



National Library
of Canada

Bibliothèque nationale
du Canada

Canadian Theses Service

Service des thèses canadiennes

Ottawa, Canada
K1A 0N4

NOTICE

The quality of this microform is heavily dependent upon the quality of the original thesis submitted for microfilming. Every effort has been made to ensure the highest quality of reproduction possible.

If pages are missing, contact the university which granted the degree.

Some pages may have indistinct print especially if the original pages were typed with a poor typewriter ribbon or if the university sent us an inferior photocopy.

Previously copyrighted materials (journal articles, published tests, etc.) are not filmed.

Reproduction in full or in part of this microform is governed by the Canadian Copyright Act, R.S.C. 1970, c. C-30.

AVIS

La qualité de cette microforme dépend grandement de la qualité de la thèse soumise au microfilmage. Nous avons tout fait pour assurer une qualité supérieure de reproduction.

S'il manque des pages, veuillez communiquer avec l'université qui a conféré le grade.

La qualité d'impression de certaines pages peut laisser à désirer, surtout si les pages originales ont été dactylographiées à l'aide d'un ruban usé ou si l'université nous a fait parvenir une photocopie de qualité inférieure.

Les documents qui font déjà l'objet d'un droit d'auteur (articles de revue, tests publiés, etc.) ne sont pas microfilmés.

La reproduction, même partielle, de cette microforme est soumise à la Loi canadienne sur le droit d'auteur, SRC 1970, c. C-30.

DÉPENDANCE DE
L'ÉNERGIE DES DISLOCATIONS
EN FONCTION DE LA TEMPÉRATURE

Thèse déposée à
l'École des études supérieures et de la recherche
en vue de l'obtention de la maîtrise en physique

Bruno Grossmann
Département de physique Université d'Ottawa
Ottawa, Ontario, Canada
août 1988

© Bruno Grossman, Ottawa, Canada, 1988.

Permission has been granted to the National Library of Canada to microfilm this thesis and to lend or sell copies of the film.

The author (copyright owner) has reserved other publication rights, and neither the thesis nor extensive extracts from it may be printed or otherwise reproduced without his/her written permission.

L'autorisation a été accordée à la Bibliothèque nationale du Canada de microfilmer cette thèse et de prêter ou de vendre des exemplaires du film.

L'auteur (titulaire du droit d'auteur) se réserve les autres droits de publication; ni la thèse ni de longs extraits de celle-ci ne doivent être imprimés ou autrement reproduits sans son autorisation écrite.

ISBN 0-315-46766-5



UNIVERSITÉ D'OTTAWA
UNIVERSITY OF OTTAWA

Résumé

Le but du projet était de voir quels étaient les effets de la température sur les propriétés des dipôles de dislocations d'une monocouche de xénon. Nous avons utilisé un programme de simulation basé sur les algorithmes de dynamique moléculaire, et avons vérifié les résultats de Duesbery et Joos. Ces résultats, obtenus à $T = 0$ K, avaient démontré que les énergies associées aux défauts ne correspondaient pas aux prédictions de la théorie de l'élasticité. De plus, nous avons observé une augmentation linéaire des énergies des défauts en fonction de la température. Les pentes de ces droites tendent vers un maximum correspondant à de longs dipôles. Nous avons également trouvé que la température de Peierls (c'est-à-dire la température à laquelle le dipôle commence à bouger) diminue de façon monotone avec la taille du défaut. Ces deux observations sont reliées au passage du défaut d'un état où il se comporte comme une seule entité à un état où les deux noyaux n'interagissent que faiblement. Elles confirment la présence d'une grande région associée au cœur de la dislocation.

Table des matières

1	INTRODUCTION	1
2	LES GAZ RARES	3
2.1	ENERGIES D'INTERACTION :	4
2.1.1	Interactions atome-atome	5
2.1.2	Interactions atome-surface	7
2.2	STRUCTURE DES MONOCOUCHEs :	10
3	LES DISLOCATIONS	13
3.1	LA THEORIE DE KTHNY :	14
3.2	COMPORTEMENT INÉLASTIQUE DES DIPÔLES :	18
4	LA TECHNIQUE DE DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE	23
4.1	LES ALGORITHMES DE DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE :	24
4.2	EXEMPLES DE SIMULATIONS :	30
4.3	CALCULS ET INCERTITUDES	33
5	RÉSULTATS ET DISCUSSION	35

5.1 ÉNERGIES DES DÎPÔLES :	35
5.2 FORCE DE PEIERLS :	39
6. CONCLUSION	41

Chapitre 1

INTRODUCTION

L'étude des solides bidimensionnels intéresse les physiciens depuis maintenant un siècle. En effet, c'est au tournant du siècle qu'on a commencé à s'intéresser aux films d'huile flottant sur l'eau. Toutefois, les monocouches de gaz rares représentent un sujet beaucoup plus neuf: ce n'est qu'en 1969 que l'on a découvert cette propriété qu'ont ces gaz, de se "coller" à une surface si l'on décroît suffisamment la pression du contenant dans lequel ils sont placés [1,2]. Depuis cette découverte, le domaine des monocouches de gaz rares adsorbées sur un substrat - en général du graphite - a pris un essor assez considérable. Des expériences ont été faites [3], on a formulé des théories au sujet de la fonte de ces systèmes, et, depuis l'avènement des ordinateurs, on a commencé à effectuer des simulations [3,4,5]. Beaucoup de propriétés intéressantes ont ainsi été découvertes. Il reste qu'une certaine quantité d'informations importantes nous manque encore. Par exemple, la transition de la phase solide à la phase liquide d'une monocouche de gaz rare est-elle du premier ou du second ordre? L'ordre de cette transition dépend-il du fait qu'il y ait un substrat, et, si oui, dépend-il de la variation spatiale du potentiel de ce substrat

CHAPITRE 1. INTRODUCTION

2

[4,5,6,7,8,9,10,11] ? Autant de questions débattues qui restent sans réponse, malgré notre compréhension sans cesse meilleure de ces systèmes.

Chapitre 2

LES GAZ RARES

C'est entre 1894 et 1898 que les gaz rares - hélium, néon, argon, krypton et xenon - furent découverts. Depuis maintenant 50 ans, les gaz rares font l'objet de recherches extensives. Ce sont eux qui servent de modèles élémentaires dans les livres de physique et de chimie, pour introduire les concepts de liaisons et de structure cristalline.

La raison en est bien simple: les interactions en jeu sont simples et bien connues. Tout d'abord, on peut ne tenir compte que des interactions atome-atome, ceci constituant une excellente approximation. De plus, le potentiel a la symétrie sphérique. Enfin, la grandeur de ces interactions peut être obtenue à partir de données expérimentales bien connues. Tout ceci fait des gaz rares un sujet de prédilection pour le chercheur averti.

C'est vers la fin des années 1960 que Tomy et Duval effectuèrent leur premières mesures sur du krypton et du xénon physisorbés (ou adsorbés) sur du graphite; Ces expériences montrèrent que les atomes de gaz rare s'adsorbaient sur la surface couche par couche, et que la densité à la surface pouvait être contrôlée avec une grande

précision. De plus, Tomy et Duval observèrent les phases solide, liquide et gazeuse, et les transitions de phase associées. On allait donc pouvoir obtenir des résultats expérimentaux à comparer avec les travaux théoriques de Landau et de Peierls [13], qui prédisaient, entre autre, l'absence d'ordre cristallin à longue distance. Les chercheurs expérimentaux étaient également intéressés à comparer leurs résultats avec la théorie de Halperin, Nelson et Young [14,15], basée sur une idée de Kosterlitz et Thouless [16] (KTHNY), qui, elle, prédisait une fonte continue. Examinons d'abord les énergies d'interaction des monocouches; nous étudierons ensuite les monocouches elles-mêmes.

2.1 ENERGIES D'INTERACTION :

Même si le système choisi est censé être simple - pas d'interactions d'origine chimique, atomes sphériquement symétriques - , les forces doivent être déterminées avec précision, si l'on veut que les résultats soient fiables. Toutes les énergies inhérentes au système sont assez précisément représentées par des potentiels 12-6 de type Lennard-Jones.

$$V = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r} \right)^6 \right] \quad (1)$$

où σ est le rayon effectif du potentiel, et ϵ correspond à une énergie. Le premier terme de ce potentiel est un terme répulsif dont la puissance a été choisie arbitrairement par simplicité analytique. Le deuxième terme, qui représente l'attraction dipolaire est la partie importante de ce potentiel.

2.1.1 Interactions atome-atome

Comme première approximation, on pourrait prendre le potentiel (1) avec les paramètres suivants

Paramètres associés au potentiel de Lennard-Jones

	ϵ (K)	σ (Å)
Kr	150	3.59
Xe	214	3.92

On peut toutefois obtenir un potentiel plus précis de la façon suivante.

L'on sait que, pour des atomes dont la couche extérieure est complète, l'approximation de Hartree-Fock nous donne une expression plus rigoureuse pour le terme à la puissance 12, soit un potentiel répulsif variant exponentiellement avec la distance interatomique. Dans le cadre de cette approximation, on obtient

$$V_0(r) = Ae^{-\alpha r} - \frac{C_6}{r^6} \quad (2)$$

Si l'on veut être plus rigoureux, il faut introduire les termes quadrupolaires C_8 et octupolaires C_{10} . On obtient alors le potentiel suivant [17] (fig. 1.1)

$$V_0(r) = \epsilon \left(Ax^\gamma e^{-\alpha x} - \left(\frac{C_6}{r^6} + \frac{C_8}{r^8} + \frac{C_{10}}{r^{10}} \right) F(x) \right) \quad (3)$$

$$F(x) = \exp \left[- \left(\frac{D}{r} - 1 \right)^2 \right] \quad x < D \quad (4)$$

$$F(x) = 1 \quad x > D$$

x est défini par

$$x = \frac{r}{r_m} \quad (5)$$

où r_m est la distance interatomique à l'équilibre.

Les fonctions F et x^γ sont utilisées pour adoucir les contributions dues aux interactions à courte et longue distances dans la région intermédiaire, de façon à avoir un meilleur accord avec les résultats expérimentaux.

Toutefois, même dans un système simple comme celui-ci, il y a des complications. Elles proviennent du fait, que les atomes interagissent indirectement par le biais de la surface d'adsorption. En effet, le moment dipolaire de l'atome crée un moment-image sur la surface. Ce moment-image interagit alors avec le moment dipolaire d'un autre atome, et affaiblit l'attraction obtenue avec l'interaction directe. Ce problème peut être traité directement par la méthode des images. On obtient alors le terme correctif suivant [18,19]

$$\Delta V(r) = \frac{4C_{11}}{r^6 p^{3/2}} \left(\frac{1}{3} - \frac{L^2}{pr^2} \right) - \frac{C_{12}}{r^6 p^3} \quad (6)$$

$$p = 1 + 4 \frac{L^2}{r^2}$$

$L = \langle z \rangle - \frac{d}{2}$ est la distance du plan-image. d est la distance intercouche du graphite - celle-ci intervient par le biais du phénomène d'image électrostatique -,

$\langle z \rangle$ est la distance moyenne des atomes à la surface et

$$C_{s1} = \frac{3}{\pi} \int_0^{\infty} \alpha^2(i\xi) g(i\xi) d\xi$$

$$C_{s2} = \frac{3}{\pi} \int_0^{\infty} \alpha^2(i\xi) g^2(i\xi) d\xi \quad (7)$$

$$g(i\xi) = \frac{(\epsilon(i\xi) - 1)}{(\epsilon(i\xi) + 1)}$$

Dans les expressions ci-dessus, $\alpha(i\xi)$ représente la polarisabilité des atomes, et $\epsilon(i\xi)$ la fonction diélectrique du solide. Ces 2 fonctions sont évaluées sur l'axe des énergies dans la partie imaginaire positive, $i\xi$.

Le potentiel final est donc le suivant

$$V(r) = V_0(r) + \Delta V(r) \quad (8)$$

2.1.2 Interactions atome-surface

Bien que le système utilisé pour nos simulations n'ait pas de substrat, nous allons décrire le potentiel associé à la surface, car on pense qu'il influence fortement la monocouche de gaz rare. L'étude d'un système avec substrat est d'ailleurs prévue comme suite logique de celle présentée dans ce document, et notre programme de dynamique moléculaire incorpore de tels systèmes.

Il existe 2 types d'adsorption: l'adsorption chimique et l'adsorption physique, ou faible. Dans le second cas, l'énergie latérale des atomes entre eux représente une fraction plus importante de l'énergie totale que dans le premier cas. Ces interactions représentent d'ailleurs le processus de redistribution des charges ayant lieu dans la physisorption. Le substrat change donc les propriétés physiques de la monocouche.

Puisque le substrat utilisé lors des études précédentes était le graphite, choisissons-le nous aussi. Le graphite a une structure hexagonale périodique. On peut donc définir un réseau bidimensionnel superposable à cette structure. Ce réseau a pour vecteurs de base

$$\vec{a}_1 = \vec{i} \quad (9)$$

$$\vec{a}_2 = \frac{1}{2}\vec{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}\vec{j}$$

où \vec{i} et \vec{j} sont les vecteurs de base d'un repère orthonormé. Puisque le substrat est périodique, on peut utiliser la propriété suivante: si l'on fait subir une translation $\vec{l} = l_1\vec{a}_1 + l_2\vec{a}_2$ (l_1 et l_2 entiers) à un atome, il sera dans une position équivalente à celle de départ. Le potentiel a donc la périodicité du substrat

$$U_s(\vec{r} + \vec{l}) = U_s(\vec{r}) \quad (10)$$

On peut donc représenter ce potentiel sous la forme d'une série de Fourier, qui tient compte de la structure interne du graphite

$$U_s(\vec{r}) = \sum_{\vec{\alpha}} \sum_{\vec{g}} W_{\vec{g}}(Z_{\alpha}) \exp(i\vec{g} \cdot \vec{r}) \quad (11)$$

\vec{r} est le vecteur de translation et \vec{g} est un vecteur réciproque défini comme suit

$$\vec{g} = 2\pi(g_1\vec{b}_1 + g_2\vec{b}_2) \quad (12)$$

g_1 et g_2 sont des entiers, et \vec{b}_1 et \vec{b}_2 sont tels que

$$\begin{aligned} \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_1 &= \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_2 = 1 \\ \vec{a}_1 \cdot \vec{b}_2 &= \vec{a}_2 \cdot \vec{b}_1 = 0 \end{aligned} \quad (13)$$

Enfin, $W_{\vec{g}}(Z_{\alpha})$ est le coefficient de Fourier du $\alpha^{\text{ème}}$ plan d'atomes de graphite situé à une distance Z_{α} du gaz d'atomes, et s'exprime comme suit

$$W_{\vec{g}}(Z_{\alpha}) = \frac{1}{a_s} \int_a \exp(-i\vec{g} \cdot \vec{r}) U_s(\vec{r}) d\vec{r} \quad (14)$$

où a_s est la surface de la cellule unitaire. On sait que l'interaction entre les atomes de gaz rare et les atomes de carbone est représentée par le potentiel de Lennard-Jones. Si l'on utilise ce potentiel, et que l'on tient compte de la périodicité du système, on obtient finalement

$$\begin{aligned}
 U_s(\vec{r}) = \epsilon_{gs} \frac{2\pi}{a_s} \sum_{\alpha} \left[q \left(\frac{2}{5} \frac{\sigma_{gs}^{12}}{Z_{\alpha}^{10}} - \frac{\sigma_{gs}^6}{Z_{\alpha}^4} \right) + \sum_{\vec{y}=0} \sum_{\vec{k}=1} \exp(i\vec{g} \cdot (\vec{k}_m + \vec{r})) \right. \\
 \left. \times \left(\frac{\sigma_{gs}^{12}}{30} \left(\frac{q}{Z_{\alpha}} \right)^5 K_5(gZ_{\alpha}) - 2\sigma_{gs}^6 \left(\frac{q}{2Z_{\alpha}} \right)^2 K_2(gZ_{\alpha}) \right) \right] \quad (15)
 \end{aligned}$$

Dans cette équation, ϵ_{gs} est l'amplitude du potentiel de Lennard-Jones, q est le nombre total d'atomes par unité de surface, σ_{gs} correspond au rayon de sphère dure associé au potentiel de Lennard-Jones, les $K_i(gZ_{\alpha})$ sont les solutions de l'intégrale fournissant $W_g(Z_{\alpha})$, et \vec{m}_k est défini de telle façon que $\vec{l} + \vec{m}_k$ situe le $k^{\text{ème}}$ atome dans la cellule unitaire dont la position est fournie par \vec{l} .

Si l'on ne garde que les 6 premiers vecteurs réciproques, on obtient l'approximation suivante [20]

$$U_s(\vec{r}) = V_0(z) - 2V_G(z) (\cos(2\pi s_1) + \cos(2\pi s_2) + \cos(2\pi(s_1 + s_2))) \quad (16)$$

$$\begin{aligned}
 \text{avec } s_1 &= \frac{2x}{a\sqrt{3}} \\
 \text{et } s_2 &= \frac{y\sqrt{3} - x}{a\sqrt{3}}
 \end{aligned}$$

a est la distance entre les centres de deux hexagones adjacents.

V_0 est donné par l'équation

$$V_0(z) = \frac{4\pi\epsilon\sigma^6}{a_s d^4} \left(\frac{2}{5} \left(\frac{\sigma}{d} \right)^6 \xi\left(10, \frac{z}{d}\right) - \xi\left(4, \frac{z}{d}\right) \right) \quad (17)$$

où ϵ et σ ont la même signification que précédemment, a_s est la surface de la cellule unitaire du graphite, d est la distance intercouche, et

$$\xi(n, x) = \sum_{j=0}^{\infty} (j + x)^{-n} \quad (18)$$

Quant à V_G , il est donné par

$$V_G(z) = \frac{\pi\epsilon\sigma^6 g^2}{a_s} \left(\frac{\sigma^6 g^3}{480Z^3} K_5 - \left(K_2 + 0.4 \left(K_2 - \frac{gZK_3}{4} \right) \right) \right) \quad (19)$$

Il est à noter que le terme $0.4(K_2 - \frac{gZK_3}{4})$ représente l'anisotropie du potentiel attractif. La modulation de la surface du substrat est représentée par la somme des cosinus.

2.2 STRUCTURE DES MONOCOUCHE :

Les potentiels utilisés sont donc assez simples. Il est à remarquer que, même si les corrections au potentiel de départ sont petites, leurs effets n'en sont pas moins non-négligeables: la valeur absolue de la profondeur des puits de potentiel est diminuée de 20% à cause de la création des moments dipolaires dans le substrat et de l'interaction de ces moments avec les moments des atomes.

Pour bien comprendre quels paramètres jouent un rôle important dans ces systèmes, et dans la structure qu'ils vont adopter, traitons 2 exemples.

Examinons tout d'abord quelles sont les structures possibles pour le krypton déposé sur du graphite. Nous savons que les atomes préfèrent être au centre d'une cellule hexagonale; toutefois, ils ne peuvent être situés dans deux cellules adjacentes, à cause des forces de répulsion du potentiel. Toutefois, si les atomes sont au centre d'un hexagone sur trois -c'est-à-dire de la cellule hexagonale la plus proche, après la

cellule adjacente -, on obtient une densité inférieure de seulement 10% à la densité idéale. La périodicité de cette structure étant un multiple de celle du substrat, on parle de phase commensurable. Une propriété essentielle de cette structure est que l'on peut placer les atomes de krypton sur trois sous-mailles différentes α , β et γ . Les vecteurs de la cellule unitaire du krypton sont plus longs que ceux de la cellule unitaire de carbone par un facteur multiplicatif $\sqrt{3}$, et ont subi une rotation de 30 degrés. On parlera donc de la structure $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$.

Le krypton peut également être dans une phase dite incommensurable. En effet, si l'on varie le potentiel chimique de façon à avoir plus d'atomes par unité de surface du substrat, on va observer la situation suivante: le krypton va alors occuper une certaine sous-maille α avec la structure $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$. Toutefois, comme cette structure correspond à une densité inférieure à celle requise par la valeur du potentiel chimique, on va trouver une région plus dense au bout d'une certaine distance. On appelle cette région un mur de domaine. Puis le krypton reprend la structure $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$ sur une sous-maille β . Il est à noter que l'on peut donner au potentiel chimique une valeur telle que la densité de la monocouche soit inférieure à celle correspondant à la phase commensurable. Dans ce cas, les murs de domaine correspondent à une région moins dense en atomes. C'est ce qui se passe pour le xénon. Il est évident que le paramètre de maille est légèrement plus grand que la valeur obtenue avec la structure $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$. Le xénon est donc toujours dans une phase incommensurable. *

Tous les systèmes que nous venons de voir sont des systèmes expérimentaux. Ce sont eux qui donnent des informations sur les transitions de phases, les différentes structures des monocouches, etc. Il ne faut toutefois pas oublier que le substrat

joue ici un rôle important: c'est lui qui détermine si la monocouche est commensurable ou non. Il peut donc également influencer des paramètres aussi importants que la température de fonte, et même la façon dont la fonte se produit. Puisque notre étude est uniquement théorique, nous nous sommes d'abord débarrassés du substrat. Les simulations que nous avons faites représentent un système purement bidimensionnel, sans substrat. En fait, on néglige les effets possibles de modulation en densité, en supposant qu'ils ne devraient pas être importants dans les systèmes où les murs de domaine sont très rapprochés les uns des autres (Xe sur graphite), ou dans les systèmes où la modulation dans le potentiel V_G est faible (comme dans le cas du xénon déposé sur le substrat Ag(111)). L'effet majeur qui est négligé dans ces derniers cas est le mouvement perpendiculaire au substrat, qui, dans l'approximation harmonique, est découplé du mouvement dans le plan. Bien qu'il n'ait pas encore été obtenu dans les expériences actuelles, ce système bidimensionnel est d'un intérêt fondamental.

Chapitre 3

LES DISLOCATIONS

L'étude des dislocations en deux dimensions est d'une importance cruciale pour les systèmes que nous étudions. En effet, la théorie de KTHNY prédit, que la fonte dans les monocouches de gaz rares physisorbés est initiée par la croissance des dislocations incluses. Nous allons donc nous intéresser tout d'abord aux dislocations dans la théorie de l'élasticité, et leur rôle dans la fonte; puis nous mentionnerons les données obtenues par Joos et al., qui montrent que ces dislocations ne se comportent pas toujours selon cette théorie, et nous essaierons d'en tirer des conséquences.

Contrairement à leurs analogues en 3 dimensions, les dipôles de dislocation en 2 dimensions sont des défauts, ayant une énergie assez basse pour être activés thermiquement. Ce sont des agrégats linéaires composés de lacunes ou d'atomes interstitiels. Au contraire, en 3 dimensions, ils sont formés de plans de lacune, ce qui explique la différence dans les énergies. C'est pour cette raison qu'en 2 dimensions, ils sont appelés à jouer un rôle important dans la fonte. Une théorie proposée est celle de KTHNY: elle prévoit que la fonte d'un solide bidimensionnel peut être continue, si elle est initiée par la libération des dipôles de dislocation. Il est à noter

qu'en 3 dimensions, la fonte est un phénomène de premier ordre, alors que cette théorie prévoit un phénomène du second ordre en 2 dimensions. A la suite de cette nouvelle peu banale, un certain nombre de travaux – expériences et simulations fut initié, afin d'observer cette transition. Toutefois, jusqu'à présent, les 2 transitions ont été observées, quelquefois dans le même système. Par exemple, certaines simulations effectuées avec des atomes de gaz rare – donc un potentiel de Lennard-Jones – ont exhibé une fonte du premier ordre alors que d'autres, qui utilisaient un potentiel coulombien, ont fondu de façon continue (pour une discussion extensive à ce sujet, voir [4]).

Il est à noter que le système utilisé dans nos simulations, avec les restrictions que nous lui imposons – c'est-à-dire l'absence de substrat – n'a pas d'équivalents à l'exception de systèmes similaires utilisés dans d'autres simulations.

3.1 LA THEORIE DE KTHNY :

Dans les solides tridimensionnels, on retrouve 2 types de dislocations [21,22]:

- Les dislocations hélicoïdales: elles n'ont pas d'analogues en 2 dimensions et ne sont d'aucun intérêt pour nous.
- les dislocations de bord: en trois dimensions, elles peuvent être construites en insérant un demi-plan supplémentaire d'atomes dans le cristal. Le côté de ce demi-plan peut être considéré comme le coeur de ces dislocations. La distortion qui résulte de l'introduction de ce demi-plan est localisée dans le voisinage immédiat de ce coeur, et son rayon s'étend sur quelques périodes de la maille. Ce rayon est associé au rayon du coeur de la dislocation, r_c . En

2 dimensions, cette dislocation devient un défaut ponctuel; elle est créée en insérant une demi-droite supplémentaire d'atomes.

La structure triangulaire, qu'adopte la monocouche de gaz rare, correspond à un seul plan, de la structure HCP. Le réseau triangulaire déformé est donc relié à une dislocation en coin, dont la limite est située le long de l'axe c de cette structure. On peut voir un exemple de dipôle de dislocation sur la figure 3.1. Les vecteurs de Burgers sont indiqués par des flèches. Le vecteur de Burgers se définit comme suit: on suit d'abord un circuit autour de la dislocation dans le cristal; Puis on refait le même circuit dans un cristal parfait. La différence entre les deux circuits est définie comme le vecteur de Burgers de la dislocation.

La plupart des propriétés physiques importantes des dislocations ont été décrites dans le cadre de la théorie d'élasticité. On peut donc exprimer toutes les quantités utiles en terme de tenseurs de déformation, de contrainte, de champs de déplacement et de constantes élastiques. L'énergie d'interactions entre 2 dislocations ayant respectivement pour vecteurs de Burgers \vec{b}_1 et \vec{b}_2 , et séparées par un vecteur \vec{R}_{12} , est donnée par la formule suivante

$$\Delta E_{12} = -J \left[\vec{b}_1 \cdot \vec{b}_2 \ln \left[\frac{R_{12}}{r_c} \right] - \frac{(\vec{b}_1 \cdot \vec{R}_{12})(\vec{b}_2 \cdot \vec{R}_{12})}{R_{12}^2} \right] \quad (20)$$

où r_c est le rayon du coeur de la dislocation, et J est l'énergie d'interaction. Pour les cristaux isotropiquement élastiques, J peut être exprimée comme suit

$$J = \frac{\mu(\lambda + \mu)}{\pi(\lambda + 2\mu)} \quad (21)$$

λ et μ étant les coefficients de Lamé. On peut d'ailleurs relier ces coefficients à des quantités physiques connues. μ est le module de glissement, et $K = \lambda + \mu$ est le module de compression uniforme.

En trois dimensions, les dislocations sont des défauts assez énergétiques pour ne pas être créés par des fluctuations de température; mais en 2 dimensions, le fait qu'ils soient des défauts ponctuels rend la création de dipôles de dislocation beaucoup plus facile, surtout si ces dipôles ont des vecteurs de Burgers opposés. On peut par exemple décrire une lacune comme une paire de dislocations séparées par une distance, correspondant à une fois le paramètre de maille - ceci n'étant pas la façon la plus simple de décrire un tel dipôle. Si l'on continue à ajouter des lacunes dans ce système, ces lacunes peuvent soit se regrouper pour former une zone de vide, soit s'aligner en prenant la forme d'un dipôle plus grand. Les dipôles créés par des lignes de lacunes ont des vecteurs de Burgers satisfaisant la propriété suivante, soit $\vec{b}_1 = -\vec{b}_2$ et $|\vec{b}_1| = a$, le paramètre de réseau. A partir de ces données, on peut déduire leur énergie

$$E_{12} = 2E_c a^2 + J a^2 \left[\ln \left(\frac{R_{12}}{a} \right) - \frac{1}{2} \cos(2\theta) \right], \quad (22)$$

où R_{12} est la distance inter-dislocation, θ est l'angle entre \vec{R}_{12} et \vec{b}_1 , et E_c est la partie inélastique de l'énergie de déformation contenue dans le coeur de la dislocation.

Si l'équation ci-dessus est obéie, et si $E_c \sim J$, alors la formation de dipôles de plus en plus grands sera énergétiquement favorable. Cette condition constitue la base de la théorie de fonte de KTHNY. En effet, la dépendance logarithmique de l'énergie en fonction de la distance va favoriser la création de longs dipôles; au fur et à mesure que la température augmente, leur densité et leur longueur vont également augmenter. Ils s'écranteront de plus en plus efficacement. Puis, lorsqu'ils atteignent la première température critique, ils se séparent. C'est à ce moment que le système perd son ordre positionnel à longue distance; toutefois, il garde son ordre orientationnel jusqu'à une seconde température critique, à laquelle les coeurs de dislocation

se divisent en disclination. La monocouche est alors vraiment dans sa phase liquide. La phase constituée du système entre les 2 températures critiques est appelée phase hexasatique.

D'autre part, en se basant sur l'hypothèse que E_c était petite par rapport à J , Saito [23] a montré qu'une transition de phase, initiée par la nucléation de boucles de dislocations contenues dans les parois de flexion, aurait lieu, et qu'elle serait du premier ordre. Chui [24] a estimé que ce processus devrait avoir lieu pour $E_c < 0.71 J$. Selon lui, la fonte ne peut jamais être continue; même pour de grandes énergies de coeur, la transition sera du premier ordre, bien que faiblement.

Le modèle de KTHNY utilise aussi une autre hypothèse, qu'il est important de souligner. Le mécanisme de libération ne peut se produire que dans un gaz de dipôles, c'est-à-dire un ensemble de dipôles libres de se déplacer dans le réseau. Cela implique, que la force de Peierls [13] - la force nécessaire pour bouger un défaut d'un paramètre de réseau - est négligeable. Ceci est généralement vrai pour les cristaux tridimensionnels, en particulier ceux ayant la structure HCP. Toutefois, il y a d'importantes exceptions.

Tous ces énoncés plus ou moins contradictoires ont donc poussé les théoriciens à essayer de vérifier les résultats de la théorie de KTHNY. En particulier, des simulations sur différents systèmes ont été faites. Ceci nous amène aux résultats obtenus par Joos et Duesbery [25], qui nous intéressent plus particulièrement.

3.2 COMPORTEMENT INÉLASTIQUE DES DIPÔLES :

Comme il a été dit auparavant, la théorie de KTHNY prédit que la fonte des systèmes du type de celui que nous étudions devrait se produire par l'allongement de la taille des dipôles de dislocation. Cette théorie est basée sur l'hypothèse, que les systèmes étudiés se comportent selon les prédictions de la théorie de l'élasticité. Nous allons maintenant discuter la validité de cette hypothèse.

Le comportement harmonique des solides à basse température a été vérifié par des simulations [26,27,28]. Toutefois, ces simulations ont été effectuées dans des systèmes ne comprenant pas de défauts, et ne nous permettent donc pas de dire si les dislocations interagissent élastiquement entre elles.

Fisher, Halperin et Morf [29] ont calculé les énergies de différents défauts pour un potentiel de la forme $\frac{1}{r}$ - le potentiel associé au gaz d'électrons bidimensionnel -, en utilisant à la fois une méthode variationnelle basée sur la théorie de l'élasticité, et une méthode de relaxation numérique. De leurs calculs, il ressort que les interactions élastiques entre dislocations restent valides jusqu'à des distances de l'ordre de 3 paramètres de réseau. Ils ont également trouvé que l'énergie des dipôles interstitiels est inférieure à celle des lacunes. Ceci est dû à la charge de fond positive nécessaire pour maintenir les électrons sous la forme d'un solide.

Ladd et Hoover [30], quant à eux, ont fait le même genre de calculs sur un système ayant un potentiel linéaire. Leur conclusion est semblable à celle de Fisher et al., soit que les interactions sont de type élastique pour des séparations supérieures à quelques paramètres de maille.

Les calculs effectués par Joos et Duesbery [25] (fig. 2.2) laissent entrevoir des

interactions bien plus compliquées dans le cas des gaz rares. Joos et al. ont utilisé une méthode de relaxation statique à température nulle pour simuler le comportement de dipôles de dislocation de différentes longueurs, et ont obtenu les énergies de ces dipôles. Plusieurs résultats ressortent de ces simulations. Tout d'abord, les dipôles interstitiels ont un comportement élastique, dès que leur longueur atteint environ $7 a$. Les lacunes, au contraire, ont un comportement fortement inélastique qui ne disparaît qu'après que leur longueur ait atteint $30 a$ ou plus. Dans les régions inélastiques, l'énergie des lacunes est inférieure à celle calculée d'après la théorie de l'élasticité - ce qui indique une liaison forte -, et inférieure à celle des dipôles interstitiels. La différence entre les deux peut être importante: le monopôle interstitiel a plus de 3 fois l'énergie de la monolacune. On peut donc raisonnablement conclure que seules les lacunes seront présentes lors des processus thermiques.

De façon à définir l'énergie du coeur, le rayon du coeur a été choisi comme étant égale au paramètre de réseau. Une plus petite valeur n'aurait pas été physique et il n'y a aucune raison d'en choisir une plus grande. L'énergie a donc été obtenue en extrapolant la droite d'énergie asymptotique jusqu'à l'origine. Il est à noter que les résultats sont assez proches de la valeur critique de Chui [24].

Toutefois, le résultat important reste l'énergie des petites lacunes, qui diffèrent radicalement de celles calculées à partir de la théorie d'élasticité. En effet, si celle-ci prédisait une fonte ayant lieu par l'intermédiaire de la croissance des petites lacunes - ceci étant dû au fait que ce processus était plus énergétiquement favorable -, les résultats exposés précédemment permettent d'imaginer un nouveau processus. Par exemple, l'énergie nécessaire à la création d'une dilacune à $4,26 \text{ \AA}$ est inférieure de seulement 100 K à l'énergie d'une monolacune. De plus, cette différence diminue lorsque a augmente. A des températures de l'ordre de 100 K , cette différence est

largement surclassée par le fait, que la création d'une nouvelle monolacune est thermodynamiquement très favorable pour le système. Donc, il y aura une augmentation dans la densité des petits dipôles, plutôt qu'une croissance de ces dipôles, nécessaire à la fonte prédite par la théorie de KTHNY.

Les résultats obtenus par Joos et Duesbery comportent deux avertissements sérieux pour les simulations de fonte de systèmes, de type Lennard-Jones. D'abord, la grande différence d'énergies entre les lacunes et les dipôles interstitiels, conjuguée avec les conditions aux limites périodiques, et un nombre fixé d'atomes, va donner des résultats discutables, car, dans de tels systèmes, ces deux types de défauts sont généralement créés sous forme de paires. Il est possible que la difficulté de tels systèmes, à créer des lacunes, soit à l'origine de l'observation dans presque toutes ces simulations, d'une transition de phase du premier ordre, alors que des transitions de phase continues sont observées dans plusieurs systèmes expérimentaux. D'ailleurs, la seule simulation, dans laquelle une transition continue a été observée, utilise un système permettant le mouvement des atomes dans les 3 dimensions [5]. Il est à souligner qu'un algorithme simulant un système à potentiel chimique constant - et donc des fluctuations de densité appréciables - serait très utile.

Les résultats de Joos et Duesbery indiquent également, qu'il faut être prudent, en faisant l'extrapolation des résultats obtenus à partir d'un système fini pour obtenir la limite thermodynamique. Si la théorie de l'élasticité n'est obéie qu'à partir de 30 a, le système simulé devrait alors être plus grand que les 1000 atomes ordinairement utilisés. De plus, la forme des interactions entre dislocations laisse entrevoir un système contenant une certaine concentration de lacunes dont la longueur serait de l'ordre de 10 a. D'ailleurs, de gros agrégats formés de défauts ont déjà été observés, juste avant que la fonte se produise, dans de tels systèmes (Tobochnik

et Chester, [28] 1979). Leur présence avait alors été interprétée comme la preuve d'une transition de phase du premier ordre, et en particulier, comme une fonte due aux dislocations des parois de flexion. Toutefois, si la limite élastique n'avait pas encore été atteinte, ces agrégats pourraient être considérés comme une partie du coeur de la dislocation.

De plus, Joos et al. ont calculé, d'après les résultats précédents, que l'énergie d'activation nécessaire pour surmonter la force de Peierls était de 50 K, donc supérieure à la valeur hypothétique de la théorie de KTHNY.

Les calculs de Joos et Duesbery font également ressortir qu'une étude sur la dépendance entre les phénomènes observés et la taille typique du système est d'une importance capitale, si l'on veut pouvoir comprendre la fonte en 2 dimensions. Toxvaerd [31] a effectué quelques simulations de ce genre sur des systèmes obéissant au potentiel de Lennard-Jones, et il a observé une diffusion substantielle dans une simulation de 8100 particules, alors qu'un système plus petit ne s'était pas comporté de telle façon. Cette diffusion pourrait avoir un rôle important à jouer, dans le comportement du solide près de la transition de phase. De plus, le module de glissement μ exhibait une diminution substantielle et à peu près logarithmique en fonction du nombre de particules pour des simulations contenant jusqu'à 1024 atomes. Hoover et al. [32,33] avaient calculé l'augmentation de μ en fonction de la taille, en utilisant l'approximation quasi-harmonique. Toutefois, cette approximation n'est valide qu'à basses températures. Les résultats obtenus par Toxvaerd semble indiquer que des ensembles de 1024 atomes et moins ne sont pas suffisants pour tester la théorie de l'élasticité près de la température de fonte.

Il est à noter que ces résultats sont aussi valides pour des monocouches adsorbées sur un substrat dont la surface est presque plane, et également pour des

monocouches dont les murs sont assez éloignés les uns des autres.

Ces résultats sont très importants, mais ne tiennent pas compte des effets thermiques. C'est ce qui nous a poussé à refaire ces calculs à température non-nulle, pour voir si la température change les résultats obtenus précédemment.

Chapitre 4

LA TECHNIQUE DE DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE

La technique de simulation de dynamique moléculaire étudie l'évolution temporelle d'un système par intégration des équations classiques de Newton. La première simulation utilisant ce procédé fut effectuée par Alder et Wainright [34]. Elle utilisait des puits de potentiel carrés et des sphères dures. Depuis, une quantité impressionnante d'algorithmes a été dérivée. Nous n'allons passer en revue que les plus connus, et nous attarder à celui que nous avons utilisé.

4.1 LES ALGORITHMES DE DYNAMIQUE MOLÉCULAIRE :

Tous les algorithmes partent des mêmes équations de base, les équations de Newton

$$\frac{d\vec{r}_i}{dt} = \frac{\partial H}{\partial \vec{p}_i} = \frac{\vec{p}_i}{m} \quad (23)$$

$$\frac{d\vec{p}_i}{dt} = -\frac{\partial H}{\partial \vec{r}_i} = -\frac{\partial U(\vec{r})}{\partial \vec{r}_i}$$

où les \vec{r}_i représentent les positions des atomes, les \vec{p}_i leurs quantités de mouvement, H est l'hamiltonien du système et $U(\vec{r})$ est le potentiel. A partir de ces équations, on peut obtenir différents algorithmes, dépendants de l'ensemble thermodynamique dans lequel on se place.

- Ensemble canonique (N, V, E)

Dans la simulation traditionnelle de dynamique moléculaire, l'énergie totale E d'un nombre d'atomes N fixé contenu dans un volume V constant est conservée pendant que le système évolue. L'ensemble thermodynamique utilisé pour ces simulations est l'ensemble N,V,E. Les équations utilisées sont de la forme

$$\vec{r}_i(t + \Delta t) = \vec{r}_i(t) + \frac{\vec{p}_i(t)}{m} \Delta t \quad (24)$$

$$\vec{p}_i(t) = \vec{p}_i(t - \Delta t) + \vec{F}_i(t - \Delta t) \Delta t$$

Une version "améliorée" de cet algorithme a été proposée par Verlet [35]. On

l'appelle algorithme saute-mouton. Les équations du mouvement correspondantes sont les suivantes

$$\begin{aligned}\bar{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) &= \bar{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) + \bar{F}_i(t) \frac{\Delta t}{m} \\ \bar{r}_i(t + \Delta t) &= \bar{r}_i(t) + \bar{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) \Delta t \\ \bar{v}_i(t) &= \frac{[\bar{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) + \bar{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2})]}{2}\end{aligned}\tag{25}$$

où l'on a

$$\bar{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) = \frac{(\bar{r}_i(t) - \bar{r}_i(t - \Delta t))}{\Delta t}\tag{26}$$

- Ensemble canonique (N, V, T) avec renormalisation des vitesses en fonction de la température du système

Une légère variante consiste à garder la température constante. On travaille alors dans l'ensemble N, V, T où T est la température. La seule modification à apporter aux équations précédentes vient du fait que l'on change les vitesses des particules, de façon à ce que l'énergie cinétique du système corresponde à son énergie thermique

$$\bar{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) = \bar{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) \beta + \bar{F}_i(t) \frac{\Delta t}{m}\tag{27}$$

où

$$\beta^2 = \frac{(3(N-1)kT/m)}{\sum_{i=1}^N \bar{v}_i^2(t - \frac{\Delta t}{2})}\tag{28}$$

- Ensemble canonique (N, V, T) : méthode des forces amorties

La méthode des forces amorties est un algorithme un peu plus sophistiqué. Elle consiste en la modification des équations hamiltoniennes du mouvement

comme suit

$$\frac{d\bar{p}_i}{dt} = \bar{F}_i - \alpha \frac{\bar{p}_i}{m} \quad (29)$$

$$\frac{d\bar{q}_i}{dt} = \frac{\bar{p}_i}{m}$$

où α est une constante. L'on veut que $\frac{dT}{dt} = 0$. Comme on connaît la température en fonction de la vitesse, on peut en déduire la valeur de α . Après quelques manipulations algébriques, on obtient la modification à l'équation

$$\bar{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) = \bar{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2})(2\beta - 1) + \beta \bar{F}_i(t) \frac{\Delta t}{m} \quad (30)$$

avec

$$\beta^2 = \frac{(3(N-1)kT/m)}{\sum_{i=1}^N \bar{v}_i'^2(t)} \quad (31)$$

et

$$\bar{v}_i'(t) = \bar{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) + \bar{F}_i(t) \frac{\Delta t}{2m} \quad (32)$$

Cet algorithme nous garantit que la température calculée à l'aide de l'énergie cinétique des particules est, en moyenne, égale à la température fixée.

- Ensemble canonique (N, P, H) : méthode d'Andersen

La méthode d'Andersen [36] consiste à garder la pression dans le système constante; on travaille alors dans l'ensemble thermodynamique N,P,H. L'hamiltonien exprimé en fonction des variables réduites

$$\bar{R}_i = \frac{\bar{r}_i}{A^{\frac{1}{3}}} \quad (33)$$

$$\frac{d\bar{R}_i}{dt} = \frac{\bar{p}_i}{mA^{\frac{1}{3}}}$$

sous la forme

$$H(\{\bar{R}\}, \{\dot{\bar{R}}\}, A, \dot{A}) = \frac{A}{2} \sum_{i=1}^N m \dot{\bar{R}}_i \cdot \dot{\bar{R}}_i + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \phi(R_{ij}, A^{\frac{1}{2}}) + \frac{1}{2} M \dot{A}^2 + P_E V \quad (34)$$

où A est la surface de la cellule de simulation, M est une constante et P_E est la pression extérieure.

Les deux premières quantités représentent exactement l'énergie interne des particules du système. Les deux derniers termes représentent les énergies cinétique et potentielle associées au changement de volume. L'énergie conservée est celle obtenue à partir de l'hamiltonien ci-dessus.

Les équations de Newton pour ce système ont déjà été données

$$\ddot{\bar{R}}_i = \frac{\bar{F}_i}{m A^{\frac{1}{2}}} - \frac{1}{2} \dot{\bar{R}}_i \frac{\dot{A}}{A} \quad (35)$$

$$\ddot{A} = \frac{(P - P_E)}{M}$$

P est la pression du système et est calculée comme suit

$$P = \frac{1}{2A} \left(\sum_{i=1}^N m \left(\frac{\bar{p}_i}{m} \right) \cdot \left(\frac{\bar{p}_i}{m} \right) + \sum_{i=1}^N \sum_{j>i}^N \bar{r}_{ij} \cdot \bar{F}_{ij} \right) \quad (36)$$

où $\bar{r}_{ij} = \bar{r}_i - \bar{r}_j$ et \bar{F}_{ij} est la force de l'atome j sur l'atome i .

Dans ce cas, il n'est pas possible d'appliquer directement l'algorithme saute-mouton, car les équations sont couplées. On peut se débarrasser de ce problème en retransformant les équations dans le repère cartésien d'origine. On obtient d'abord la relation entre la quantité de mouvement et la vitesse

$$\frac{\bar{p}_i}{m} = \dot{\bar{r}}_i - \bar{r}_i \frac{\dot{A}}{2A} \quad (37)$$

Ceci nous permet de simplifier la première équation. Quant à la deuxième, on applique l'algorithme de Verlet à la quantité de mouvement p_i pour surmonter la difficulté

$$\bar{p}_i(t) = 2\bar{p}_i(t - \Delta t) - \bar{p}_i(t - 2\Delta t) \quad (38)$$

Dans cette approximation, on néglige les termes en Δt^2 . Avant d'intégrer les équations du mouvement, il nous faut obtenir A et \dot{A}

$$A(t + \Delta t) = 2A(t) - A(t - \Delta t) + \frac{(P(t) - P_E) \Delta t^2}{M} \quad (39)$$

$$\dot{A}(t) = \frac{A(t + \Delta t) - A(t - \Delta t)}{2\Delta t}$$

La modification à la vitesse dans l'algorithme saute-mouton est alors

$$\bar{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) = \bar{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) + \left[\frac{\bar{F}_i(t)}{m} + \frac{\bar{r}_i(t)}{2A(t)} \left(\ddot{A}(t) - \frac{\dot{A}(t)^2}{2A(t)} \right) \right] \Delta t \quad (40)$$

Les autres équations de l'algorithme ne changent pas.

- Ensemble canonique (N, P, T) : méthode combinée

Enfin, l'algorithme qui nous intéresse est une modification de l'algorithme d'Andersen, de façon à garder la pression et la température constantes [37]. Dans ce cas, on combine le troisième algorithme avec celui d'Andersen. Les vitesses déphasées sont calculées comme suit

$$\bar{v}_i'(t) = \bar{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2}) + \left[\frac{\bar{F}_i(t)}{m} + \frac{\bar{r}_i(t)}{2A(t)} \left(\ddot{A}(t) - \frac{\dot{A}(t)^2}{2A(t)} \right) \right] \frac{\Delta t}{2} \quad (41)$$

On peut alors calculer la quantité de mouvement déphasée

$$\bar{p}_i'(t) = \bar{v}_i'(t) - \bar{r}_i(t) \frac{\dot{A}(t)}{2A(t)} \quad (42)$$

et le coefficient d'amortissement est égal à

$$\beta^2 = \frac{3(N-1)kT/m}{\sum_{i=1}^N (\bar{p}_i'(t)/m)^2} \quad (43)$$

La vitesse est alors calculée à l'aide de la formule suivante

$$\begin{aligned} \bar{v}_i(t + \frac{\Delta t}{2}) &= \bar{v}_i(t - \frac{\Delta t}{2})(2\beta - 1) + \left[\bar{r}_i(t) \frac{\dot{A}(t)}{A(t)} \right] (1 - \beta) \\ &+ \beta \left[\frac{\bar{F}_i(t)}{m} + \frac{\bar{r}_i(t)}{2A(t)} \left(\ddot{A}(t) - \frac{\dot{A}(t)^2}{2A(t)} \right) \right] \Delta t \end{aligned} \quad (44)$$

Il est important de noter, que la vitesse d'un atome dépend de sa position.

En effet,

$$\bar{r}_i = \frac{\bar{p}_i}{m} + \bar{r}_i \frac{\dot{A}}{2A} \quad (45)$$

Donc, si un atome traverse un des côtés de la cellule périodique utilisée pour la simulation, sa position, mais aussi sa vitesse vont être affectées. Nous parlons ici de vitesse absolue, soit la vitesse de l'atome par rapport à la surface plus la vitesse de la surface. La vraie vitesse de l'atome – soit la première, respectivement –, ne varie pas en fonction de sa position dans la boîte. Cet algorithme maintient donc la température et la pression constantes. Cette propriété nous intéresse beaucoup pour 2 raisons

- Nous voulons être sûrs que la température est constante, si nous voulons en voir les effets sur l'énergie des dislocations.
- Le fait que la pression est gardée constante est également très important. En effet, si, à une distance raisonnable des coeurs de dislocation, les déplacements des atomes correspondent à ceux prédits par la théorie de l'élasticité, il n'en est pas de même à courte distance, où les effets

anharmoniques sont beaucoup plus forts. Donc, si l'on enlève un certain nombre d'atomes de notre cellule de simulation, il faut également en corriger le volume. Ceci est effectué automatiquement avec cet algorithme.

4.2 EXEMPLES DE SIMULATIONS :

Différents exemples de simulations utilisant des algorithmes similaires ont déjà été publiés (voir [38] pour les simulations en 3 dimensions, et [5] pour les systèmes bidimensionnels). Toutefois, pour faciliter l'analyse de nos résultats par le lecteur, nous allons fournir quelques exemples d'exécutions, ainsi que leurs interprétations.

L'algorithme que nous utilisons a 3 paramètres ajustables :

- La pression à l'équilibre :

c'est elle qui nous permet de fixer le paramètre de réseau à la valeur voulue. La pression du système va osciller autour de cette pression. Il est à remarquer que les oscillations ont 2 causes distinctes: les variations microscopiques reliées à chaque atome, et la variation de la surface. C'est ce qui explique la superposition des 2 ondes sur les graphiques 4.1, 4.7, 4.13, etc. Les fréquences les plus élevées correspondent aux fluctuations microscopiques, alors que les basses fréquences sont reliées aux mouvements de la surface.

- La masse effective de la surface :

c'est la masse correspondant à l'énergie cinétique créée par la variation de la surface. Plus cette masse effective est petite, et plus les variations de la pression seront rapides. On peut voir ses effets en comparant 4.1-4.6 et 4.7-4.12, 4.7-4.12 et 4.13-4.18, etc. C'est ce paramètre que l'on varie pour obtenir de bonnes moyennes plus rapidement. comme nous le montre les comparaisons

entre les figures 4.2 et 4.8, 4.8 et 4.14, 4.14 et 4.20, etc. Andersen a suggéré une analogie pour faciliter la compréhension du rôle de cette masse. Supposons que notre gaz soit placé dans un contenant à volume variable, et qu'il puisse être comprimé par un piston. Dans ce cas, M peut être considérée comme la masse du piston. Toutefois, l'hamiltonien utilisé pour dériver nos équations n'est pas tout à fait analogue à celui qui serait utilisé pour simuler le système décrit ci-dessus.

Il est à noter que les avis sont partagés, quant à la signification de cette masse effective, et surtout, quant aux valeurs à lui donner, de façon à obtenir les quantités instantanées correctes. En effet, si les moyennes ne dépendent pas de M , la simulation d'un système réel requiert l'utilisation d'une masse en rapport avec celui-ci. Nous avons choisi d'utiliser le critère d'Andersen, qui relie la masse de la membrane à la vitesse du son dans le solide. M doit donc être choisie, de façon à ce que la période de fluctuation de la surface soit égale à $S^{\frac{1}{2}}$ divisée par la vitesse du son dans notre monocouche.

- La température :

elle est variée de façon à d'écrire un large éventail dans les énergies calculées.

De plus, on peut évidemment varier le nombre d'atomes, la taille de la boîte, le pas temporel, et tous les paramètres standard à ce genre de simulation.

Pour voir les effets des différents paramètres, plusieurs simulations ont été effectuées. Nous avons d'abord fait une étude sur les effets de la masse effective à température et pression fixe. Les résultats obtenus sont exposés sous forme de graphiques dans les figures 4.1-4.30. D'après ces figures, on voit que la masse effective a 2 effets, l'un d'intérêt pour nous, l'autre néfaste. Le premier est l'obtention

d'une moyenne correcte plus rapidement au fur et à mesure que l'on augmente M . Les comparaisons entre les figures 4.2 et 4.8, 4.4 et 4.10, 4.6 et 4.12, par exemple, nous le montrent. Le deuxième est l'amplitude de plus en plus grande des oscillations de départ, et le temps de plus en plus long qu'il faut pour que cette amplitude diminue jusqu'à une valeur raisonnable. Pour voir cela, il suffit de comparer 4.1 et 4.25, par exemple. Ce sont ces effets qui nous ont poussé à essayer de changer M pendant la simulation. De plus nous avons effectué d'autres simulations qui nous ont montré qu'une température plus élevée ne changeait peu ou pas le comportement du système - ceci est dû au fait que l'on change le pas temporel avec la température de façon à ce que le système ne s'emballe pas. Nous avons donc fait en sorte que le système se thermalise un peu avec une masse effective normale, puis qu'un changement de masse se produise lorsque la thermalisation était suffisante. Nous avons ainsi obtenu les figures 4.31-4.36. Nous avons eu à faire face à plusieurs problèmes. Tout d'abord, il a fallu faire attention aux dimensions de la boîte, de façon à ce qu'elle n'entre pas en résonance à cause des ondes sonores reliées à la température. De plus, le changement de masse effective thermalisation ne pouvait se faire n'importe comment, et n'importe quand, la thermalisation préalable devant être suffisante. Ainsi, les fluctuations dues au fait que la masse est petite, s'en sont trouvées minimisées elles aussi. Ceci nous a d'ailleurs amené à remarquer que les résultats obtenus ne variaient pratiquement pas d'une valeur de M à une autre. Nous suggérons que, si l'ensemble simulé est proche de l'équilibre thermique, le fait de changer M - puisque qu'à ce moment, cela ne change que la fréquence des vibrations de la surface, et non leur amplitude -, n'a pas d'effets sur les quantités instantanées.

4.3 CALCULS ET INCERTITUDES

La raison principale qui nous a fait choisir un algorithme de simulation à pression constante vient du fait que, dans les expériences, c'est ce genre de système qui est utilisé, plutôt qu'un système à volume et énergie constants. Cet algorithme a l'avantage, de compenser automatiquement les variations de pression, dues au comportement inélastique du réseau à courte distance des dislocations. Ainsi, au lieu d'utiliser le processus itératif, qui consiste à corriger la surface du système, de façon à obtenir la pression voulue, et de recommencer la simulation pour s'assurer que la configuration obtenue est bien celle correspondant à l'énergie minimale, nous obtenons directement un système à la pression voulue. Il est ensuite facile de calculer l'énergie de la dislocation si l'on connaît les valeurs de la surface et de l'énergie des systèmes parfait et avec défauts,

$$U_D = U_P + p_0 \Delta A \quad (46)$$

où U_P est la différence des énergies du système parfait et du système comprenant un défaut, p_0 est la pression du système à l'équilibre, et ΔA est la différence des surfaces. $p_0 \Delta A$ représente le travail qu'il faut fournir, pour que la surface revienne à sa valeur initiale.

Tout en ayant été obtenus à l'aide d'un ordinateur, nos résultats n'en comportent pas moins des incertitudes, dont nous allons cerner les origines. Il y a tout d'abord l'incertitude de départ, imputable au fait que nous utilisons un algorithme simulant un système à pression constante, et non pas à volume constant. Nous ne pouvons donc pas fixer le paramètre de maille à la valeur voulue exacte. Même si cette incertitude est très petite - $\Delta a_{abs} = \pm 10^{-3}$ Å, $\Delta a_{rel} = \pm 2.5 \cdot 10^{-2}$ % -, elle a un effet assez important sur la valeur obtenue de l'énergie, cela étant dû aux effets des

vibrations associées à la température. Il y a ensuite les incertitudes associées aux moyennes de la pression, de la surface et de l'énergie. Toutefois, grâce au changement de masse effective, leurs valeurs sont très petites; les incertitudes relatives avoisinant toutes 10^{-3} %. C'est finalement la première incertitude qui contribue le plus aux différences, ce qui est normal, car l'énergie des défauts dépend fortement du paramètre de maille. On obtient finalement une marge d'erreur d'environ ± 150 K sur les énergies des dislocations. Il ne faut toutefois pas oublier que, contrairement aux calculs effectués par Joos et al., notre système comprend la variable température. Celle-ci a un effet non négligeable pour 2 raisons : les vibrations qu'elle génère rendent plus difficile les calculs exacts. De plus, le système simulé est plus à même de tomber dans un état métastable, et surtout, d'y demeurer plus longtemps.

Chapitre 5

RÉSULTATS ET DISCUSSION

Les monocouches de gaz rare sont des solides bidimensionnels théoriques obéissant aux potentiels des systèmes physisorbés. Ces potentiels, décrits dans le chapitre 1, sont similaires aux potentiels de Lennard-Jones, dont les caractéristiques principales sont une répulsion de type sphère dure à courte distance, et une portée de $3a$, où a est le paramètre de maille. D'après les observations de Joos et Duesbery, le krypton et le xenon ont des comportements semblables, les seules différences apparaissant quantitativement. Les résultats obtenus devraient d'ailleurs être valides pour tout réseau triangulaire obéissant à des interactions ayant une portée de plusieurs paramètres de maille.

5.1 ÉNERGIES DES DIPÔLES :

Comme on l'a vu dans le chapitre 2, les dipôles de dislocations sont en fait composés d'une rangée de lacunes. La façon la plus simple d'introduire ces défauts est d'enlever une rangée d'atomes du système simulé. On obtient alors un dipôle dans la configuration $\frac{2\pi}{3}$, comme le montre les figures 5.1-5.13. Toutes nos simulations

partent de cette configuration, le dipôle étant centré par rapport à la boîte, pour des raisons de commodité. Il est à noter que, sans la force de Peierls, la dislocation devrait bouger de façon à se retrouver dans la configuration $\frac{\pi}{4}$, soit une configuration correspondant à une énergie minimale, et donc à un équilibre stable. Toutefois, ceci ne se produit pas car la force de Peierls est suffisamment grande pour l'empêcher – du moins ceci est-il vrai pour les petites et moyennes dislocations. Nous verrons ce qu'il en est pour les dislocations plus longues.

Nous n'avons pas jugé bon de calculer les énergies associées aux dipôles interstitiels à la suite des conclusions tirées par Joos et Duesbery, sur le fait que ceux-ci suivent de très près la théorie de l'élasticité. Nous nous sommes donc concentrés sur les lacunes, en particulier les petites lacunes, dont l'énergie obtenue était bien plus petite que celle prédite, par cette théorie. Nos calculs portent donc sur des dipôles dont la longueur maximale atteint $30 a$, où a est le paramètre de maille. En effet, c'est à partir de cette longueur que les dipôles se comportent suivant la théorie.

Nous avons effectué des simulations préliminaires, de façon à pouvoir déterminer la pression du système si l'on en connaissait la température, et que l'on voulait un certain paramètre de maille. Ces simulations nous ont fourni les courbes isothermes, que l'on peut voir sur la figure 5.14. Nous avons ensuite essayé de reproduire les résultats de Joos et Duesbery, en effectuant des simulations à très basse température, soit 5 K. Les courbes obtenues à partir de ces simulations se trouvent sur la figure 5.15. Comme on peut le constater, nos résultats sont très proches de ceux de Joos et Duesbery. Nous pensons que les différences proviennent de l'énergie thermique du système. Il est à remarquer qu'à la suite de ces simulations, nous avons décidé d'abandonner la simulation des systèmes, dont le paramètre de maille était plus grand que le paramètre de maille du réseau à l'équilibre. La raison principale

qui a motivé ce choix est le manque de signification physique d'un tel système; de plus, dans de telles configurations, les états métastables se multiplient à cause de l'inélasticité du réseau, et cela rend très difficile l'obtention, de l'état d'énergie minimale. Nous avons enfin effectué les simulations nécessaires à l'obtention de nos résultats, soit des simulations à $a = 4,26 \text{ \AA}$ et $a = 4,36 \text{ \AA}$ pour des températures allant de 10 à 80 K. Ces résultats sont exposés sous la forme de graphes sur les figures 5.16-5.25.

Il ressort de nos résultats les mêmes conclusions que celles de Joos et al. Les énergies obtenues, en particuliers celles des petits dipôles, diffèrent assez considérablement des énergies prédites par la théorie de l'élasticité. Par exemple, pour $a = 4,26 \text{ \AA}$, l'énergie de la monolacune est deux fois plus petite que l'énergie calculée à partir de la théorie. On peut de plus remarquer que, les énergies des lacunes varient linéairement avec la température. Ceci peut être expliqué de la façon suivante: comme il a été expliqué auparavant, l'énergie totale d'une lacune est composée de son énergie potentielle, et d'un terme associé au travail à fournir au système pour introduire le défaut. Nous avons vérifié que l'énergie potentielle ne changeait pas avec la température dans les limites de précision de nos résultats. Il en est de même pour la différence de surface. Par contre, la pression varie linéairement avec la température car l'on étudie la monocouche dans le régime de Debye. Ceci explique la dépendance linéaire des énergies des dipôles. La différence des énergies prédites par la théorie de l'élasticité et celles calculées va donc être conservée. Donc, en utilisant les valeurs obtenues, on peut conclure que l'augmentation de la longueur des dipôles avec la température est sans doute moins favorable que l'augmentation de la densité des petits dipôles. En effet, la différence énergétique entre les 2 processus est faible; de plus, il faut penser que la présence de 2 petites lacunes est plus

} favorable au système du point de vue de l'entropie, que la présence d'une longue lacune.

Une autre remarque peut être formulée au sujet des résultats. Il est clair, d'après nos graphes, que les pentes reliées à l'augmentation de l'énergie des dipôles avec la température tendent vers une pente maximale (figs. 5.26, 5.27). Il s'agit d'un phénomène de saturation facilement explicable. En effet, si l'on considère le comportement d'une petite lacune, on s'aperçoit qu'elle correspond presque à une entité unique. Si, au contraire, on étudie un long dipôle, on remarque le découplage des 2 coeurs, comme si ceux-ci étaient plus ou moins indépendants. C'est ce phénomène que l'on observe sur ces graphes. Pour les dipôles assez courts, l'énergie thermique est absorbée par le système tout entier. Mais, plus les dipôles s'allongent, plus le réseau entre les 2 coeurs redevient parfait, et plus ces coeurs absorbent à eux seuls l'énergie thermique du système.

Pentes des droites des figures 5.24 et 5.25 ($\times 10^3$)

longueur des défauts (a)	a = 4,26 A	a = 4,36 A
	1	7.91
3	12.75	17.55
7	14.99	21.28
11	18.85	24.46
15	21.27	26.59
21	22.24	26.65

5.2 FORCE DE PEIERLS :

Comme il a été mentionné dans le chapitre 2, la grandeur de la force de Peierls dépend beaucoup de la structure du cristal. En particulier, la force de Peierls est très petite pour les cristaux tri-dimensionnels ayant la structure hexagonale. Etant donné que les gaz rares possèdent la symétrie triangulaire, et que celle-ci correspond à la plus grande densité possible en 2 dimensions, on s'attendrait à ce que la force de Peierls soit petite. Toutefois, il n'en est rien. Les calculs effectués par Joos et Duesbery prévoient en effet une énergie d'activation égale à environ 50 K. Il est à noter que les simulations nécessaires à ces calculs ont été effectués à $T = 0$ K, et que le groupe a tiré ses valeurs des calculs des constantes élastiques, en utilisant un modèle de barrière de potentiel linéaire - alors que la vraie barrière a la forme d'une gaussienne. La méthode-standard utilisée consiste à appliquer par incréments une contrainte élastique homogène, parallèlement à la ligne de glissement du réseau hexagonal et dans la direction du vecteur de Burgers, jusqu'à ce que l'incrément total soit suffisant, pour faire bouger la dislocation. A cause du fait que notre simulation comprenait la variable température, nous avons été incapables de reproduire ces résultats directement. En effet, les déformations élastiques nécessaires à ces calculs - qui sont très petites - nous auraient obligé à faire des simulations très longues dans le temps, de façon à obtenir une moyenne fiable. Toutefois, nous avons pu faire des analyses, grâce aux positions finales de nos atomes. En effet, si la dislocation a bougé à la fin de la simulation, cela signifie qu'elle a reçu l'énergie thermique nécessaire pour le faire, et donc, que la température de Peierls du système a été dépassée. Nous avons ainsi pu, pour chaque type de défaut, mettre des bornes supérieure et inférieure à T_P . Les graphes obtenus sont exposés sur les figures 5.28 et 5.29. Pour 4,26 Å, on remarque tout de suite la décroissance monotone de T_P

en fonction de la longueur du défaut. Comme la force de Peirls dépend en grande partie de l'ordre de la structure de la monocouche - c'est-à-dire de la perfection du cristal -, il est normal que la température associée décroisse, puisque plus le défaut est long, et plus l'ordre de la structure du système est détruit. Le cas $a = 4,36$ A est plus délicat à traiter. Nous n'avons pas trouvé d'explication au maximum local à $l = 11$ - l étant la longueur du défaut. Une possibilité à étudier serait la "transition" du défaut se comportant comme une entité, vers un défaut, dont les coeurs interagissent très faiblement. En effet, jusqu'à $l = 11$, l'espace compris entre les coeurs ne se referme presque pas, ceci conservant donc l'ordre à longue distance dans le réseau. Par contre, à partir de $l = 15$, l'espace se referme, créant ainsi un certain désordre dans la structure cristalline, et accélérant la baisse dans la température de Peierls.

Chapitre 6

CONCLUSION

L'objectif principal de ce projet était de vérifier la validité des calculs de Duesbery et Joos pour des monocouches sans et avec substrat, et d'étendre leurs résultats pour des systèmes dont la température est non-nulle. Nous avons donc effectué la première partie avec succès. Il est clair que, dans ces systèmes composés d'atomes de gaz rares, la théorie de l'élasticité n'est pas valable pour toutes les tailles de défaut. Nous avons de plus observé une augmentation linéaire dans les énergies des dipôles. Nous avons montré que cette dépendance particulière pouvait être expliquée par le fait que la pression dépend linéairement de la température dans le régime de Debye. De plus, les pentes associées à ces droites tendent vers une pente maximale. Enfin, nous avons observé que l'énergie d'activation de Peierls diminuait avec la taille du défaut. Les deux derniers résultats obtenus sont reliés au changement de l'état où la dislocation se comporte comme une entité unique, à l'état où l'on se retrouve en présence d'un dipôle dont les coeurs n'interagissent que très faiblement, et confirme l'existence d'un coeur assez étalé (spatialement parlant) dans ces systèmes. Nous prévoyons de faire la deuxième partie de cette étude – soit

les monocouches adsorbées sur un substrat - cet été.

Je tiens à remercier Béla Joos pour le temps qu'il m'a consacré et les conseils qu'il m'a prodigués, Mike Duesbery pour m'avoir aidé dans le calcul de l'énergie des dipôles et Neil Shrimpton pour son assistance dans l'amélioration du rendement de mon programme de simulation.

Ce projet a été effectué avec le support du CRSNG.

Liste des figures

fig. 2.1 - Diagramme montrant le potentiel utilisé. On peut voir les deux parties du potentiel, soit la partie répulsive (petits pointillés) et la partie attractive (longs pointillés). La somme des deux est le potentiel utilisé (ligne continue). Il est à noter que les énergies sont exprimées en unités de K/k_B . Toutefois, par commodité, nous n'utiliserons que le symbole K dans ce document.

fig. 3.1 - Diagramme montrant un dipôle de dislocations et les vecteurs de Burgers associés. Pour obtenir ce dipôle, on a enlevé 11 atomes dans une rangée. On peut voir les circuits dans le réseau parfait et le réseau avec dislocations, qui nous permettent de trouver \vec{b} , le vecteur de Burgers.

fig. 3.2 - Diagramme montrant les énergies des dipôles de dislocations en fonction de leurs longueurs et du paramètre de maille. à $T = 0$ K. (D'après Joos et al. [25])

fig. 4.1 - Diagramme montrant la pression en fonction du temps pour $T = 10$ K. Noter la superposition des 2 types de fluctuations mentionnées précédemment, soit les fluctuations thermiques représentées par les hautes fréquences, et les fluctuations de la surface, dont la fréquence est plus basse. Noter également le temps nécessaire pour passer de la configuration de départ à un système thermalisé. Plus la différence entre ces 2 systèmes est grande, et plus l'amplitude des oscillations de départ sera

grande. De plus, on verra que le temps de thermalisation augmente également. C'est la raison pour laquelle nous avons utilisé des configurations thermalisées d'une simulation à l'autre. De plus, les calculs des moyennes ne s'effectuent qu'après que les systèmes soient en équilibre thermique.

fig. 4.2 - Ce graphique représente la moyenne de la pression en fonction temps. Plus exactement, chaque ordonnée correspond à la somme des pressions instantanées précédentes divisée par le nombre de pas effectués. On remarquera que, si les oscillations thermiques de haute fréquence disparaissent assez vite, il n'en est pas de même pour celles de basse fréquence. D'après ce graphique, il est clair que le système n'a pas encore atteint son équilibre. On ne peut donc pas en extraire les quantités physiques d'intérêt pour nos calculs.

fig. 4.3 - Variation de l'énergie en fonction du temps. On note tout de suite la superposition des 2 fréquences, similaire à celle observée dans les variations de pression. On retrouve d'ailleurs les mêmes périodes caractéristiques. Les oscillations paraissent importantes, mais ne représentent en fait qu'une variation de $\pm 1.4 \cdot 10^{-1} \%$

fig. 4.4 - Variation de l'énergie moyenne en fonction du temps. Là encore, on observe la disparition des hautes fréquences. La moyenne ne s'est pas encore stabilisée, ce qui indique que le système n'est pas en équilibre. On obtient donc les mêmes informations qu'en analysant 4.1 et 4.2 .

fig. 4.5 - Variation du paramètre de maille en fonction du temps. Cette fois, on n'observe que les oscillations de basse fréquence, car les oscillations statistiques n'ont pas d'effets sur les variations de la surface. Bien que l'amplitude des oscillations soit assez faible, il est clair que le système est éloigné de l'équilibre.

fig. 4.6 - Variation de la moyenne du paramètre de maille en fonction du temps. Ce graphique confirme que le système n'a pas atteint l'équilibre thermique dans

lequel nous voulons qu'il soit, pour pouvoir calculer les quantités d'intérêt.

fig. 4.7 - Variation de la pression en fonction du temps pour une masse effective M 10 fois plus légère que celle de la figure 4.1. On observe 3 changements par rapport à la figure 4.1. Tout d'abord, la fréquence de variation de la surface a augmenté. Ceci est dû au fait que, M étant plus légère, celle-ci réagit plus rapidement aux impulsions que le système lui fait subir. Les variations associées aux hautes fréquences paraissent se produire moins souvent. Cela s'explique par le fait que, la pression variant plus rapidement, certaines de ces variations sont "absorbées". Enfin, on observe que l'amplitude des oscillations augmente légèrement. Ceci est également explicable par le fait, que la masse effective est plus légère.

fig. 4.8 - Variation de la moyenne de la pression en fonction du temps. On remarque tout de suite que la moyenne converge plus rapidement vers sa valeur à l'équilibre. Ceci est dû à l'augmentation de la fréquence des oscillations.

figs. 4.9, 4.10 - Variation de l'énergie et de la moyenne de l'énergie en fonction du temps. L'analyse de ces courbes fournit les mêmes conclusions que celles obtenues avec les courbes de pression.

fig. 4.9 - Variation de l'énergie en fonction du temps.

fig. 4.10 - Variation de la moyenne de l'énergie en fonction du temps.

fig. 4.11 - Variation du paramètre de maille en fonction du temps. Cette courbe nous montre l'augmentation de l'amplitude des oscillations, reliée à la diminution de la masse effective.

fig. 4.12 - Variation de la moyenne du paramètre de maille en fonction du temps. On voit la convergence plus rapide de la moyenne sur ce graphique.

fig. 4.13 - Variation de la pression en fonction du temps pour une masse effective M 10 fois plus légère que celle de la figure 4.7. On observe le même phénomène

entre 4.13 et 4.7 qu'entre 4.7 et 4.1, soit une augmentation dans l'amplitude et la fréquence des oscillations, et les fluctuations statistiques moins visibles. De plus, il est à remarquer que le temps qu'il faut au système, pour atteindre sa configuration à l'équilibre, augmente.

fig. 4.14 - Variation de la moyenne de la pression en fonction du temps. On observe une convergence plus rapide dans la moyenne.

figs. 4.15, 4.16, 4.17, 4.18 - Variations de l'énergie, la moyenne de l'énergie, du paramètre de maille et de la moyenne du paramètre de maille. Toutes les observations précédentes apparaissent dans ces graphiques.

fig. 4.15 - Énergie en fonction du temps à $T = 10$ K.

fig. 4.16 - Moyenne de l'énergie en fonction du temps

fig. 4.17 - Paramètre de maille en fonction du temps à $T = 10$ K.

fig. 4.18 - Moyenne du paramètre de maille en fonction du temps

figs. 4.19, 4.20, 4.21, 4.22, 4.23, 4.24 - Variations de la pression, de l'énergie, du paramètre de maille et de leurs moyennes. La masse effective étant plus petites, la tendance décrite précédemment se poursuit: augmentation de la fréquence et de l'amplitude des oscillations, et augmentation du temps d'équilibration.

fig. 4.19 - Pression en fonction du temps à $T = 10$ K pour une masse effective M 10 fois plus légère que celle de la figure 4.13.

fig. 4.20 - Moyenne de la pression en fonction du temps

fig. 4.21 - Énergie en fonction du temps à $T = 10$ K.

fig. 4.22 - Moyenne de l'énergie en fonction du temps

fig. 4.23 - Paramètre de maille en fonction du temps à $T = 10$ K.

fig. 4.24 - Moyenne du paramètre de maille en fonction du temps

figs. 4.25, 4.26, 4.27, 4.28, 4.29, 4.30 - Variations de la pression, de l'énergie,

du paramètre de maille et de leurs moyennes. Ceci est la simulation qui a été effectuée avec la plus petite masse effective. D'après les graphiques, on comprend bien pourquoi il n'est pas possible d'utiliser cette masse dès le début. Le temps qu'il faudrait au système pour être en équilibre serait alors très long. De plus, de telles vibrations ne sont pas concevables dans des systèmes réels. Par contre, si l'on examine les moyennes, l'on s'aperçoit tout de suite qu'avoir des oscillations très rapides fait converger les moyennes beaucoup plus vite. C'est pourquoi nous avons opté pour le compromis décrit précédemment.

fig. 4.25 - Pression en fonction du temps à $T = 10$ K pour une masse effective M 10 fois plus légère que celle de la figure 4.19.

fig. 4.26 - Moyenne de la pression en fonction du temps

fig. 4.27 - Énergie en fonction du temps à $T = 10$ K.

fig. 4.28 - Moyenne de l'énergie en fonction du temps

fig. 4.29 - Paramètre de maille en fonction du temps à $T = 10$ K.

fig. 4.30 - Moyenne du paramètre de maille en fonction du temps

figs. 4.31, 4.32, 4.33, 4.34, 4.35, 4.36 - Variations de la pression, de l'énergie, du paramètre de maille et de leurs moyennes en fonction du temps pour une simulation dans laquelle on a effectué un changement de masse effective. On voit immédiatement les effets de ce changement, soit une diminution dans l'amplitude des oscillations, une augmentation de leur fréquence et enfin, l'obtention beaucoup plus rapide d'une moyenne stable (même si la moyenne de l'énergie n'a pas l'air de s'être stabilisée, il faut tenir compte de l'échelle des énergies, et aussi que les variations sont moins régulières que celles observées dans la pression ou le paramètre de maille).

figs. 4.31 - Variations de la pression en fonction du temps pour une simulation

dans laquelle on a effectué un changement de masse effective. On voit immédiatement les effets de ce changement, soit une diminution dans l'amplitude des oscillations et une augmentation de leur fréquence.

fig. 4.32 - Variations de la moyenne de la pression en fonction du temps. On observe les effets du changement de masse effective, soit l'obtention beaucoup plus rapide d'une moyenne stable.

fig. 4.33 - Variations de l'énergie en fonction du temps pour une simulation dans laquelle on a effectué un changement de masse effective. On observe également les effets de ce changement.

fig. 4.34 - Variations de la moyenne de l'énergie en fonction du temps. (Même si la moyenne de l'énergie n'a pas l'air de s'être stabilisée, il faut tenir compte de l'échelle des énergies, et aussi que les variations sont moins régulières que celles observées dans la pression ou le paramètre de maille).

fig. 4.35 - Paramètre de maille en fonction du temps

fig. 4.36 - Moyenne du paramètre de maille en fonction du temps

figs. 5.1, 5.2, 5.3, 5.4, 5.5, 5.6 - Dipôles de dislocation de différentes longueurs pour un réseau ayant pour paramètre de maille $a = 4,26 \text{ \AA}$ à $T = 10 \text{ K}$. Ces dessins ont été obtenus à la suite de simulations de 2000 pas temporels. Il est à remarquer que le dipôle de dislocations commence à se refermer dès que sa longueur atteint $7a$. Ceci est dû au fait que le réseau est compressé par rapport à sa position à l'équilibre. C'est ce qui explique qu'on obtienne la configuration trigonale à très basse température. Des calculs préliminaires nous ont d'ailleurs indiqué que l'énergie de la configuration trigonale et du dipôle aligné étaient très proches.

fig. 5.1 - Monolacune dans un réseau de paramètre de maille $a = 4,26 \text{ \AA}$ à $T = 10 \text{ K}$.

fig. 5.2 - Trilacuné dans le même réseau que précédemment à $T = 10$ K. Il est à noter que l'on obtient la trilacuné alignée qu'à très basse température. Ceci est dû au fait que le réseau est compressé, et que les 2 configurations sont très proches énergétiquement parlant.

fig. 5.3 - Dipôle de dislocation de 7 paramètres de maille de longueur ($a = 4,26$ A , $T = 10$ K). Le dipôle commence déjà à se refermer à cette longueur. Ceci est encore relié à la compression du réseau.

fig. 5.4 - Dipôle de dislocation de 11 paramètres de maille de longueur ($a = 4,26$ A , $T = 10$ K). Le dipôle est complètement refermé. De plus, on peut voir qu'il a subi une rotation par rapport au réseau. Ceci indique que la force de Peierls a été dépassée.

fig. 5.5 - Dipôle de dislocation de 15 paramètres de maille de longueur ($a = 4,26$ A , $T = 10$ K). Les coeurs des dipôles interagissent encore plus faiblement.

fig. 5.6 - Dipôle de dislocation de 21 paramètres de maille de longueur ($a = 4,26$ A , $T = 10$ K). Nous sommes ici presque en présence de 2 coeurs libres. Il est à remarquer que la température n'est que de 10 K.

figs. 5.7, 5.8, 5.9, 5.10, 5.11, 5.12, 5.13 - Dipôles de dislocations de différentes longueurs pour un réseau ayant pour paramètre de maille $a = 4,36$ A. Le réseau étant plus près de sa configuration à l'équilibre, les dipôles doivent atteindre une longueur plus grande avant de commencer à se refermer. De plus, la configuration trigonale n'est obtenue qu'à des températures plus élevées.

fig. 5.7 - Monolacuné dans un réseau de paramètre de maille $a = 4,36$ A à $T = 10$ K.

fig. 5.8 - Trilacuné dans le même réseau que précédemment à $T = 10$ K. Cette fois, la trilacuné alignée est observée jusqu'à des températures d'environ 60 K.

fig. 5.9 - Dipôle de dislocation de 7 paramètres de maille de longueur avec $a = 4,36 \text{ \AA}$ à $T = 10 \text{ K}$. Le dipôle se referme beaucoup moins que son équivalent dans le réseau compressé. Ceci est également relié au fait, que le réseau est presque à l'équilibre.

fig. 5.10 - Dipôle de dislocation de 11 paramètres de maille de longueur ($a = 4,36 \text{ \AA}$, $T = 10 \text{ K}$). Le dipôle commence à se refermer. Il n'a pas encore subi une rotation par rapport au réseau. Ceci indique que la force de Peierls n'est pas encore dépassée.

fig. 5.11 - Dipôle de dislocation de 15 paramètres de maille de longueur ($a = 4,36 \text{ \AA}$, $T = 10 \text{ K}$). Le dipôle est complètement refermé. Les coeurs des dipôles interagissent alors plus faiblement.

fig. 5.12 - Dipôle de dislocation de 21 paramètres de maille de longueur ($a = 4,36 \text{ \AA}$, $T = 10 \text{ K}$). Nous sommes ici presque en présence de 2 coeurs presque libres. Là encore on remarquera que la température n'est que de 10 K .

fig. 5.13 - Configuration trigonale de la trilacune correspondant à la figure 5.8. La température est de 70 K . Il faut donc que le système soit soumis à suffisamment de vibrations, pour que cette configuration apparaisse. Cela nous indique que la différence d'énergie est assez importante.

fig. 5.14 - Courbes isothermes de la pression en fonction du paramètre de maille.

fig. 5.15 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 5 \text{ K}$. Les courbes suivent de très près celles de Joos et Duesbery jusqu'à $a = 4,41$. On suppose que passé cette valeur, les énergies diminuent à cause du fait que le réseau est dilaté, et qu'il y a beaucoup plus d'états métastables - ceci étant dû à la forme du potentiel dans cette région.

figs. 5.16, 5.17, 5.18, 5.19, 5.20, 5.21, 5.22, 5.23 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille pour T allant de 10 K à 80 K. On remarque que les courbes gardent la même forme, soit celle observée précédemment. Nous n'avons pu obtenir la courbe des énergies pour $a = 4,36 \text{ \AA}$ à 80 K car nous étions trop près de la température de fonte, et le temps de thermalisation du système aurait été trop long.

fig. 5.16 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 10 \text{ K}$. Les courbes d'énergie suivent assez exactement celles de Joos et Duesbery, avec, toutefois, un léger décalage vers le haut.

fig. 5.17 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 20 \text{ K}$. Les courbes d'énergie suivent encore celles de Joos et Duesbery, avec, toutefois, un décalage plus important vers le haut.

fig. 5.18 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 30 \text{ K}$.

fig. 5.19 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 40 \text{ K}$.

fig. 5.20 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 50 \text{ K}$.

fig. 5.21 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 60 \text{ K}$.

fig. 5.22 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 70 \text{ K}$.

fig. 5.23 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 80$ K.

figs. 5.24, 5.25 - Variations des énergies des dipôles en fonction de la température pour différentes longueurs. On remarque que les pentes associées tendent vers un maximum.

fig. 5.24 - Variations des énergies des dipôles en fonction de la température pour différentes longueurs. On remarque que les pentes associées tendent vers un maximum.

fig. 5.25 - Variations des énergies des dipôles en fonction de la température pour différentes longueurs. Les pentes associées tendent également vers un maximum.

figs. 5.26, 5.27 - Variations des pentes associées aux droites des figures 5.24 et 5.25.

fig. 5.26 - Variation des pentes associées aux droites de la figure 5.24 en fonction de la longueur des dipôles

fig. 5.27 - Variation des pentes associées aux droites de la figure 5.25 en fonction de la longueur des dipôles

fig. 5.28 - Variation de l'énergie d'activation de Peierls en fonction de la longueur du dipôle pour $a = 4,26$ A. On notera l'énergie importante associée aux défauts courts et la limite asymptotique qui tend vers 0

fig. 5.29 - Variation de l'énergie d'activation de Peierls en fonction de la longueur du dipôle pour $a = 4,36$ A. Les mêmes remarques que celles faites pour la figure 5.28 prévalent. Toutefois, comme il a été mentionné dans la discussion, nous n'avons pas d'explication précise pour le maximum local compris entre $l = 7$ a et $l = 11$ a.

fig. 5.30 - Superposition des figures 5.27 et 5.28. On remarque la grande similitude des deux courbes.

références

- [1] A. Thomy et X. Duval, J.Chim.Phys.(Paris)66, 1966 (1969).
- [2] G. Dash, Physics Today, Décembre 1985
- [3] R. J. Birgeneau et P. M. Horn. Science 232, 329 (1986)
- [4] K.-J. Strandburg, Rev.Mod.Phys.60, 161 (1988).
- [5] F. F. Abraham, Phys.Rev.Lett.44, 463 (1980); Phys.Rep.80, 339 (1981a); Phys.Rev.B23, 6145 (1981b); Phys.Rev.B28, 7338 (1983a); Phys.Rev.Lett.50,978 (1983b);Phys.Rev.B29, 2606 (1984).
- [6] E. M. Hammonds, P. Heiney, P. W. Stephens, R. J. Birgeneau et P. M. Horn, J.Phys.C13, L301 (1980).
- [7] R. J. Birgeneau, E. M. Hammonds, P. Heiney, P. W. Stephens, et P. M. Horn, dans *Ordering in Two Dimensions*, edited by S. K. Sinha (North-Holland, New York, 1980).

[8] P. A. Heiney, R. J. Birgeneau, G. S. Brown, P. M. Horn, D. E. Moncton et P. W. Stephens, Phys.Rev.Lett.48, 104 (1982); P. A. Heiney, P. W. Stephens, R. J. Birgeneau, P. M. Horn et D. E. Moncton, Phys.Rev.B28, 6416 (1983).

[9] T. F. Rosebaum, S. E. Nagler, P. M. Horn et R. Clarke, Phys.Rev.Lett.50, 1791 (1983).

[10] P. Dimon, P. M. Horn, M. Sutton, R. J. Birgeneau et D. E. Moncton, Phys.Rev.B31, 437 (1985); D. M. Butler, J. A. Litzinger et G. A. Stewart, Phys.Rev.Lett.44, 466 (1980).


[11] R. J. Birgeneau, G. S. Brown, P. M. Horn, D. E. Moncton et P. W. Stephens, J.Phys.C14, L49 (1981); D. E. Moncton, P. W. Stephens, R. J. Birgeneau, P. M. Horn et G. S. Brown, Phys.Rev.Lett.46, 1533 (1981).

[12] D. E. Specht, M. Sutton, R. J. Birgeneau, D. E. Moncton et P. M. Horn, Phys.Rev.B30, 1589 (1984).

[13] R. Peierls, Proc.Phys.Soc. London 52, 34 (1940).

[14] B. I. Halperin et D. R. Nelson, Phys.Rev.Lett.41, 121 (1978); Phys.Rev.Lett.41, 519 (1978); D. R. Nelson et B. I. Halperin, Phys.Rev.B19, 2457 (1979).

[15] A. P. Young, Phys.Rev.B19, 1855 (1979).

- 
- [16] J. M. Kosterlitz et D. J. Thouless, J.Phys.C 5, L124 (1972); J.Phys.C 6, 1181 (1973).
- [17] R. A. Aziz, Mol.Phys. 38, 177 (1979).
- [18] S. Rauber, J. R. Klein et M. W. Cole, Phys.Rev.B27, 1314 (1983).
- [19] A. D. McLachlan, Mol.Phys. 7, 381 (1964).
- [20] W. A. Steele, Surf.Sci. 36, 317 (1973).
- [21] F. R. N. Nabarro dans *Theory of Crystal Dislocations* (Clarendon, Oxford, 1967).
- [22] J. P. Hirth et J. Lothe. *Theory of dislocations*. 2^{ème} édition (Willey, New York, 1982).
- [23] Y. Saito, Phys.Rev.Lett.48, 1114 (1982); Phys.Rev.B26, 6239 (1982).
- [24] S. T. Chui, Phys.Rev.Lett.48, 933 (1982); Phys.Rev.B28, 178 (1983).
- [25] B. Joos et M. S. Duesbery, Phys.Rev.Lett.55, 1997 (1985); Phys.Rev.B33, 8632 (1986); M. S. Duesbery et B. Joos. Phil.Mag.A54, 145 (1986).

- [26] D. A. Young et B. J. Alder. J.Chem.Phys.60, 1254 (1974).
- [27] R. C. Gann, S. Chakravarty et G. S. Chester, Phys.Rev.B20, 326 (1979).
- [28] J. Tobochnik et G. S. Chester, Phys.Rev.B20, 3761 (1979).
- [29] D. S. Fisher, B. I. Halperin et R. Morf, Phys.Rev.B20, 4692 (1979).
- [30] A. J. C. Ladd et W. G. Hoover, Phys.Rev.B26, 5469 (1982).
- [31] S. Toxvaerd, Phys.Rev.A24, 2735 (1981); Phys.Rev.Lett.51, 1971 (1983).
- [32] W. G. Hoover, J. A. Combs et C. Massobrio, Phys.Rev.Lett.53, 2351 (1984).
- [33] S. Toxvaerd, Phys.Rev.Lett.53, 2352 (1984a); Phys.Rev.B29, 2821 (1984b).
- [34] B. J. Alder et T. E Wainwright. Phys.Rev 127, 359 (1962).
- [35] L. Verlet, Phys.Rev 159, 98 (1967).
- [36] H. C. Andersen, J.Chem.Phys.72, 2384 (1980).
- [37] D. Brown et J. H. R. Clarke. Mol.Phys.51, 1243 (1984).

[38] J. M. Haile et H. W. Graben. J.Chem.Phys.73, 2412 (1980).

Potentiel interatomique

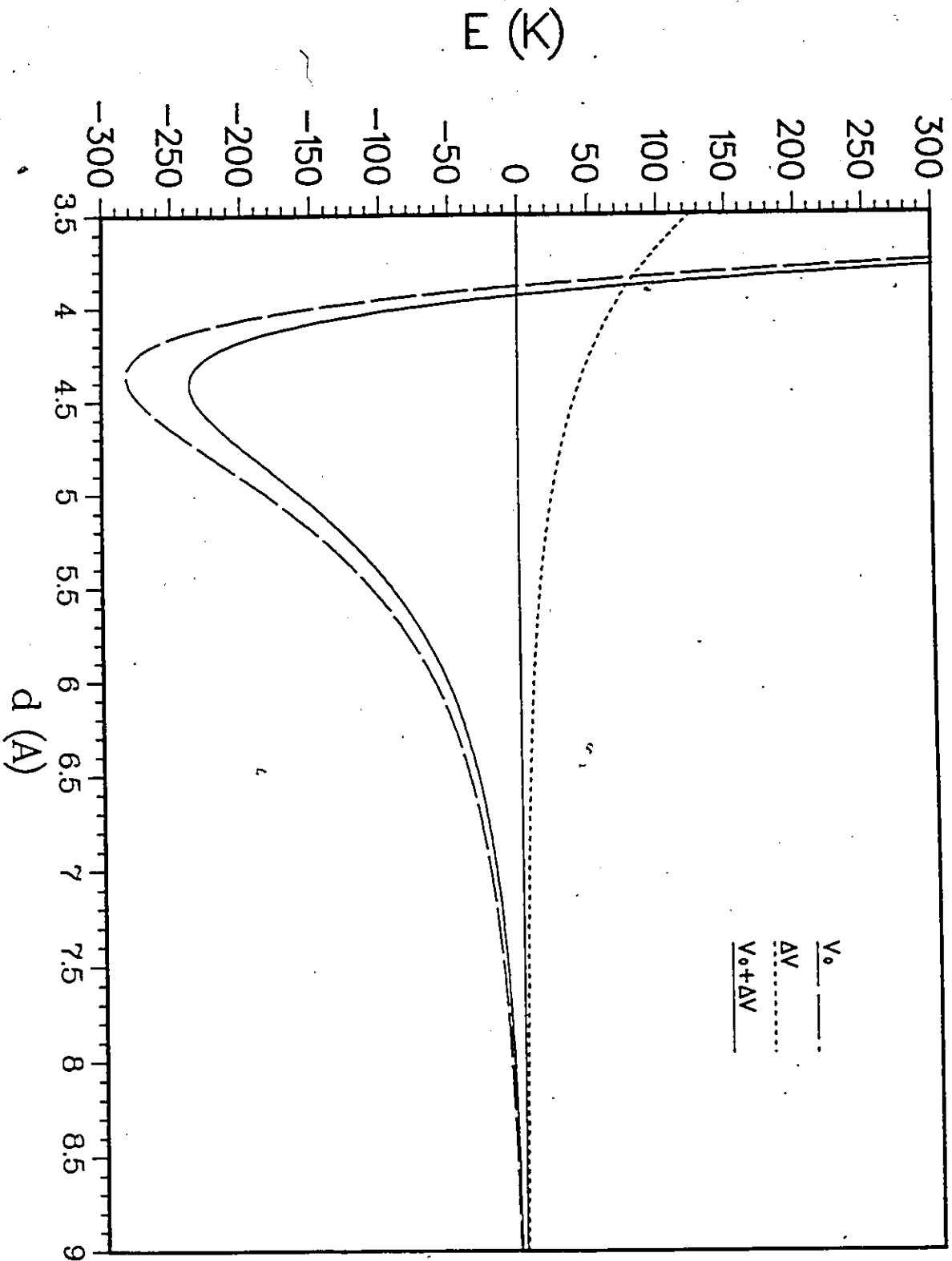


fig. 2.1 - Diagramme montrant le potentiel utilisé. On peut voir les deux parties du potentiel, soit la partie répulsive (petits pointillés) et la partie attractive (longs pointillés). La somme des deux est le potentiel utilisé (ligne continue). Il est à noter que les énergies sont exprimées en unités de K/k_B . Toutefois, par commodité, nous n'utiliserons que le symbole K dans ce document.

fig. 3.1 - Diagramme montrant un dipôle de dislocations et les vecteurs de Burgers associés. Pour obtenir ce dipôle, on a enlevé 11 atomes dans une rangée. On peut voir les circuits dans le réseau parfait et le réseau avec dislocations, qui nous permettent de trouver \vec{b} , le vecteur de Burgers.

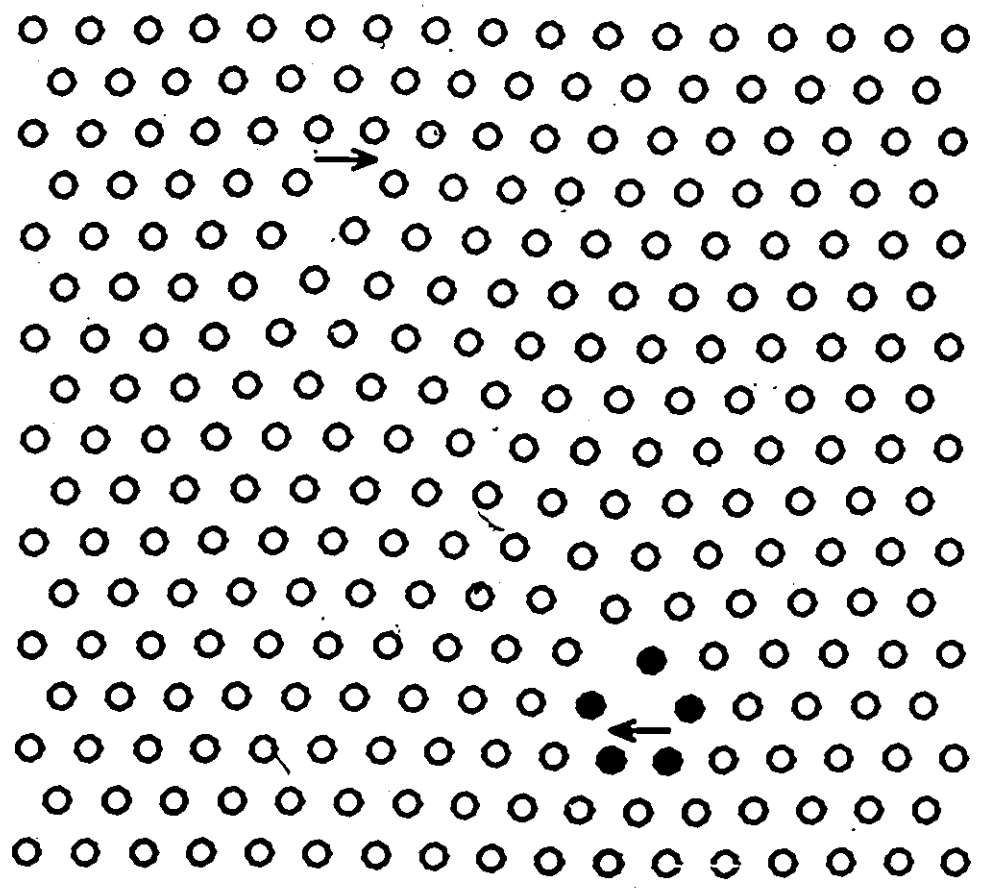


fig. 3.2 - Diagramme montrant les énergies des dipôles de dislocations en fonction de leurs longueurs et du paramètre de maille. à $T = 0$ K. (D'après Joos et al. [25])

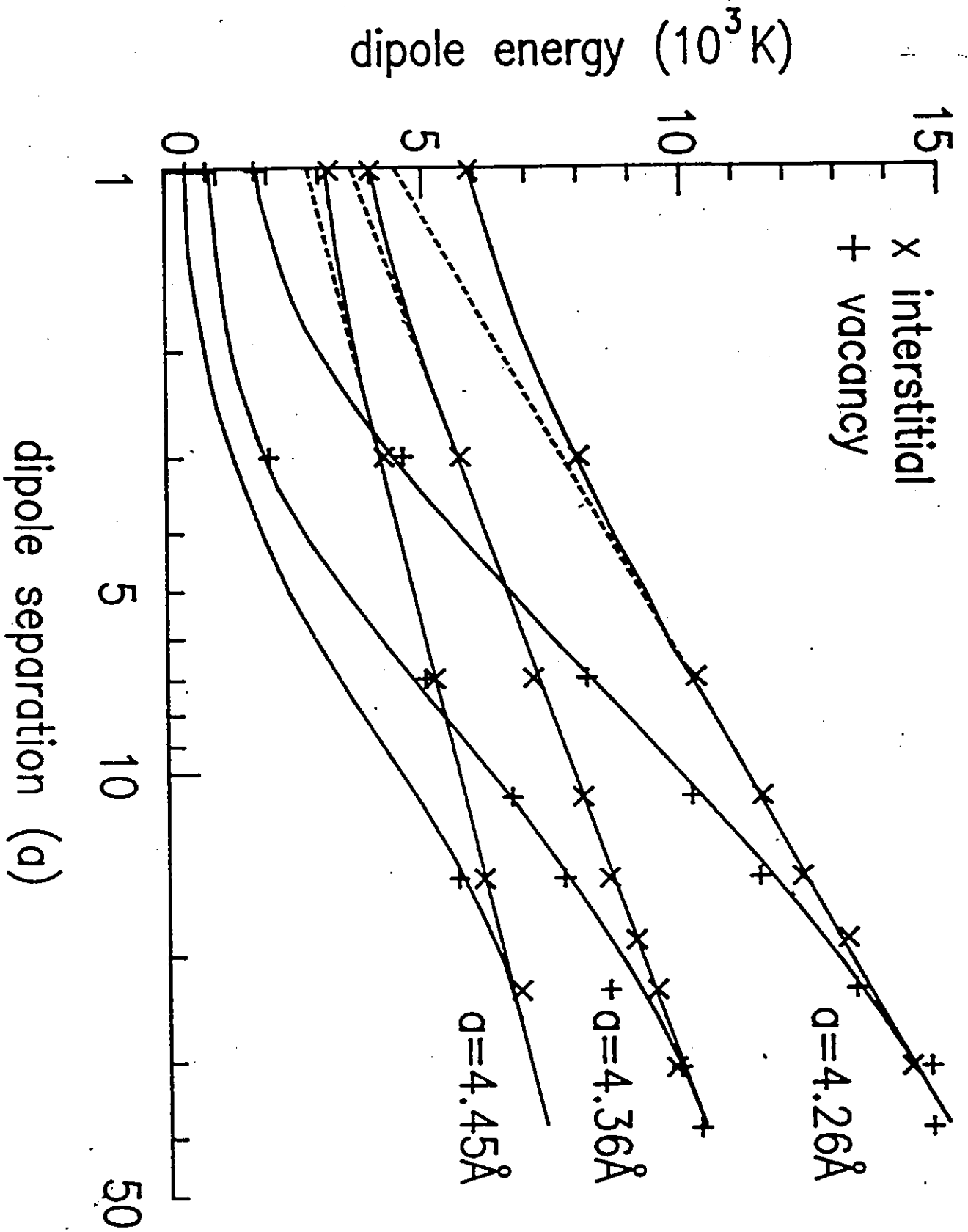


fig. 4.1 - Diagramme montrant la pression en fonction du temps pour $T = 10$ K. Noter la superposition des 2 types de fluctuations mentionnées précédemment, soit les fluctuations thermiques représentées par les hautes fréquences, et les fluctuations de la surface, dont la fréquence est plus basse. Noter également le temps nécessaire pour passer de la configuration de départ à un système thermalisé. Plus la différence entre ces 2 systèmes est grande, et plus l'amplitude des oscillations de départ sera grande. De plus, on verra que le temps de thermalisation augmente également. C'est la raison pour laquelle nous avons utilisé des configurations thermalisées d'une simulation à l'autre. De plus, les calculs des moyennes ne s'effectuent qu'après que les systèmes soient en équilibre thermique.

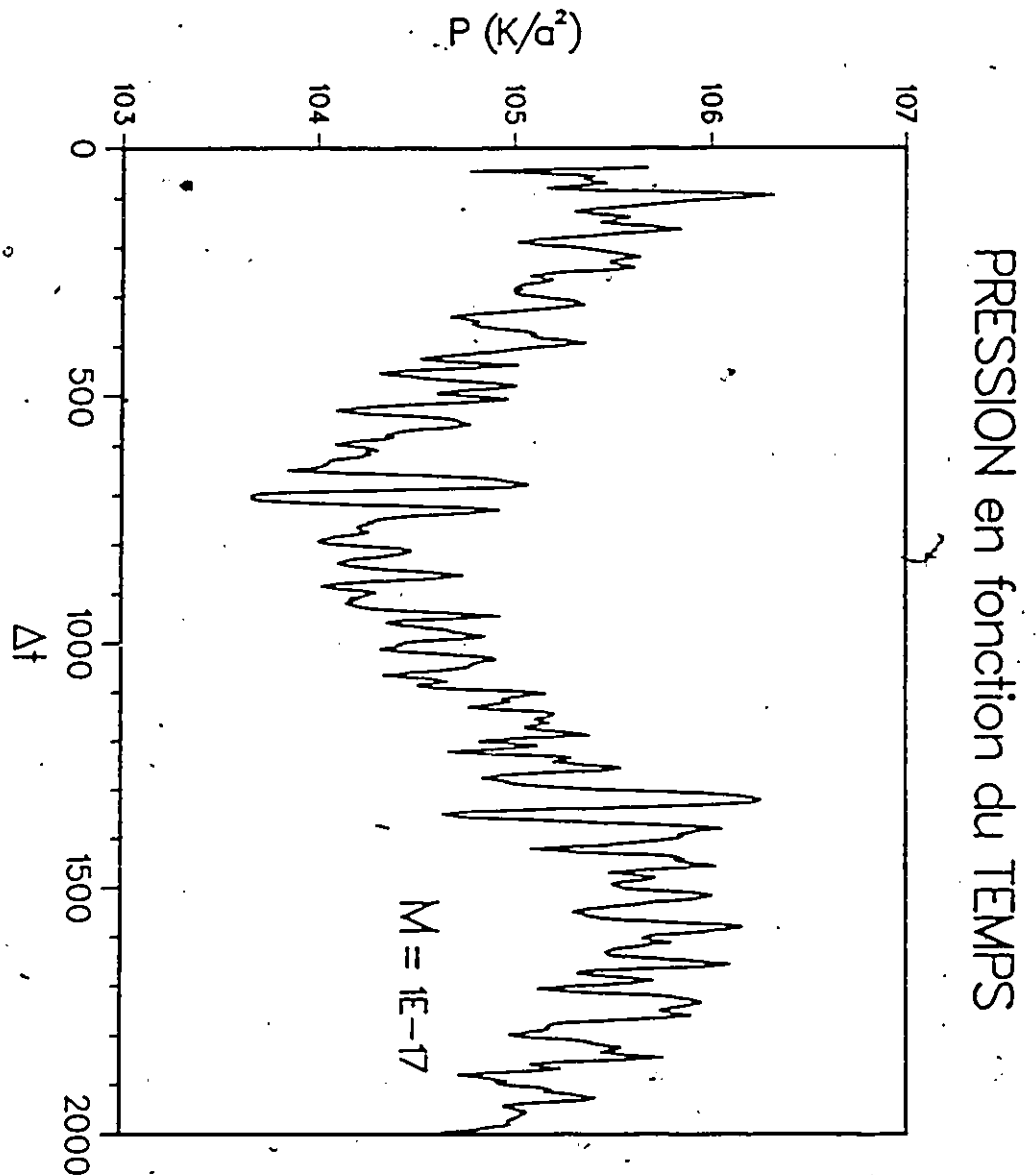


fig. 4.2 - Ce graphique représente la moyenne de la pression en fonction temps. Plus exactement, chaque ordonnée correspond à la somme des pressions instantanées précédentes divisée par le nombre de pas effectués. On remarquera que, si les oscillations thermiques de haute fréquence disparaissent assez vite, il n'en est pas de même pour celles de basse fréquence. D'après ce graphique, il est clair que le système n'a pas encore atteint son équilibre. On ne peut donc pas en extraire les quantités physiques d'intérêt pour nos calculs.

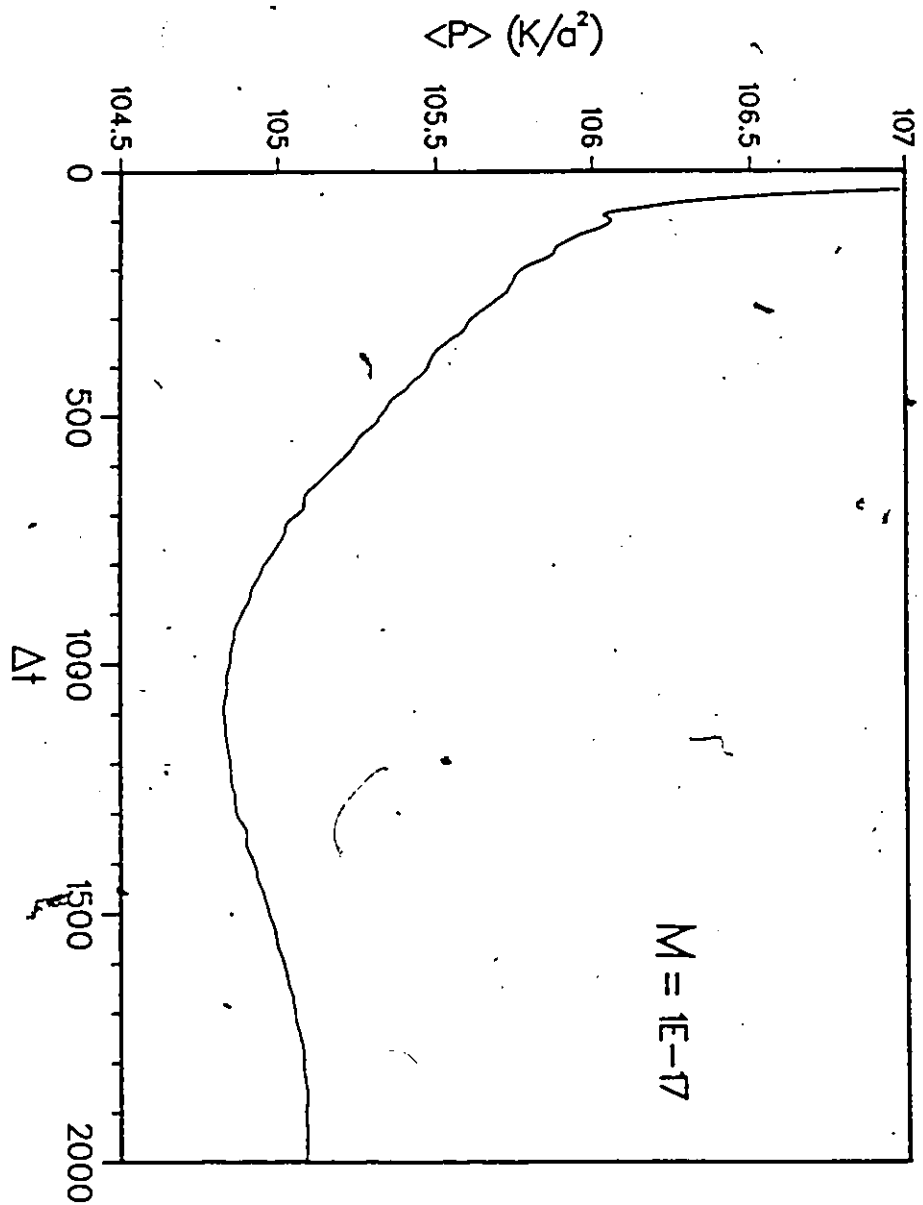


fig. 4.3 - Variation de l'énergie en fonction du temps. On note tout de suite la superposition des 2 fréquences, similaire à celle observée dans les variations de pression. On retrouve d'ailleurs les mêmes périodes caractéristiques. Les oscillations paraissent importantes, mais ne représentent en fait qu'une variation de $\pm 1.4 \cdot 10^{-1} \%$

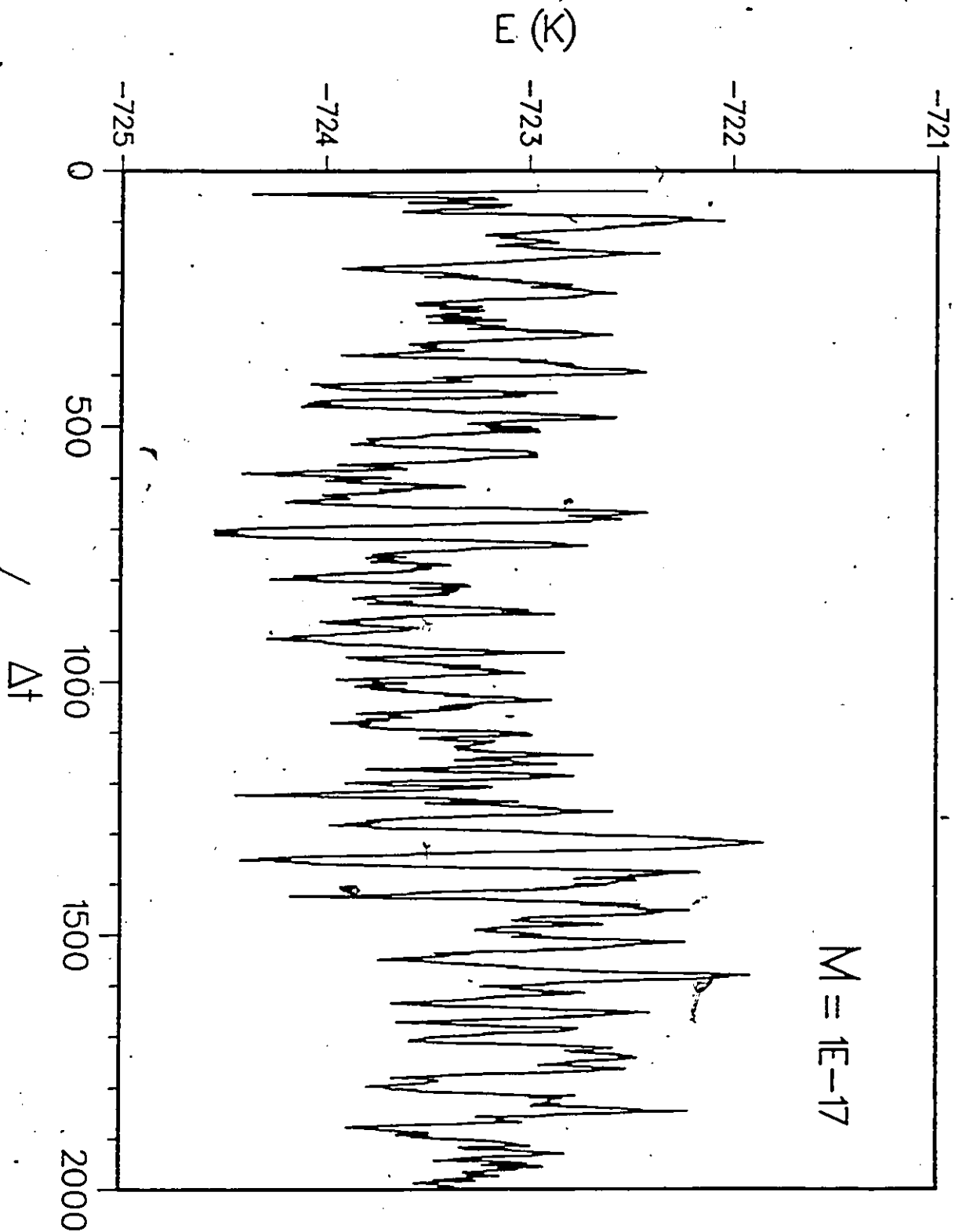


fig. 4.4 - Variation de l'énergie moyenne en fonction du temps. Là encore, on observe la disparition des hautes fréquences. La moyenne ne s'est pas encore stabilisée, ce qui indique que le système n'est pas en équilibre. On obtient donc les mêmes informations qu'en analysant 4.1 et 4.2 .

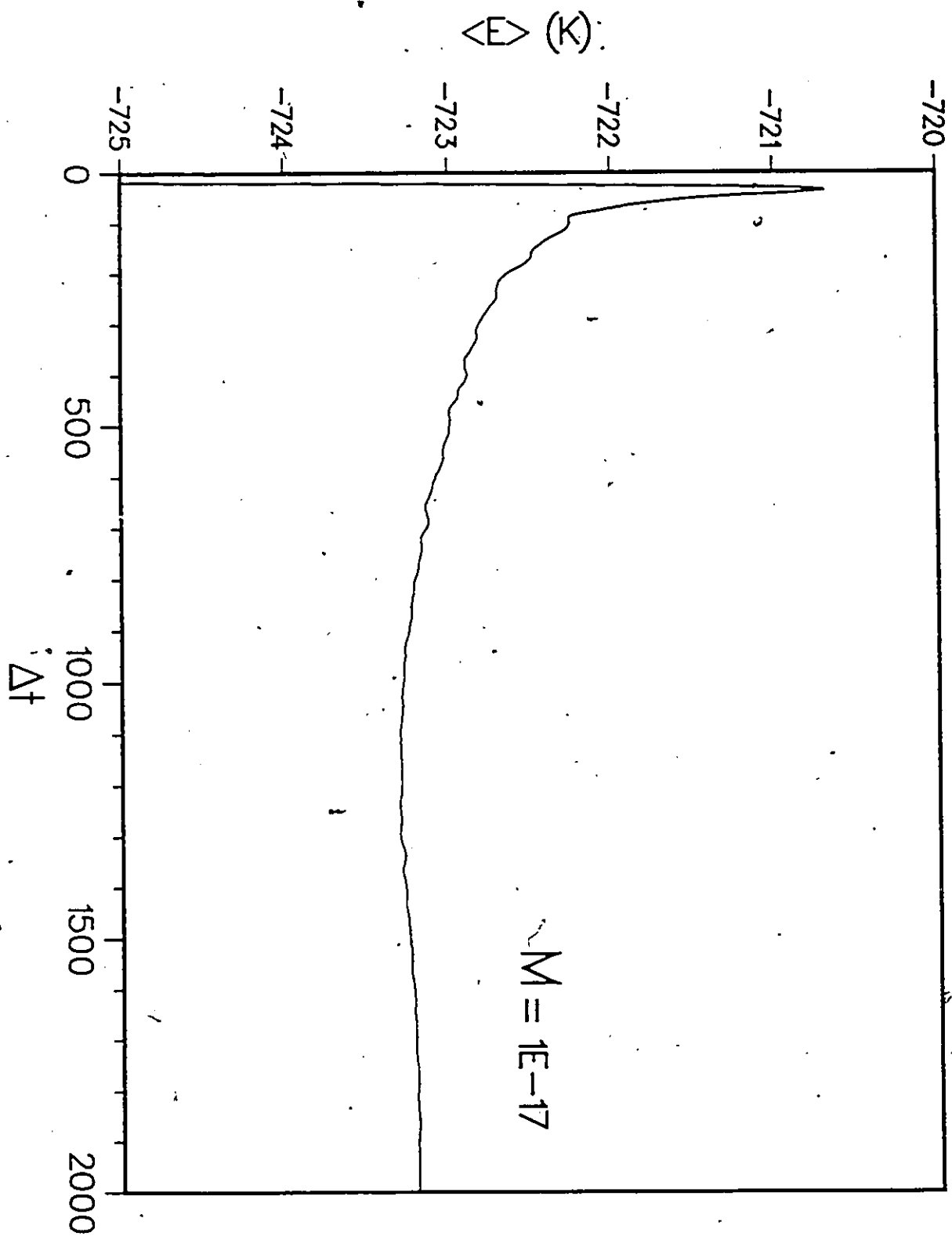


fig. 4.5 - Variation du paramètre de maille en fonction du temps. Cette fois, on n'observe que les oscillations de basse fréquence, car les oscillations statistiques n'ont pas d'effets sur les variations de la surface. Bien que l'amplitude des oscillations soit assez faible, il est clair que le système est éloigné de l'équilibre.

Paramètre de maille en fonction du TEMPS

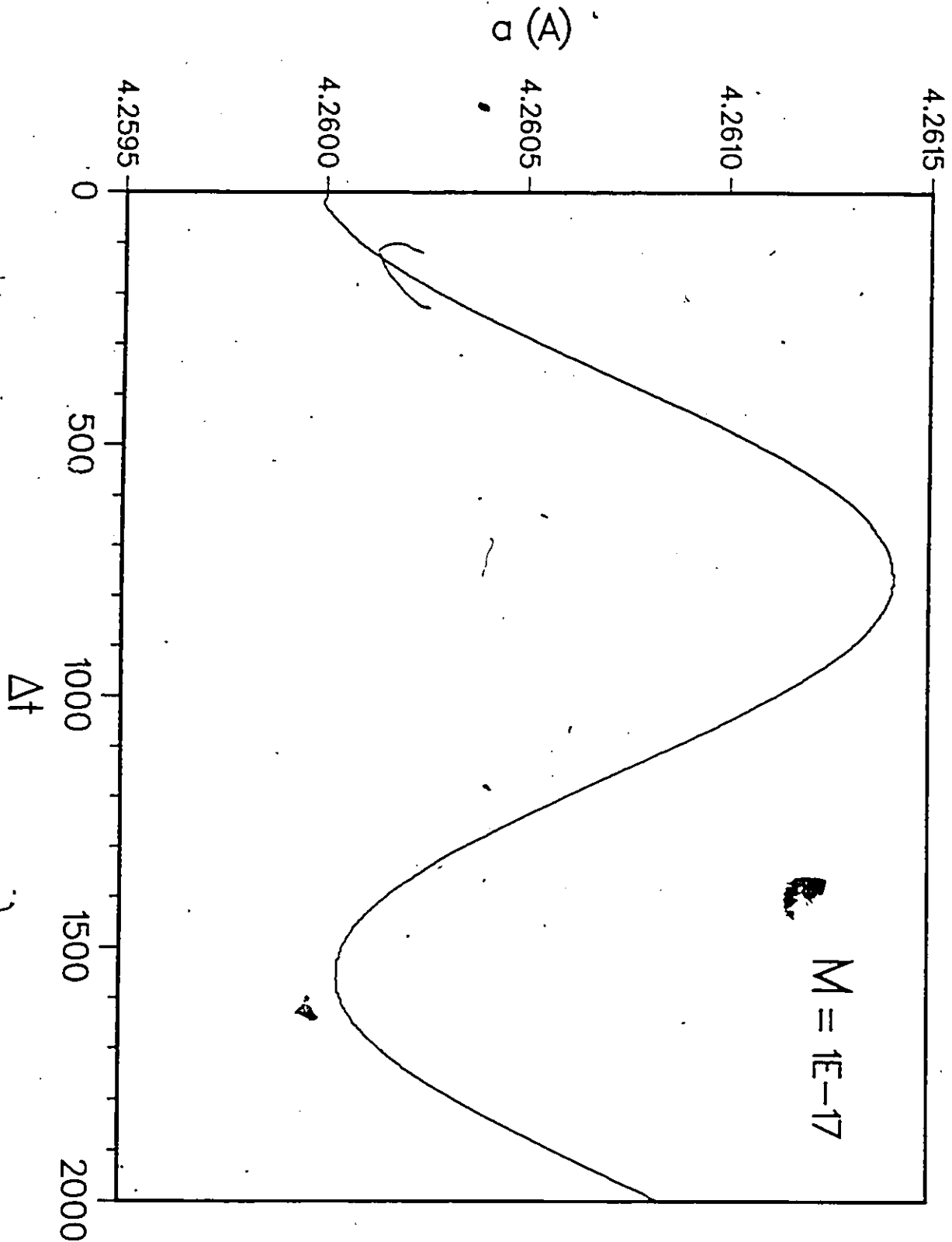


fig. 4.6 - Variation de la moyenne du paramètre de maille en fonction du temps.
Ce graphique confirme que le système n'a pas atteint l'équilibre thermique dans lequel nous voulons qu'il soit, pour pouvoir calculer les quantités d'intérêt.

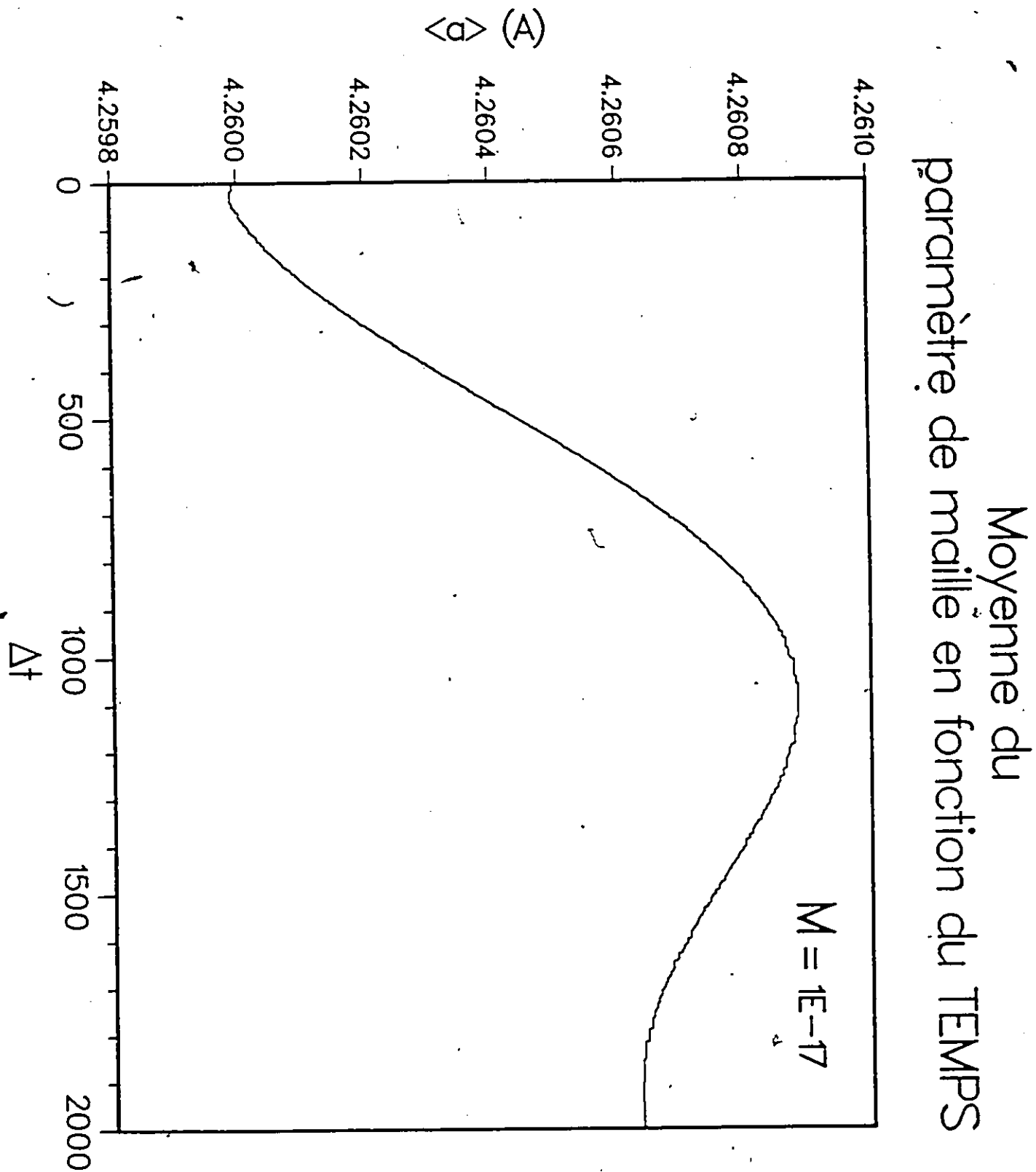


fig. 4.7 - Variation de la pression en fonction du temps pour une masse effective M 10 fois plus légère que celle de la figure 4.1. On observe 3 changements par rapport à la figure 4.1. Tout d'abord, la fréquence de variation de la surface a augmenté. Ceci est dû au fait que, M étant plus légère, celle-ci réagit plus rapidement aux impulsions que le système lui fait subir. Les variations associées aux hautes fréquences paraissent se produire moins souvent. Cela s'explique par le fait que, la pression variant plus rapidement, certaines de ces variations sont "absorbées". Enfin, on observe que l'amplitude des oscillations augmente légèrement. Ceci est également explicable par le fait, que la masse effective est plus légère.

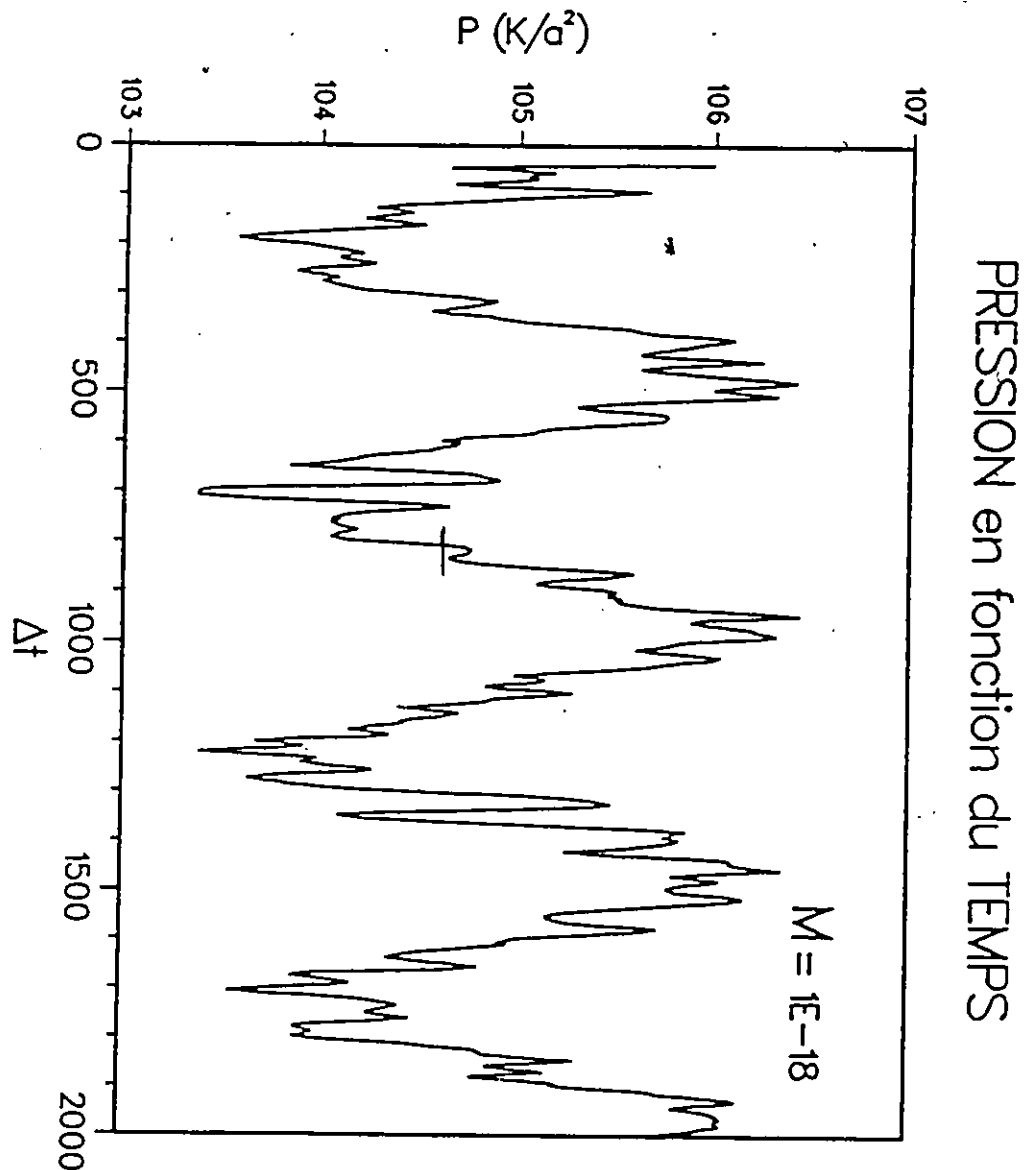
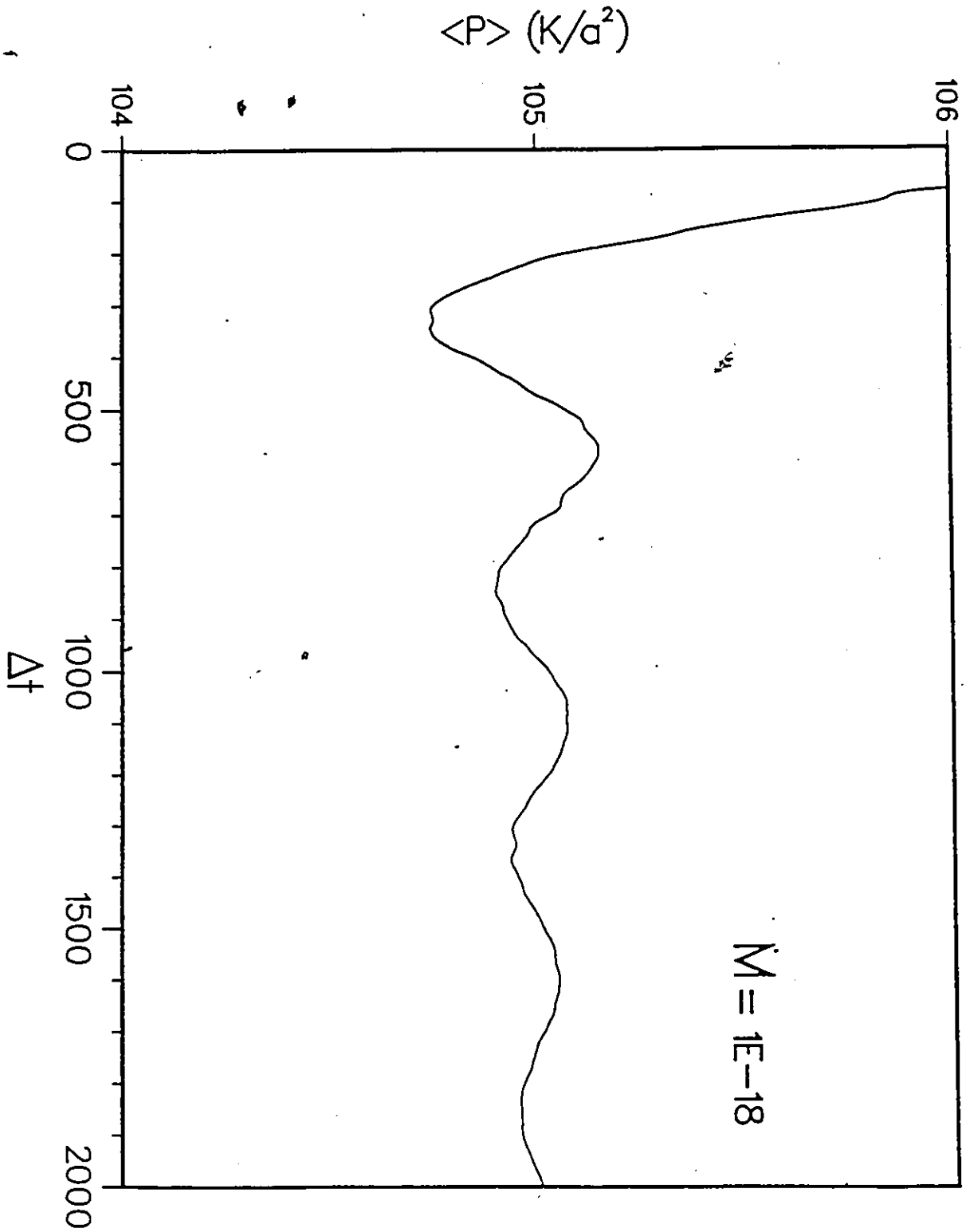


fig. 4.8 -Variation de la moyenne de la pression en fonction du temps. On remarque tout de suite que la moyenne converge plus rapidement vers sa valeur à l'équilibre. Ceci est dû à l'augmentation de la fréquence des oscillations.



Moyenne de la pression en fonction du TEMPS

ÉNERGIE en fonction du TEMPS

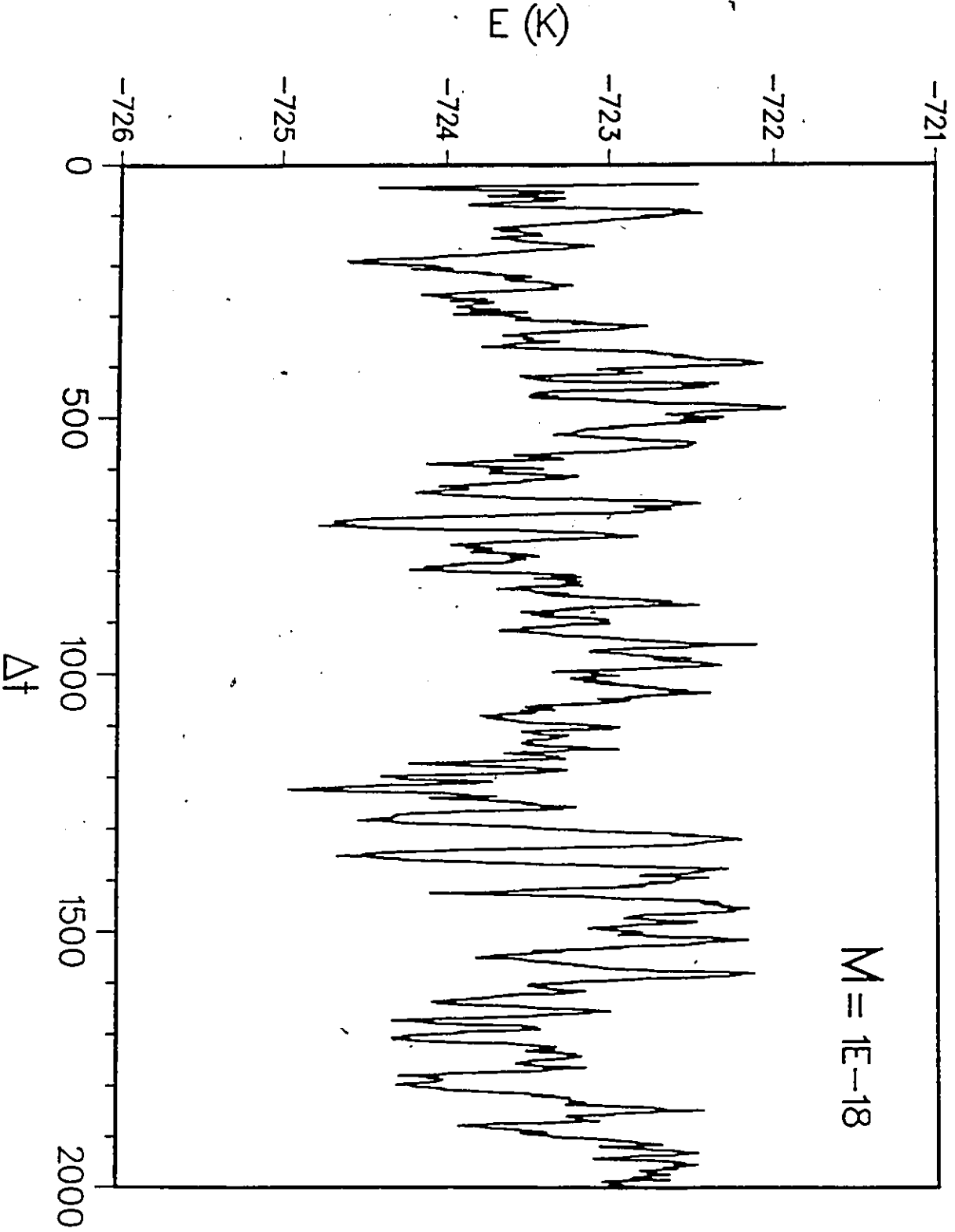


fig. 4.9 - Variation de l'énergie en fonction du temps.

fig. 4.10 - Variation de la moyenne de l'énergie en fonction du temps.

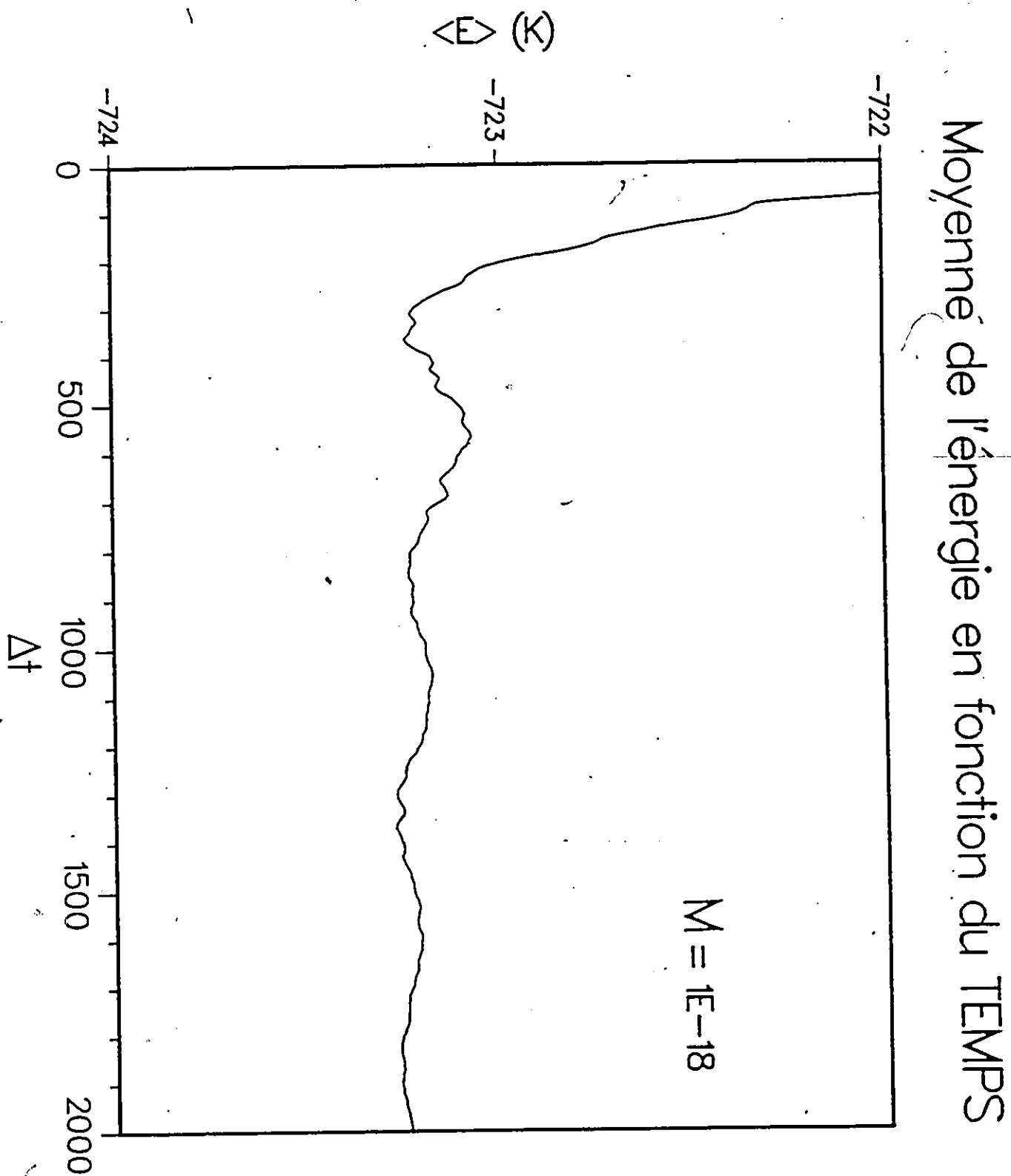


fig. 4.11 - Variation du paramètre de maille en fonction du temps. Cette courbe nous montre l'augmentation de l'amplitude des oscillations, reliée à la diminution de la masse effective.

Paramètre de maille en fonction du TEMPS

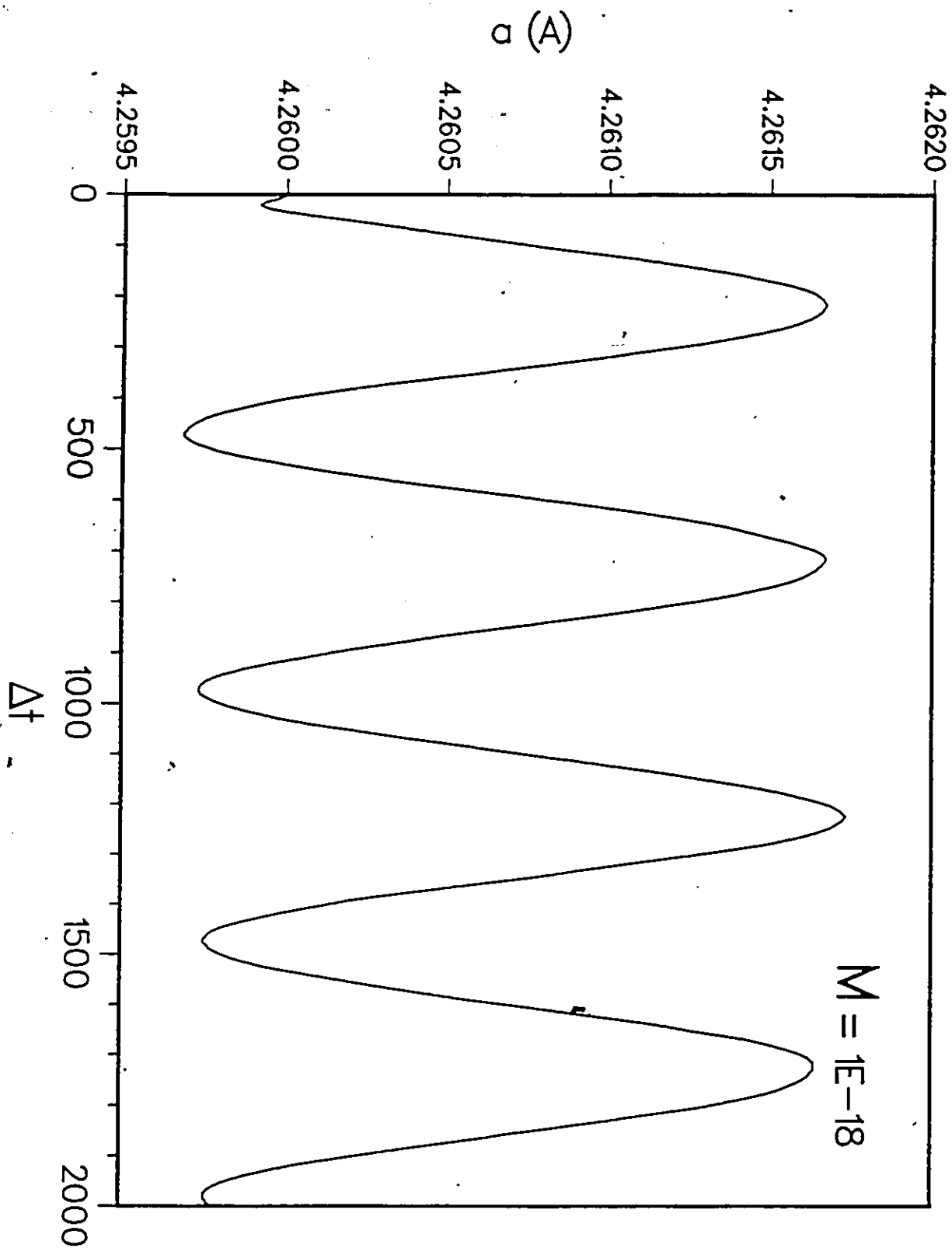


fig. 4.12 - Variation de la moyenne du paramètre de maille en fonction du temps.

On voit la convergence plus rapide de la moyenne sur ce graphique.

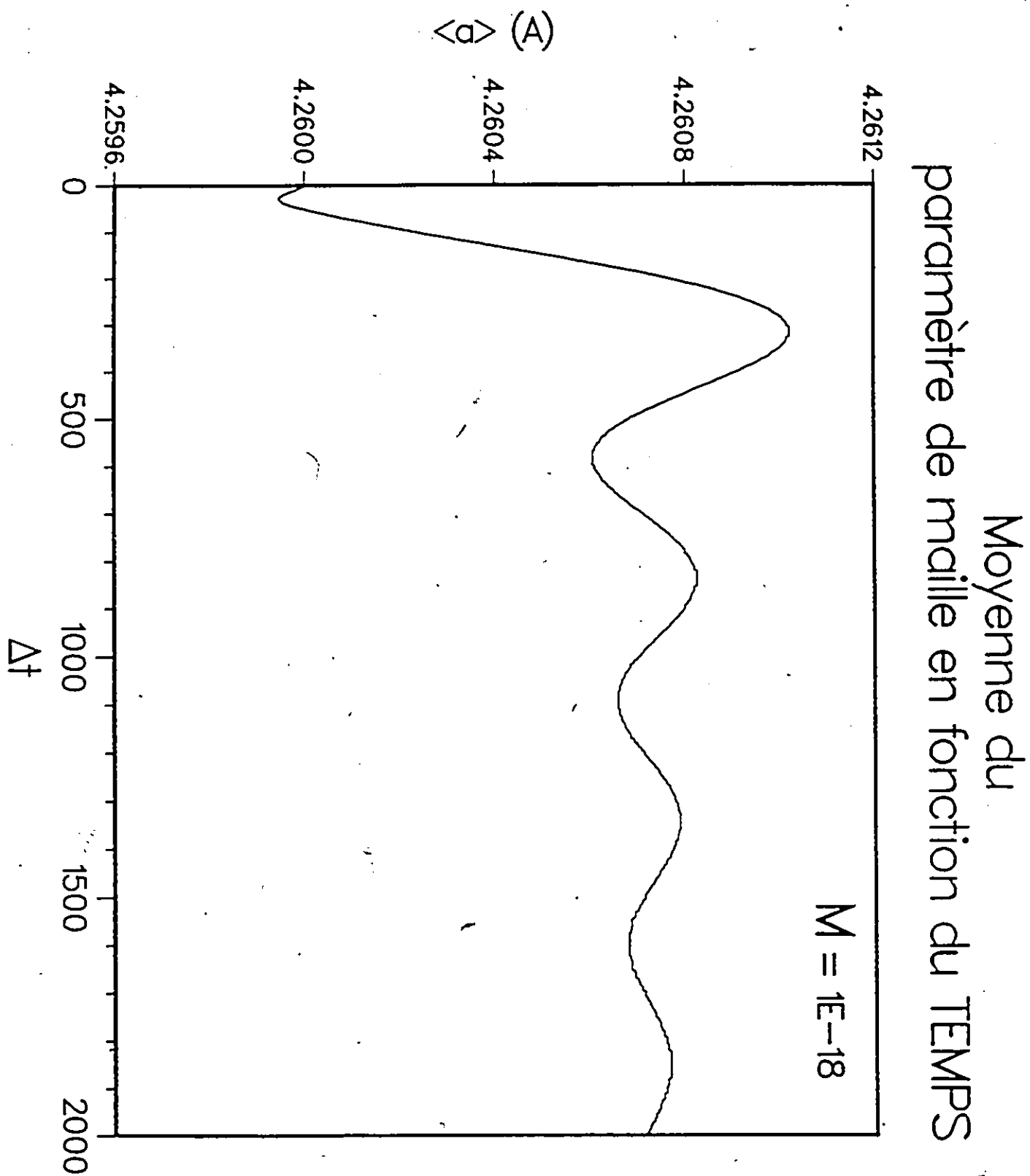


fig. 4.13 - Variation de la pression en fonction du temps pour une masse effective M 10 fois plus légère que celle de la figure 4.7. On observe le même phénomène entre 4.13 et 4.7 qu'entre 4.7 et 4.1, soit une augmentation dans l'amplitude et la fréquence des oscillations, et les fluctuations statistiques moins visibles. De plus, il est à remarquer que le temps qu'il faut au système, pour atteindre sa configuration à l'équilibre, augmente.

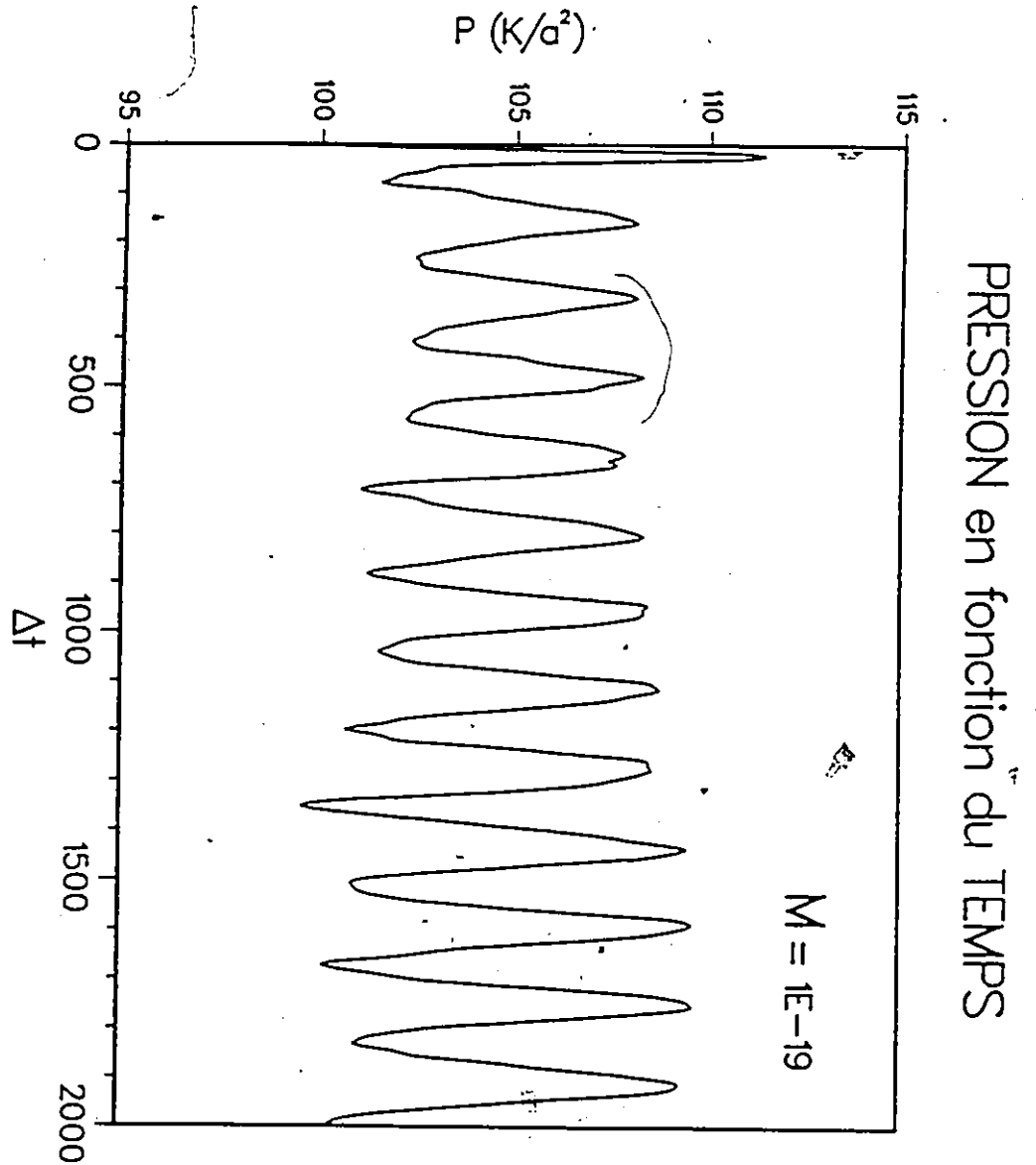
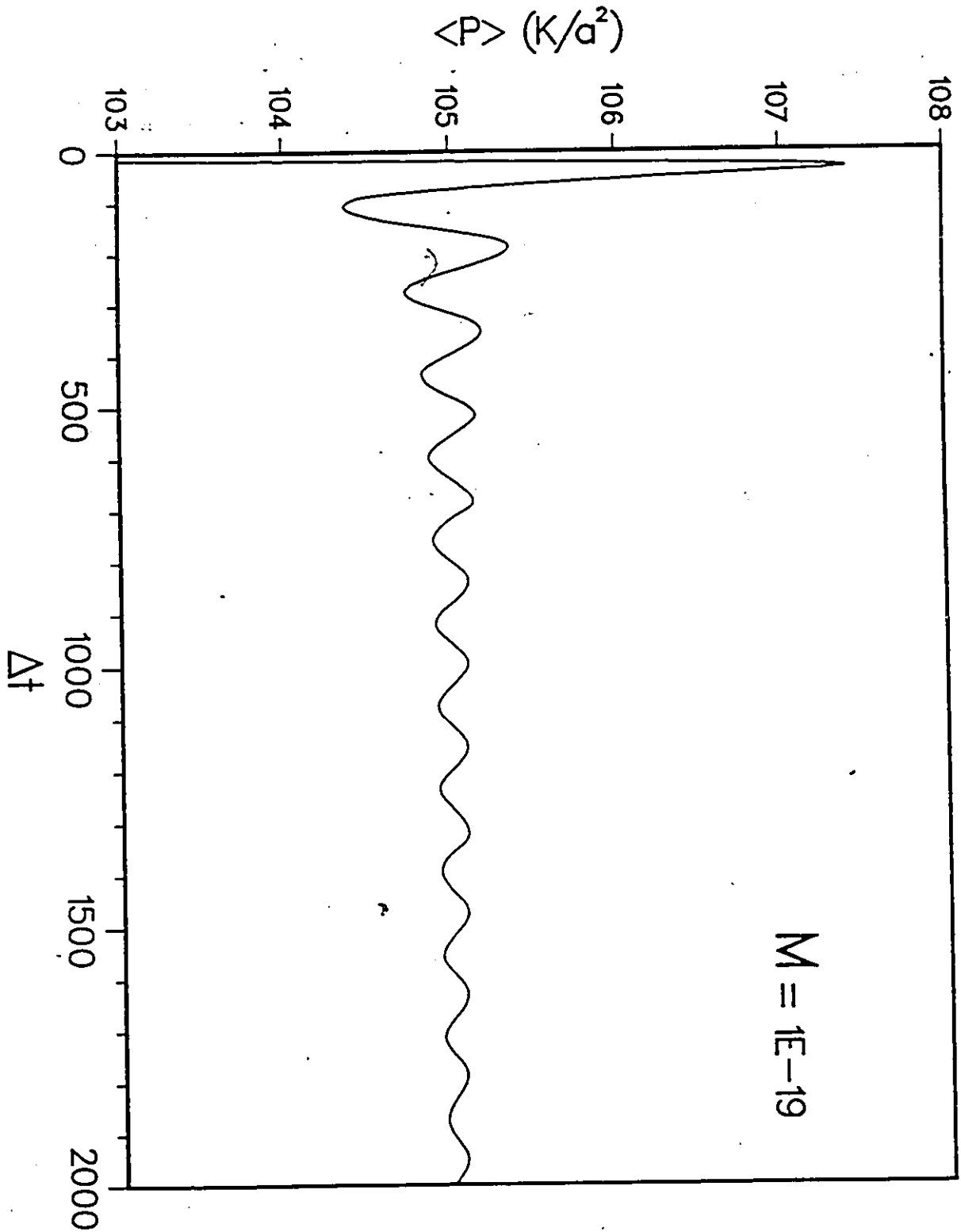


fig. 4.14 - Variation de la moyenne de la pression en fonction du temps. On observe une convergence plus rapide dans la moyenne.



ÉNERGIE en fonction du TEMPS

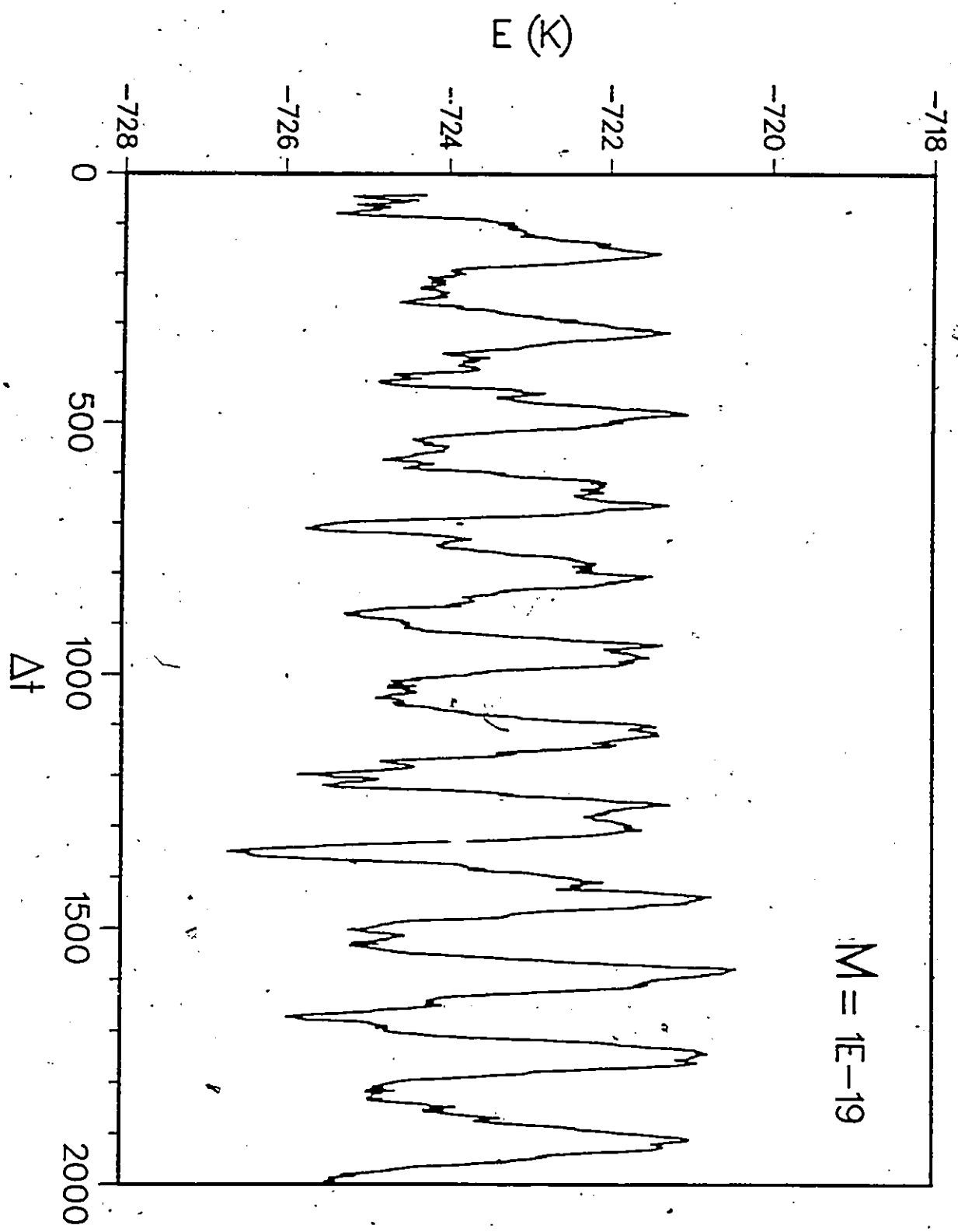


fig. 4.15 - Énergie en fonction du temps à $T = 10$ K.

Moyenne de l'énergie en fonction du TEMPS

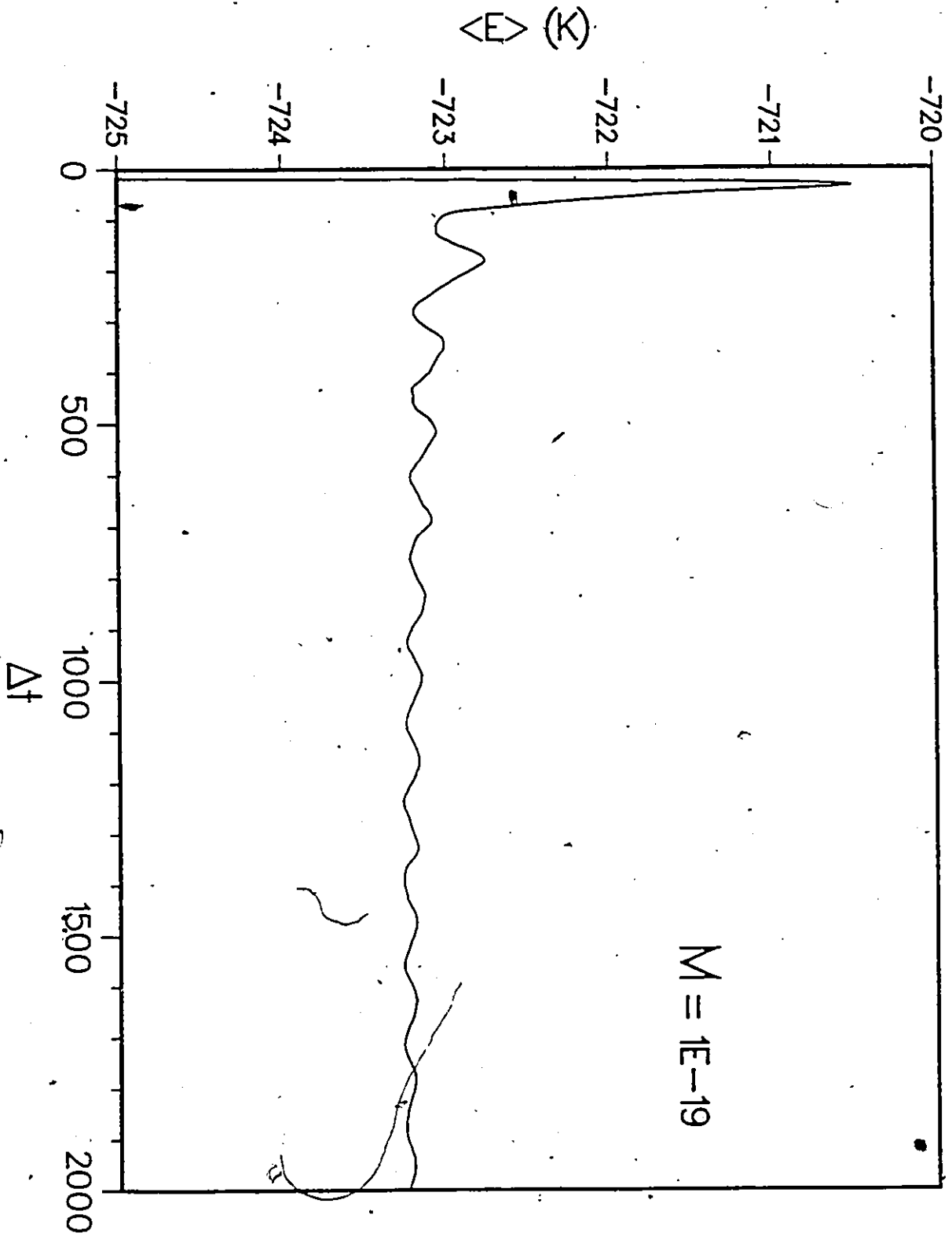


fig. 4.16 - Moyenne de l'énergie en fonction du temps

Paramètre de maille en fonction du TEMPS

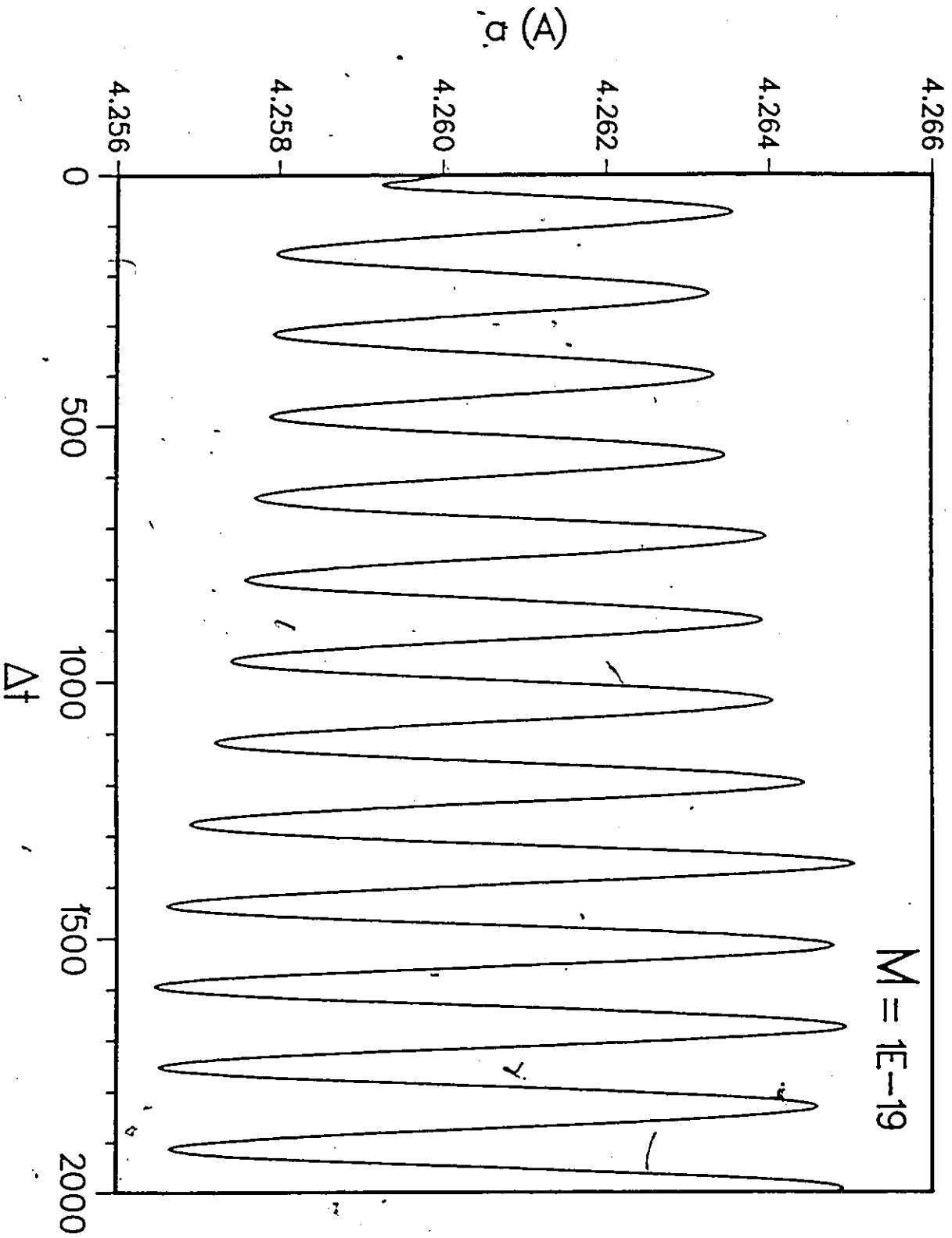


fig. 4.17 - Paramètre de maille en fonction du temps à $T = 10$ K.

fig. 4.18 - Moyenne du paramètre de maille en fonction du temps

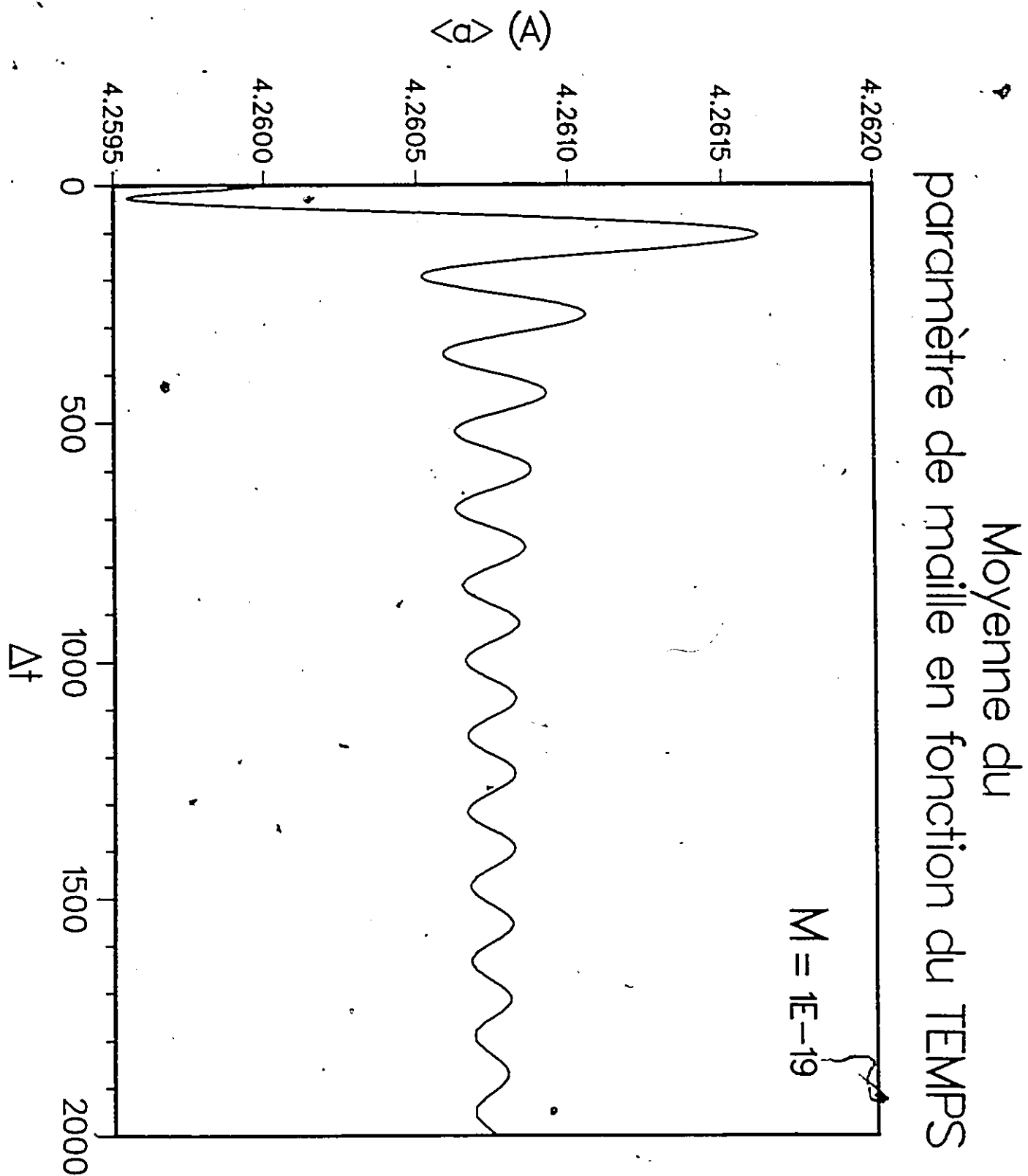
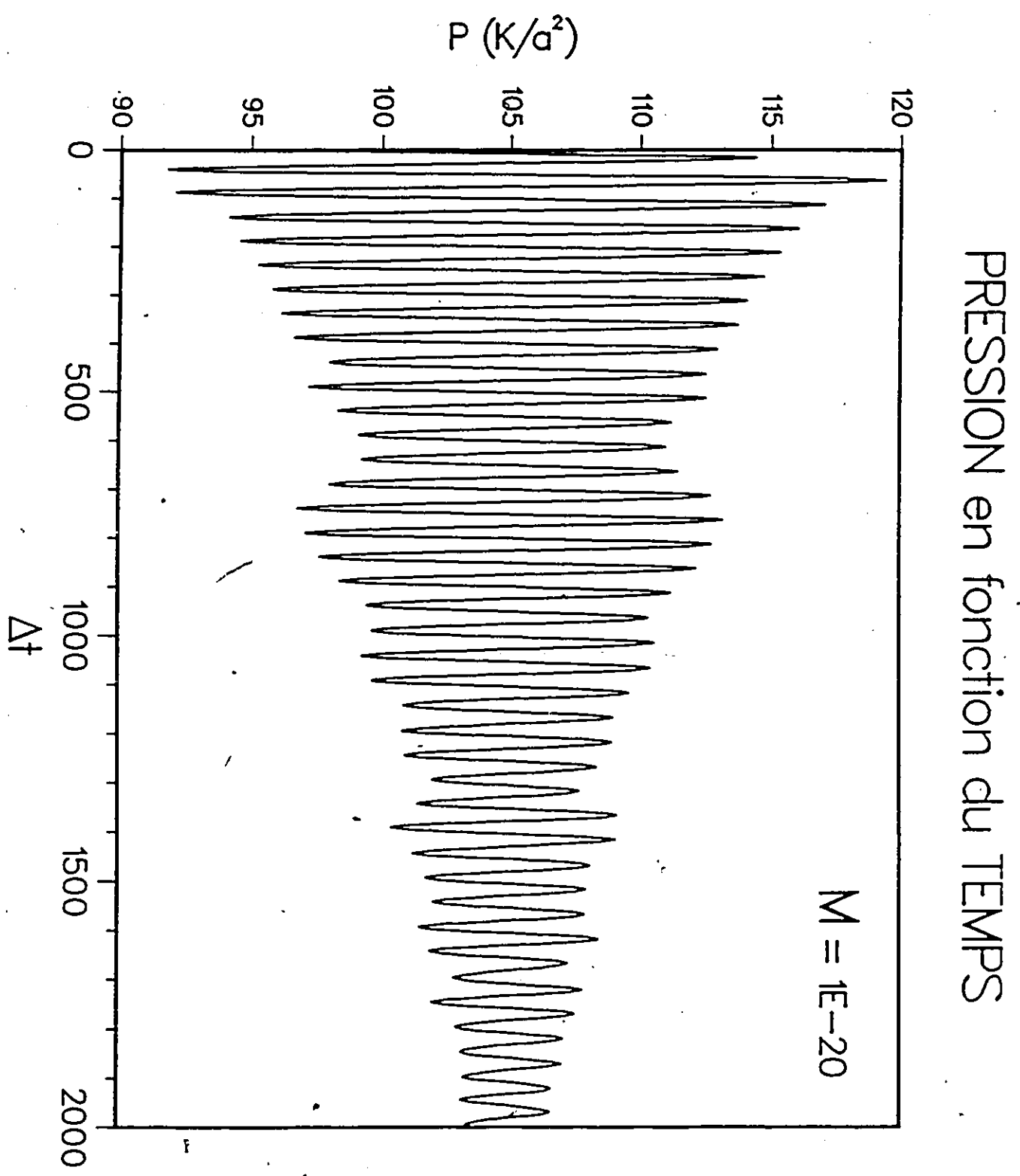


fig. 4.19 - Pression en fonction du temps à $T = 10$ K pour une masse effective M 10 fois plus légère que celle de la figure 4.13.



Moyenne de la pression en fonction du TEMPS

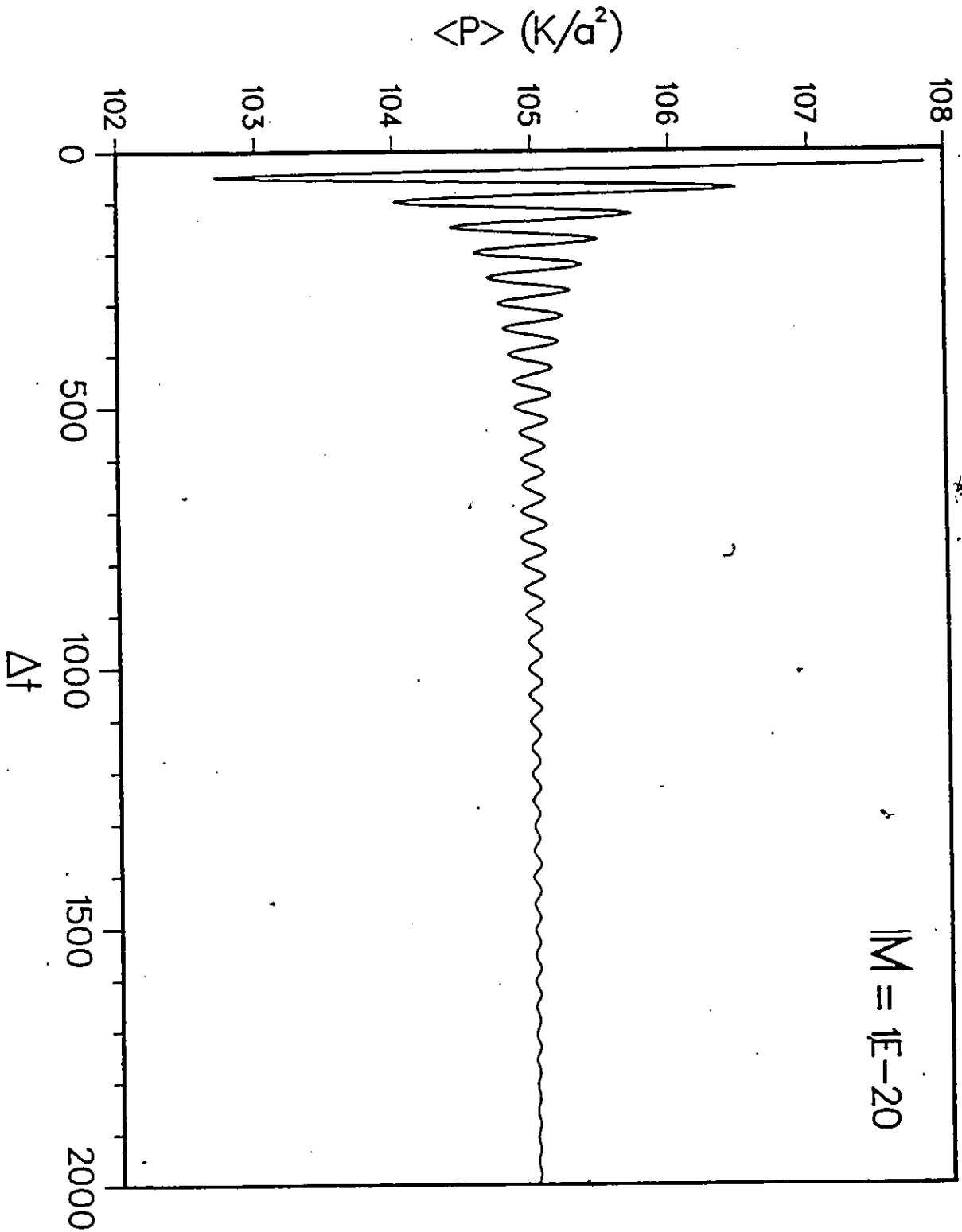
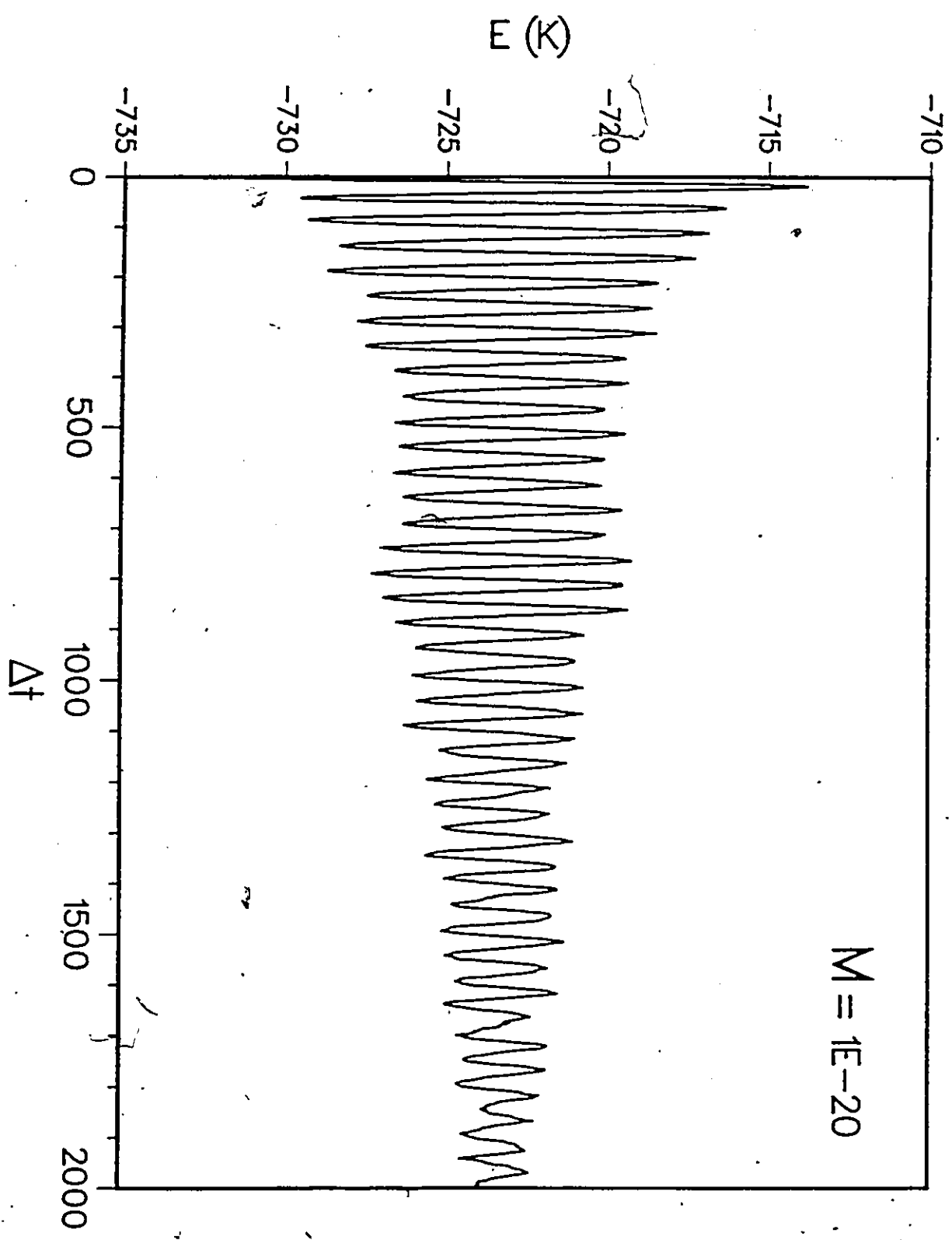


fig. 4.20 - Moyenne de la pression en fonction du temps

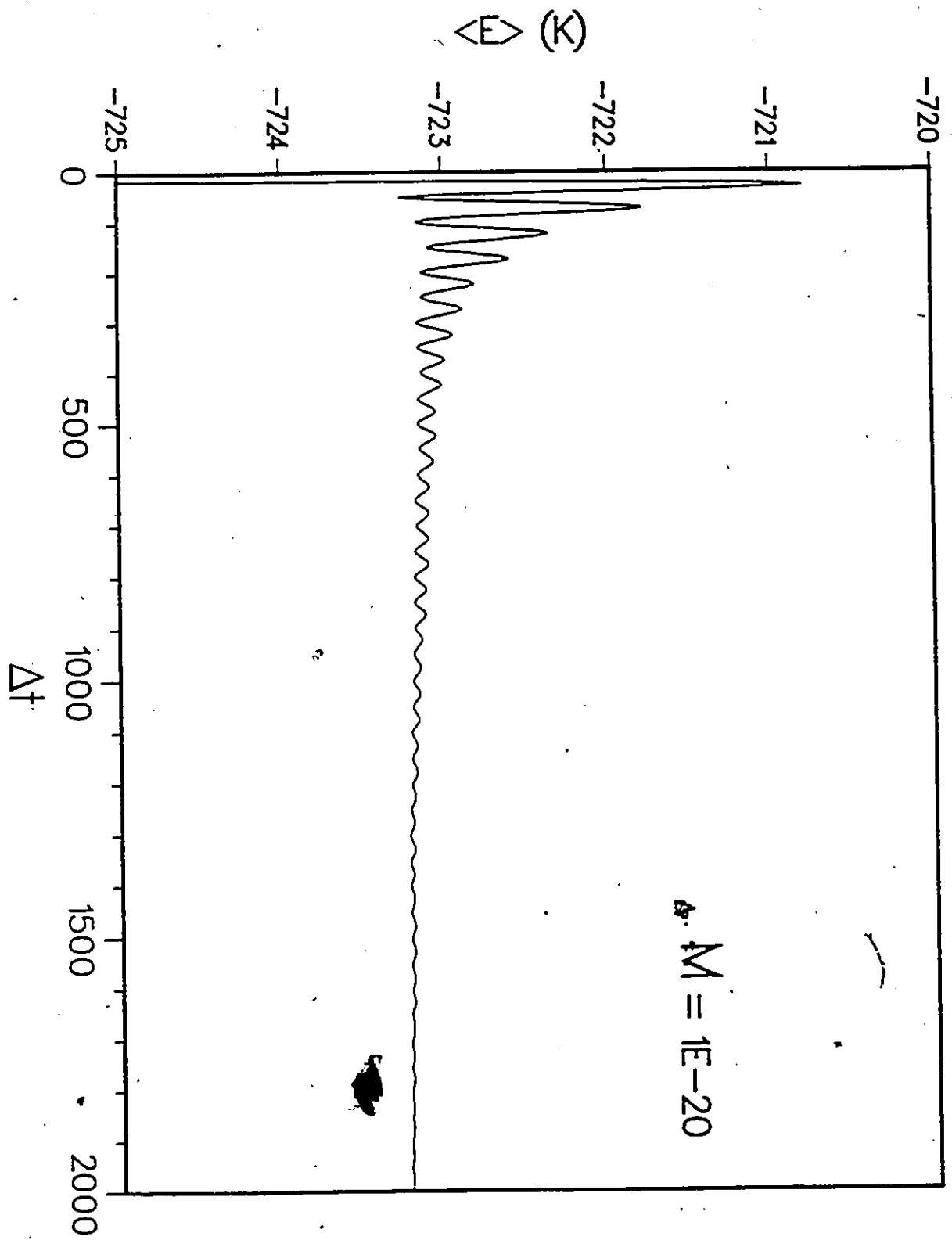
ÉNERGIE en fonction du TEMPS

fig. 4.21 - Énergie en fonction du temps à $T = 10$ K.



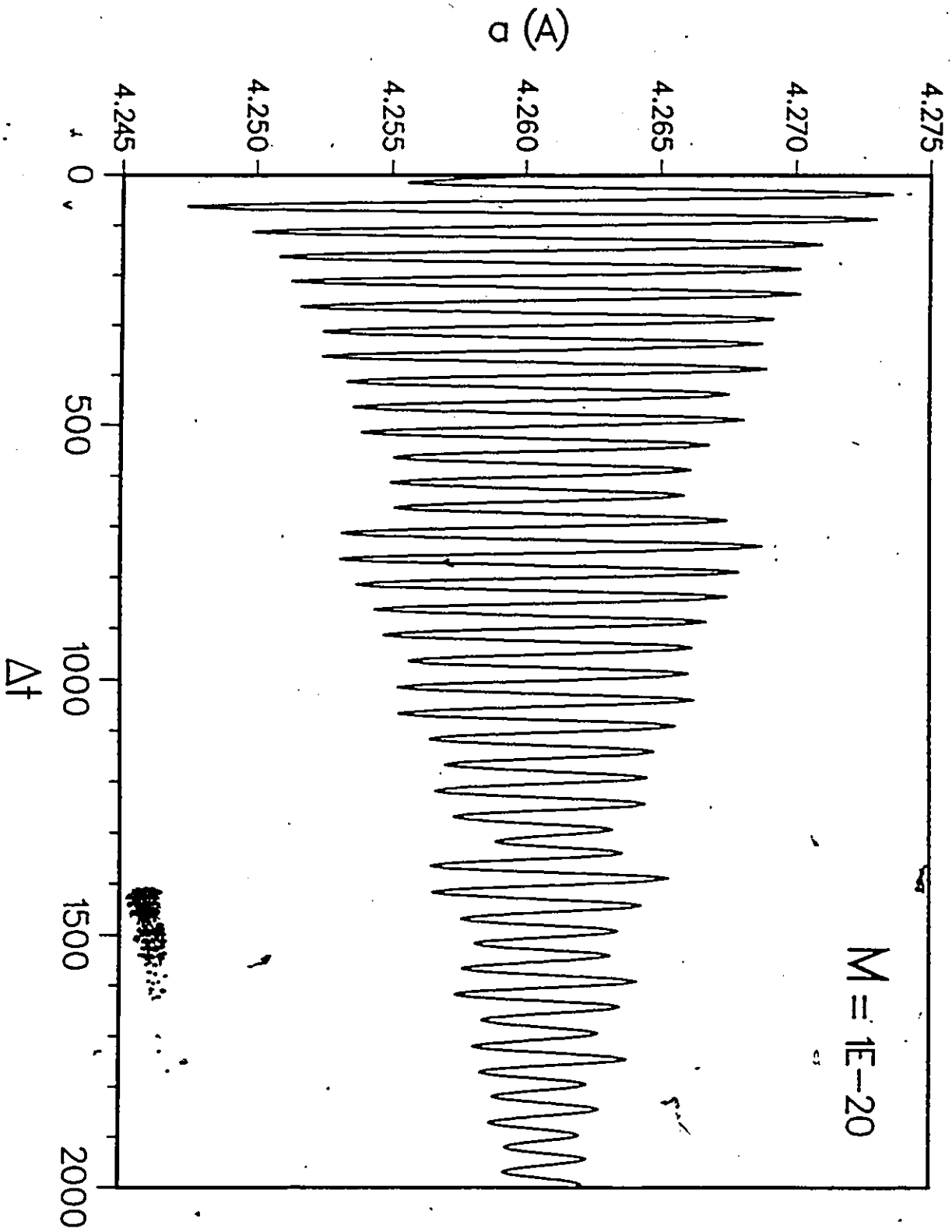
Moyenne de l'énergie en fonction du TEMPS

fig. 4.22 - Moyenne de l'énergie en fonction du temps



Paramètre de maille en fonction du TEMPS

fig. 4.23 - Paramètre de maille en fonction du temps à $T = 10$ K.



Moyenne du
paramètre de maille en fonction du TEMPS

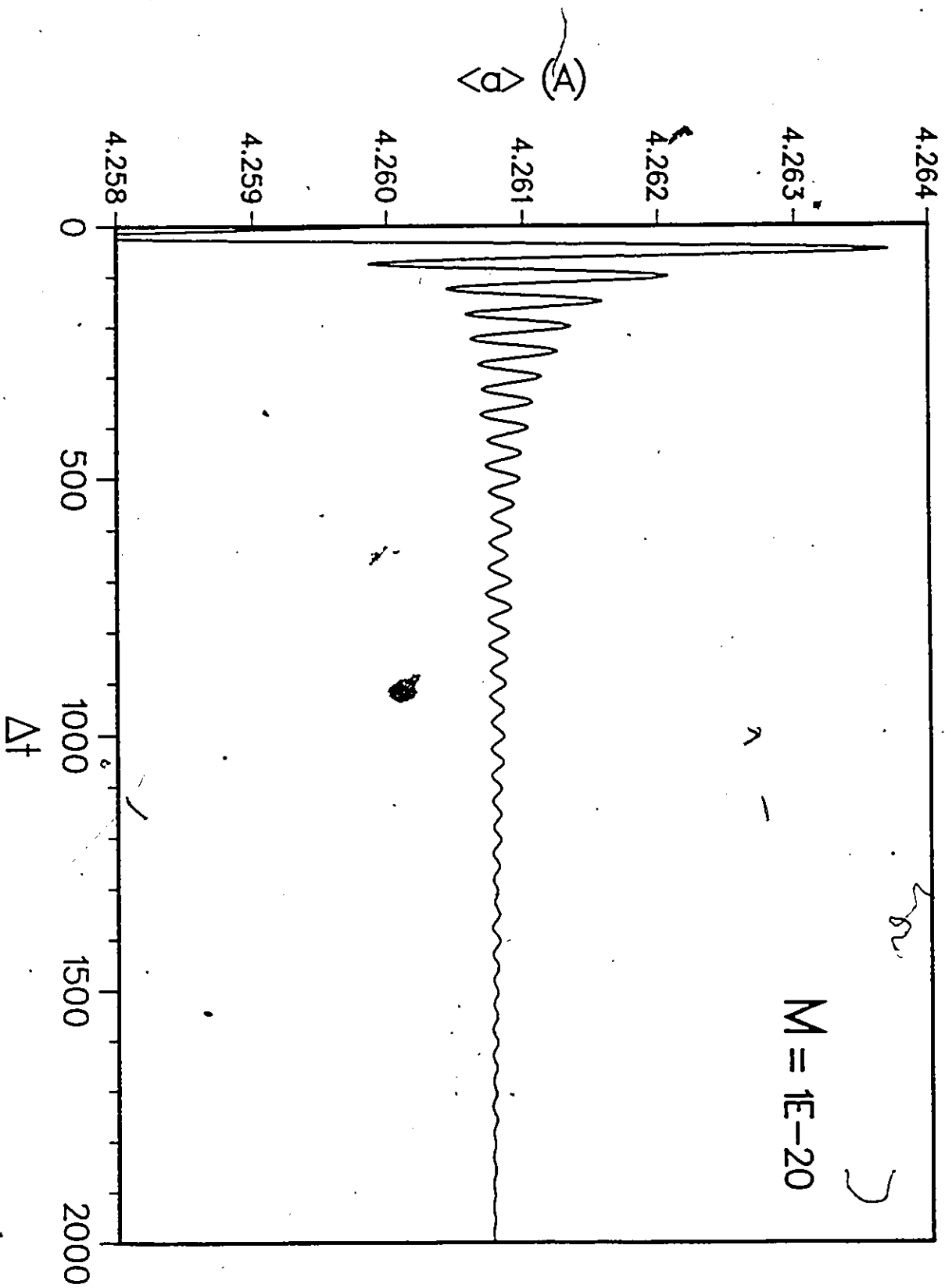


fig. 4.24 - Moyenne du paramètre de maille en fonction du temps

fig. 4.25 - Pression en fonction du temps à $T = 10$ K pour une masse effective M 10 fois plus légère que celle de la figure 4.19.

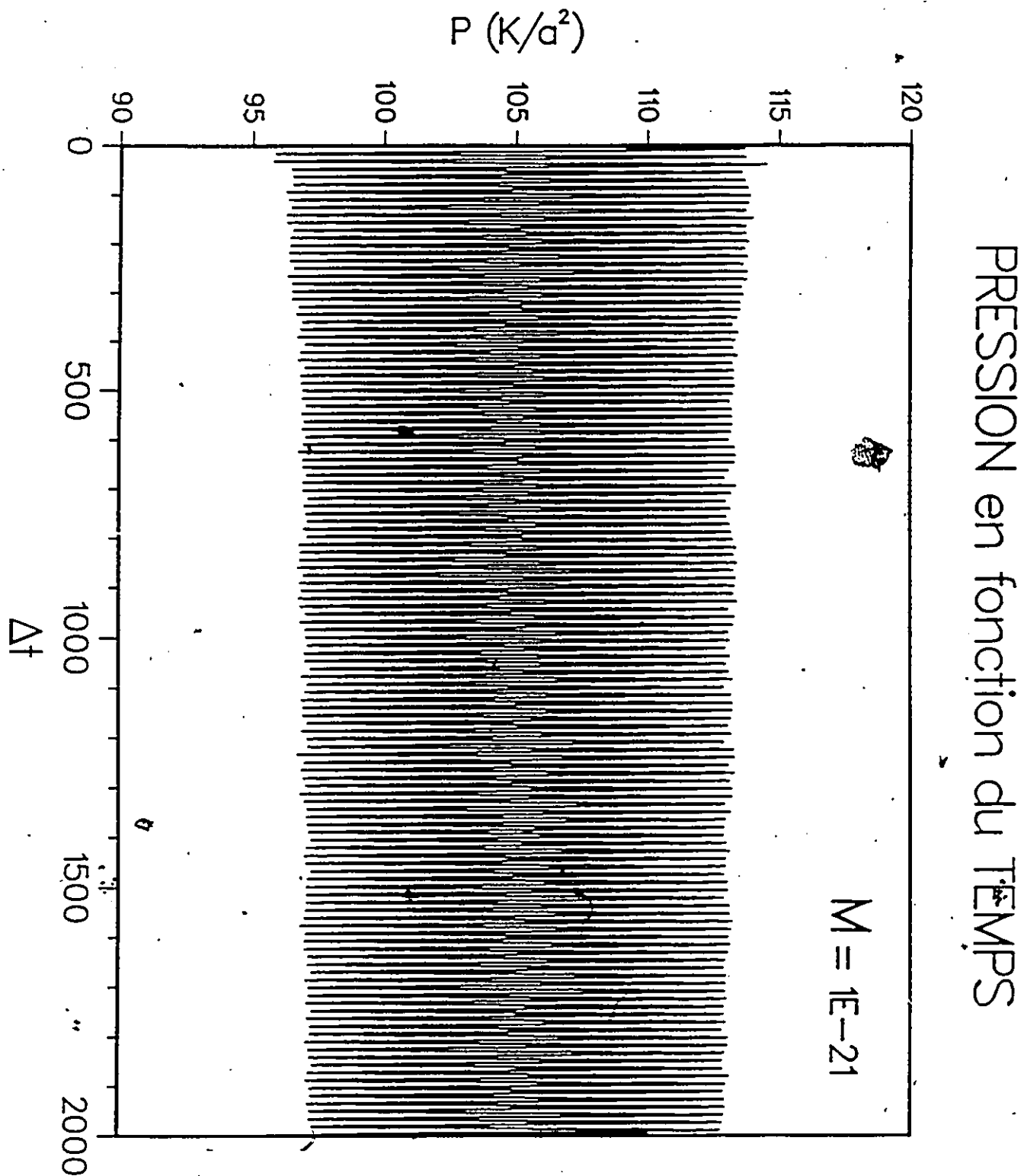
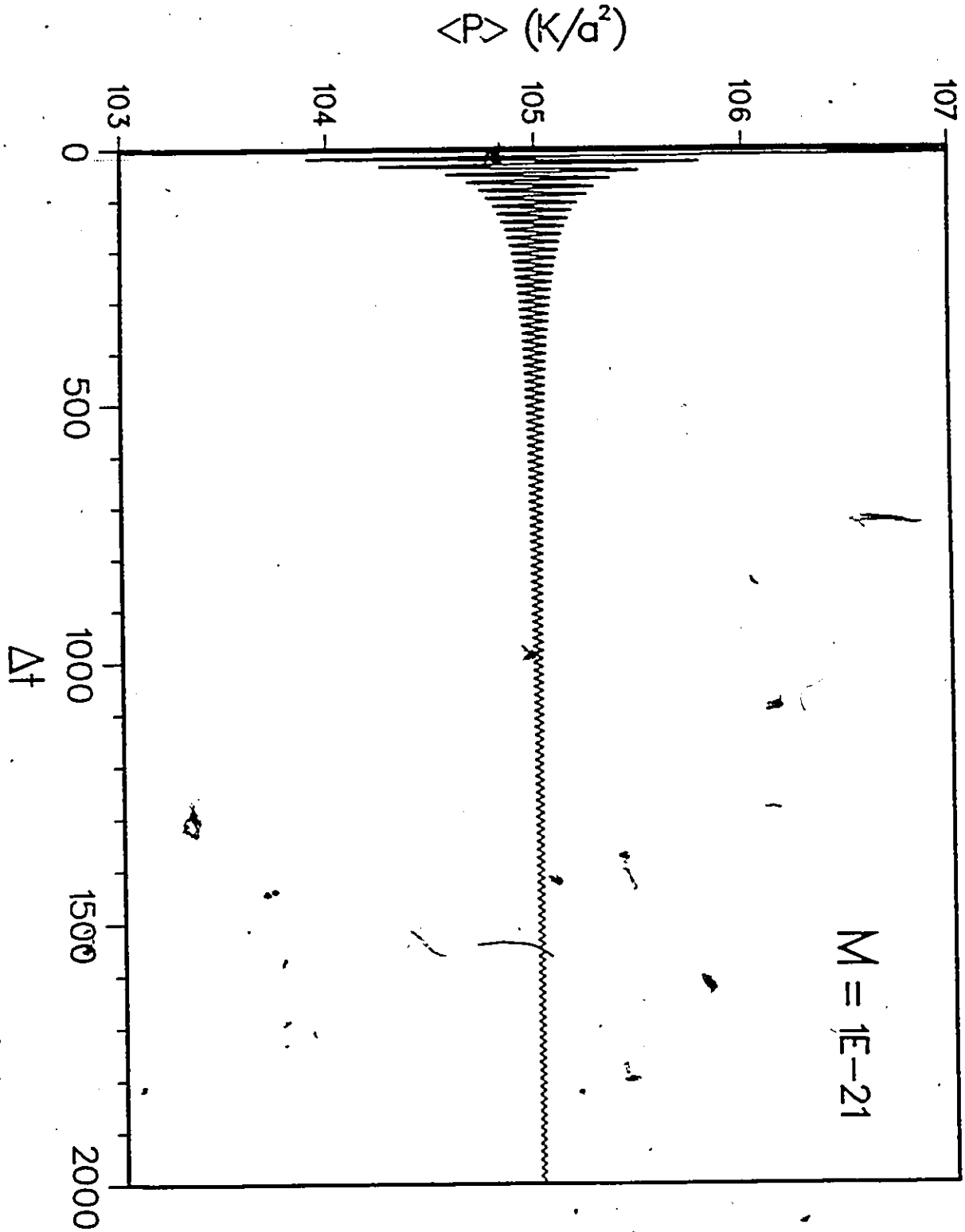


fig. 4.26 - Moyenne de la pression en fonction du temps



Moyenne de la pression en fonction du TEMPS

ÉNERGIE en fonction du TEMPS

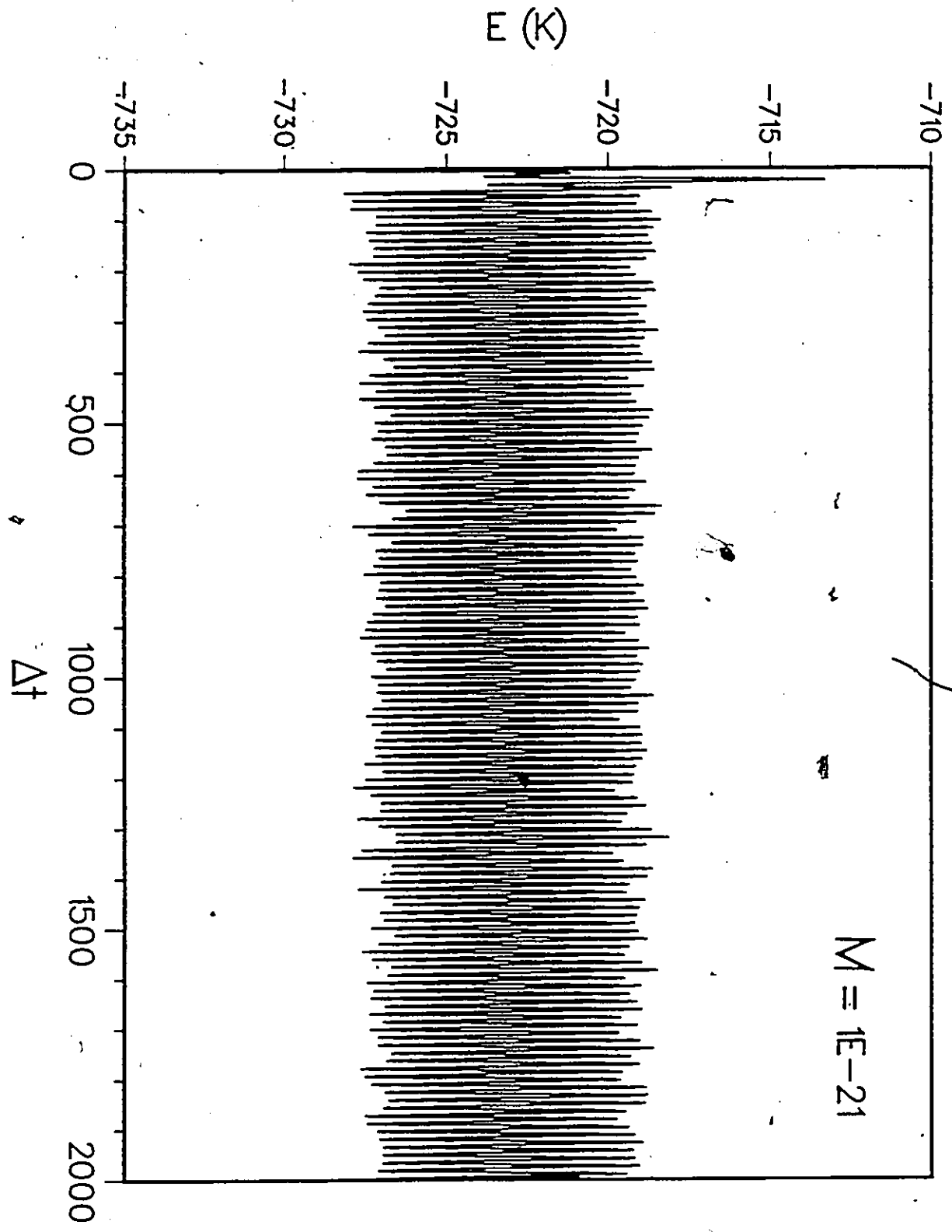


fig. 4.27 - Énergie en fonction du temps à $T = 10$ K.

Moyenne de l'énergie en fonction du TEMPS

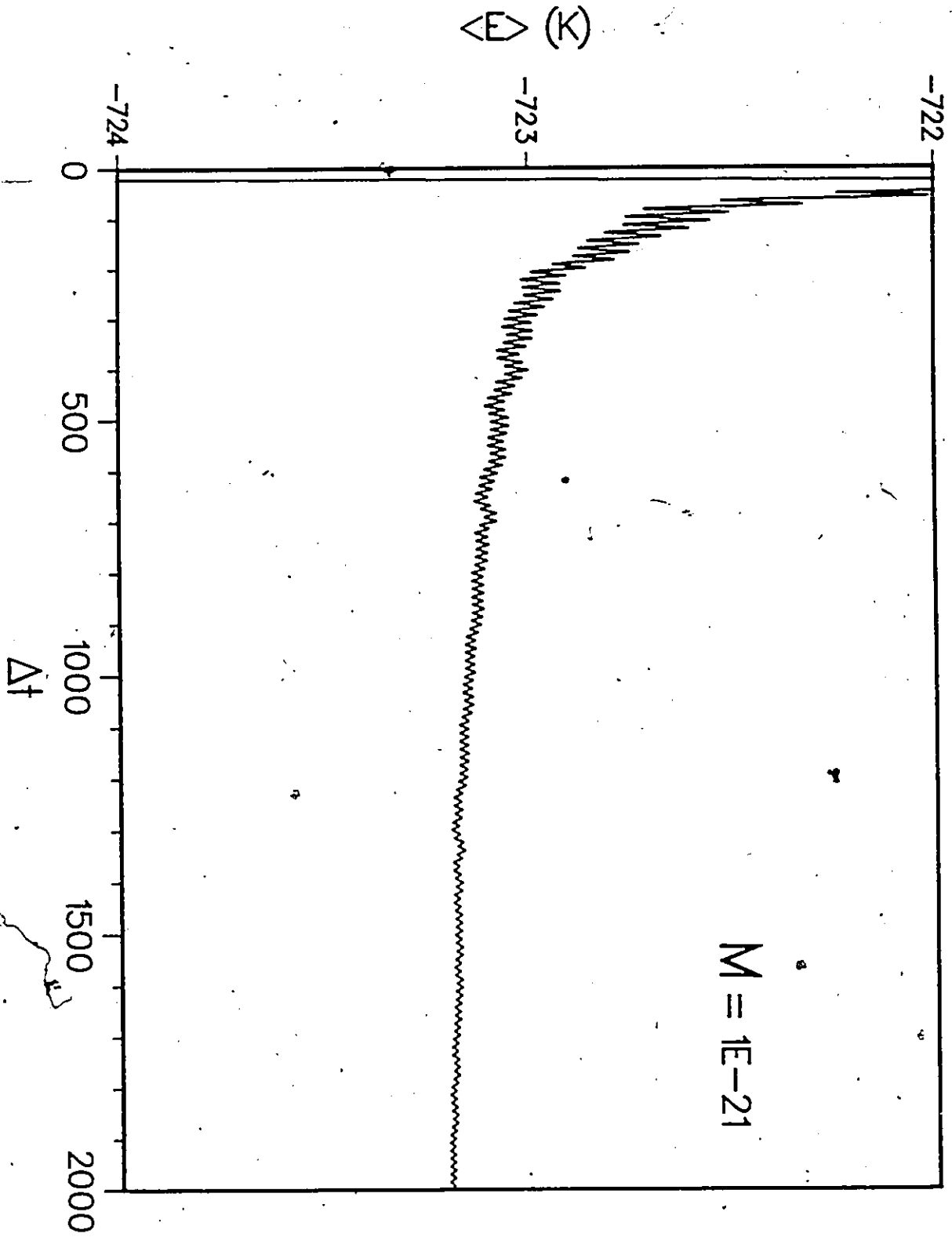


fig. 4.28 - Moyenne de l'énergie en fonction du temps

Paramètre de maille en fonction du TEMPS

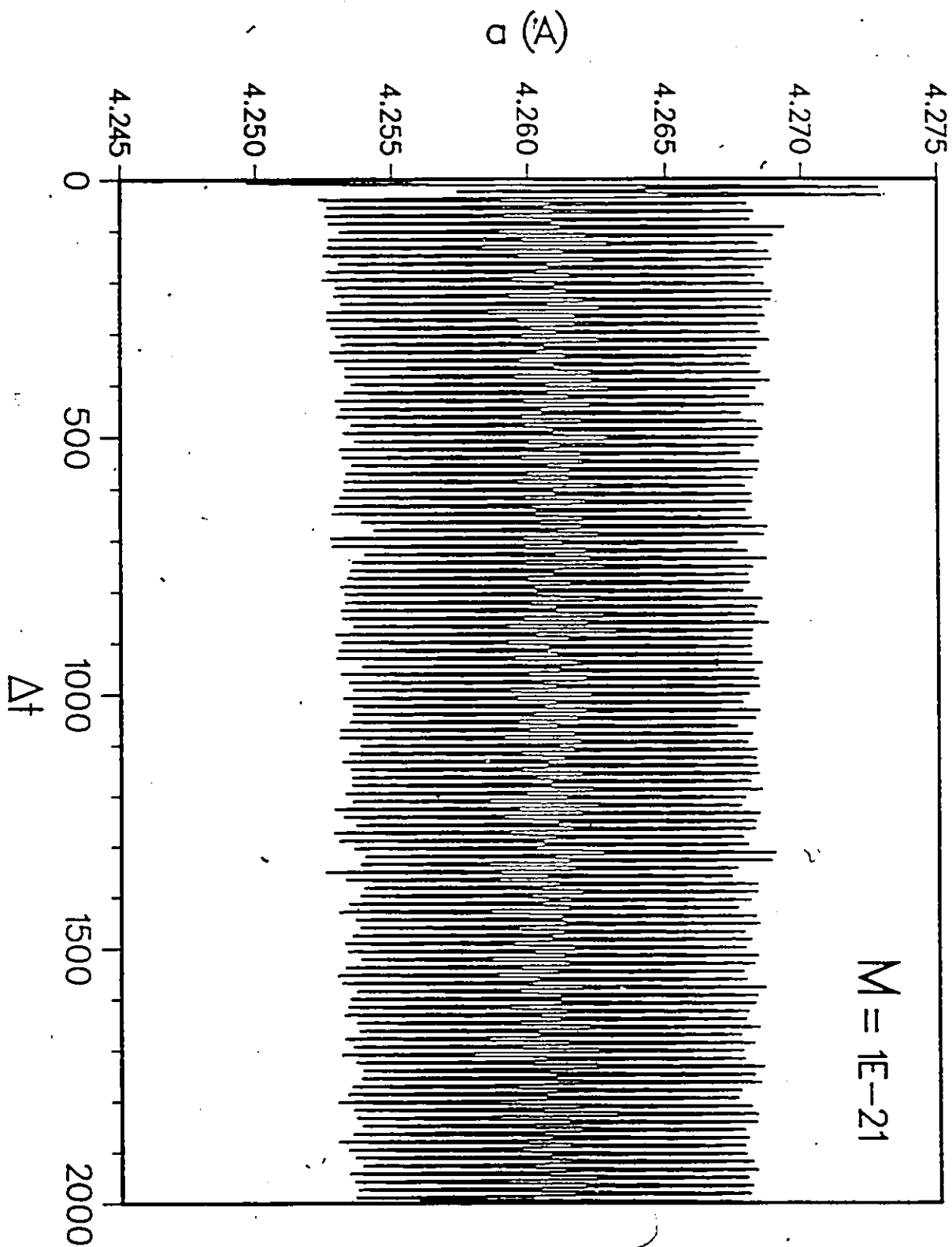


fig. 4.29 - Paramètre de maille en fonction du temps à $T = 10$ K.

Moyenne du
paramètre de maille en fonction du TEMPS

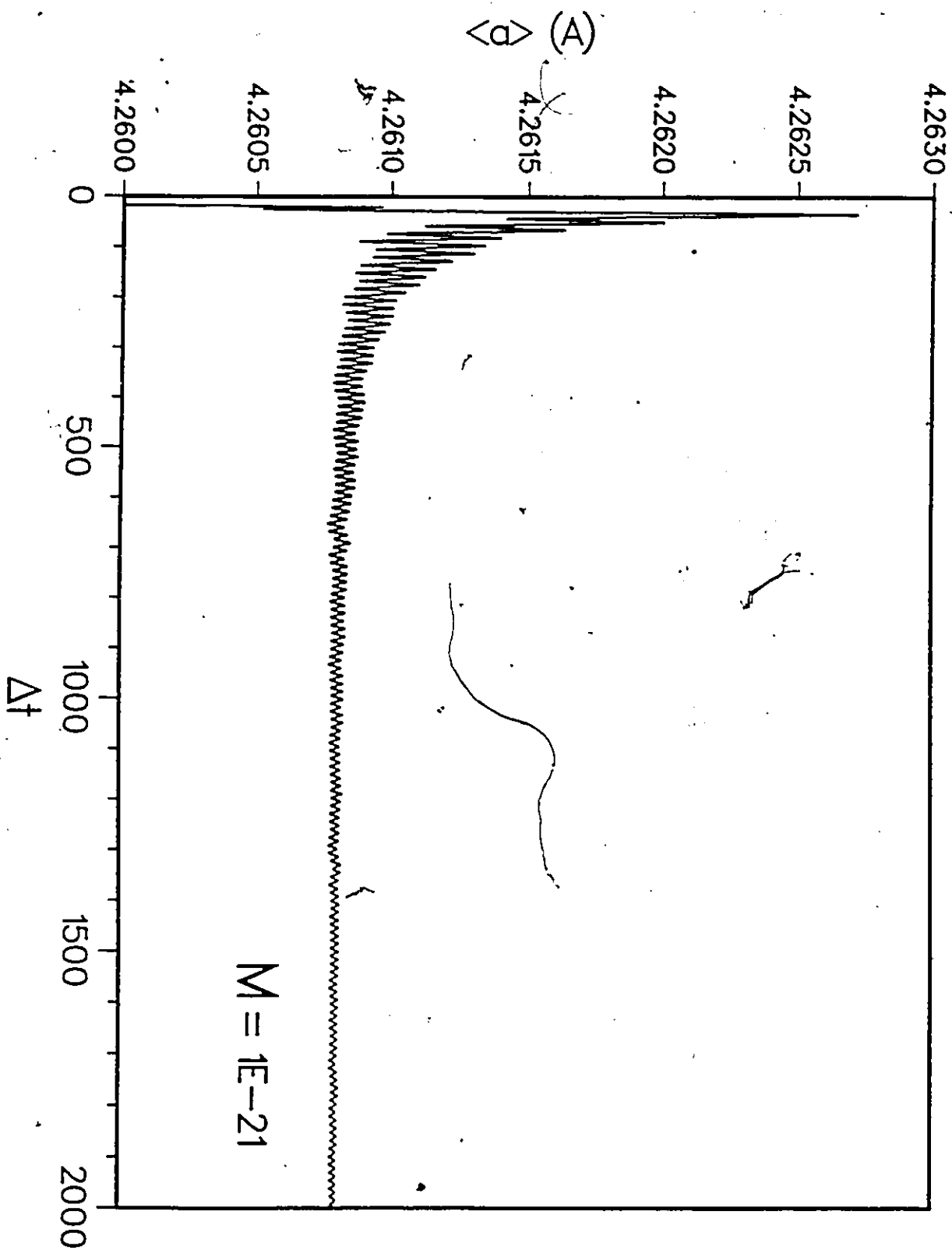


fig. 4.30 - Moyenne du paramètre de maille en fonction du temps

fig . 4.31 - Variations de la pression en fonction du temps pour une simulation dans laquelle on a effectué un changement de masse effective. On voit immédiatement les effets de ce changement, soit une diminution dans l'amplitude des oscillations et une augmentation de leur fréquence.

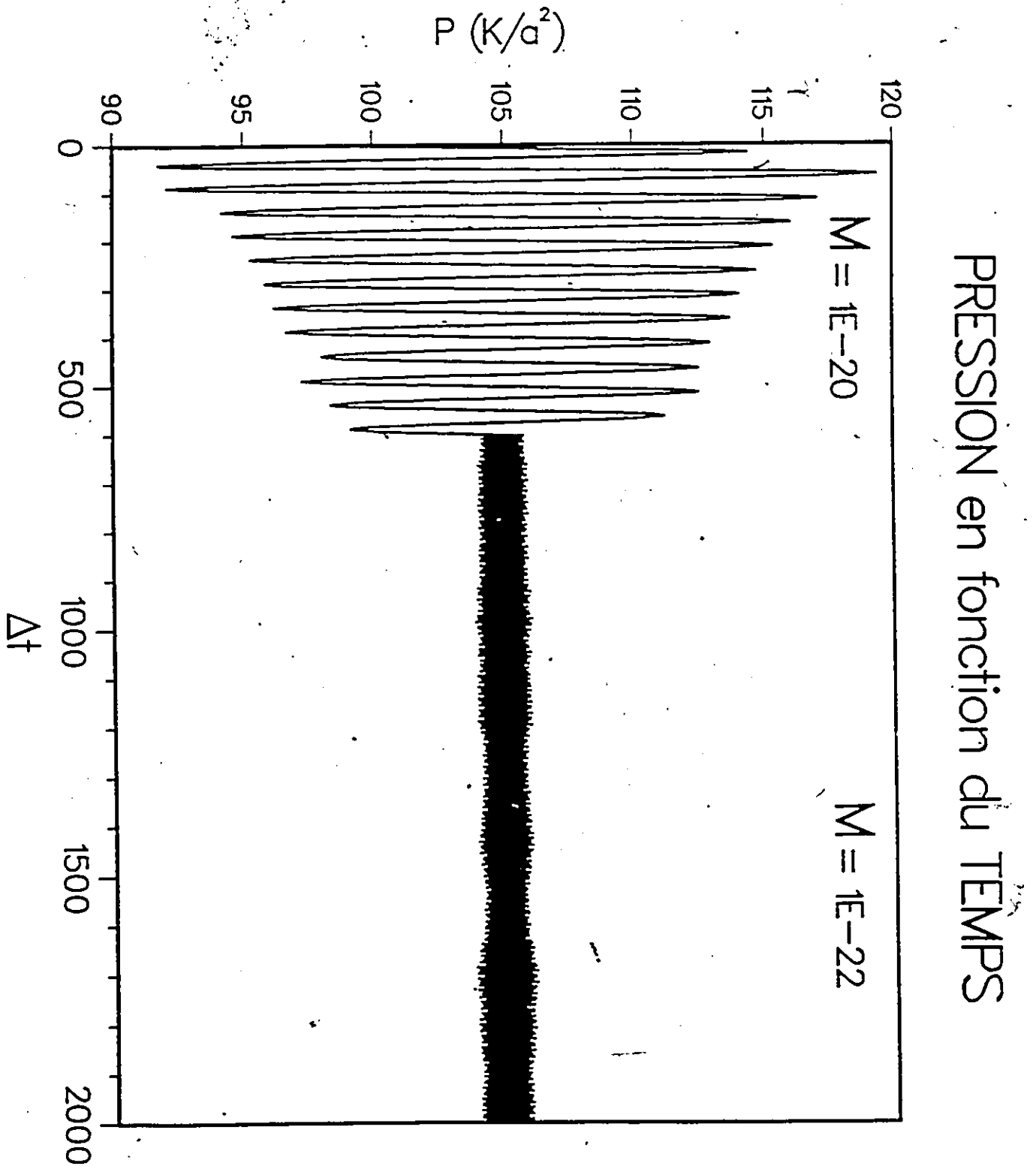


fig. 4.32 - Variations de la moyenne de la pression en fonction du temps. On observe les effets du changement de masse effective, soit l'obtention beaucoup plus rapide d'une moyenne stable.

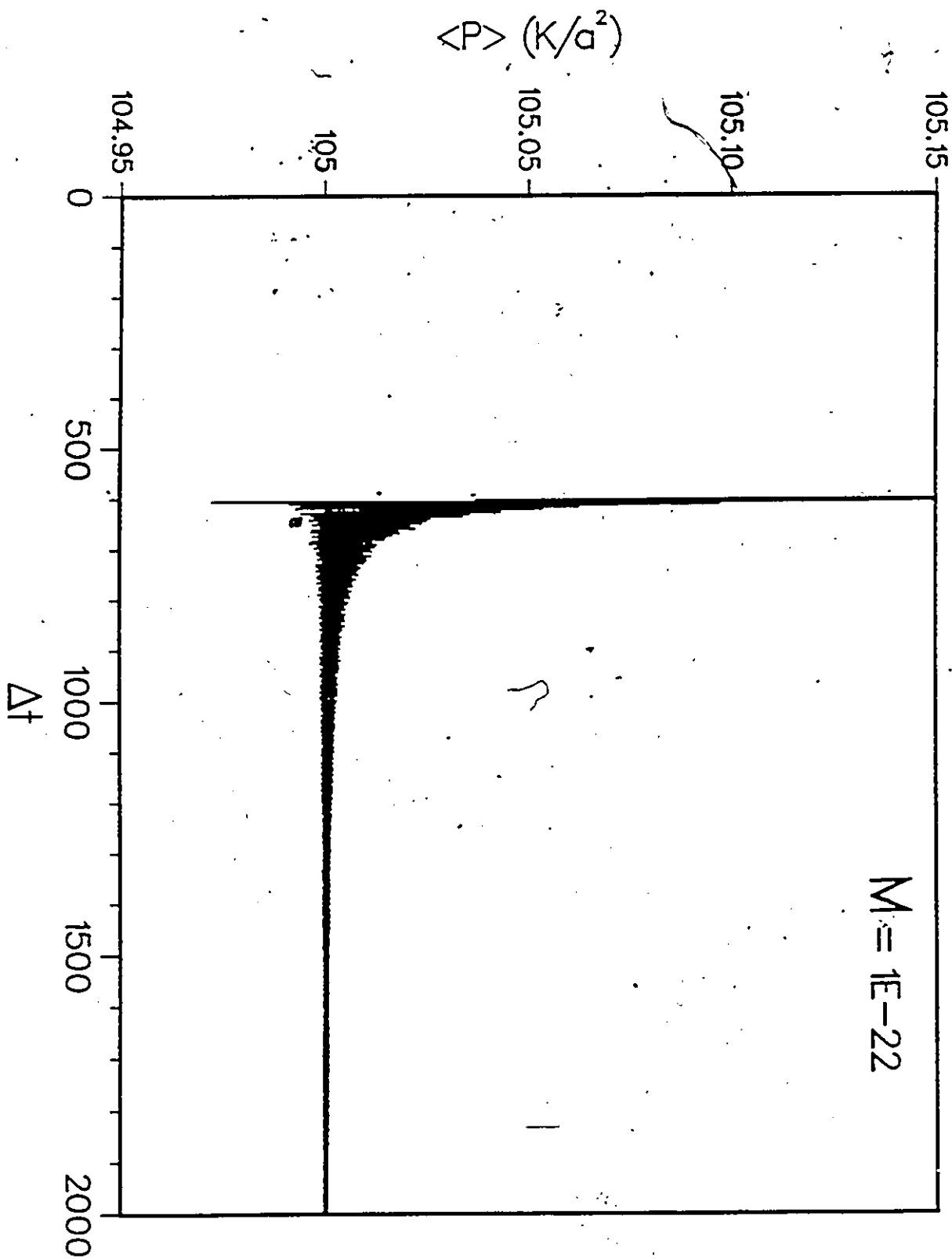


fig. 4.33 - Variations de l'énergie en fonction du temps pour une simulation dans laquelle on a effectué un changement de masse effective. On observe également les effets de ce changement.

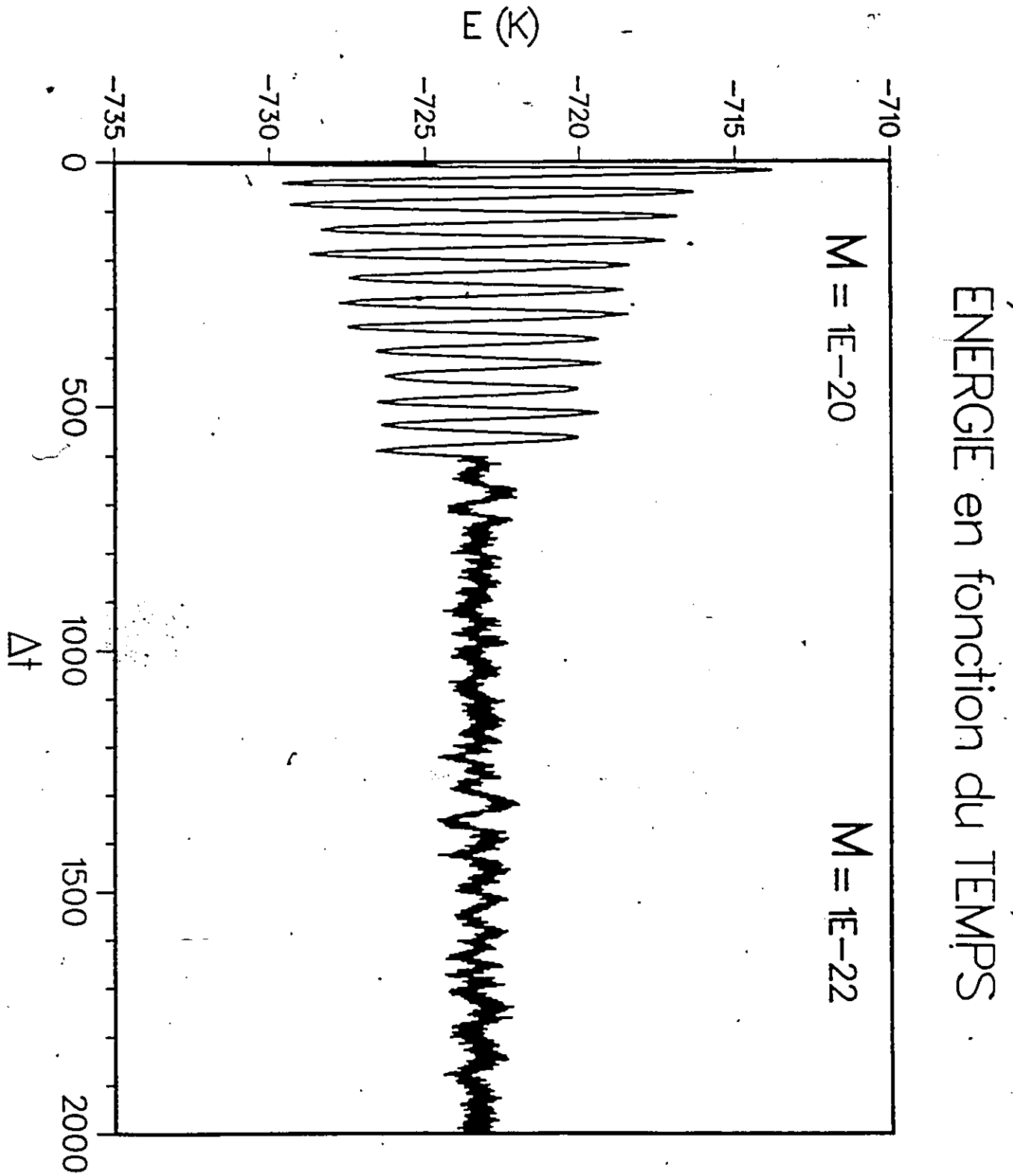
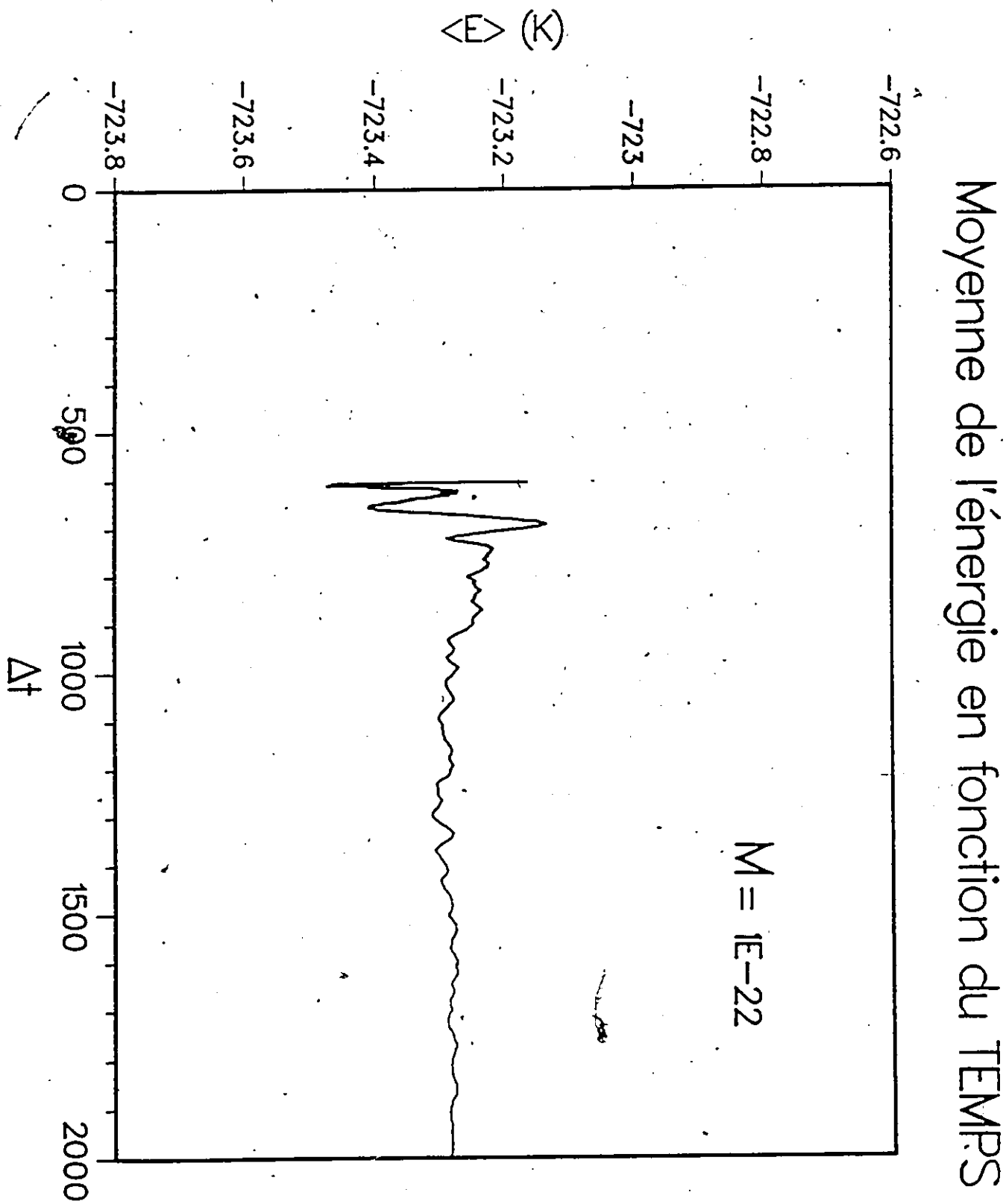


fig. 4.34 - Variations de la moyenne de l'énergie en fonction du temps. (Même si la moyenne de l'énergie n'a pas l'air de s'être stabilisée, il faut tenir compte de l'échelle des énergies, et aussi que les variations sont moins régulières que celles observées dans la pression ou le paramètre de maille).



Paramètre de maille en fonction du TEMPS

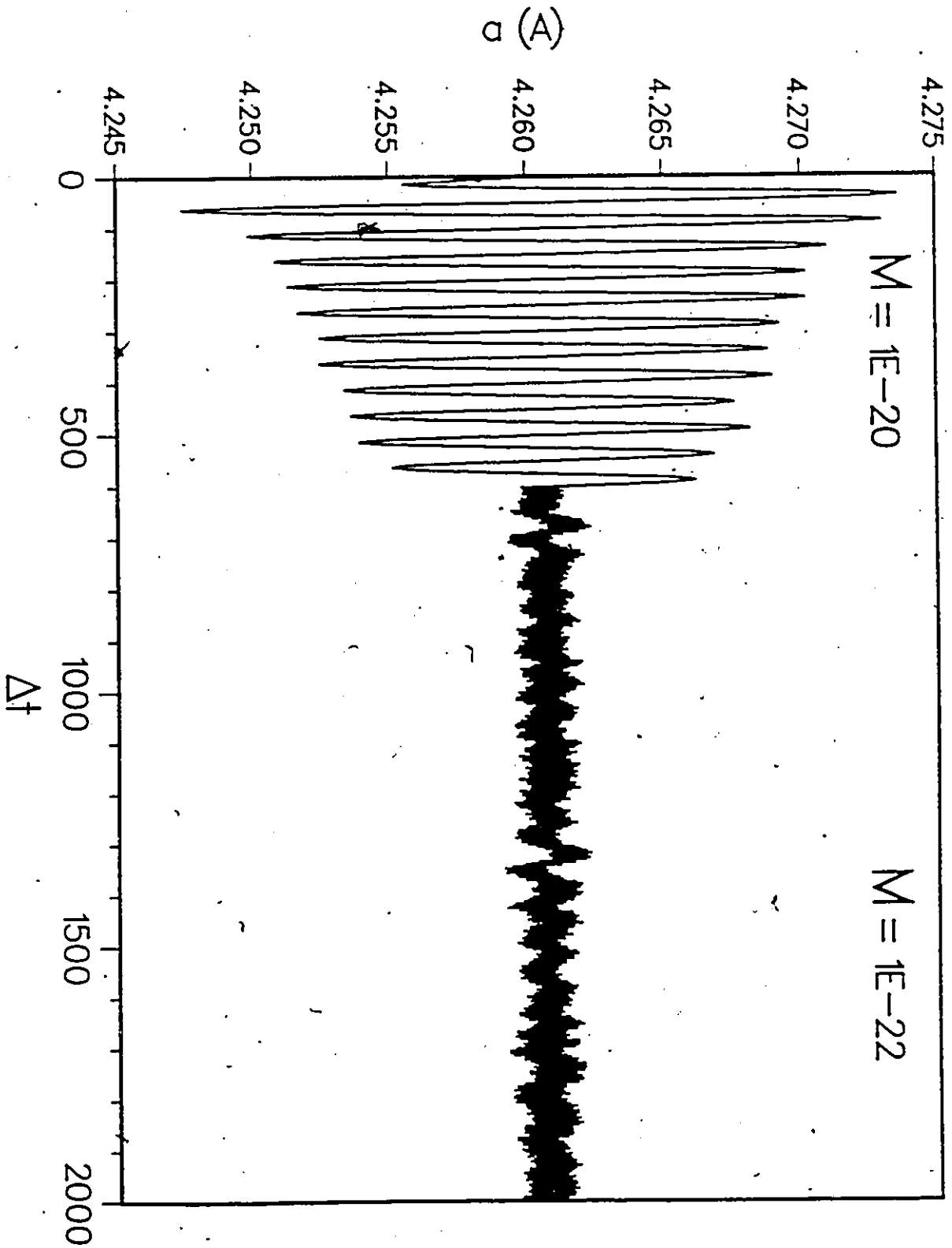


fig. 4.35 - Paramètre de maille en fonction du temps

fig. 4.36 - Moyenne du paramètre de maille en fonction du temps

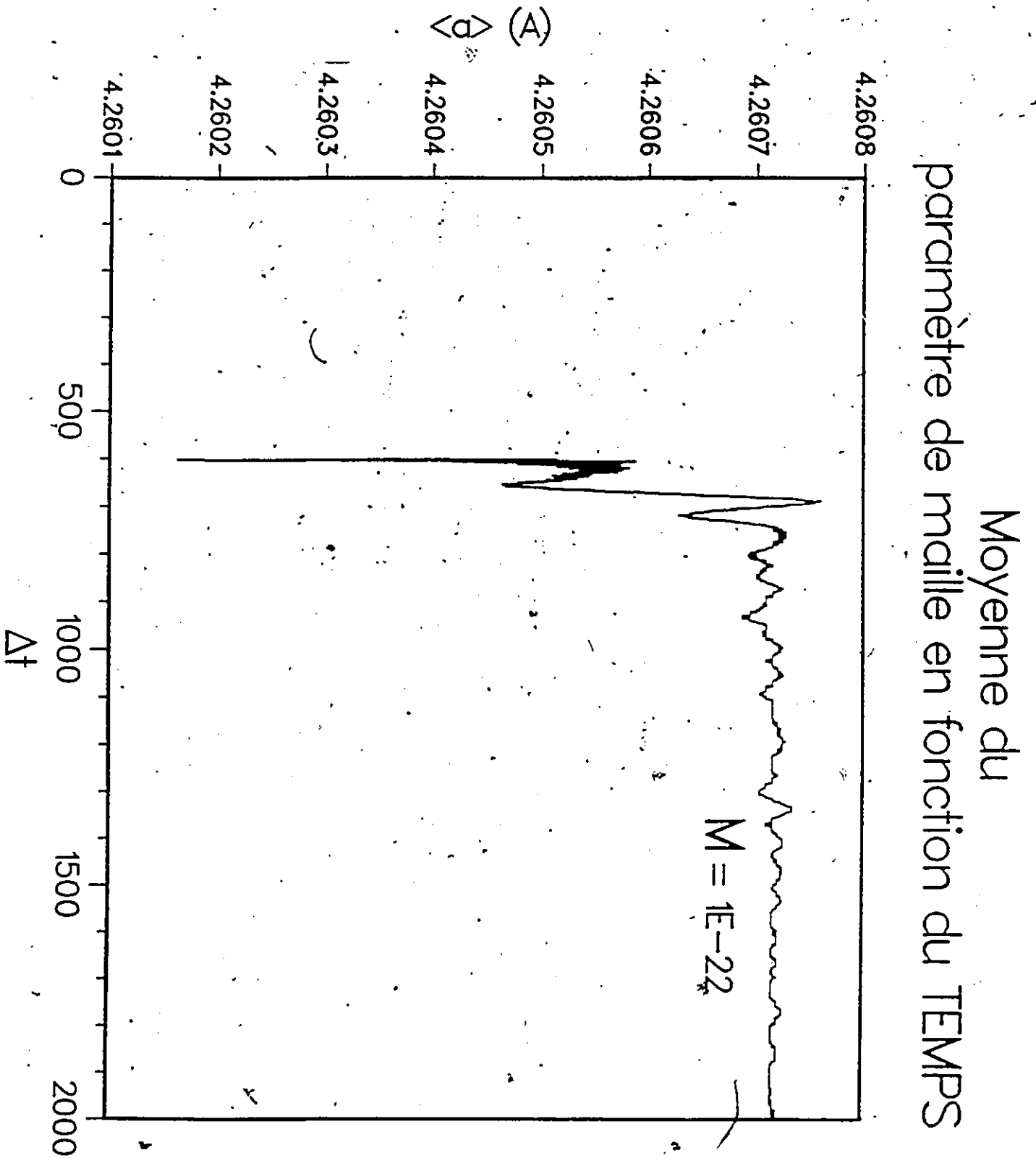


Fig. 5.1 - Monolacune dans un réseau de paramètre de maille $a = 4,26 \text{ \AA}$
 $T = 10 \text{ K}$.

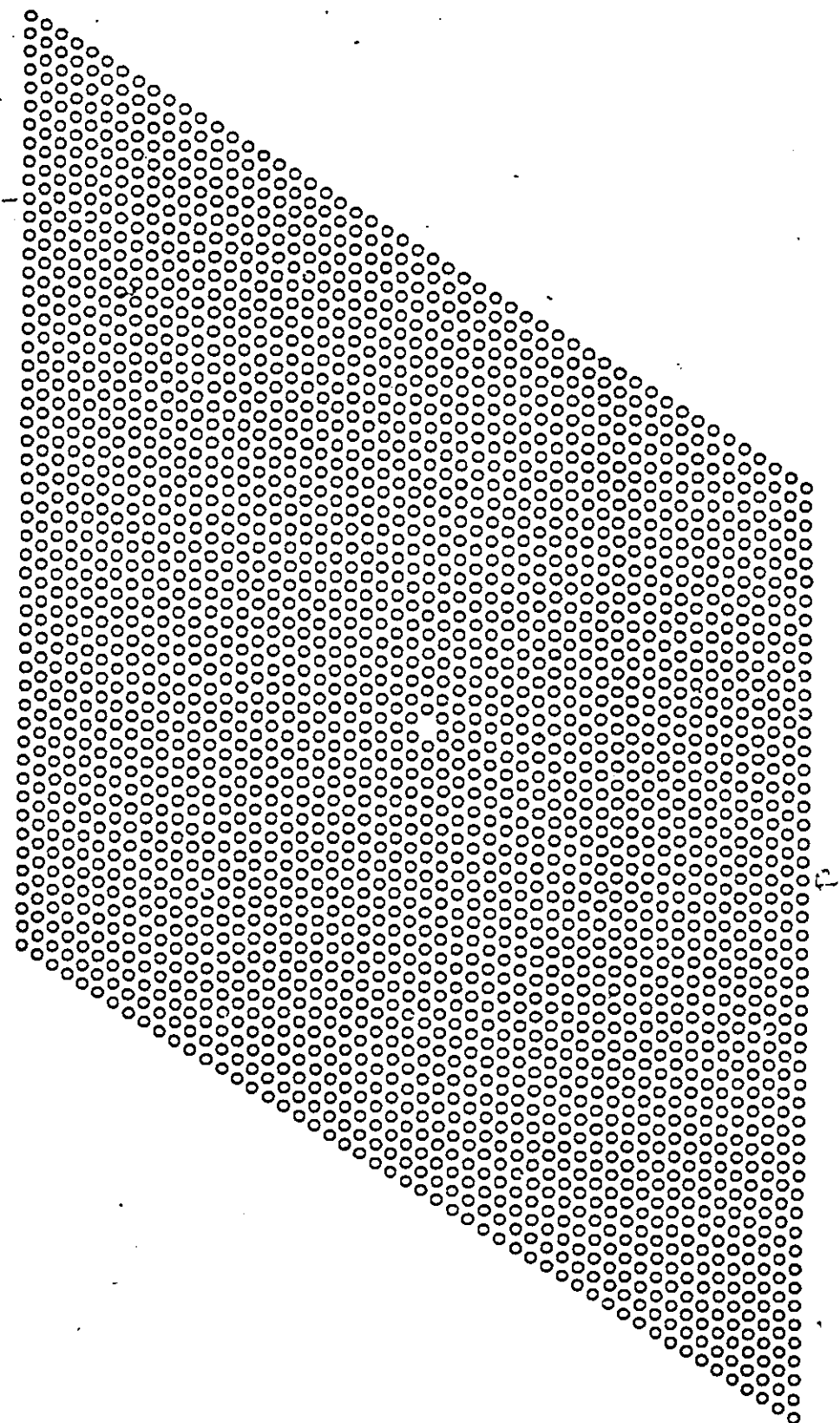


fig. 5.2 - Trilacune dans le même réseau que précédemment à $T = 10$ K. Il est à noter que l'on obtient la trilacune alignée qu'à très basse température. Ceci est dû au fait que le réseau est comprimé, et que les 2 configurations sont très proches énergétiquement parlant.

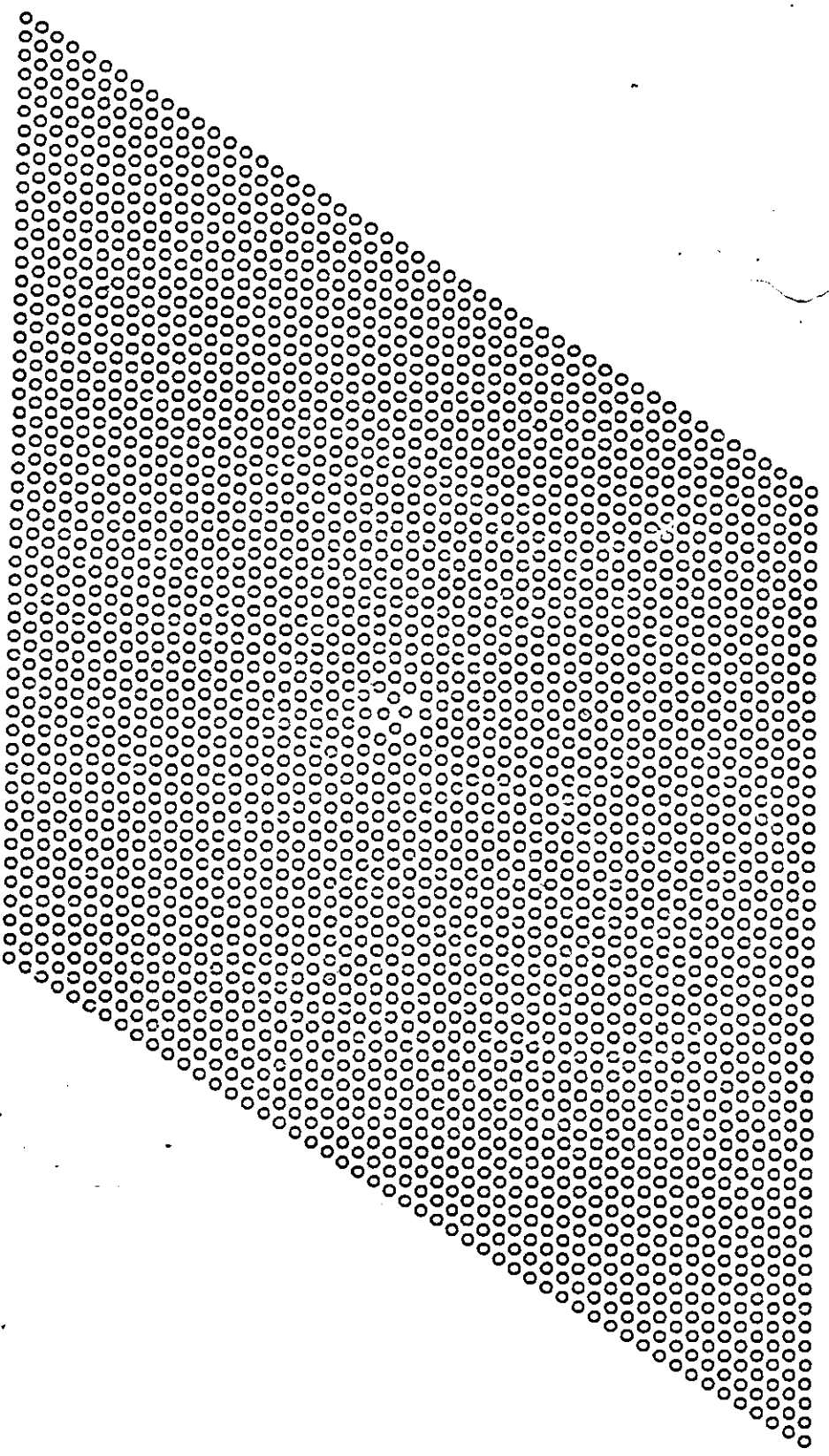
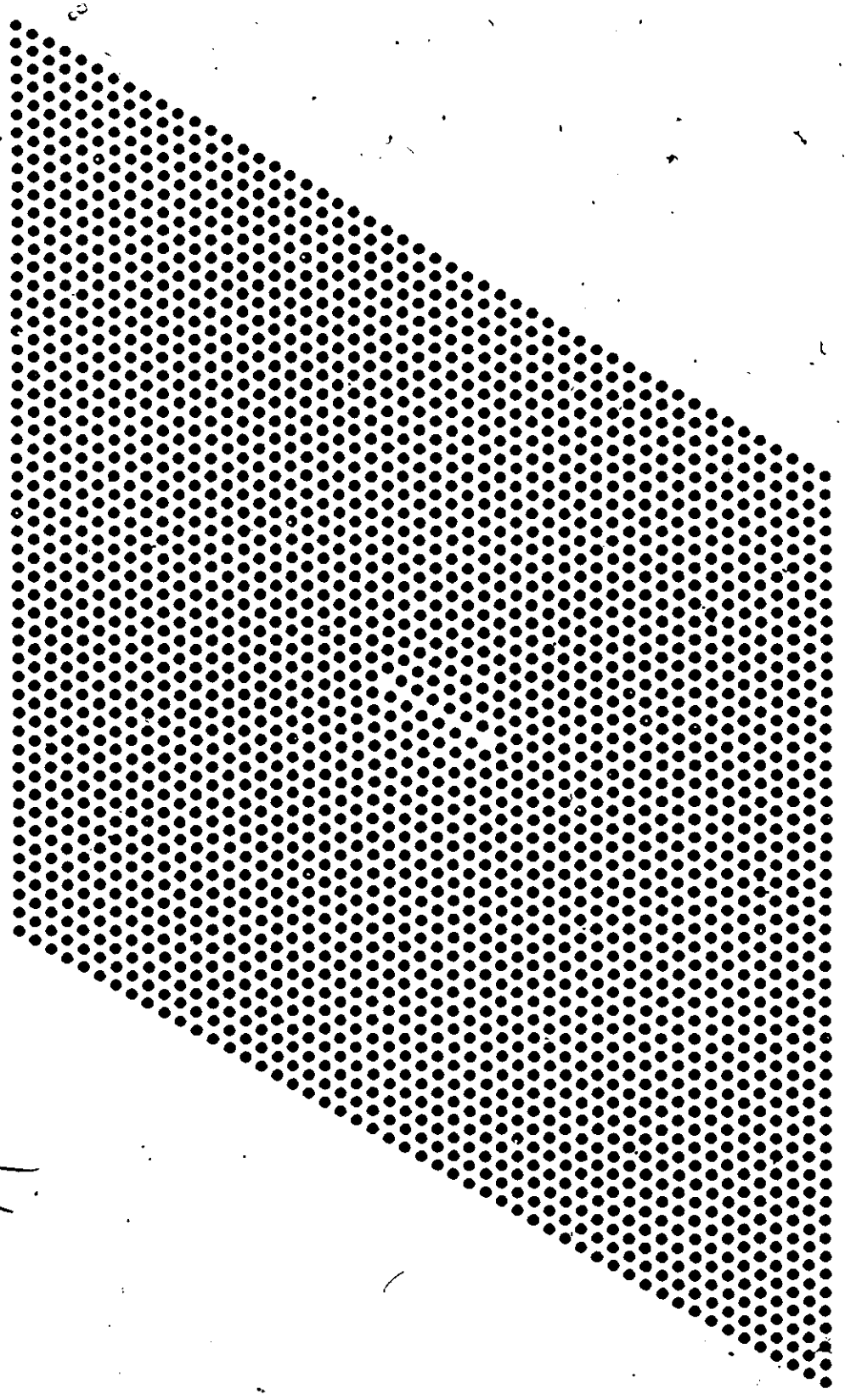


Fig. 5.3 - Dipôle de dislocation de 7 paramètres de maille de longueur
($a = 4,26 \text{ \AA}$, $T = 10 \text{ K}$). Le dipôle commence déjà à se refermer à cette longueur.
Ceci est encore relié à la compression du réseau.



V

fig. 5.4 - Dipôle de dislocation de 11 paramètres de maille de longueur
($a = 4,26 \text{ \AA}$, $T = 10 \text{ K}$). Le dipôle est complètement refermé. De plus, on peut
voir qu'il a subi une rotation par rapport au réseau. Ceci indique que la force de
Peierls a été dépassée.

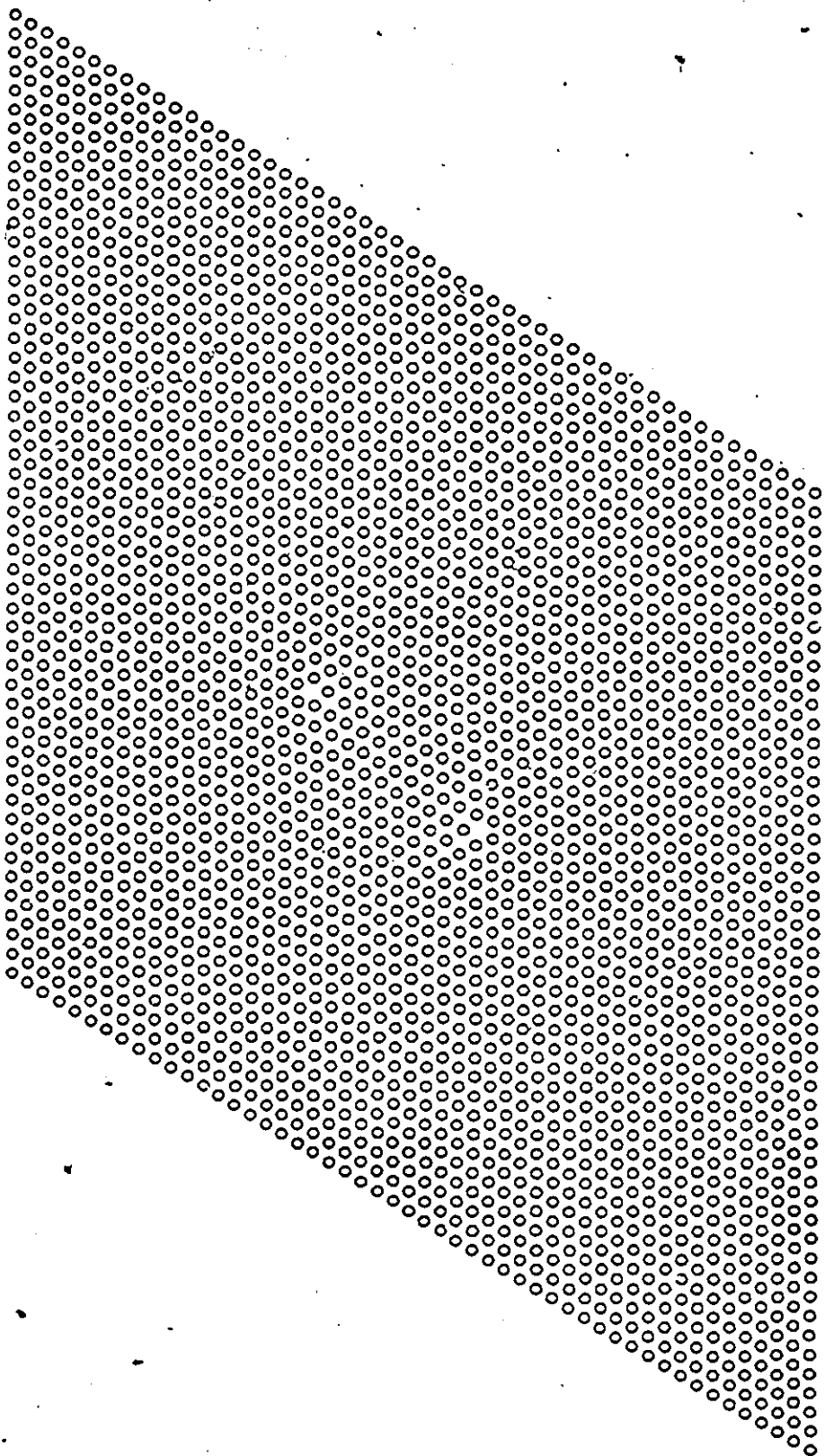


Fig. 5.5 - Dipôle de dislocation de 15 paramètres de maille de longueur
($a = 4,26 \text{ \AA}$, $T = 10 \text{ K}$). Les coeurs des dipôles interagissent encore plus faiblement.

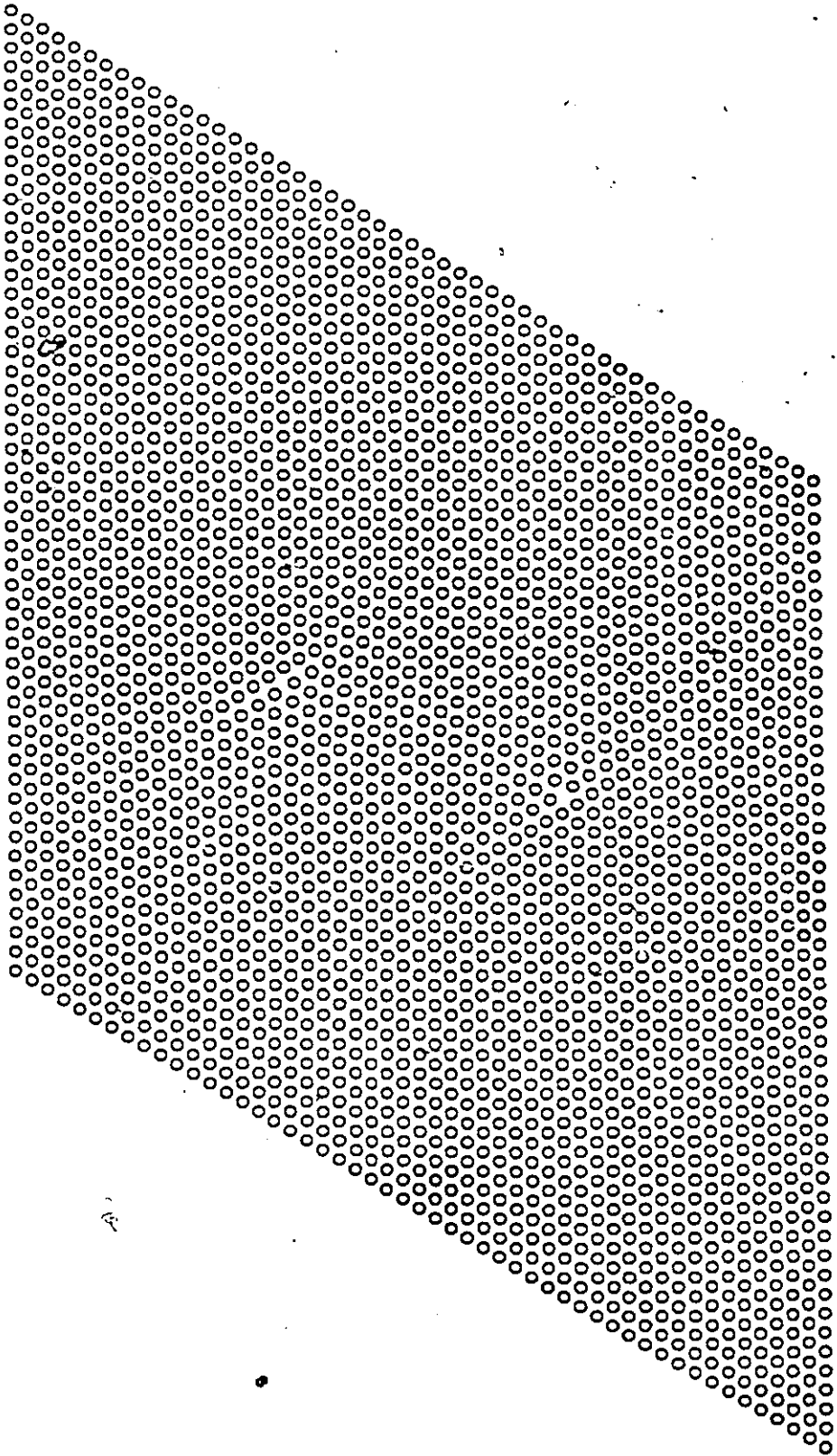


fig. 5.6 - Dipôle de dislocation de 21 paramètres de maille de longueur
($a = 4,26 \text{ \AA}$, $T = 10 \text{ K}$). Nous sommes ici presque en présence de 2 coeurs libres.
Il est à remarquer que la température n'est que de 10 K.

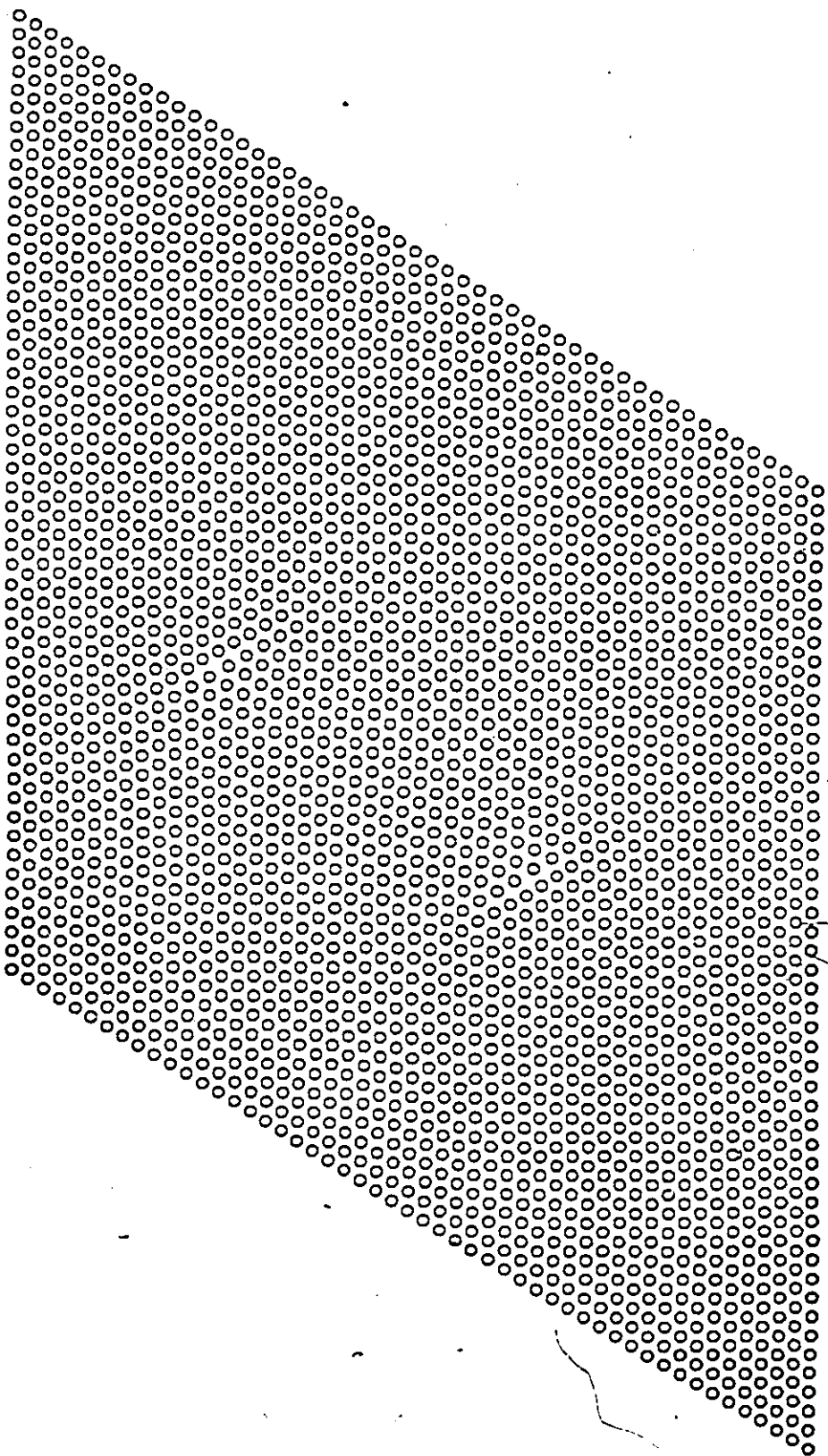


fig. 5.7 - Monolacune dans un réseau de paramètre de maille $a = 4,36 \text{ \AA}$
 $T = 10 \text{ K.}$

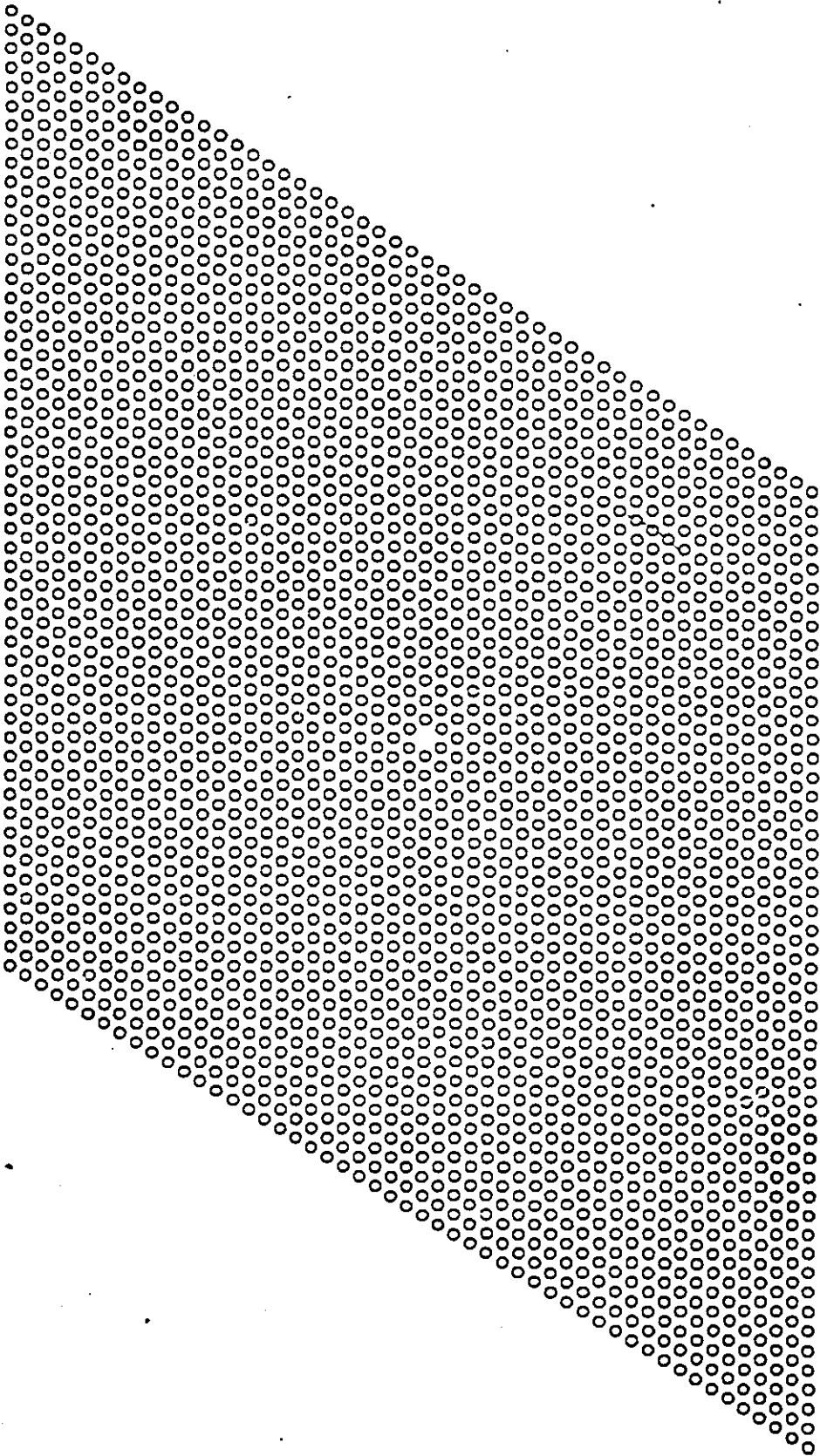


fig. 5.8 - Trilacune dans le même réseau que précédemment à $T = 10$ K. Cette fois, la trilacune alignée est observée jusqu'à des températures d'environ 60 K.

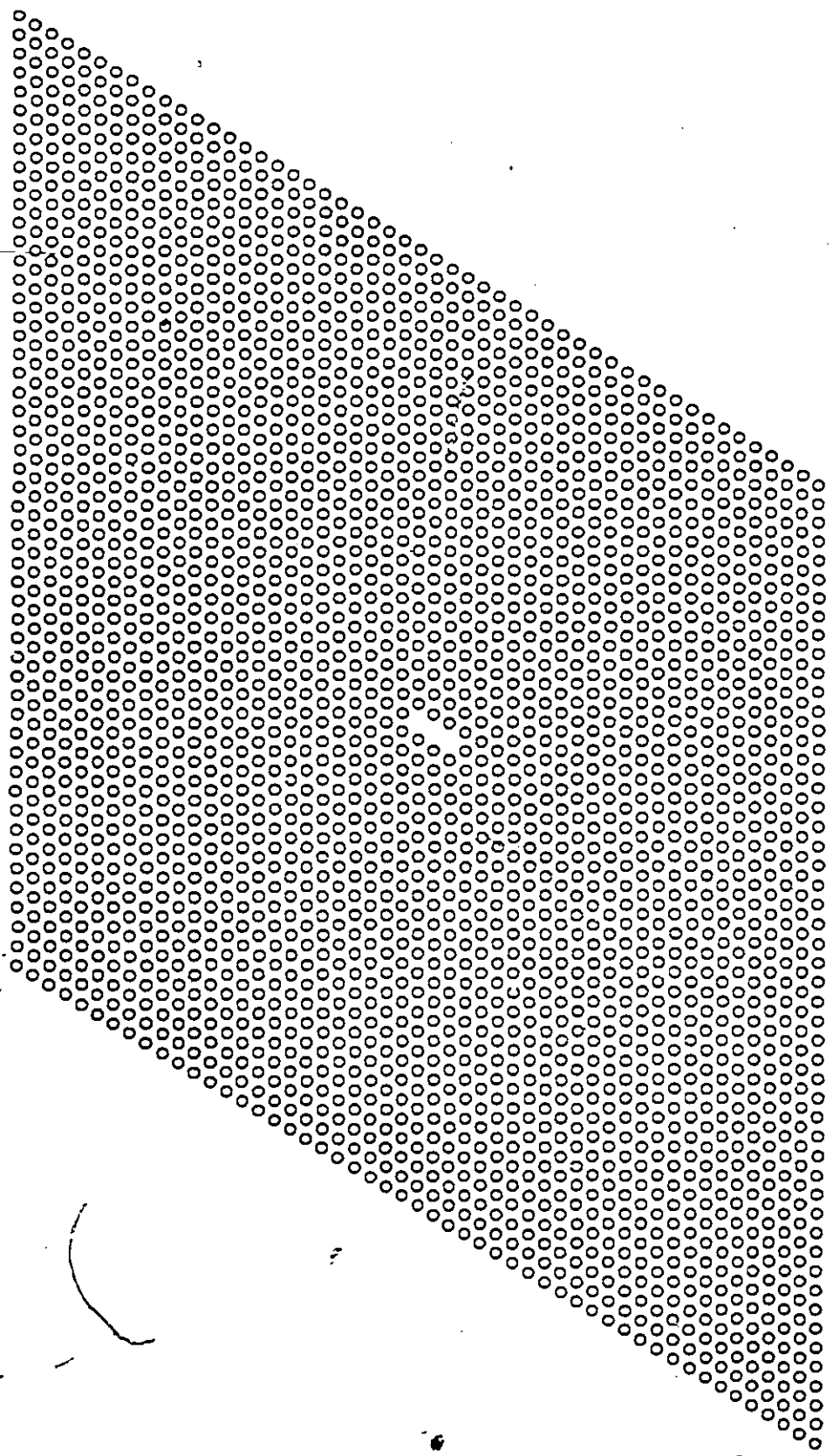


fig. 5.9 - Dipôle de dislocation de 7 paramètres de maille de longueur avec $a = 4,36 \text{ \AA}$ à $T = 10 \text{ K}$. Le dipôle se referme beaucoup moins que son équivalent dans le réseau compressé. Ceci est également relié au fait, que le réseau est presque à l'équilibre.

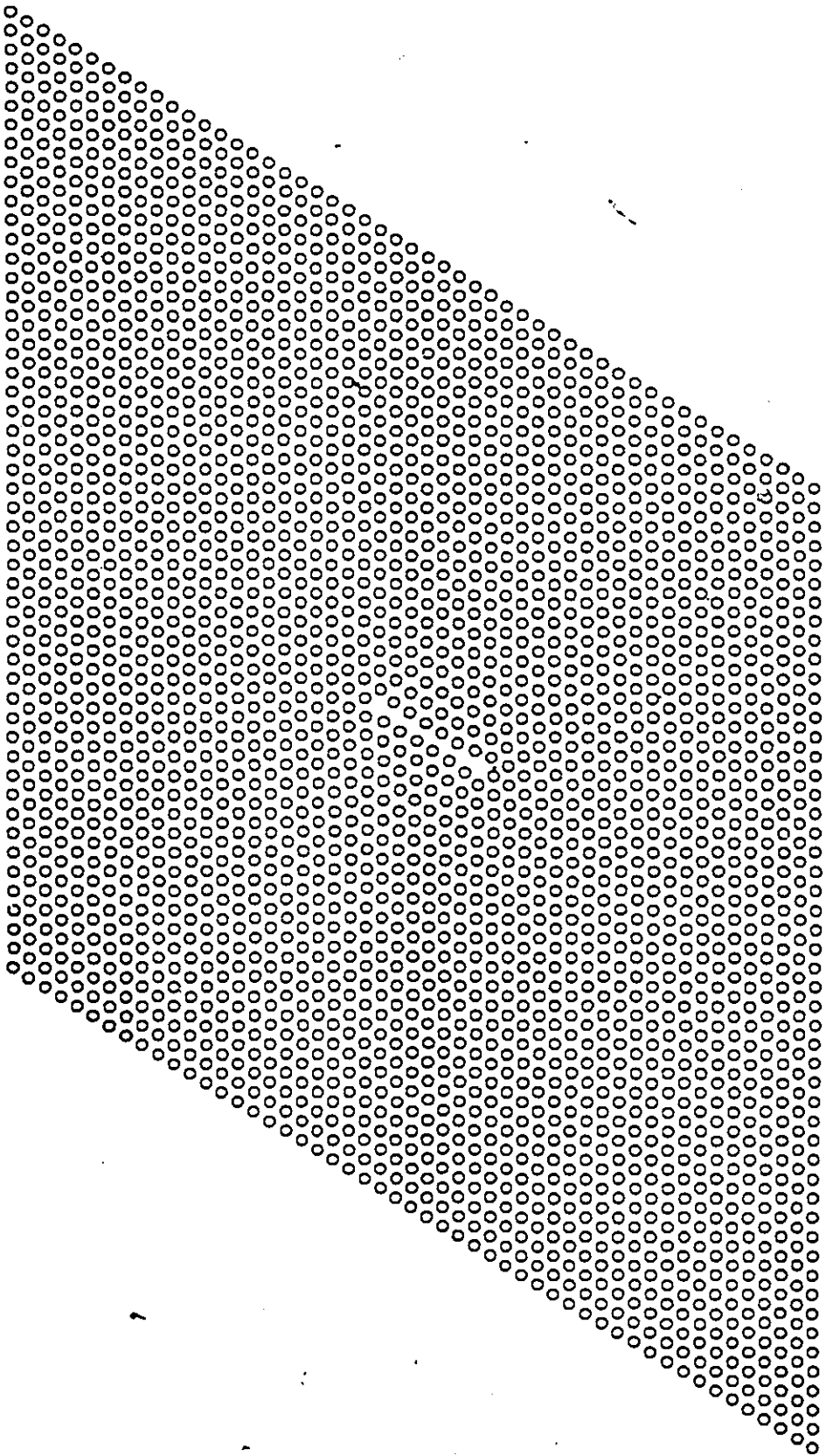


Fig. 5.10 - Dipôle de dislocation de 11 paramètres de maille de longueur
($a = 4,36 \text{ \AA}$, $T = 10 \text{ K}$). Le dipôle commence à se refermer. Il n'a pas encore subi
une rotation par rapport au réseau. Ceci indique que la force de Peierls n'est pas
encore dépassée.

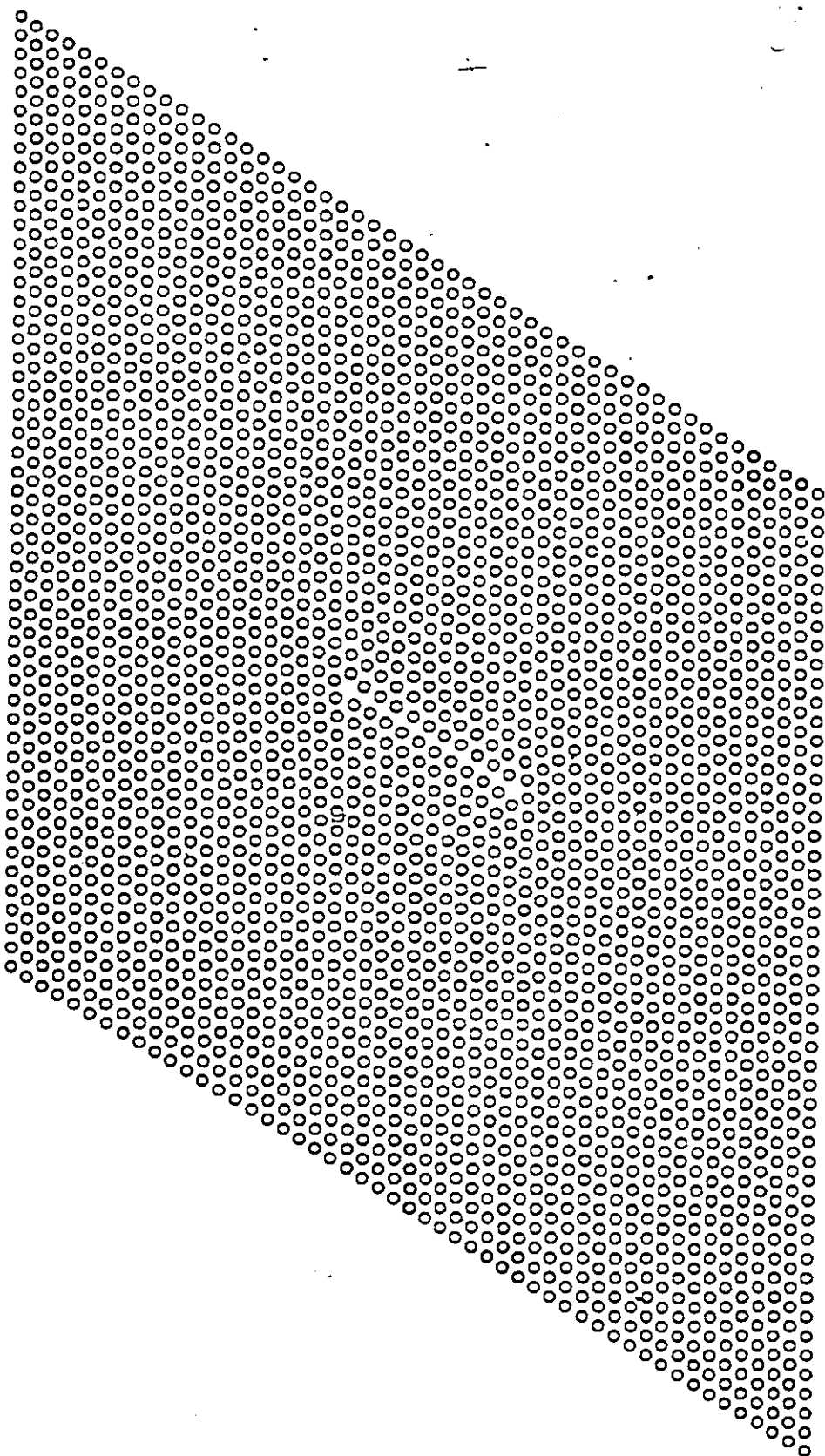


fig. 5.11 - Dipôle de dislocation de 15 paramètres de maille de longueur
($a = 4,36 \text{ \AA}$, $T = 10 \text{ K}$). Le dipôle est complètement refermé Les coeurs des dipôles
interagissent alors plus faiblement.

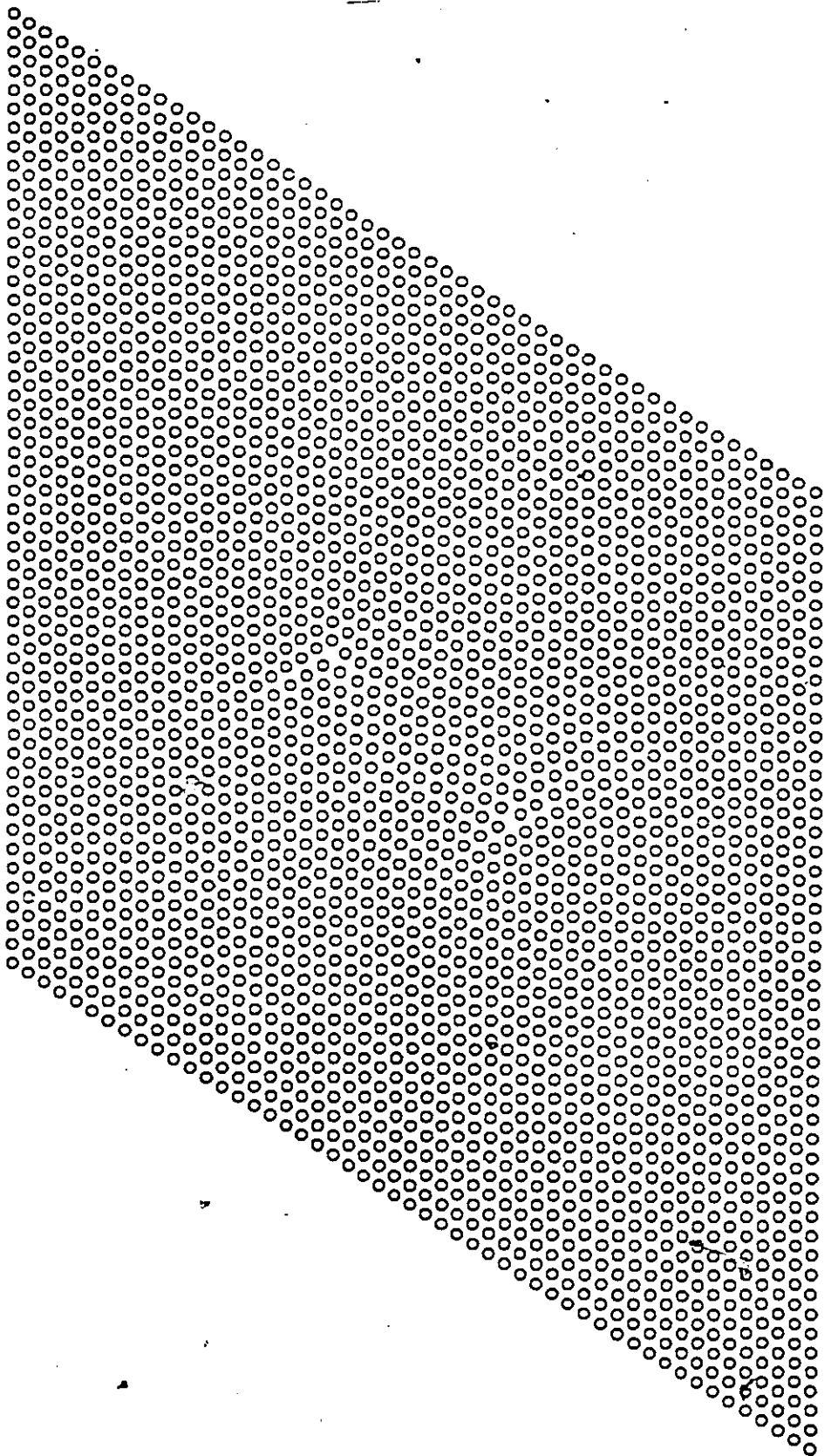


fig. 5.12 - Dipôle de dislocation de 21 paramètres de maille de longueur
($a = 4,36 \text{ \AA}$, $T = 10 \text{ K}$). Nous sommes ici presque en présence de 2 coeurs presque
libres. Là encore on remarquera que la température n'est que de 10 K.

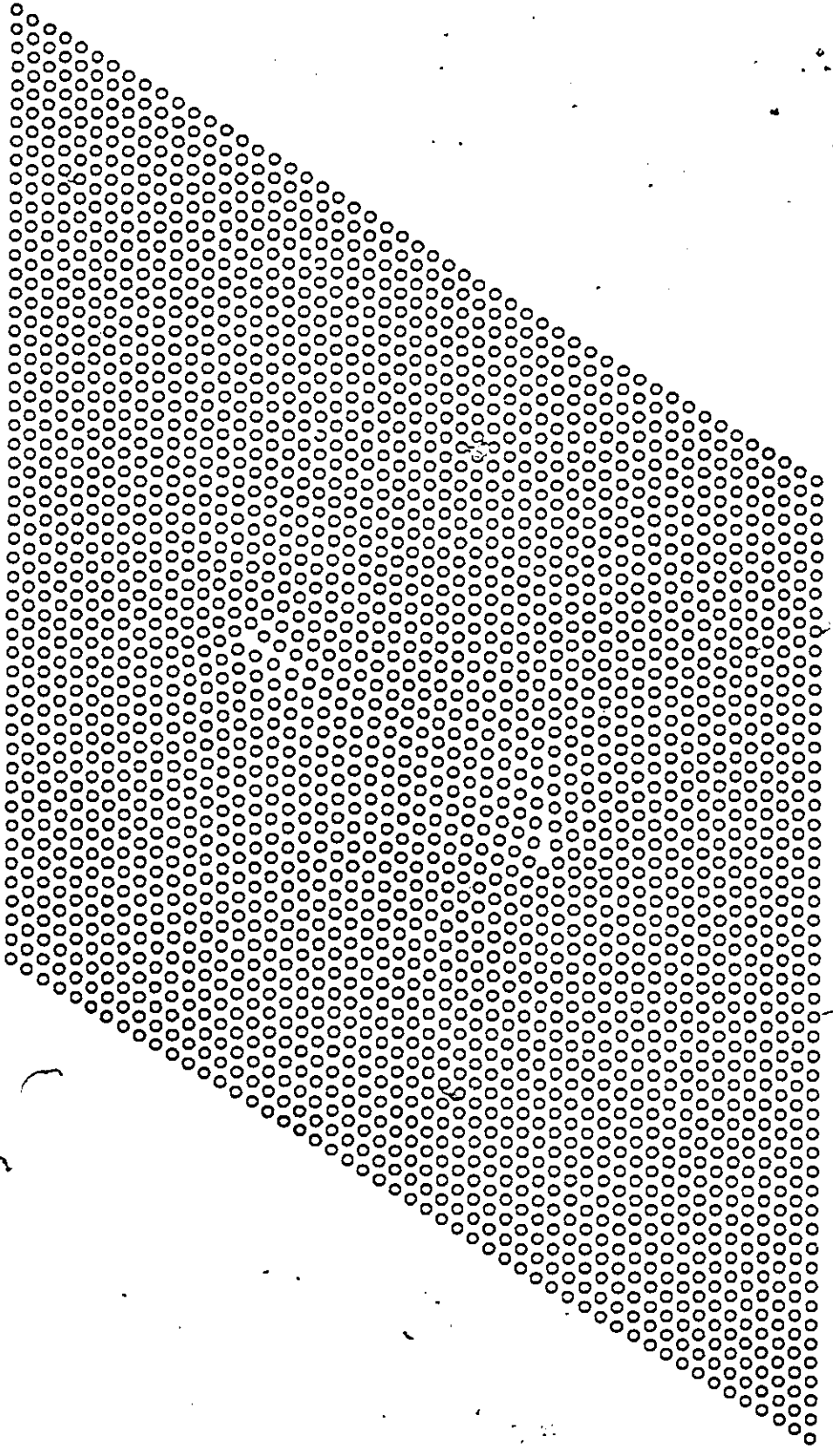
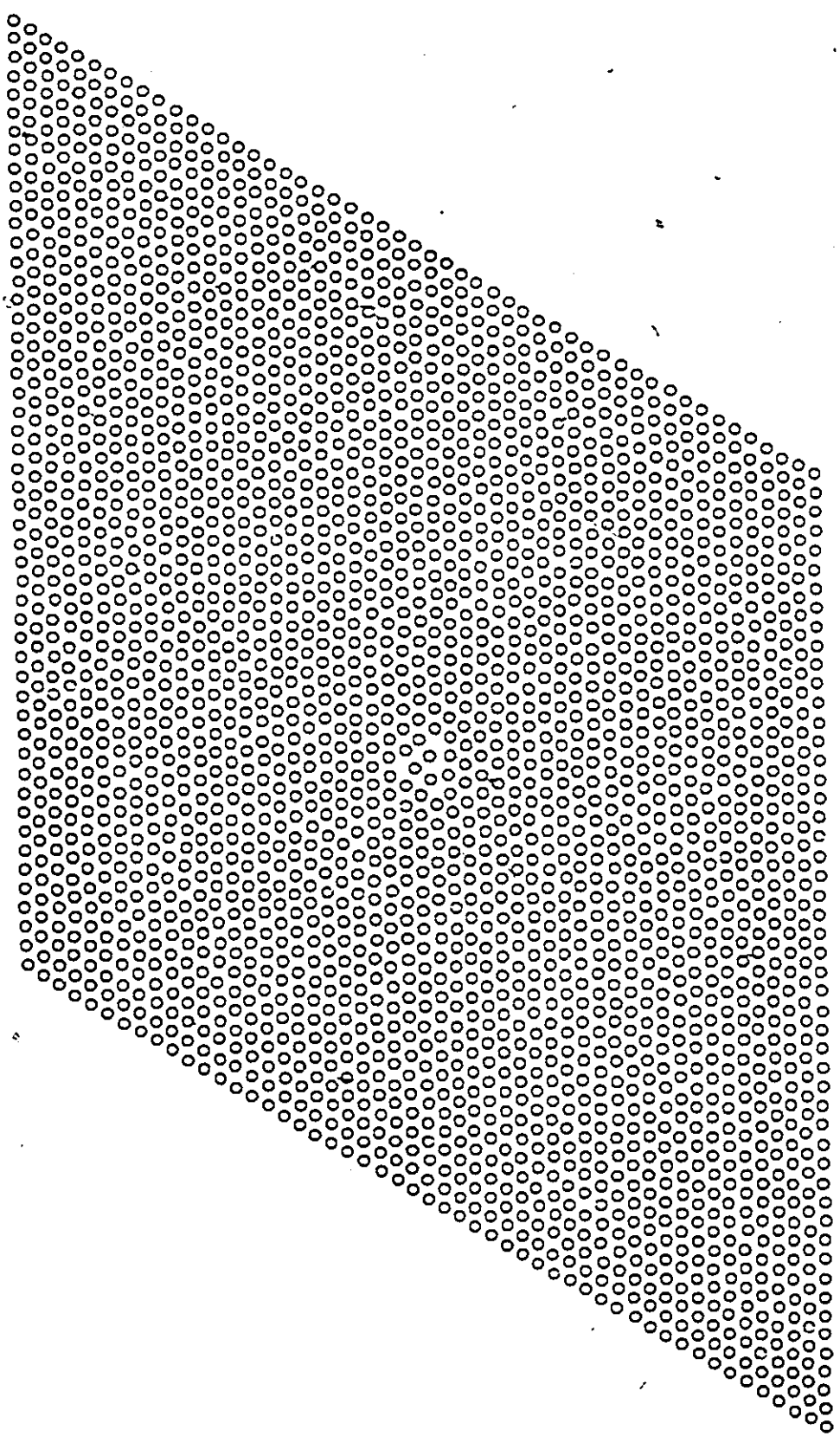


fig. 5.13 - Configuration trigonale de la trilacune correspondant à la figure 5.8.
La température est de 70 K. Il faut donc que le système soit soumis à suffisamment
de vibrations, pour que cette configuration apparaisse. Cela nous indique que la
différence d'énergie est assez importante.



Courbes isothermes de la pression en fonction du paramètre de maille

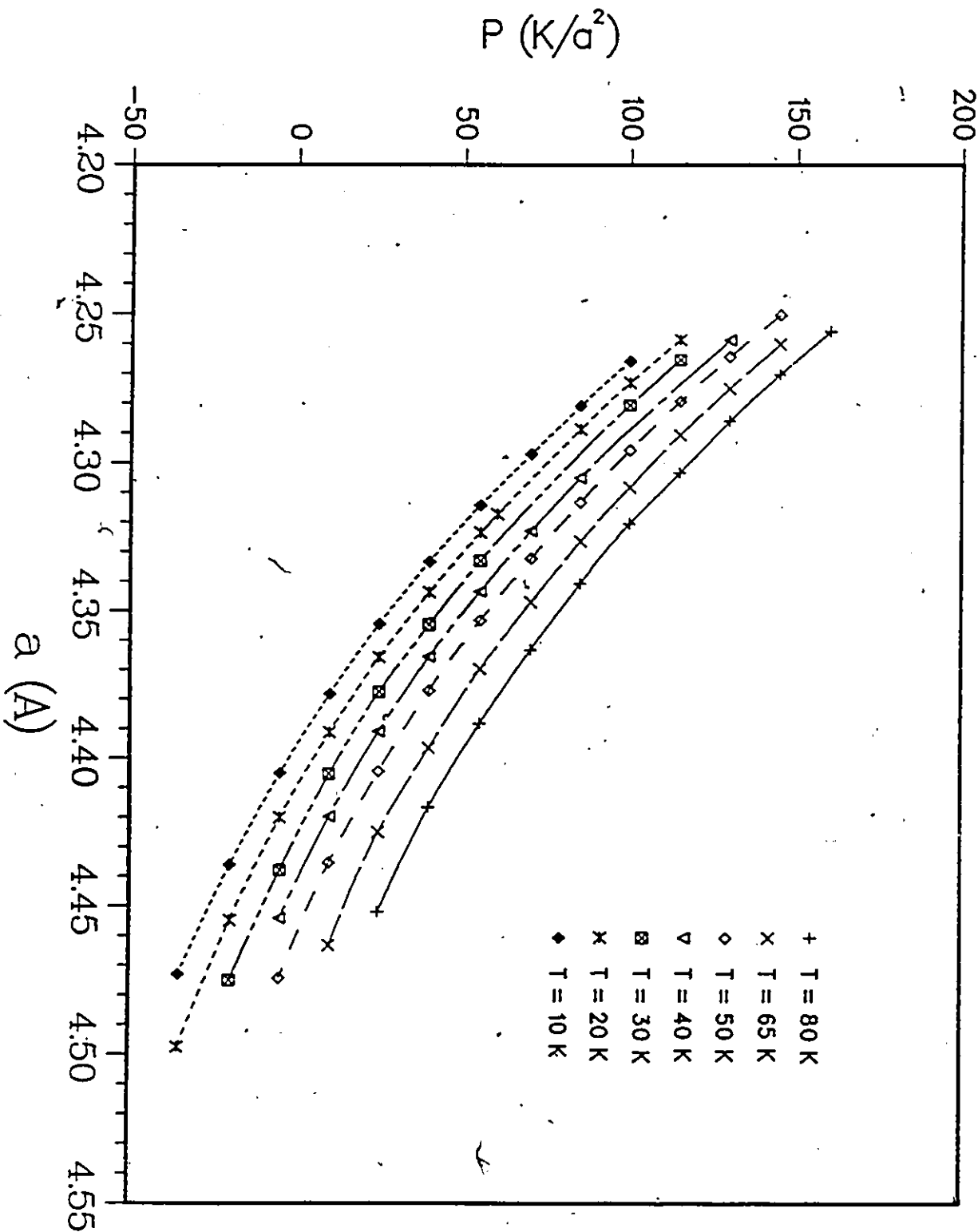


fig. 5.14 - Courbes isothermes de la pression en fonction du paramètre de maille.

fig. 5.15 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 5$ K. Les courbes suivent de très près celles de Joos et Duesbery jusqu'à $a = 4,41$. On suppose que passé cette valeur, les énergies diminuent à cause du fait que le réseau est dilaté, et qu'il y a beaucoup plus d'états métastables - ceci étant dû à la forme du potentiel dans cette région.

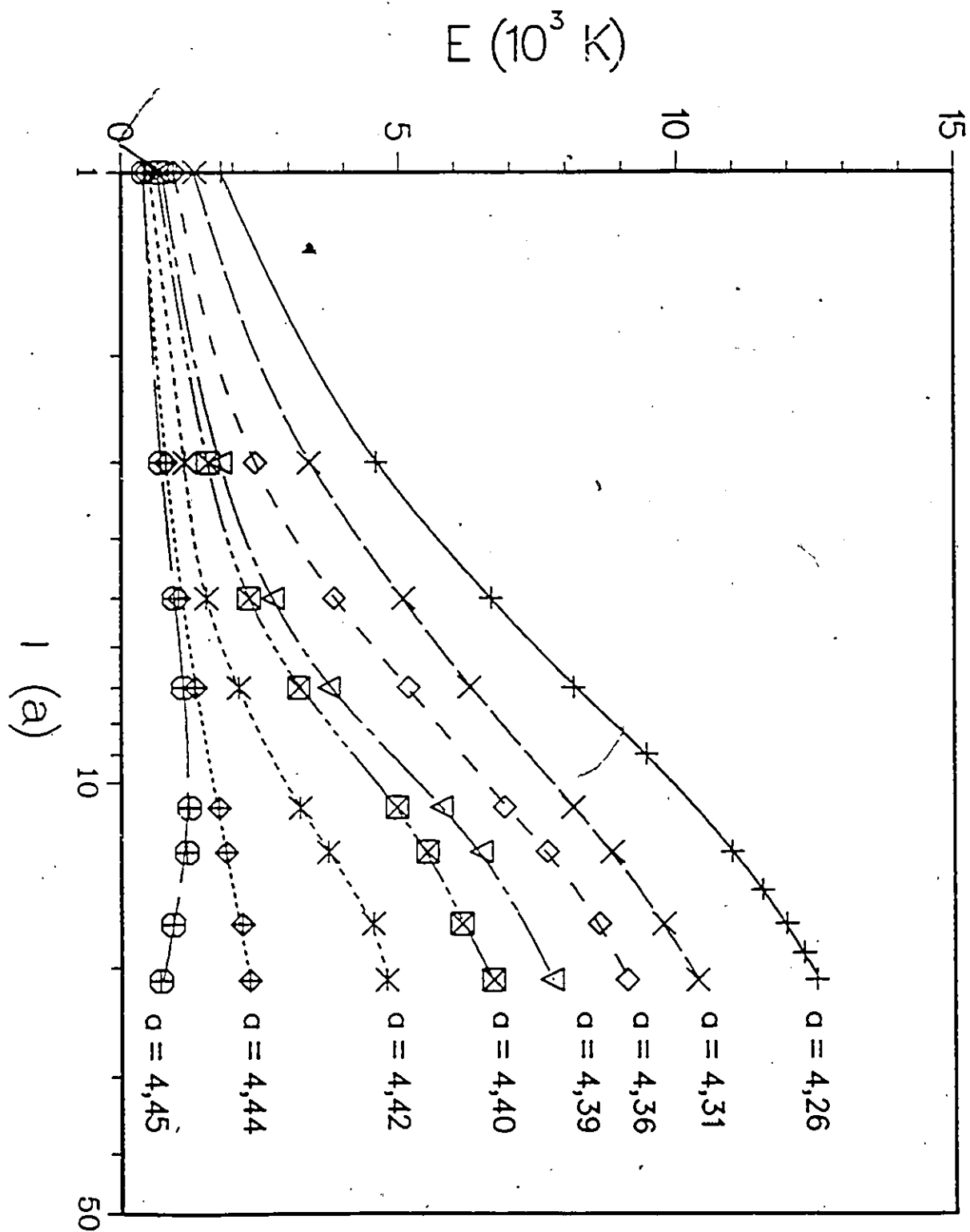


fig. 5.16 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 10$ K. Les courbes d'énergie suivent assez exactement celles de Joos et Duesbery, avec, toutefois, un léger décalage vers le haut.

Énergie des défauts à 10 K

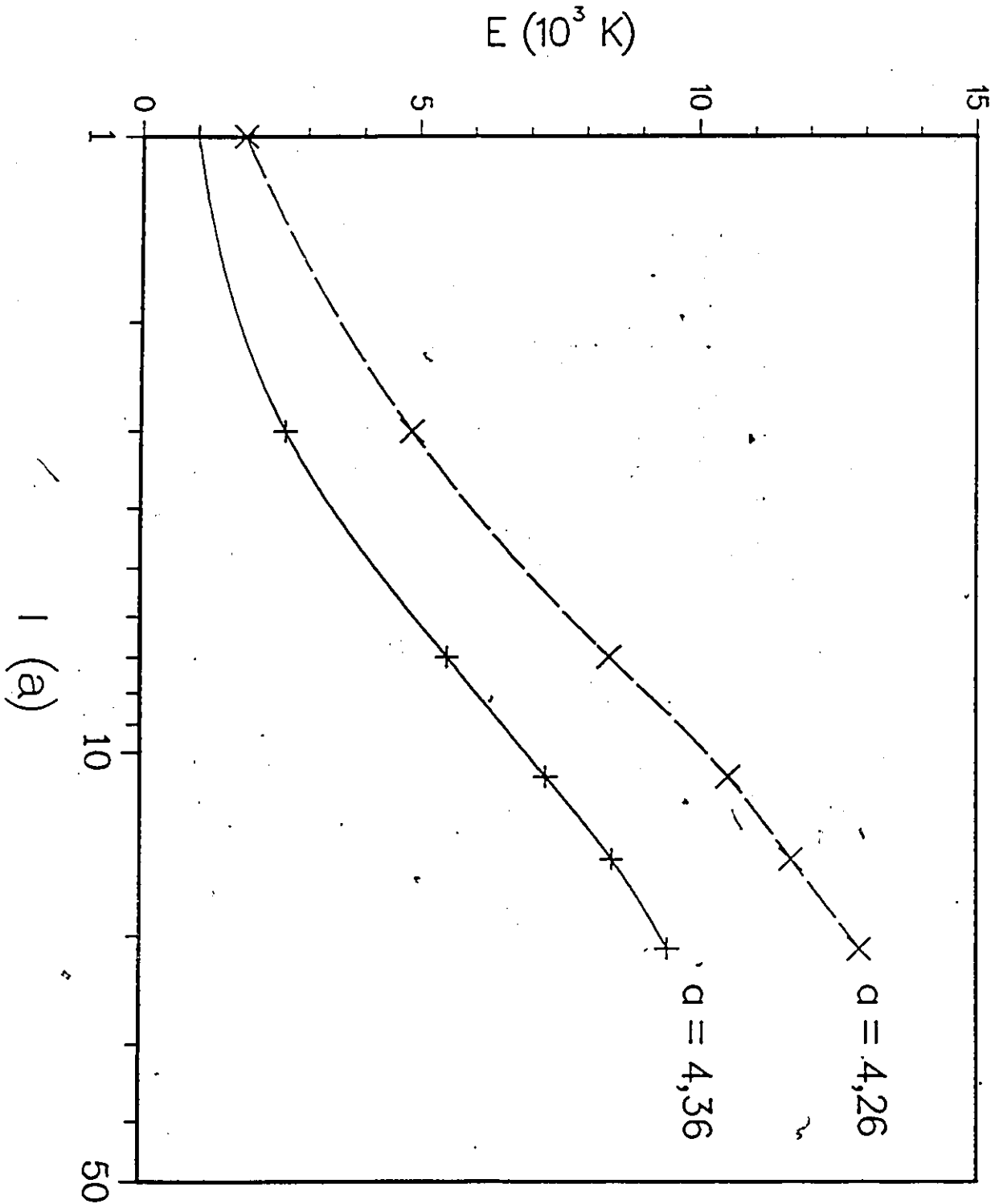
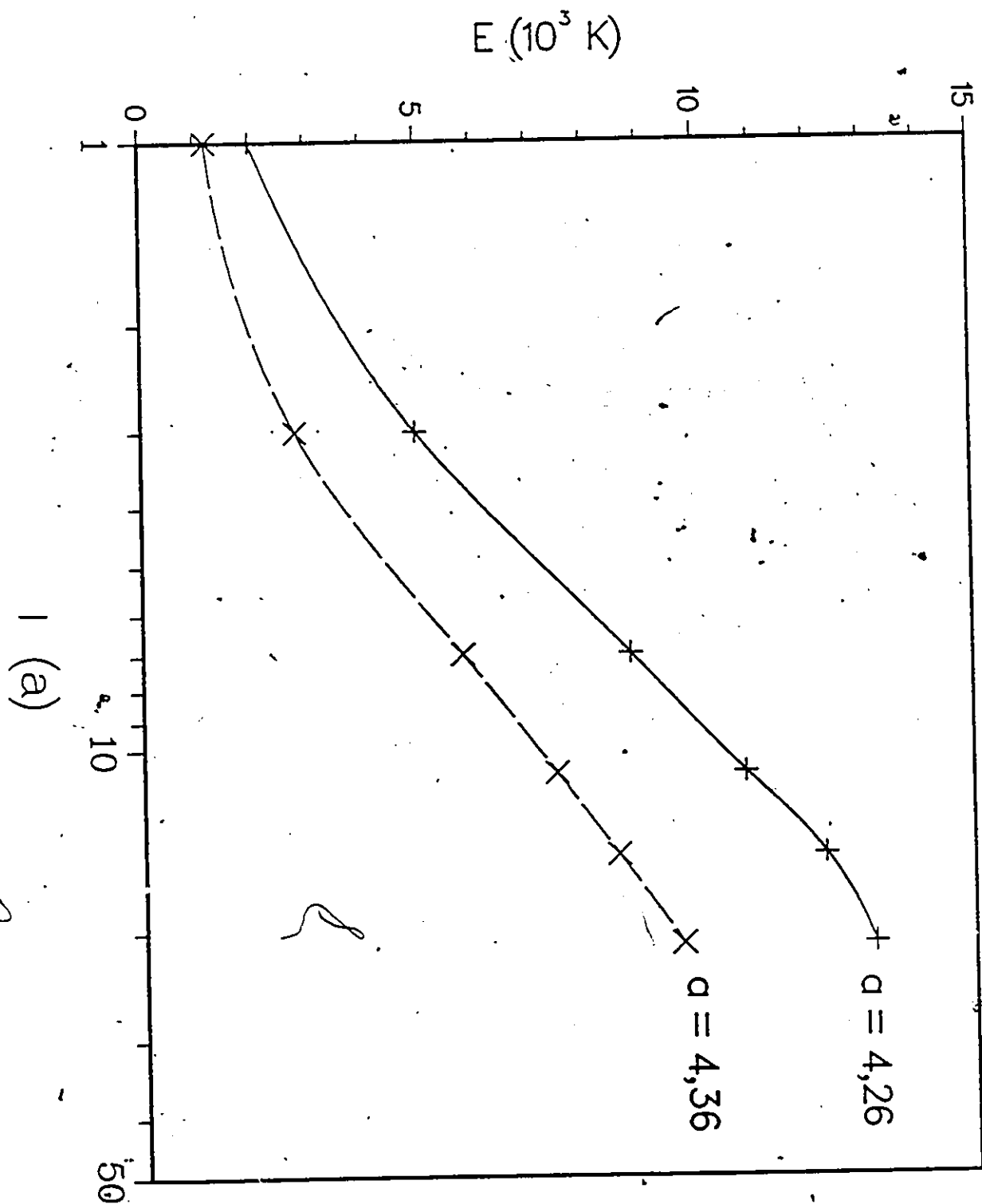


fig. 5.17 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 20$ K. Les courbes d'énergie suivent encore celles de Joos et Duesbery, avec, toutefois, un décalage plus important vers le haut.



Énergie des défauts à 20 K

fig. 5.18 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à T = 30 K.

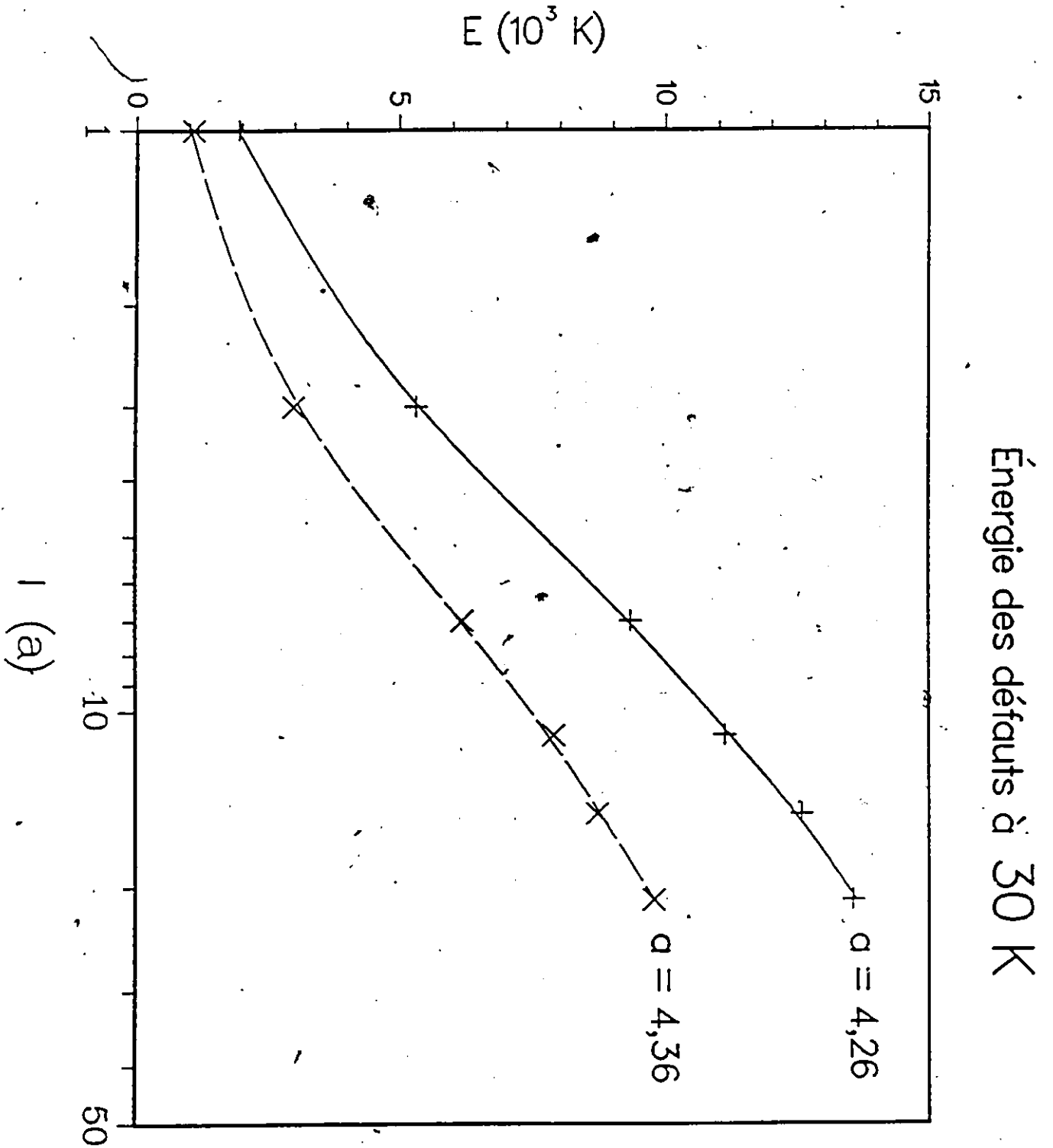


fig. 5.19 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à $T = 40$ K.

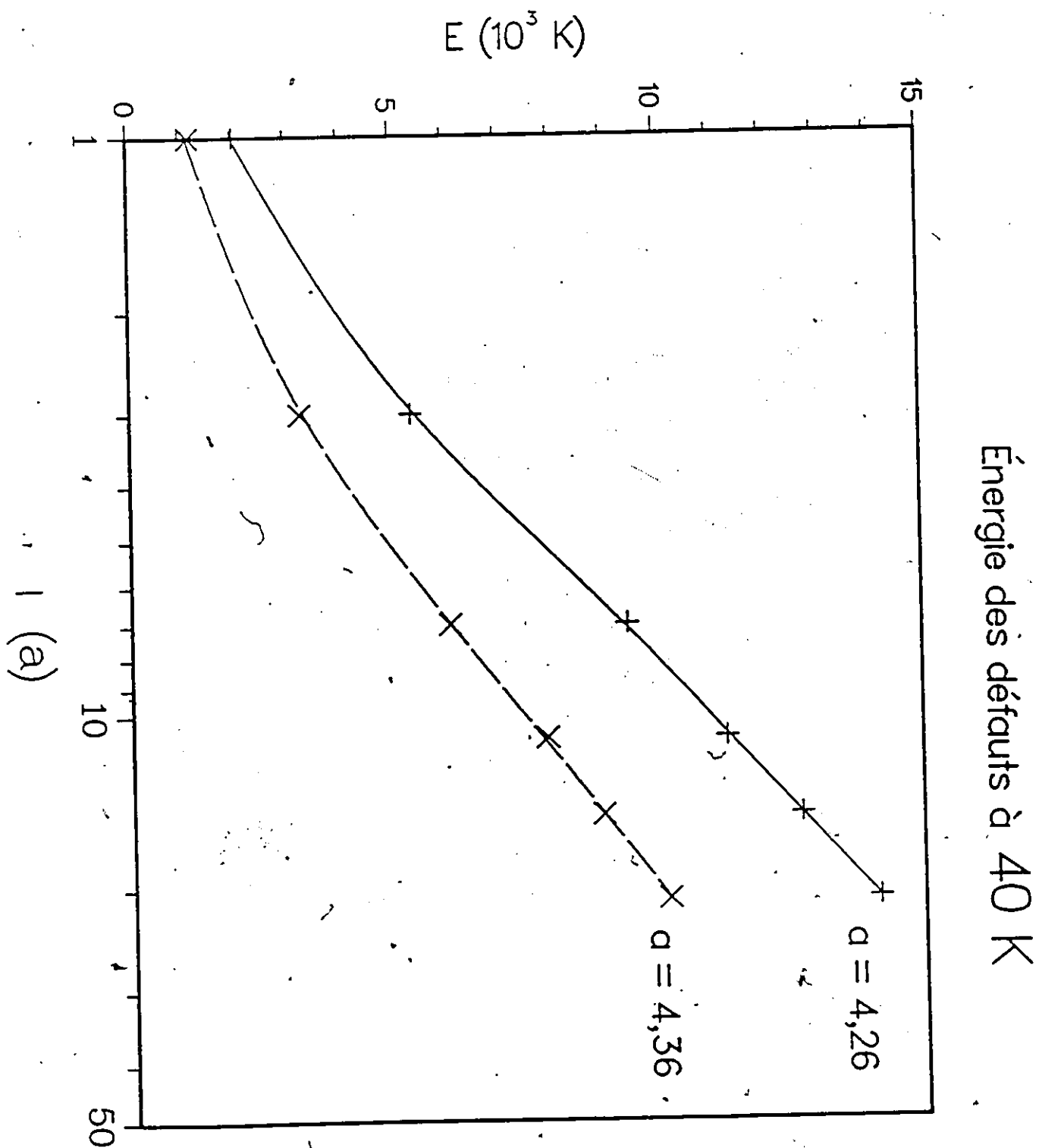


fig. 5.20 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille, a) et du paramètre de maille à $T = 50$ K.

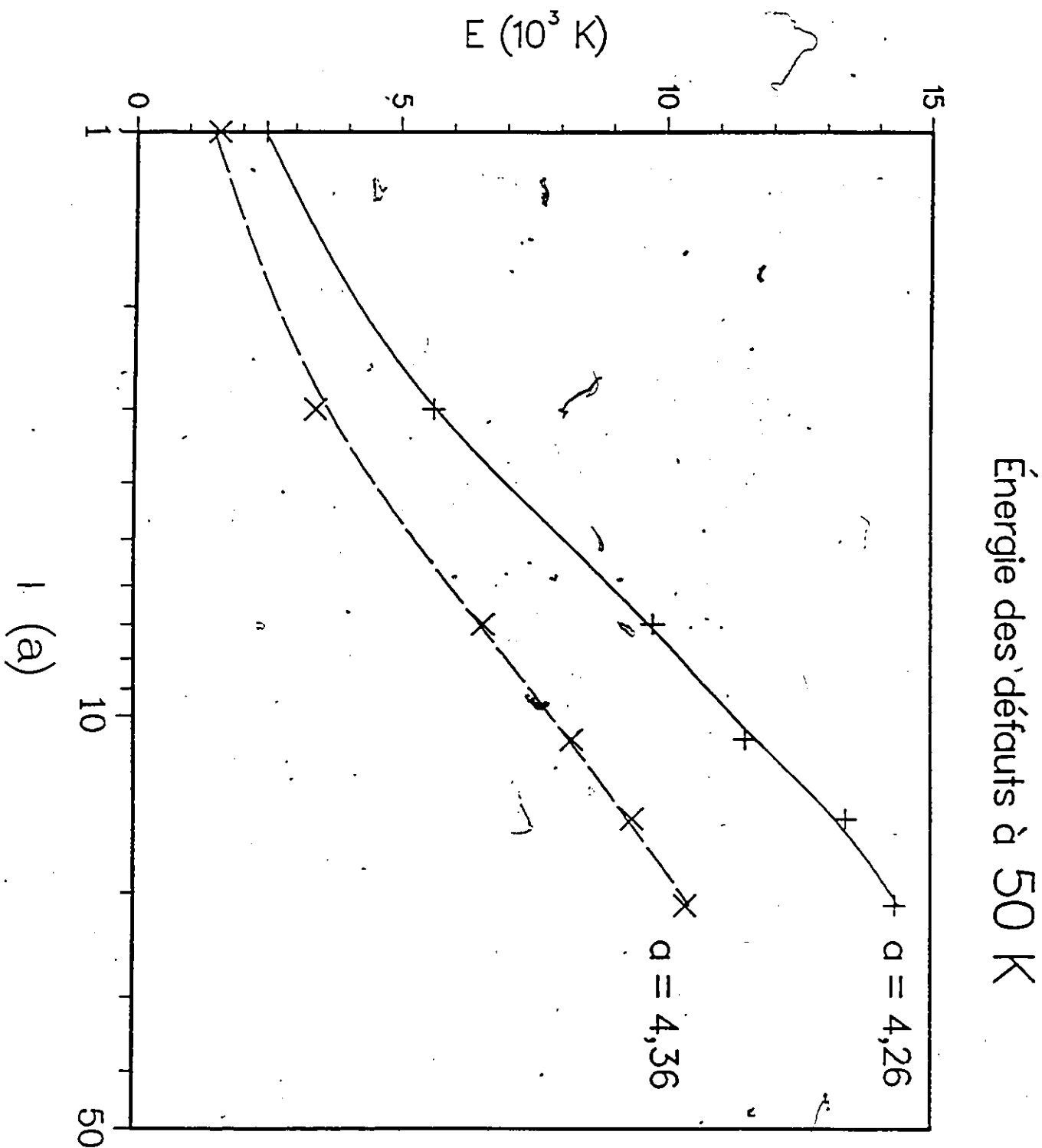


fig. 5.21 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à T = 60 K.

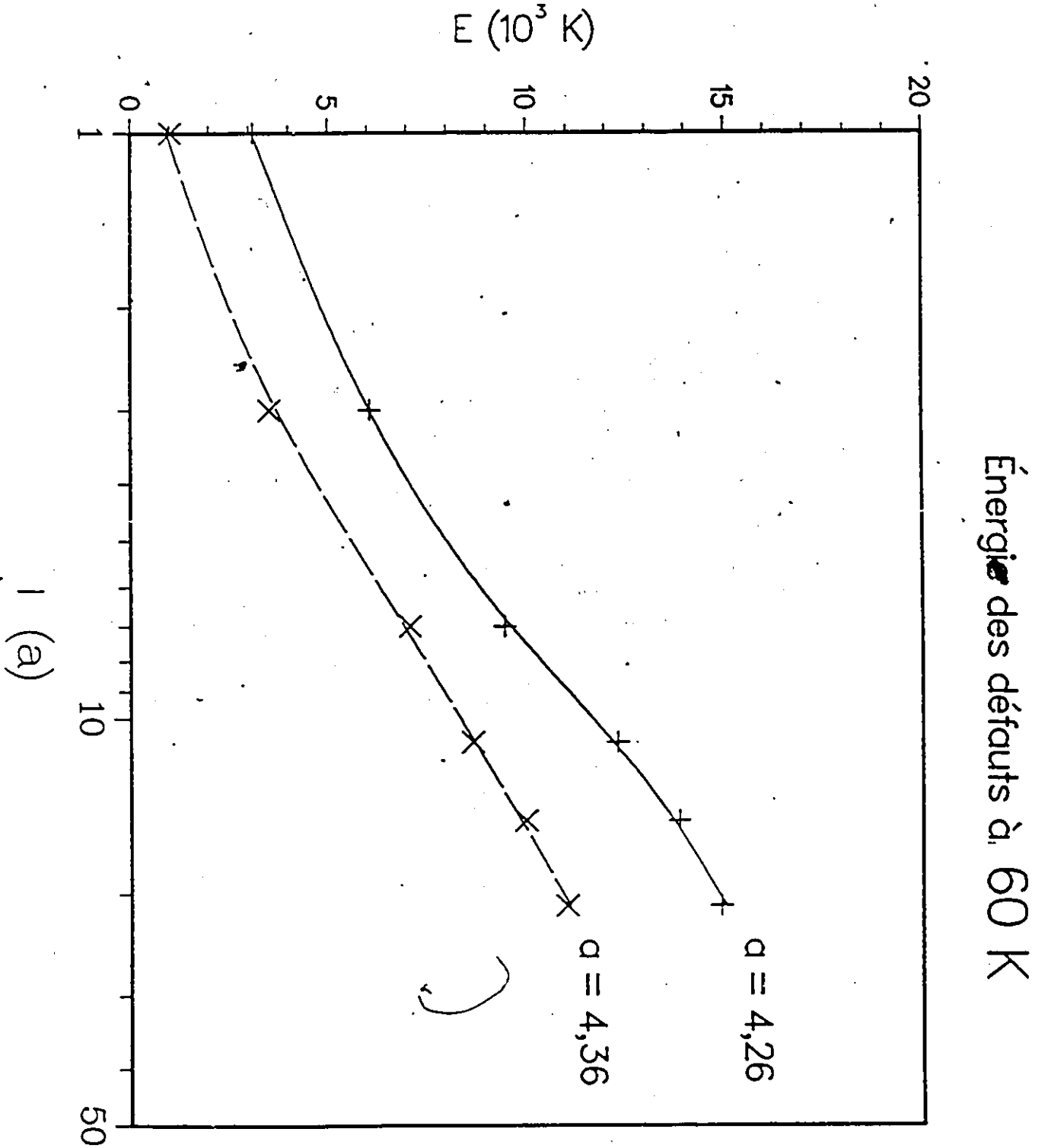
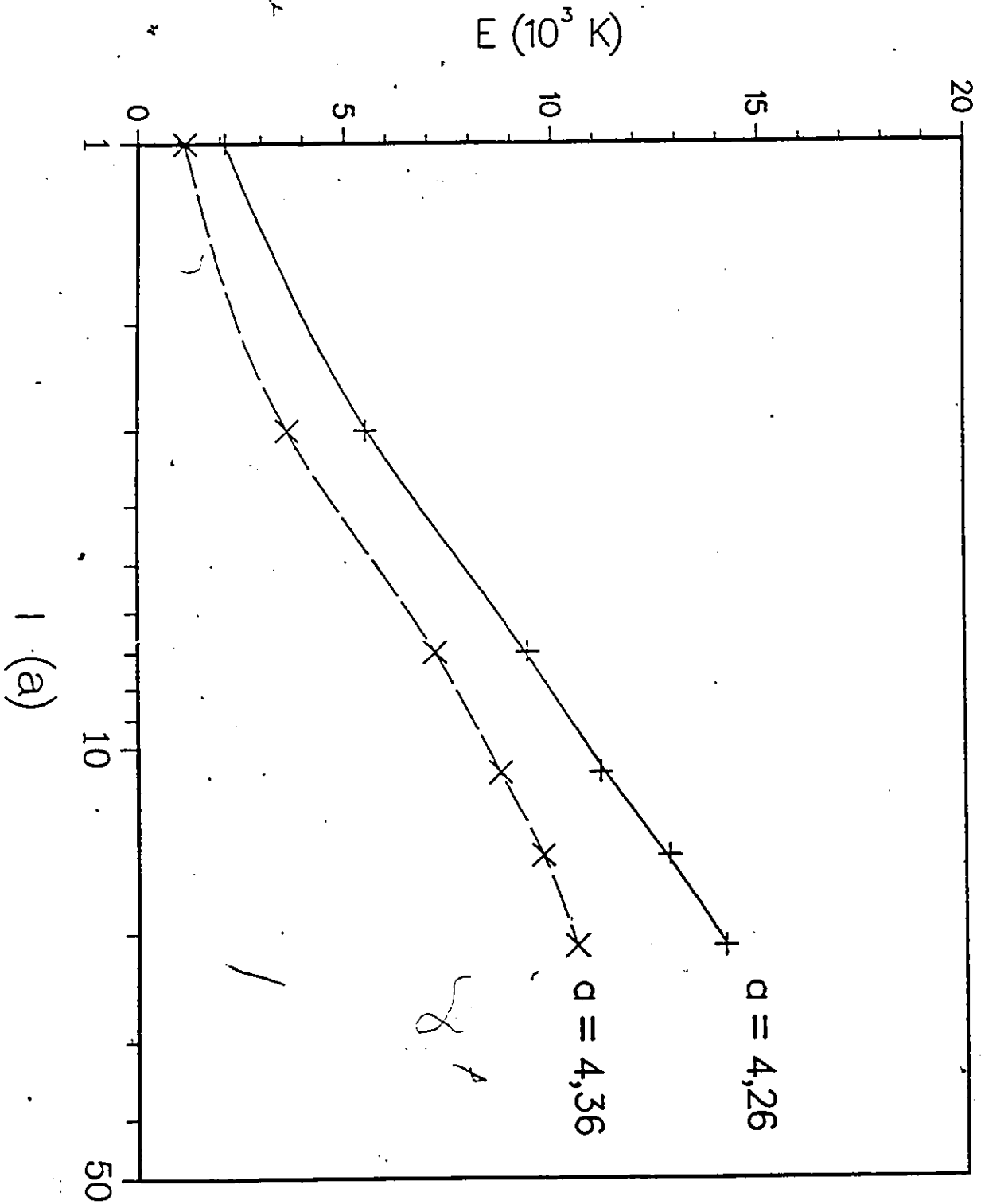


fig. 5.22 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à T = 70 K.



Énergie des défauts à 70 K

fig. 5.23 - Énergies des dipôles de dislocations en fonction de leur longueur (en unité de paramètre de maille a) et du paramètre de maille à T = 80 K.

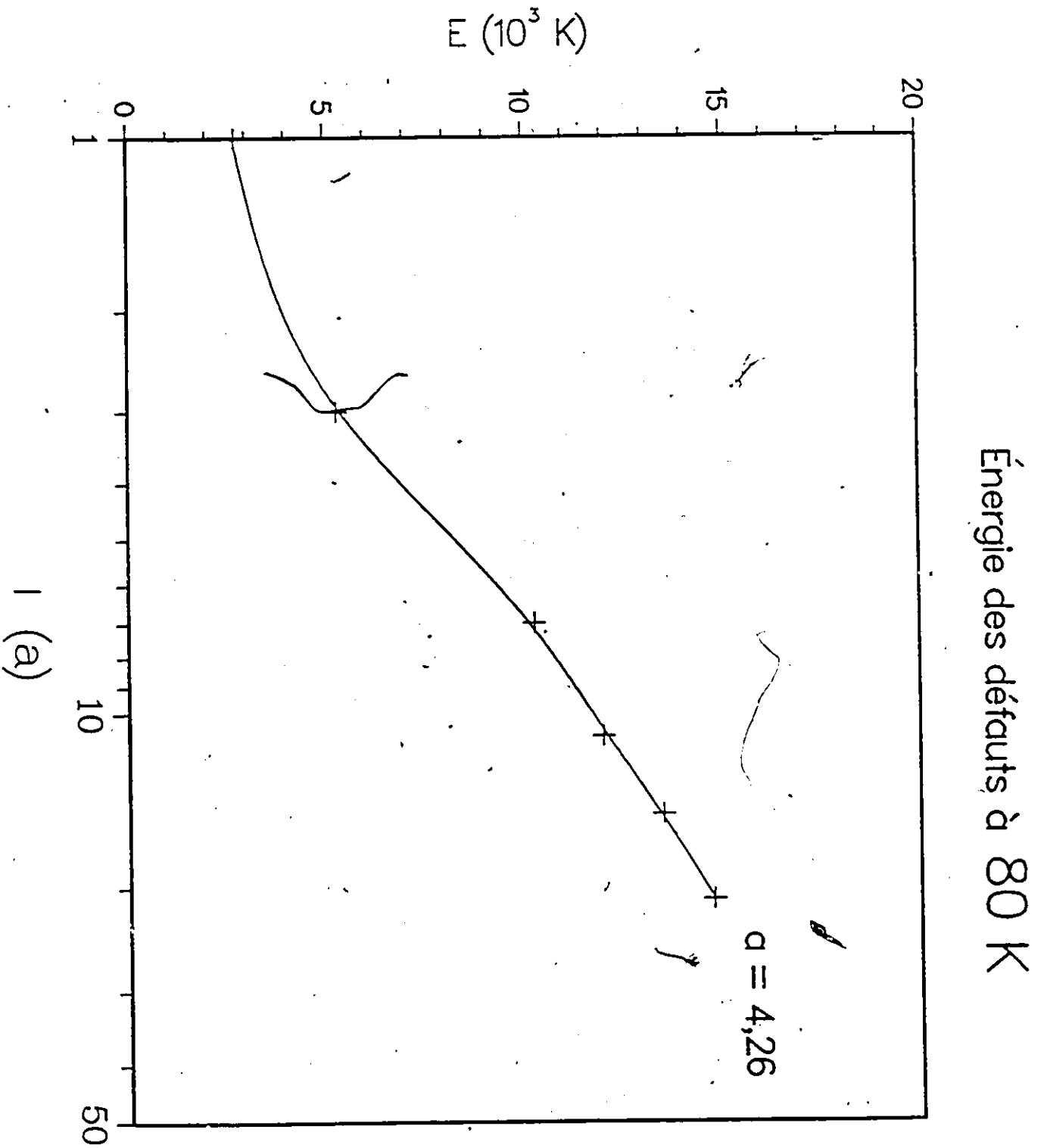


fig. 5.24 - Variations des énergies des dipôles en fonction de la température pour différentes longueurs. On remarque que les pentes associées tendent vers un maximum.

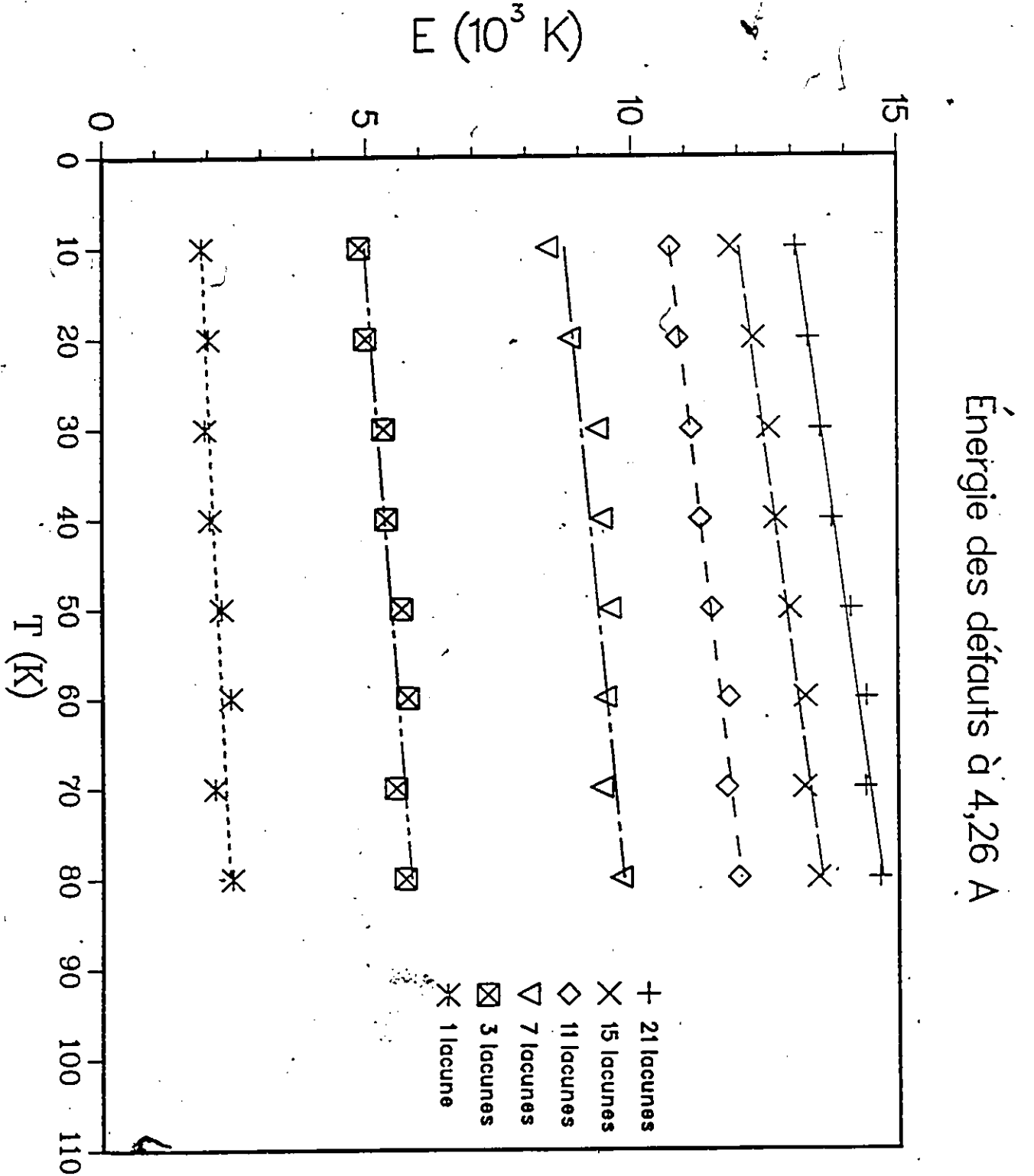
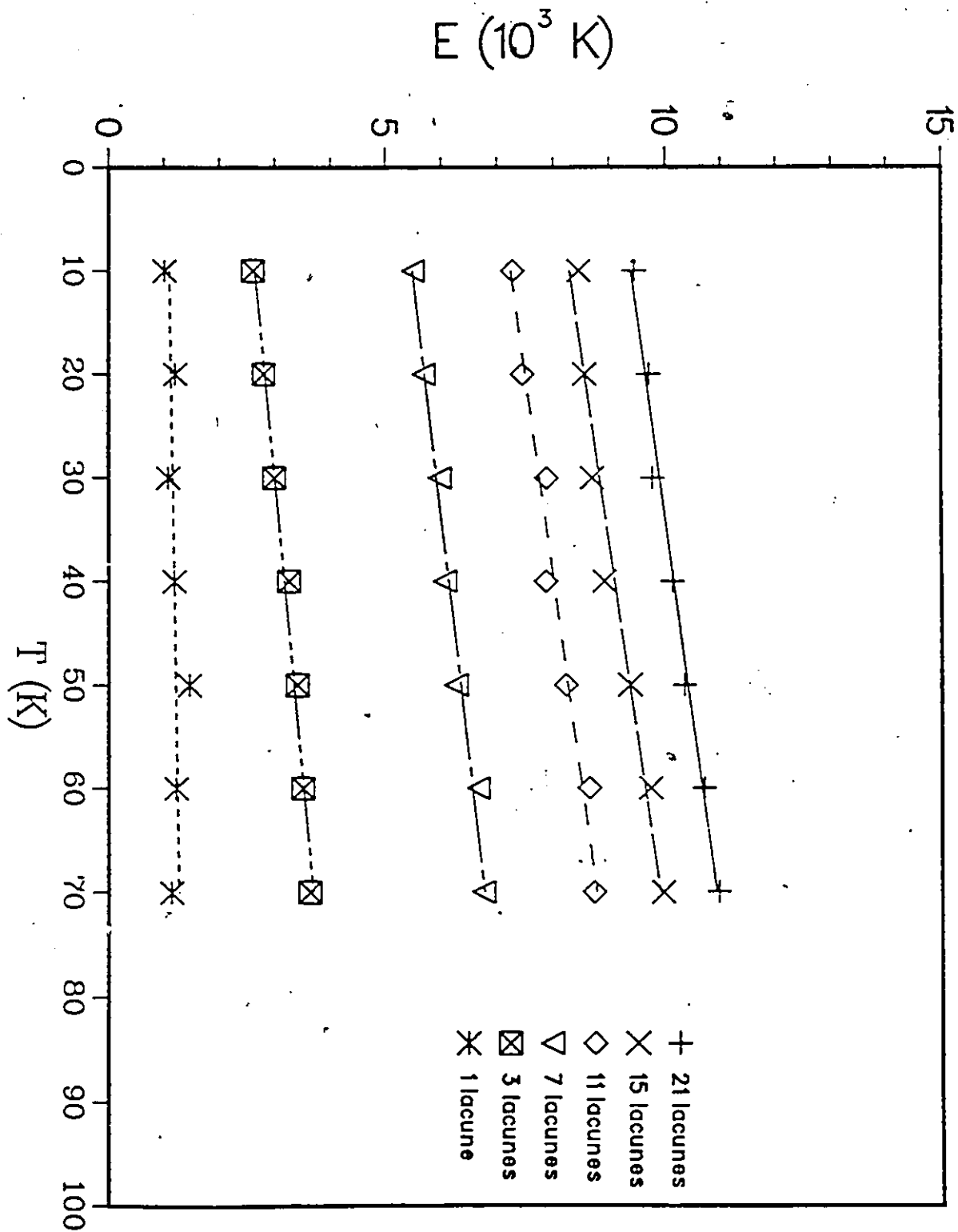


fig. 5.25 - Variations des énergies des dipôles en fonction de la température pour différentes longueurs. Les pentes associées tendent également vers un maximum.



Énergie des défauts à 4,36 Å

Variation de la pente en fonction de la longueur du défaut

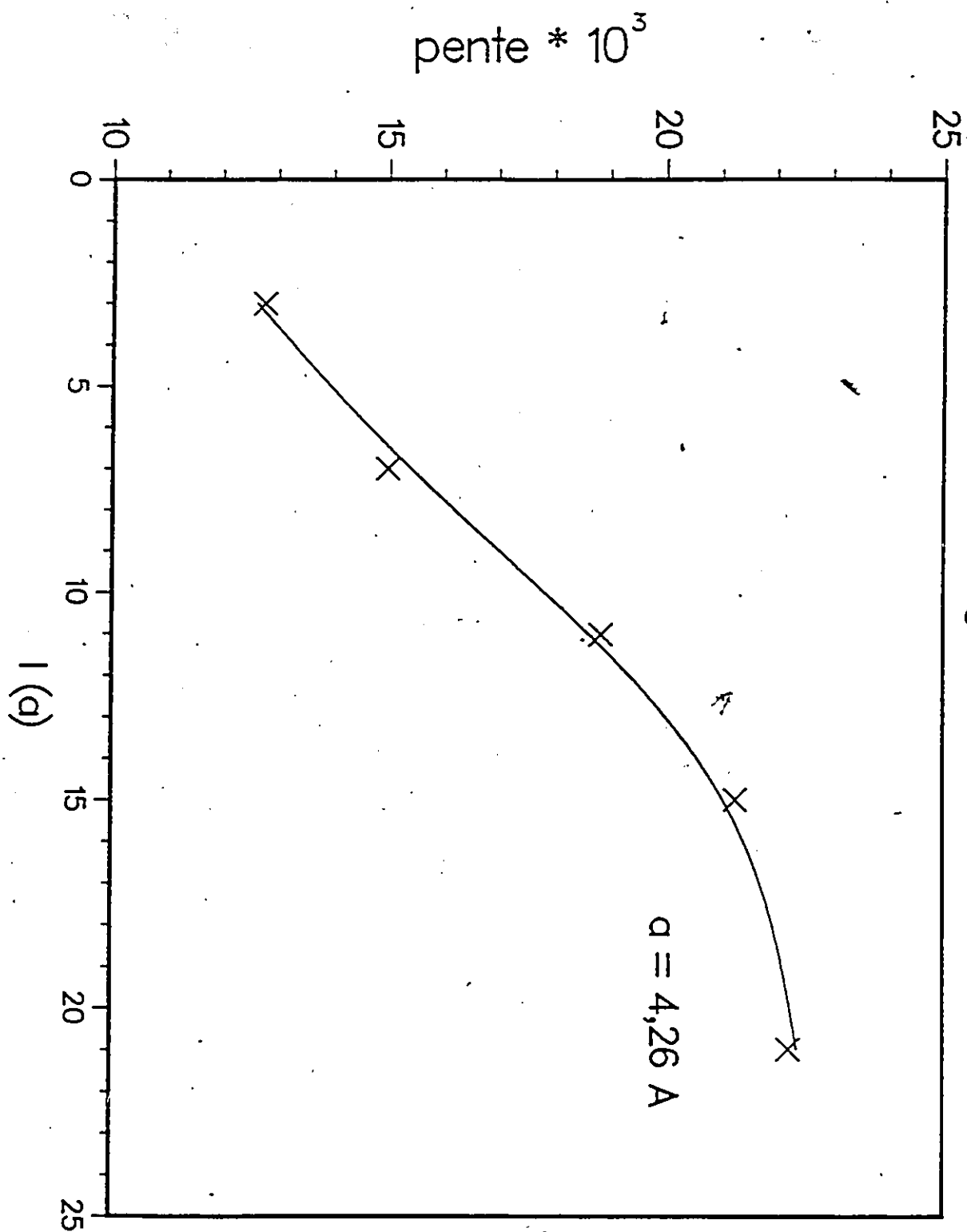


fig. 5.26 - Variation des pentes associées aux droites de la figure 5.24 en fonction de la longueur des dipôles

Variation de la pente en fonction
de la longueur du défaut

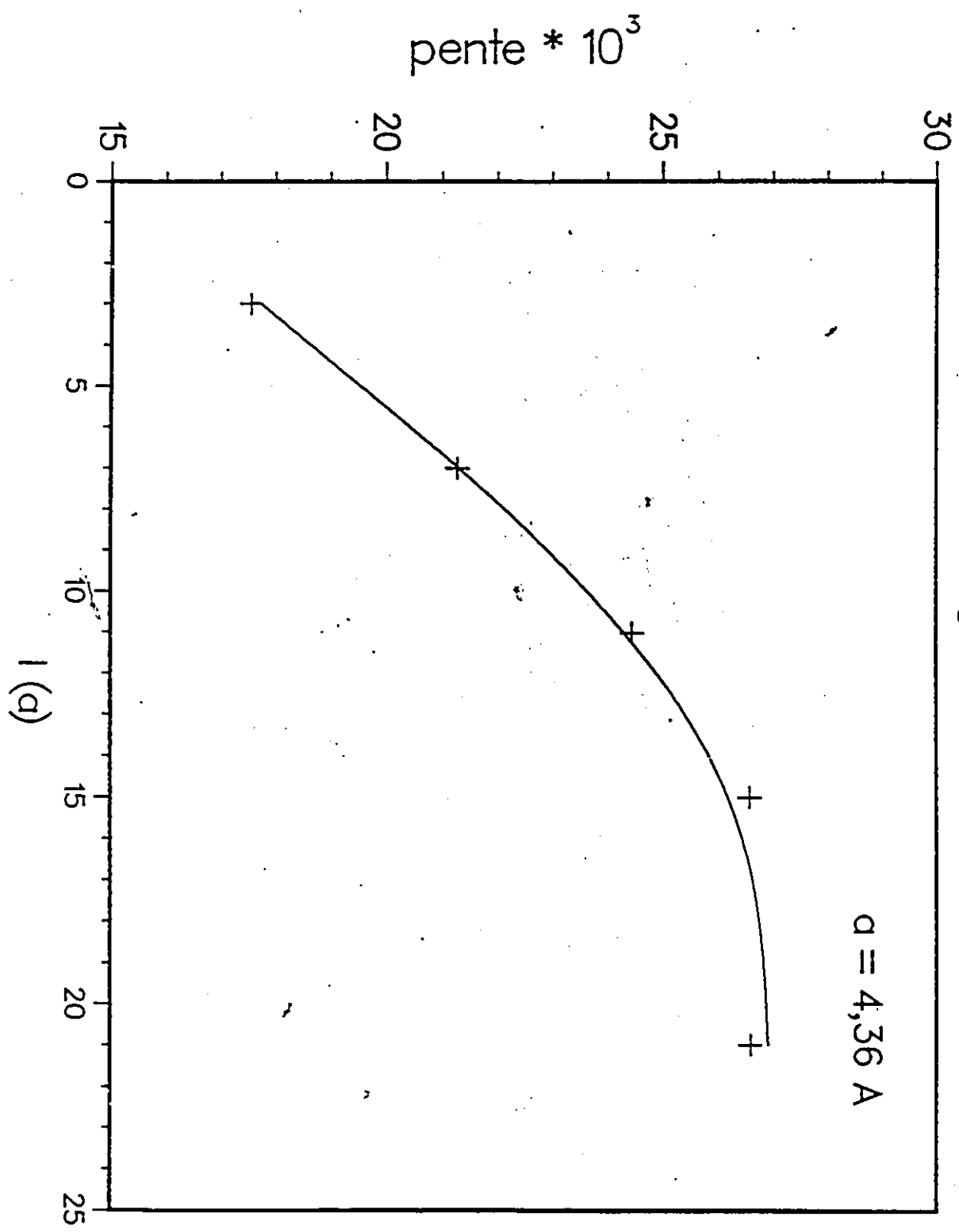


fig. 5.27 - Variation des pentes associées aux droites de la figure 5.25 en fonction de la longueur des dipôles

fig. 5.28 - Variation de l'énergie d'activation de Peierls en fonction de la longueur du dipôle pour $a = 4,26 \text{ \AA}$. On notera l'énergie importante associée aux défauts courts et la limite asymptotique qui tend vers 0

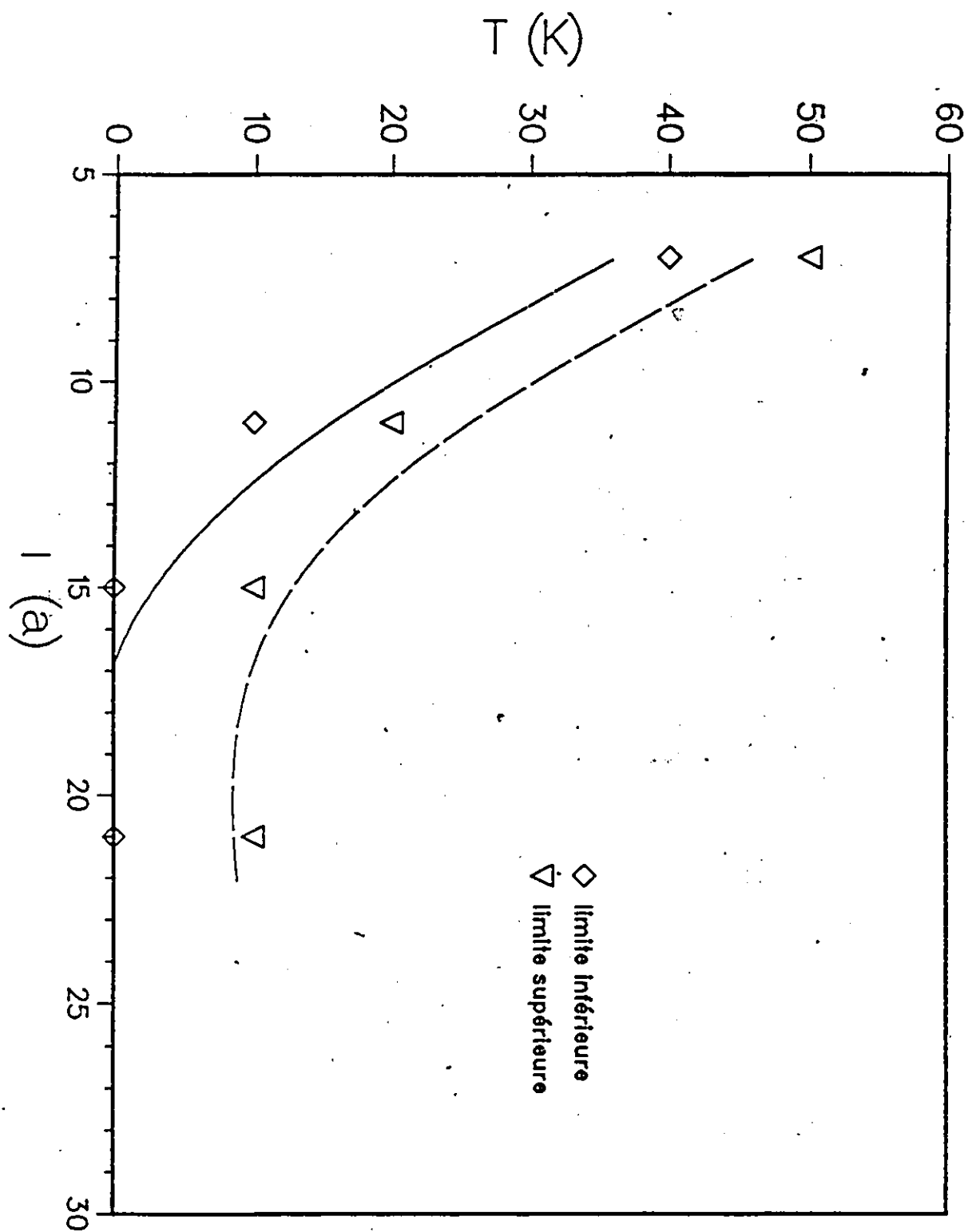
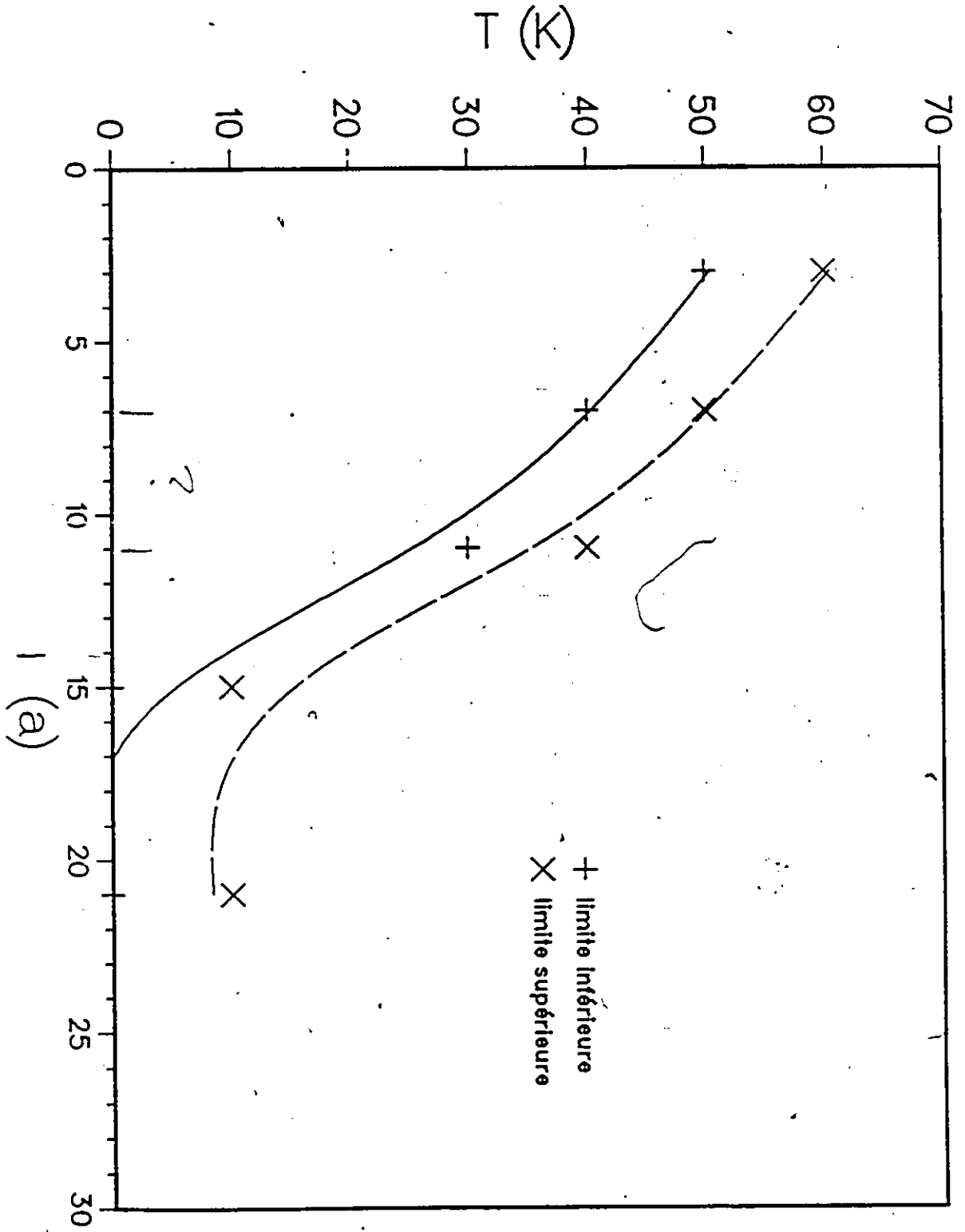


fig. 5.29 - Variation de l'énergie d'activation de Peierls en fonction de la longueur du dipôle pour $a = 4,36 \text{ \AA}$. Les mêmes remarques que celles faites pour la figure 5.28 prévalent. Toutefois, comme il a été mentionné dans la discussion, nous n'avons pas d'explication précise pour le maximum local compris entre $l = 7 \text{ \AA}$ et $l = 11 \text{ \AA}$.



Température de Peierls à $a = 4,36 \text{ \AA}$

Variation de la pente en fonction de la longueur du défaut

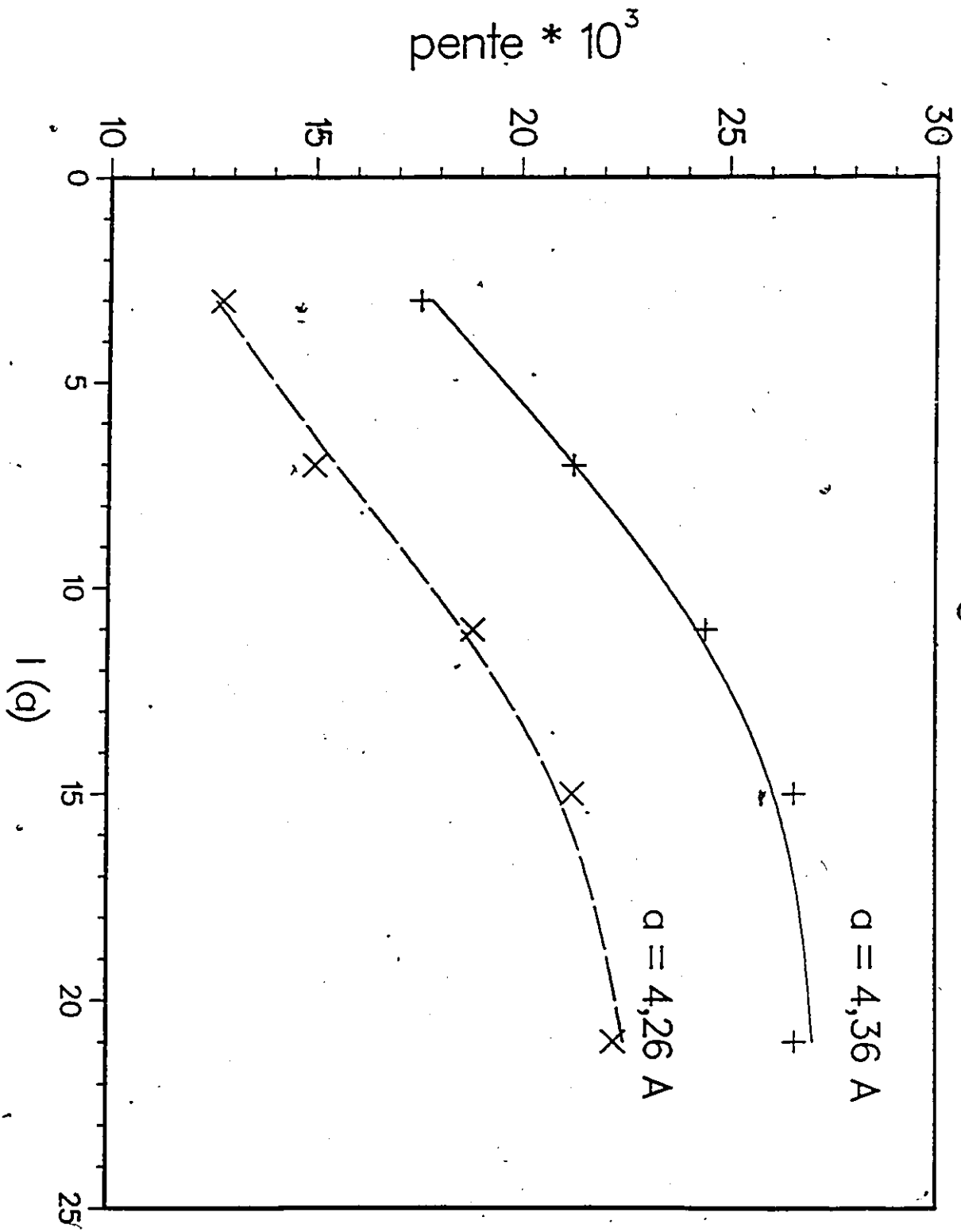


fig. 5.30 - Superposition des figures 5.27 et 5.28. On remarque la grande similitude des deux courbes.