

Questions et commentaires pour Pascal Parneix

Question de Jacques Le Bourlot (n°32) :

Avant d'arriver à des clusters de taille critique $\sim n^*$, il faut réussir à initier le processus en passant de $n=1$ à $n=2$, puis de $n=2$ à $n=3$. Comment se passent ces toutes premières étapes ?

Réponse : Les théories de nucléation à l'équilibre considèrent des populations à l'équilibre, sans se préoccuper des mécanismes atomistiques de croissance ou de dissociation. La formation d'un dimère atomique, en particulier, requiert l'assistance d'un tiers. Dans les modèles type CNT, la population n'est fonction que de l'énergie libre via une loi d'Arrhenius. Seules des approches cinétiques (modèle de Langevin) ou explicitement moléculaires (simulation) permettent d'appréhender la croissance atome par atome, mais celles-ci nécessitent une bonne connaissance des lois d'interaction, notamment à grande distance, afin de pouvoir prédire quantitativement les taux de condensation et d'évaporation.

Question de Céline Martin (n°33) :

Est-ce que ne plus décrire l'interface avec une fonction Heaviside mais plutôt avec une fonction « sigmoïde » peut-il être interprété comme la prise en compte dans l'énergie de Gibbs de la présence d'une phase bidimensionnelle adsorbée sur le grain ?

Réponse : Les variations continues de la densité à l'interface doivent ici être comprises comme un effet de moyenne statistique issu des fluctuations thermiques, elles-mêmes traduisant l'équilibre liquide-gaz entre évaporation et condensation : ces variations seront d'autant plus abruptes que la température est basse. L'épaisseur de l'interface reflète ainsi une phase intermédiaire moins dense, dont les éléments moléculaires sont susceptibles de temporairement retourner à la phase gazeuse. Cette interface, homogène du point de vue chimique, contribue additivement à l'énergie de Gibbs et de façon plus réaliste que la CNT.