variations du paramètre d'ordre sur le front de croissance deviennent trop importantes, le système doit attendre jusqu'à ce que ces variations soient « recuites » par les fluctuations de l'interface. Pour cette raison, l'algorithme de Metropolis standard (celui qui est basé sur la discréétisation du temps avec une échelle fixe) devient inefficace en raison du taux de rejet très élevé. En même temps, on constate que le nombre de mouvements possibles à un moment donné est proportionnel à la longueur du front de croissance, c'est-à-dire qu'il est petit par rapport à la taille du système. Il est donc possible de mémoriser la liste de tous les futurs mouvements possibles, et de la remettre à jour après chaque mouvement. On assigne (aléatoirement, selon l'équation cinétique) à chaque mouvement mémorisé l'instant où il s'effectuera. Ensuite, on choisit le mouvement ordonné le plus tôt, on l'effectue et on remet ensuite la liste de mouvements à jour.

## ***Les buts recherchés.***

La modélisation numérique a pour but de répondre aux questions suivantes:

- 1) Est-il possible d'atteindre l'équilibre dans une phase privée de dynamique en volume, juste par les fluctuations de son interface?
- 2) Même si ce mécanisme de mise en équilibre existe, l'équilibre ainsi obtenu ne peut qu'être local. C'est-à-dire, qu'il n'existe que dans les volumes d'une taille de l'ordre de la profondeur du recul typique du front de croissance. La question qui reste ouverte est la suivante: comment cette taille dépend-elle de la vitesse de croissance?
- 3) Est-il possible d'éviter le régime de «croissance en dendrites» en modifiant l'équation cinétique (tout en gardant l'équilibre en détails)?

## ***Références.***

- [1] D. Joseph, *Phys. Rev. B* **58**, 8347 (1998) ; D. Joseph, U. Grimm, cond-mat/9903074
- [2] P. Kalugin, *Eur Phys. J. B* **18**, 77-84 (2000)