

Série 11: Equilibre et croissance d'une surface

Dans ce tutorat, nous allons modéliser une interface d'équilibre entre deux milieux, par exemple un liquide et une vapeur.

Dans un souci de simplicité, nous nous placerons à deux dimensions, où l'interface est une ligne, que nous allons modéliser ici de deux manières: tout d'abord (Exercice 1) en adoptant un formalisme continu, puis (Exercice 2) dans un formalisme discret où l'interface sépare deux domaines d'aimantations opposées.

Exercice 1 Modélisation continue d'une interface

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

- Q1.** Soit L la longueur de l'interface projetée sur l'axe des x , exprimer $\mathcal{L}$ en fonction de L et de $(dy/dx)^2$.
- Q2.** a) Montrer qu'en choisissant comme conditions aux limites périodiques: $y(0) = y(L) = 0$, la décomposition de Fourier de $y(x)$ peut s'écrire:

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

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

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

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

Que peut-on dire de cette décomposition?

- Q3.** a) Que vaut, à une constante multiplicative près, la probabilité d'observer la valeur A_n pour le mode n ? Quelle est la probabilité jointe $P(A_n, A_m)$ entre deux modes n et m ?
- b) On en déduira les valeurs moyennes $\langle A_n \rangle$ et $\langle A_n A_m \rangle$. Montrer qu'on retrouve le théorème d'équipartition de l'énergie.
- c) Dédurre de ces résultats la valeur moyenne du produit $\langle y(x) y(x') \rangle$, par exemple pour $x' \geq x$, en utilisant la propriété:

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

- Q4.** On pose: $\Delta y = y(x') - y(x)$ la différence d'ordonnées entre deux points d'abscisses x et x' . Quand x et x' sont éloignés, $\langle \Delta y^2 \rangle^{1/2}$ peut être considérée comme l'épaisseur de l'interface.

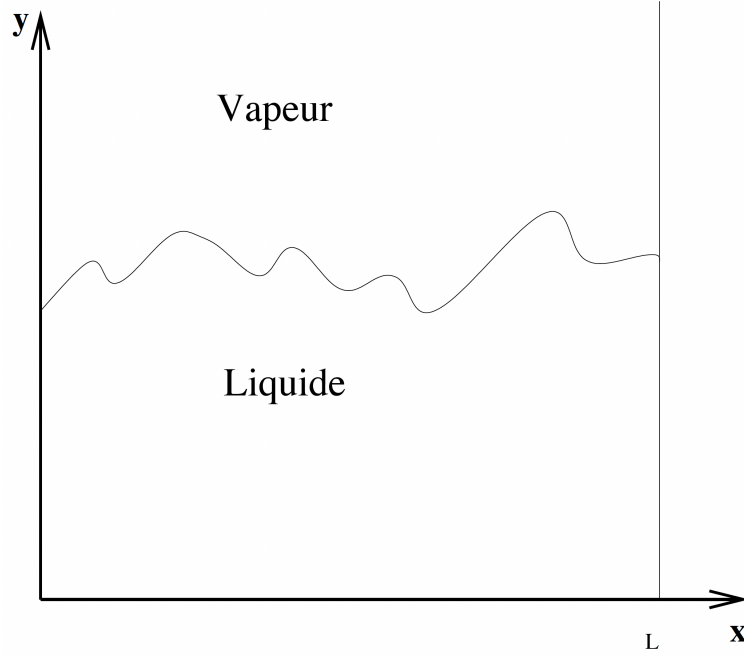


Figure 1: Interface liquide/vapeur à deux dimensions. L est la longueur projetée de l'interface, $\mathcal{L}$ sa longueur développée.

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

Solution of Exercise 1

- Q1.** Nous pouvons commencer par discrétiser l'interface : nous divisons l'axe x en N petits intervalles Δx_i et nous définissons $\Delta y_i = y(\Delta x_i) - y(\Delta x_{i-1})$. Nous pouvons alors exprimer la longueur totale $\mathcal{L}$ comme la somme de

$$\mathcal{L} = \sum_{i=1}^N \sqrt{(\Delta x_i)^2 + (\Delta y_i)^2} = \sum_{i=1}^N \Delta x_i \sqrt{1 + \left(\frac{\Delta y_i}{\Delta x_i} \right)^2}. \quad (1)$$

En prenant la limite continue, on obtient

$$\mathcal{L} = \int_0^L dx \sqrt{1 + \left(\frac{dy}{dx} \right)^2} \approx \int_0^L dx \left(1 + \frac{(dy/dx)^2}{2} \right) = L + \int_0^L \frac{\dot{y}^2}{2} dx \quad (2)$$

où nous avons défini $\dot{y} = dy/dx$ et nous avons utilisé l'hypothèse $(dy/dx)^2 \ll 1$ et le fait que $\sqrt{1+x} \approx 1 + x/2 + \mathcal{O}(x^2)$ pour $x \ll 1$.

- Q2.** a) Supposons que la fonction $y(x)$ soit antisymétrique en 0. De cette façon, puisque nous avons les conditions aux limites $y(0) = y(L) = 0$, nous pouvons avoir une périodicité de la

fonction sur $2L$. Cela signifie que nous pouvons exprimer $y(x)$ comme la série de Fourier

$$y(x) = A_0 + \sum_{n=1}^{\infty} \left(A_n \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) + B_n \cos\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \right) \quad (3)$$

et les conditions aux bords nous donnent

$$y(0) = 0 = A_0 + \sum_n B_n, \quad y(L) = 0 = A_0 + \sum_n (-1)^n B_n \quad (4)$$

ce qui conduit à $A_0 = 0$ et $B_n = 0$ pour tout n . Il nous reste donc

$$y(x) = \sum_{n=1}^{\infty} A_n \sin\left(\frac{\pi n x}{L}\right) \quad (5)$$

b) Nous pouvons maintenant écrire explicitement

$$(dy/dx)^2 = \left(\sum_n \frac{\pi n}{L} A_n \cos\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \right)^2 = \frac{\pi^2}{L^2} \sum_{n,m} n m A_n A_m \cos\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \cos\left(\frac{\pi m}{L} x\right). \quad (6)$$

En combinant ceci avec l'expression trouvée pour $\mathcal{L}$ dans Q1, nous obtenons

$$H = \alpha L + \frac{\alpha \pi^2}{2L^2} \sum_{n,m} n m A_n A_m \int_0^L dx \cos\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \cos\left(\frac{\pi m}{L} x\right). \quad (7)$$

Les seuls termes contribuant sont ceux avec $m = n$, par orthogonalité. Pour le voir explicitement, nous pouvons réécrire

$$\cos\left(\frac{\pi n}{L} x\right) \cos\left(\frac{\pi m}{L} x\right) = \frac{1}{2} \left(\frac{e^{i\frac{\pi(n+m)}{L}x} + e^{-i\frac{\pi(n+m)}{L}x}}{2} + \frac{e^{i\frac{\pi(n-m)}{L}x} + e^{-i\frac{\pi(n-m)}{L}x}}{2} \right) \quad (8)$$

$$= \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi(n+m)}{L} x\right) + \frac{1}{2} \cos\left(\frac{\pi(n-m)}{L} x\right) \quad (9)$$

En raison de la parité, il est facile de vérifier que $\int_0^L dx \cos(\pi k x/L)$ pour tous les entiers k . Puisque n et m sont tous deux des entiers allant de 1 à $+\infty$, nous avons que l'intégrale du premier terme dans l'Eq. 8 est toujours nulle, tandis que l'intégrale du second terme n'est non-nulle que si $n - m = 0$, auquel cas l'intégrale donne $\int_0^L dx \cos(0)/2 = L/2$.

En revenant à l'énergie d'interface, on obtient finalement

$$H = \alpha L + \frac{\alpha \pi^2}{4L} \sum_n n^2 A_n^2. \quad (10)$$

Q3. a) En utilisant le formalisme canonique, nous pouvons écrire la distribution sur $\{A_n\}_{n=1}^{\infty}$ comme suit

$$P(\vec{A}) \propto \exp\left(-\frac{\alpha \beta \pi^2}{4L} \sum_n n^2 A_n^2\right) = \prod_n \exp\left(-\frac{\alpha \beta \pi^2}{4L} n^2 A_n^2\right) \quad (11)$$

d'où il ressort qu'il s'agit d'un produit de gaussiennes indépendantes de moyenne nulle et de variance $\frac{2L}{\alpha \beta \pi^2 n^2 A_n^2}$. Cela implique que :

- La probabilité d'observer une valeur A_n pour le mode n est de

$$P(A_n) \propto \exp\left(-\frac{\alpha \beta \pi^2}{4L} n^2 A_n^2\right) \quad (12)$$

- La probabilité d'observer une valeur (A_n, A_m) pour les modes n et m est de

$$P(A_n, A_m) \propto \exp\left(-\frac{\alpha\beta\pi^2}{4L} (n^2 A_n^2 + m^2 A_m^2)\right) \quad (13)$$

- La corrélation entre A_n et A_m est donnée par

$$\langle A_n A_m \rangle = \delta_{nm} \frac{2L}{\alpha\beta\pi^2 n^2}. \quad (14)$$

b) En calculant l'énergie, nous obtenons

$$\langle H \rangle = \partial_\beta \log Z = \frac{\alpha\pi^2}{4L} \sum_n n^2 \langle A_n^2 \rangle = \frac{1}{2\beta} \sum_n 1 = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{k_B T}{2}, \quad (15)$$

ce qui correspond exactement au théorème d'équipartition. Remarquez qu'en principe, les degrés de liberté sont en nombre infini, ce qui signifierait que l'énergie exploserait !

Ceci est dû au fait que dans la pratique toutes les fréquences ne sont pas activées, et analytiquement le problème est généralement résolu en mettant une limite sur le nombre n .

c) En supposant que $x' > x$ et en utilisant le résultat précédent, nous pouvons écrire

$$\langle y(x)y(x') \rangle = \sum_n \frac{2L}{\alpha\beta\pi^2 n^2} \sin(\pi n x/L) \sin(\pi n x'/L) \quad (16)$$

$$= \frac{L}{\alpha\beta\pi^2} \sum_n \frac{1}{n^2} \left(\cos \frac{\pi n}{L} (x' - x) - \cos \frac{\pi n}{L} (x' + x) \right). \quad (17)$$

En utilisant la formule du texte, on obtient

$$\langle y(x)y(x') \rangle = \frac{L}{\alpha\beta\pi^2} \left(-\frac{\pi^2}{2L} (x' - x) + \frac{\pi^2}{2L} (x' + x) + \frac{\pi^2}{4L^2} (x' - x)^2 - \frac{\pi^2}{4L^2} (x' + x)^2 \right) \quad (18)$$

$$= \frac{L}{\alpha\beta\pi^2} \left(\frac{\pi^2}{L} x - \frac{\pi^2}{L^2} x x' \right) = \frac{1}{L\alpha\beta} x(L - x'). \quad (19)$$

Q4. a) Nous pouvons écrire

$$\langle (\Delta y)^2 \rangle = \langle y^2(x) \rangle + \langle y^2(x') \rangle - 2\langle y(x)y(x') \rangle \quad (20)$$

$$= \frac{1}{L\alpha\beta} (x(L - x) + x'(L - x') - 2x(L - x')) \quad (21)$$

$$= \frac{1}{L\alpha\beta} (L(x' - x) - (x' - x)^2) = \frac{x' - x}{\alpha\beta} - \frac{1}{L\alpha\beta} (x' - x)^2 \quad (22)$$

Il est facile de voir que pour $|x' - x| \ll L$, le second terme peut être négligé et nous avons $\sqrt{\langle (\Delta y)^2 \rangle} = \sqrt{\frac{k_B T}{\alpha}} \Delta x$.

b) L'équation précédente correspond au déplacement quadratique moyen d'un processus de diffusion avec $2D = \frac{1}{\alpha\beta}$, tel que le coefficient de diffusion est $D = \frac{k_B T}{2\alpha}$.

Pour maximiser la fluctuation, nous prenons la dérivée de $\langle (\Delta y)^2 \rangle$ par rapport à Δx et nous la mettons à zéro :

$$\frac{\partial \langle (\Delta y)^2 \rangle}{\partial \Delta x} = 0 = \frac{1}{\alpha\beta} - \frac{2\Delta x}{L\alpha\beta} \quad (23)$$

d'où $\Delta x^* = L/2$ est le maximiseur, pour lequel on obtient $\langle (\Delta y)^2 \rangle = \frac{1}{\alpha\beta} (L/2 - L/4) = \frac{L}{4\alpha\beta}$.

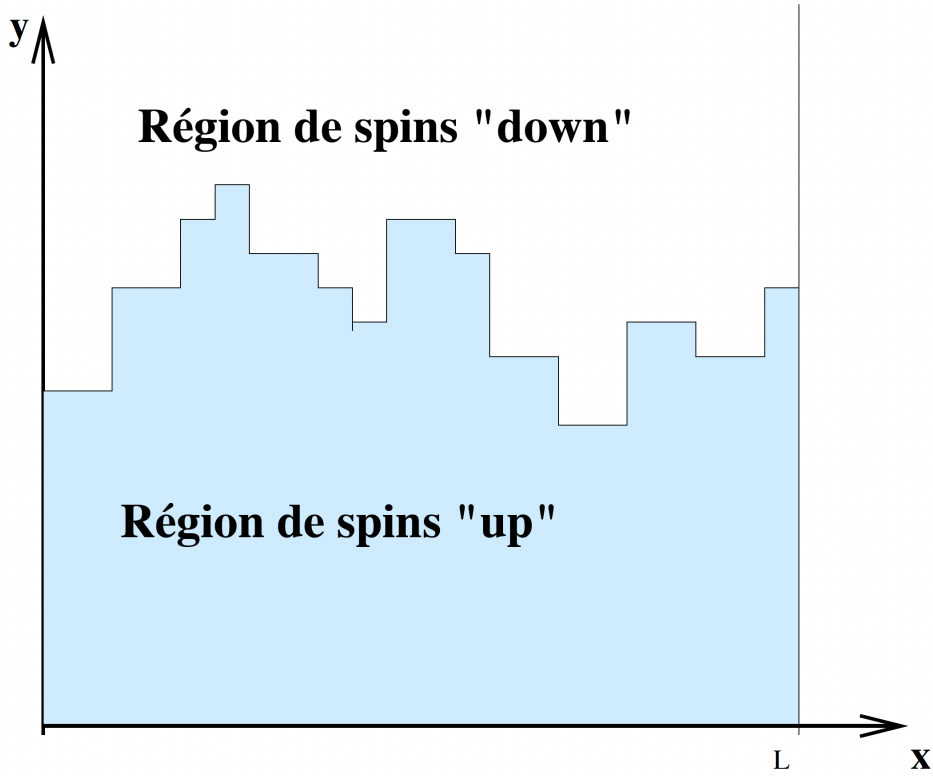


Figure 2: Interface entre la région du bas, d'aimantation positive, et la région du haut d'aimantation négative, à deux dimensions. $L = N$ est la taille du système, la longueur projetée de l'interface, le pas du réseau étant choisi égal à 1.

Exercice 2 Modélisation discrete de l'interface

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

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

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

Q1. Quelle est l'énergie associée à une interface plane (état fondamental) ? Montrer que lorsque l'interface n'est plus rectiligne, sa longueur développée est égale à :

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

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

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

pour la configuration comportant des marches de hauteur y_p .

- Q2.** On suppose que l'extrémité gauche de l'interface est fixe, et que son extrémité droite est libre de se positionner n'importe où. Les hauteurs de marche sont supposées être des variables aléatoires indépendantes pouvant prendre toutes les valeurs entières entre $-\infty$ et $+\infty$.

a) Montrer que la fonction de partition Z de l'interface peut se factoriser, et qu'on a:

$$Z = \zeta^N$$

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

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

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

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

- Q3.** Montrer que la probabilité pour qu'une marche soit de hauteur p , ascendante ou descendante, est égale à:

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

En déduire que :

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

et vérifier que:

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

Montrer aussi que:

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

- Q4.** Soit Δy la différence de hauteurs entre deux points de l'interface d'abscisses x_p et x_{p+q} :

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

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

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

Que vaut α dans ce modèle ?

Solution of Exercise 2

Q1. Les états fondamentaux correspondent au cas où l'interface est plate et où les spins de chaque sous-système sont alignés. L'énergie correspondante est $E_{\text{gs}} = -2N^2J + 2NJ$, puisqu'il y a $2N^2$ couples uniques et que chacun contribue à un facteur $-J$ à l'énergie, et l'interface contribue avec un facteur positif $2J$ pour chaque spin en touche.

En observant la figure 2, il est clair que la longueur totale de l'interface est donnée par la somme des segments horizontaux, qui par définition s'élèvent à L , et des segments verticaux, chacun d'une longueur de $|y_p|$.

Puisque chaque paix de l'interface connecte deux spins de signe différent, l'énergie excédentaire sera simplement $H = 2J * \mathcal{L}$.

Q2. a) Écrivons explicitement la fonction de partition

$$Z = \sum_{\{y_p\}_{p=1}^N} \exp -\beta \left(2NJ + 2J \sum_p |y_p| \right) = e^{-2\beta NJ} \left(\prod_p \sum_{y_p} e^{-2\beta J |y_p|} \right) = \left(e^{-2\beta J} \sum_{y=-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta J |y|} \right)^N. \quad (24)$$

En utilisant le fait que $\sum_{y=-\infty}^{+\infty} e^{-2\beta J |y|} = 2 \sum_{y=0}^{+\infty} e^{-2\beta J y} - 1$ et que $\sum_{y=0}^{+\infty} e^{-2\beta J y} = \frac{1}{1-e^{-2\beta J}}$ nous obtenons

$$Z = \left(e^{-2\beta J} \frac{2-1+e^{-2\beta J}}{1-e^{-2\beta J}} \right)^N = \left(e^{-2\beta J} \frac{e^{\beta J} + e^{-\beta J}}{e^{\beta J} - e^{-\beta J}} \right)^N \equiv \zeta^N \quad (25)$$

b) L'énergie moyenne est

$$e = \frac{\langle E \rangle}{N} = -\frac{1}{N} \partial_\beta \log Z = 2J + \frac{J(1 - \tanh^2(\beta J))}{\tanh(\beta J)} = 2J \left(1 + \frac{1 - \tanh^2(\beta J)}{2 \tanh(\beta J)} \right). \quad (26)$$

Pour une température élevée (β petite), nous trouvons $e(\beta) \approx 2J \left(1 + \frac{1}{2\beta J} - \frac{\beta J}{3} + \mathcal{O}(\beta^3) \right) = \frac{1}{\beta} + 2J - \frac{2}{3}J^2\beta + \mathcal{O}(\beta^3)$, pour les basses températures, $\tanh(\beta J) \rightarrow 1$ et donc $e(\beta) \approx 2J$. L'énergie libre est plutôt

$$f = -\frac{1}{\beta} \frac{\log Z}{N} = 2J + \frac{1}{\beta} \log \tanh \beta J \quad (27)$$

Pour une température élevée (β petite), nous trouvons $f(\beta) \approx -\frac{1}{\beta} \log(J\beta) + \frac{J^2\beta}{3} + \mathcal{O}(\beta^3)$ (qui diverge), tandis que pour les basses températures $f(\beta) \approx 2J$.

Q3. En adoptant le formalisme canonique, nous avons que

$$\mathcal{P}(y = p) = \frac{1}{\zeta^N} \sum_{\{y_p\}_{p=1}^N} \exp \left(-2\beta J N - 2\beta J \sum_p |y_p| \right) = \frac{e^{-2\beta J(1+|y|)}}{\zeta}. \quad (28)$$

Alors $\mathcal{P}(y = -p)$ a la même expression, puisque $\mathcal{P}$ ne dépend que de la valeur absolue de y , et nous pouvons écrire $\mathcal{P}(|y| = p) = \mathcal{P}(y = p) + \mathcal{P}(y = -p) + 2\mathcal{P}(y = p)$.

Par définition, la valeur moyenne est

$$\langle |y| \rangle = \sum_{p=0}^{\infty} 2p \frac{e^{-2\beta J(1+p)}}{\zeta} = \frac{2}{\zeta} e^{-2\beta J} \sum_{p=0}^{\infty} p e^{-2\beta J p} = \frac{2}{\zeta} e^{-2\beta J} \partial_x \left(\sum_{p=0}^{\infty} e^{xp} \right) \Big|_{x=-2\beta J} \quad (29)$$

En utilisant le fait que $\sum_{p=0}^{\infty} e^{-2\beta J p} = 1/(1 - e^{-2\beta J})$, en prenant la dérivée et en simplifiant, on trouve le résultat dans le texte.

De même, pour le carré, on peut écrire

$$\langle |y|^2 \rangle = \sum_{p=0}^{\infty} 2p^2 \frac{e^{-2\beta J(1+p)}}{\zeta} = \frac{2}{\zeta} e^{-2\beta J} \sum_{p=0}^{\infty} p^2 e^{-2\beta J p} = \frac{2}{\zeta} e^{-2\beta J} \partial_x^2 \left(\sum_{p=0}^{\infty} e^{xp} \right) \Big|_{x=-2\beta J} \quad (30)$$

et après quelques calculs on arrive à l'expression du texte.
 Pour l'énergie, on peut partir de l'expression de l'hamiltonien pour écrire

$$\epsilon = \frac{\langle H \rangle}{N} = 2J + 2\frac{J}{N} \sum_{p=1}^N \langle |y_p| \rangle. \quad (31)$$

Comme les y_p sont tous i.i.d. ils donnent tous la même contribution, qui est celle que nous avons trouvée au point précédent.

Q4. a) Le théorème de la limite centrale nous dit que, pour q grand

$$\frac{1}{\sqrt{q}} \sum_{i=p+1}^{p+q} y_i \sim \mathcal{N}(0, \langle y^2 \rangle), \quad (32)$$

ce qui signifie que dans cette limite nous avons

$$\Delta y \sim \mathcal{N}(0, q \langle y^2 \rangle) \quad (33)$$

Nous avons donc que

$$\sqrt{\langle (\Delta y)^2 \rangle} = \sqrt{q \langle y^2 \rangle} = \sqrt{\frac{q}{2} \frac{1}{\sinh(\beta J)}}. \quad (34)$$

b) D'après la dernière expression, il est clair que $\langle (\Delta y)^2 \rangle \sim q$. Pour faire correspondre la même expression du premier exercice, nous avons besoin de

$$\frac{1}{\alpha\beta} = \langle y^2 \rangle = \frac{1}{2 \sinh^2(\beta J)}, \quad (35)$$

de sorte que

$$\alpha = \frac{2 \sinh^2(\beta J)}{\beta}. \quad (36)$$