

CHAPITRE II :

Modélisation des surfaces vicinales

II-A. Introduction

Dans ce chapitre, les modèles utilisés pour décrire les surfaces vicinales existant dans la littérature sont tout d'abord présentés ainsi que les méthodes permettant de les résoudre.

Il existe deux grandes familles de modèles : les *modèles à marche unique* dans lesquels on ne considère qu'une seule marche plongée dans un potentiel extérieur, et les *modèles à plusieurs marches* en interaction. Ces deux types de modèles sont décrits successivement.

Les modèles à plusieurs marches ont initialement été développés pour traiter une surface au-dessus de T_R . L'observation par microscopie à effet tunnel d'une surface sous T_R nous a obligé à **développer l'application de ces modèles en-dessous de la transition rugueuse.**

Une méthode puissante, **la méthode du cylindre**, utilisable à toute température, a été appliquée ici, pour la première fois, à l'étude des faces vicinales.

II-B. Modèles à marche unique

II-B.1. Introduction

Les modèles "marche unique" sont encore actuellement largement utilisés pour l'étude des surfaces vicinales [1,2,3,4]. Par cette approche, on traite le problème en ne considérant qu'une seule marche dans un potentiel représentant l'interaction avec toutes les autres marches. Ces modèles permettent une première interprétation de deux grandeurs aisément mesurables sur les images STM : la distribution des largeurs de terrasses (TWD, Terrace Width Distribution) et la densité de crans.

L'hamiltonien associé au modèle ASOS est de la forme :

$$(II-1) \quad H_{ASOS} = \sum_y E_k |h_{y+1} - h_y| + V(h_y)$$

où h_y est le déplacement de la marche au site y par rapport à sa position d'équilibre et E_k est l'énergie d'un cran simple. Le potentiel $V(h_y)$ décrit l'influence des marches voisines, il ne dépend que de la position de la marche au site y . Les interactions entre crans ne sont pas prises en compte.

Après un rappel des résultats pour les formes simples du potentiel ($V=0$, potentiel harmonique), le cas des potentiels plus physiques, solubles par la méthode de la matrice de transfert, sera exposé.

II-B.2. La marche libre

Pour des marches suffisamment éloignées tel que l'on puisse négliger leurs interactions, l'approximation de marche libre est justifiée. L'énergie de cran E_k peut être déterminée à partir de la densité de crans mesurée sur des images STM ou plus précisément de la mesure de la diffusivité $b^2(\mathbf{q}_0, E_k, T)$ (ou moyenne quadratique des déplacements $\Delta h = h_{y+1} - h_y$ de la marche) [5,6] :

$$(II-2) \quad b^2(\mathbf{q}_0, E_k, T) = \left(\langle (\Delta h)^2 \rangle - \langle \Delta h \rangle^2 \right) ,$$

où q_0 ($\tan(q_0) = \langle \Delta h \rangle$) est la désorientation possible de la marche par rapport à la direction cristallographique idéale (cf. Figure II-1).

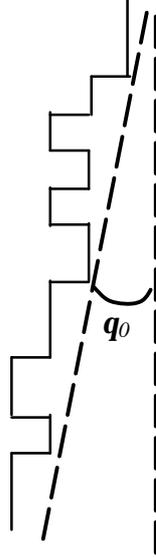


Figure II-1 : Vue de dessus d'une marche isolée, q_0 est la désorientation de la marche par rapport à la direction des rangées denses d'atomes ($[110]$ pour les faces Cu(1,1,n)).

Pour une meilleure détermination de l'énergie de cran, il est préférable de mesurer la fonction de corrélation des déplacements de la marche définie par :

$$(II-3) \quad G(y) = \langle [h_y - h_0]^2 \rangle.$$

Tous les sites étant indépendants et équivalents, la fonction peut se réécrire [7] :

$$(II-4) \quad G(y) = \langle (\Delta h^2) \rangle y + y(y-1) \langle \Delta h \rangle^2 = b^2(q_0, E_k, T) y + y^2 \langle \Delta h \rangle^2$$

La fonction de corrélation comprend donc une partie linéaire et une partie quadratique fonction de la désorientation.

Dans le cas le plus simple où la marche est parfaitement orientée ($q=0$) la diffusivité s'écrit :

$$(II-5) \quad b^2(\mathbf{q}_0 = 0, E_k, T) = b^2(E_k, T) = \frac{2 \sum_{n=1}^{\infty} n^2 e^{-\frac{nE_k}{k_B T}}}{1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} e^{-\frac{nE_k}{k_B T}}},$$

$$(II-6) \quad b^2(E_k, T) = \frac{2}{e^{\frac{E_k}{k_B T}} + e^{-\frac{E_k}{k_B T}} - 2} = \frac{1}{\cosh\left(\frac{E_k}{k_B T}\right) - 1},$$

avec k_B la constante de Boltzmann.

La diffusivité de la marche peut également être reliée à la rigidité du bord de marche $\tilde{\mathbf{b}}(\mathbf{q}_0, T)$ [5,6] :

$$(II-7) \quad b^2(\mathbf{q}_0, T) = \frac{k_B T}{(\cos(\mathbf{q}_0))^3 \tilde{\mathbf{b}}(\mathbf{q}_0, T)},$$

où $\tilde{\mathbf{b}}(\mathbf{q}_0, T)$ est définie par :

$$(II-8) \quad \tilde{\mathbf{b}}(\mathbf{q}_0, T) = \mathbf{b}(\mathbf{q}_0, T) + \frac{d^2 \mathbf{b}(\mathbf{q}_0, T)}{d\mathbf{q}_0^2},$$

et $\mathbf{b}(\mathbf{q}_0, T)$ est l'énergie libre d'une marche libre par unité de longueur qui s'écrit :

$$(II-9) \quad \mathbf{b}(\mathbf{q}_0 = 0, T) = -k_B T \ln\left(\tanh \frac{E_k}{2k_B T}\right).$$

Ce modèle permet d'obtenir des énergies de cran correctes à condition que la distance moyenne entre marches soit suffisante pour négliger leur interaction [7,8].

II-B.3. Une marche plongée dans un potentiel

II-B.3.1. Les murs durs

Ce modèle, introduit par Grubber et Mullins [9], est constitué d'une marche qui serpente librement entre deux marches voisines immobiles localisées sur leurs positions moyennes ($-\ell_0$ et $+\ell_0$). La seule interaction qui existe entre les marches est la condition de non

croisement. Cette condition limite le déplacement de la marche ce qui s'accompagne d'une diminution de son entropie créant ainsi une répulsion "*entropique*" effective entre les marches. Ce problème est équivalent au problème d'une particule dans une boîte à une dimension. Cette approximation est supposée être valable lorsque les autres interactions (élastique et dipolaire) sont faibles. La probabilité $P(h)$ que la marche soit à la position h , par rapport à sa position d'équilibre, est donnée par [2] :

$$(II-10) \quad P(h) = \frac{1}{\ell_0} \cos^2 \left(\frac{\mathbf{p}h}{2\ell_0} \right)$$

on a alors,

$$(II-11) \quad \langle h^2 \rangle = \ell_0^2 \left[1 - \frac{6}{\mathbf{p}^2} \right].$$

On remarque que cette distribution est indépendante de la température T et présente une loi d'échelle $P(h)\ell_0 = f\left(\frac{h}{\ell_0}\right)$.

II-B.3.2. Méthode de l'approximation harmonique

Généralement l'interaction entre marches ne peut pas être négligée. Dans le cas d'une forte interaction élastique une solution peut être obtenue dans le cadre de *l'approximation harmonique*.

Considérons une marche placée entre deux marches droites distantes de $2\ell_0$ et plongée dans le potentiel créé par ces deux marches. Comme nous l'avons vu précédemment (cf. chapitre I-B.) pour une interaction de type élastique ou dipolaire, le potentiel d'interaction entre marches, par unité de longueur de marche, s'écrit :

$$(II-12) \quad V(\ell) = \frac{A}{\ell^2}.$$

Le potentiel ressenti par la marche placée en h , s'écrira donc :

$$(II-13) \quad U(h, \ell_0) = \frac{A}{(h - \ell_0)^2} + \frac{A}{(h + \ell_0)^2},$$

En se plaçant à suffisamment basse température ($T \ll E_k$), afin que les fluctuations de la marche soient limitées ($h \ll \ell_0$), le potentiel devient dans l'approximation harmonique :

$$(II-14) \quad U(h, \ell_0) \approx U(0) + C(\ell_0)h^2 \quad \text{pour } h \ll \ell_0,$$

$$\text{avec } C(\ell_0) = \frac{U''(0)}{2} = \frac{6A}{\ell_0^4}.$$

La distribution des probabilités $P(h)$ est Gaussienne et s'écrit [1, 3] :

$$(II-15) \quad P_{har}(h) = \frac{1}{w_{har} \sqrt{2\mathbf{p}}} \exp\left(-\frac{h^2}{2w_{har}^2}\right),$$

où la largeur de la distribution w_{har} , qui dépend de la température et du potentiel d'interaction, est donnée par :

$$(II-16) \quad w_{har} = \left(\frac{k_B T b^2(T)}{8C(\ell_0)}\right)^{\frac{1}{4}} = \left(\frac{k_B T b^2(T)}{48A}\right)^{\frac{1}{4}} \cdot \ell_0,$$

avec $b^2(T)$ la diffusivité de la marche libre décrite par l'équation (II-5).

Cette approximation harmonique du potentiel limitée au cas des basses températures ne permet pas de séparer les interactions élastique et entropique. Ceci conduit donc à surestimer le potentiel élastique réel. On peut remarquer de nouveau que la distribution des probabilités $P_{har}(h)$ suit une loi d'échelle $P_{har}(h)\ell_0 = f\left(\frac{h}{\ell_0}\right)$.

II-B.3.3. Potentiel quelconque : méthode de la matrice de transfert à une marche

Lorsque les interactions élastique et entropique sont du même ordre de grandeur, aucune approche analytique n'est, à notre connaissance, possible pour résoudre ce problème. C'est une méthode numérique appelée *matrice de transfert* [10] qui est employée. Cette méthode très générale permet de résoudre tout système unidimensionnel d'objets en interaction (modèle d'Ising, chaîne de polymère). Le potentiel d'interaction peut prendre a priori n'importe quelle forme. Cette méthode étant classique, j'en rappellerai ici uniquement les grandes lignes, le détail des calculs étant reporté dans l'annexe I.

Fonction de partition, énergie libre

On considère toujours une marche fluctuant dans le potentiel créé par les deux marches voisines supposées droites et localisées en $h=-\ell_0$ et $h=+\ell_0$. La position de la marche sur un site y , par rapport à sa position d'équilibre, est donnée par h_y . Cette marche comporte N_s sites avec la condition aux limites périodiques $h_{N_s} = h_0$. L'hamiltonien symétrisé d'un tel système, dans le cas du modèle ASOS, est donné par :

$$(II-17) \quad H_{ASOS} = \sum_{y=0}^{N_s-1} H(h_{y+1}, h_y) \quad \text{avec :}$$

$$(II-18) \quad H(h_{y+1}, h_y) = E_k |h_{y+1} - h_y| + \frac{1}{2} [V(h_{y+1}) + V(h_y)] .$$

Une configuration de la marche est complètement décrite par l'ensemble des positions $\{h_0, \dots, h_{N_s-1}\}$. Dans la notation braket, qui sera largement utilisée ici, la position de la marche au site y sera notée $|h_y\rangle$.

La fonction de partition Z s'écrit sous la forme de la trace d'une matrice :

$$(II-19) \quad Z = Tr(\hat{T}^{N_s}) ,$$

où \hat{T} est la **matrice de transfert** dont les éléments sont définis par :

$$(II-20) \quad \langle h' | \hat{T} | h \rangle = e^{-\frac{H(h', h)}{k_B T}} ,$$

où $|h'\rangle$ et $|h\rangle$ sont les positions de la marche sur deux sites adjacents.

Cette matrice est une matrice $m \times m$, m étant le nombre de valeurs possibles de h .

Soit $\{\Lambda_p\}$ l'ensemble des valeurs propres de \hat{T} et $\{\Psi_p\}$ l'ensemble des vecteurs propres associés. La fonction de partition (II-19) s'écrit :

$$(II-21) \quad Z = \sum_{k=1}^m (\Lambda_k)^{N_s} .$$

Pour une marche de longueur infinie ($N_s \rightarrow \infty$) Z devient, en utilisant la valeur propre maximale Λ_{\max} de \hat{T} (voir Eq. (7) annexe I),

$$(II-22) \quad Z = \lim_{N_s \rightarrow \infty} (\Lambda_{\max})^{N_s} .$$

L'énergie libre par site et par unité d'aire projetée sur le plan des terrasses est donnée par :

$$(II-23) \quad F = -\frac{k_B T}{2 \ell_0} \ln(\Lambda_{\max}) .$$

Distribution des largeurs de terrasses

La distribution des largeurs de terrasses est déterminée par la probabilité $P(h)$ que la marche soit à la position h sur un site y quelconque. Cette probabilité est donnée par le module carré des composantes du vecteur propre associé à la valeur propre maximale :

$$(II-24) \quad P(h) = |\langle h | \Psi_{\max} \rangle|^2 = |(\Psi_{\max})_h|^2 .$$

On en déduit donc simplement la distribution $D(\ell)$ des largeurs de terrasses :

$$(II-25) \quad D(\ell) = P(\ell - \ell_0) .$$

On remarque que de par la symétrie du problème, la distribution obtenue est symétrique par rapport à la distance moyenne ℓ_0 . Cette particularité est contraire aux distributions réelles qui, comme nous le verrons par la suite, sont asymétriques.

Fonction de corrélation le long du bord de marche

La fonction de corrélation des déplacements du bord de marche h est définie par,

$$(II-26) \quad G(y) = \langle (h_y - h_0)^2 \rangle = 2 \langle h_0^2 \rangle - 2 \langle h_0 h_y \rangle ,$$

on note que $\langle h_0^2 \rangle = \langle h_y^2 \rangle$, tous les sites de la marche étant équivalents.

La fonction de corrélation des déplacements du bord de marche s'écrit (cf. Eq. (21) annexe I) :

(II-27)

$$G(y) = 2 \sum_h h^2 \left| \langle h | \Psi_{\max} \rangle \right|^2 - 2 \frac{\sum_{h_0, h_y} h_0 h_y \left[\sum_p \langle \Psi_{\max} | h_0 \rangle \langle h_0 | \Psi_p \rangle (\Lambda_p)^y \langle \Psi_p | h_y \rangle \langle h_y | \Psi_{\max} \rangle \right]}{(\Lambda_{\max})^y}.$$

Pour $y \rightarrow \infty$, $G(y) = 2 \langle h_0^2 \rangle$. Dans ce modèle, l'écart maximum de la marche à sa position moyenne est $(\ell_0 - 1)$ et la fonction de corrélation sature à une valeur finie. Ce modèle à une marche ne présente donc pas de transition rugueuse (caractérisée par la divergence logarithmique de la fonction de corrélation). Cette approche ne peut être valable qu'à basse température $T < T_R$.

II-B.3.4. Comparaison avec les résultats expérimentaux de la face Cu(1,1,11)

Afin d'illustrer les résultats qui peuvent être obtenus en utilisant les modèles à une marche, nous les avons appliqués aux résultats expérimentaux pour Cu(1,1,11) ($\ell_0 = 5.5$) obtenus par Masson *et al* [7] pour lesquels les valeurs $E_k = 1430$ K et $A = 70$ K (voir Figure II-2) ont été déterminées par simulation Monte Carlo (modèle à plusieurs marches) [6]. Ces résultats sont en accord avec d'autres expériences [1, 11].

Sur la Figure II-2 la distribution obtenue dans le cas du modèle des murs durs est comparée à la TWD expérimentale de la face de Cu(1,1,11). Le désaccord flagrant montre que l'interaction élastique est non négligeable.

Les procédures suivantes permettent d'obtenir E_k et A à partir de l'analyse d'images STM en utilisant les modèles à une marche :

- E_k est déterminée en ajustant la diffusivité de la marche libre (Eq. (II-4)) sur la mesure de $G(y=1)$. Connaissant E_k , A est obtenu en ajustant la variance w_{har}^2 de la TWD, calculée dans le cadre de l'approximation harmonique (Eq. (II-16)), sur la TWD expérimentale.
- E_k et A sont ajustés simultanément de façon à reproduire par un calcul de matrice de transfert à une marche la mesure de w^2 et de $G(y=1)$.

Par la première méthode l'énergie de cran de la face Cu(1,1,11) est estimée à $E_k = 1470$ K [6] et $A = 33$ K. La méthode de la matrice de transfert à une marche conduit à

$E_k=1350$ K et $A=24$ K. Les ajustement correspondants sur la TWD expérimentale sont représentés Figure II-3.

Les valeurs de E_k , proches des résultats de Masson *et al.*, semblent raisonnables. La diffusivité de la marche libre donne une bonne estimation de l'énergie de cran, tant que la distance moyenne entre marches est suffisamment grande pour négliger l'effet de l'interaction. La constante d'interaction obtenue par les modèles à une marche est sous-estimée d'un facteur deux à trois.

Il faut rappeler que l'approximation harmonique ne sépare pas les interactions entropique et élastique. La simplicité de l'approximation harmonique en a fait son succès, elle est encore utilisée [1] bien qu'elle conduise à une mauvaise estimation de l'interaction. Dans le cas de la matrice de transfert, les deux interactions sont bien séparées mais l'interaction est sous-estimée par la présence des marches voisines fixes.

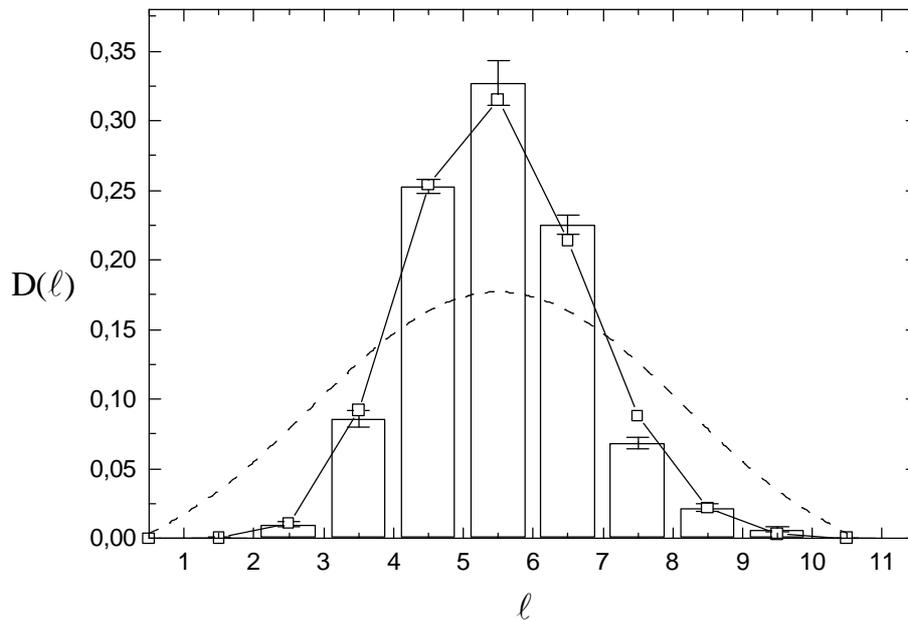


Figure II-2 : Histogramme : TWD expérimentale pour Cu(1,1,11). (?) simulation Monte Carlo ($A=70$ K et $E_k=1430$ K) [6], (--) TWD pour un potentiel murs durs (Eq. (II-10)).

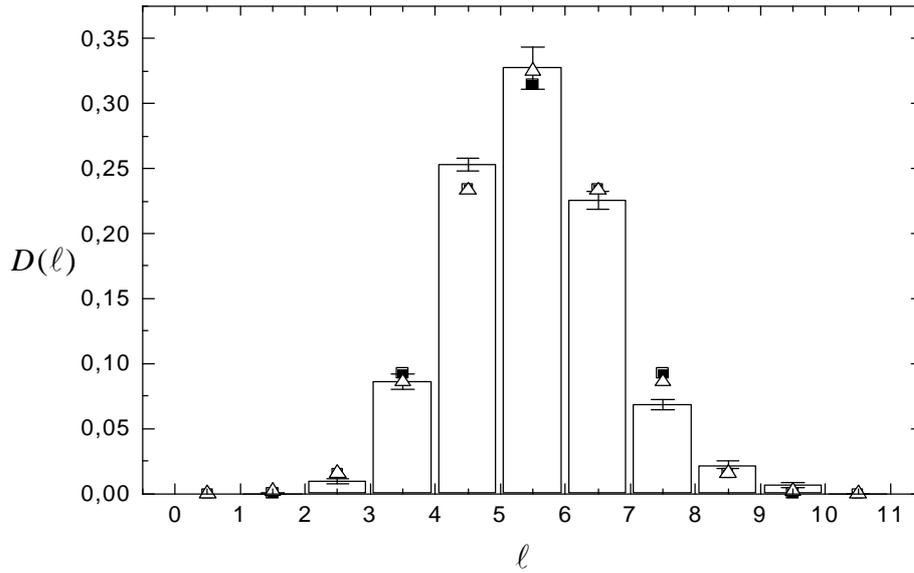


Figure II-3 : Histogramme : TWD expérimentale pour Cu(1,1,11). (■) TWD obtenue par la méthode de la matrice de transfert une marche ($E_k=1350$ K et $A=24$ K). (Δ) TWD obtenue par l'approximation harmonique ($E_k=1470$ K et $A=33$ K).

II-B.3.5. Conclusion : les modèles à une marche sont insuffisants

Les modèles à marche unique permettent de déterminer un ordre de grandeur de l'énergie de cran E_k et de la constante d'interaction A , tout en étant simple à mettre en œuvre.

Cependant :

- L'approximation de la marche libre surestime l'énergie de cran car elle ne tient pas compte, par définition, de l'interaction entre marches.
- L'approximation harmonique ne permet pas de séparer l'interaction entropique de l'interaction élastique.
- L'analyse par la méthode de la matrice de transfert à une marche est a priori meilleure puisque les deux interactions, entropique et élastique, sont bien séparées. Cependant les marches voisines fixes entraînent une sous-estimation (d'un facteur ~ 3) de A .
- Enfin, le modèle à marche unique ne présente pas de transition rugueuse.

Ces modèles sont donc tout à fait insuffisants pour obtenir des valeurs des paramètres énergétiques avec la qualité nécessaire pour comparer les résultats sur deux faces vicinales différentes ou en faisant varier la température.

Des modèles comportant plusieurs marches, qui sont plus proches d'une surface réelle, sont donc nécessaires à une bonne interprétation des résultats expérimentaux.

II-C. Modèles à plusieurs marches

II-C.1. Présentation des modèles

La description d'une surface vicinale peut se faire suivant deux échelles : "*de près*" à l'aide d'un modèle discret qui prend en compte tous les sites atomiques de la surface ou "*de loin*" par l'intermédiaire d'un modèle où la surface est considérée comme une interface continue.

Il existe deux modèles discrets permettant de décrire la surface :

- Dans le premier, le réseau de marches en interaction mutuelle est décrit par l'Hamiltonien :

$$(II-28) \quad H = \sum_{m,y} \left[h_{m,y+1} - h_{m,y} \right] E_k + \sum_{y,m>m'} V(h_{m,y}, h_{m',y}) ,$$

où $h_{m,y}$ est la position, par rapport à sa position d'équilibre, de la marche m au site y . Les marches sont séparées en moyenne par ℓ_0 sites.

Le premier terme du membre de droite de l'équation (II-28) correspond à l'énergie de formation d'un cran qui est ici proportionnelle à sa longueur (modèle ASOS). Le second terme reflète l'interaction entre marches incluant la condition de non croisement. Il faut bien noter que seules les interactions dans la direction perpendiculaire aux marches sont prises en compte, un site y n'interagit qu'avec les sites des autres marches à la même position y . Il n'y a pas d'interaction entre les crans d'une même marche, ou entre les crans de différentes marches. Cet hamiltonien est bien adapté au domaine de température où seules les marches sont

thermiquement excitées ($T < E_k$, pas d'excitation de terrasses ni formation de crans en surplomb (crans parallèles et non perpendiculaires à la direction $[\bar{1}10]$ du bord de marches moyen)).

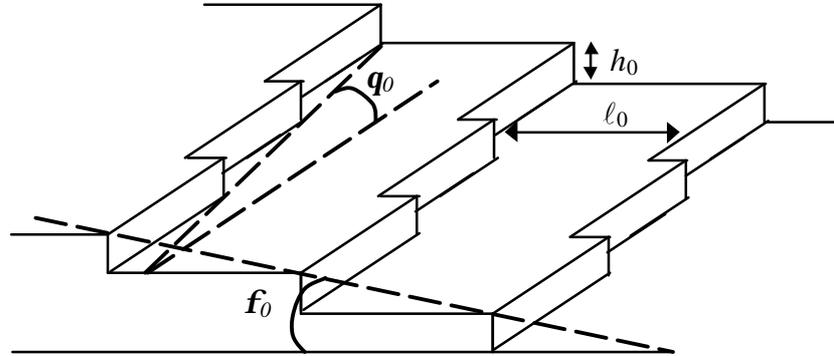


Figure II-4 : Définition des différentes notations introduites dans le texte: f_0 l'angle de coupe, q_0 la désorientation des marches par rapport à la direction des rangées denses d'atomes ($[\bar{1}10]$ pour les faces Cu(1,1,n)), h_0 et l_0 la hauteur des marches et la distance moyenne entre marches respectivement.

- Le second modèle discret est basé sur le développement de l'énergie libre, en fonction de la pente de la surface par rapport à la direction des terrasses $p = \tan(f_0) = h_0/l_0$. Il a été initialement proposé par Jayaprakash *et al.* [12]. Pour un potentiel en A/ℓ^2 , l'énergie libre par unité d'aire projetée sur le plan de référence ($f_0=0$) d'un réseau de marches avec l'orientation q_0 , s'écrit [9,12,13] :

$$(II-29) \quad f(q_0, f_0, T) = f_0(T) + \frac{b(q_0, T)}{h_0 \cos(q_0)} |p| + \frac{F_{\text{int}}(q_0, T)}{(h_0)^3} |p|^3 .$$

Le premier terme correspond à l'énergie libre des terrasses. Le second terme est l'énergie libre de création des marches. Il est linéaire avec la pente p . Le coefficient $b(q_0, T)$ est l'énergie libre par unité de longueur d'une marche libre (cf. Eq. (II-9)). Le troisième terme $\frac{F_{\text{int}}(q_0, T)}{(h_0)^3} |p|^3$ est l'énergie libre d'interaction entre marches. Il est remarquable que ce développement ne fait pas apparaître de terme en p^2 (pas de terme d'interaction en $1/\ell$). La Figure II-4 précise toutes les notations introduites ici.

- Dans le cas du modèle continu, encore appelé *modèle des ondes capillaires*, l'interface solide/vide est considérée comme une membrane fluctuante. J. Villain *et al.* [14] et José *et al.* [15] ont introduit l'idée que l'énergie libre de cette membrane F_{cap} pouvait s'écrire :

$$(II-30) \quad F_{cap} = \sum_{m,y} \left[\frac{\mathbf{h}_x}{2} (h_{m+1,y} - h_{m,y})^2 + \frac{\mathbf{h}_y}{2} (h_{m,y+1} - h_{m,y})^2 \right] + V_{loc}(T) \sum_{m,y} 2(1 - \cos(2\mathbf{p}h_{m,y})),$$

où \mathbf{h}_x (respectivement \mathbf{h}_y) est la rigidité de la membrane dans la direction perpendiculaire aux marches (respectivement parallèle aux marches) et $V_{loc}(T)$ est un potentiel de localisation qui favorise les valeurs entières du déplacement des marches $h_{m,y}$. (Ce potentiel de localisation $V_{loc}(T)$ s'annule pour toute température supérieure ou égale à la température de transition rugueuse T_R).

En fonction des composantes de Fourier h_q , de grandes longueurs d'onde, du déplacement $h_{m,y}$ de la marche :

$$(II-31) \quad h_{m,y} = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}} \sum_{q_x < q_{xc}, q_y < q_{yc}} h_q \exp(i q_x m + i q_y y),$$

où q_{xc} et q_{yc} sont des fréquences de coupure, N_x et N_y sont respectivement le nombre de marches et le nombre de sites par marche, on obtient pour l'énergie libre (voir annexe II Eq. (9)) :

$$(II-32) \quad F_{cap} = \sum_{q_x < q_{xc}, q_y < q_{yc}} \left[\mathbf{h}_x (1 - \cos(q_x)) + \mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y)) \right] |h_q|^2 + V_{loc}(T) \sum_{q_x < q_{xc}, q_y < q_{yc}} 4\mathbf{p}^2 |h_q|^2.$$

Différentes méthodes sont utilisées pour traiter ces modèles. Pour le modèle discret décrit par l'hamiltonien (II-28) deux méthodes étaient précédemment utilisées : *l'équivalence avec un modèle de fermions* ou *les simulations Monte Carlo*. Une troisième méthode appelée *méthode du cylindre* sera appliquée ici pour la première fois au cas des faces vicinales. Elle permet de déterminer exactement l'énergie libre, la distribution des largeurs de terrasses et la fonction de corrélation dans la direction parallèle aux marches, et ce, quelle que soit la température du système et le potentiel considéré. Concernant le modèle capillaire, l'interprétation des résultats expérimentaux de la face Cu(1,1,5) nécessitant la connaissance des fonctions de corrélations au-dessus et en-dessous de T_R , le calculs de ces fonctions a été étendu sous T_R .

Nous aurons donc à notre disposition quatre approches permettant d'interpréter les résultats expérimentaux obtenus sur une surface vicinale :

- l'équivalence avec un modèle de fermions,
- les simulations Monte Carlo,
- la méthode du cylindre,
- le traitement du modèle capillaire.

II-C.2. Equivalence avec le modèle des fermions en interaction

II-C.2.1. Energie libre

Le comportement d'un ensemble de marches décrit par l'hamiltonien (II-28) est équivalent, du fait de la condition de non croisement, à l'évolution au cours du temps d'une assemblée de fermions en interaction sur une ligne. Cette équivalence obtenue initialement par P. G. De Gennes [16] dans le cas d'objets linéaires sans interaction est donnée dans l'annexe III pour un ensemble de marches en interaction.

Dans ce modèle de fermions, appelé également modèle de *Calogero-Sutherland* [17,18,19], l'hamiltonien s'écrit :

$$(II-33) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \sum_{i>j} \frac{g}{(x_i - x_j)^2} ,$$

avec x_i la position du fermion i et g la constante d'interaction.

Ce modèle est très important car il est exactement soluble, il permet donc de valider toute nouvelle méthode de résolution du système décrit par l'hamiltonien (II-28). Cependant, il faut noter qu'il existe une grande différence entre le modèle de Calogero-Sutherland et un système de marches : les positions des marches sont discrètes (sites atomiques) tandis que le modèle des fermions est continu. Sans sites discrets, le modèle des fermions ne présente pas de transition rugueuse pour une interaction répulsive. Il n'est a priori valable que pour $T > T_R$. Cette absence de sites introduira aussi un comportement radicalement différent dans le cas d'une interaction attractive. Ce cas fera l'objet du chapitre III-A.3. .

Le calcul de l'énergie d'une assemblée de fermions sans interaction ne pose pas de difficulté. Considérons N fermions disposés sur un anneau de circonférence $L=N.\ell_0$, ℓ_0 étant la distance moyenne entre fermions. Les fonctions d'ondes sont des ondes planes de vecteur d'onde :

$$(II-34) \quad k = n \frac{\mathbf{p}}{N\ell_0} \quad \text{et d'énergie} \quad E(k) = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} .$$

L'énergie du système par unité de longueur dans l'état fondamental s'écrit :

$$(II-35) \quad E_{fond} = \frac{1}{N\ell_0} \int_0^N E(n) dn$$

qui devient,

$$(II-36) \quad E_{fond} = \frac{1}{N\ell_0} \int_0^{k_F} \frac{\hbar^2 k^2}{2m} \frac{N\ell_0}{\mathbf{p}} dk$$

où $k_F = \frac{\mathbf{p}}{\ell_0}$ est le vecteur d'onde associé au niveau de Fermi.

On obtient :

$$(II-37) \quad E_{fond} = \frac{\mathbf{p}^2}{3\ell_0^3} \frac{\hbar^2}{2m} .$$

On retrouve bien la dépendance en $1/\ell_0^3$ de l'énergie libre d'interaction entre marches (cf. Eq. (II-29)).

La solution du problème de fermions en interaction est plus complexe. Elle a été obtenue par Sutherland [19]. Pour ceci, il considère le même système de N fermions disposés sur un anneau de circonférence $L=N.\ell_0$. Ces fermions interagissent via un potentiel périodique en $\frac{g}{r^2}$ de la forme [19] :

$$(II-38) \quad V(r) = g \sum_{n=-\infty}^{\infty} (r+nL)^{-2} = \frac{g\mathbf{p}^2}{L^2} \left[\sin\left(\frac{\mathbf{p}r}{L}\right) \right]^{-2} .$$

Pour un système suffisamment grand ($L \rightarrow \infty$) les termes additionnels correspondant à plus d'un tour d'anneau ($n \neq 0$) deviennent négligeables. Néanmoins, le traitement mathématique est considérablement simplifié en partant d'équations périodiques.

L'Hamiltonien du système périodique s'écrit :

$$(II-39) \quad H = -\frac{\hbar^2}{2m} \sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{g\mathbf{p}^2}{L^2} \sum_{i>j} \left[\sin\left(\frac{\mathbf{p}(x_i - x_j)}{L}\right) \right]^{-2} .$$

Sutherland a obtenu pour l'état fondamental associée à cet Hamiltonien, l'énergie par unité de longueur [19] :

$$(II-40) \quad E_f(N) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{3} \frac{I^2 \mathbf{p}^2}{\ell_0^3} - \frac{1}{3} \frac{I^2 \mathbf{p}^2}{\ell_0^3} \frac{1}{N^2} \right) .$$

où le paramètre I est relié à la constante d'interaction g par ($g \geq -1/2$) :

$$(II-41) \quad 2I(I-1) = g \quad \text{ou} \quad I = \frac{1}{2} \left[1 + \sqrt{1+2g} \right] .$$

Dans l'article de Sutherland [19], le potentiel d'interaction périodique est incomplet : l'interaction entre un fermion et ses propres images après n tours d'anneau est manquante. Toutes les interactions qui doivent être prises en compte sont représentées schématiquement Figure II-5. L'expression (II-38) pour $r=0$ donne :

$$(II-42) \quad V(r=0) = \frac{1}{2} g \sum_{\substack{n=-\infty \\ n \neq 0}}^{\infty} (nL)^{-2} = g \sum_{n=1}^{\infty} (nL)^{-2} = \frac{\mathbf{p}^2}{6} \frac{g}{L^2} .$$

Le facteur 1/2 est nécessaire afin de ne compter qu'une seule fois l'interaction d'un fermion avec chacune de ses images.

L'énergie par site comprend donc le terme additionnel suivant :

$$(II-43) \quad \frac{\hbar^2}{2m} \frac{N \mathbf{p}^2}{L} \frac{g}{6 L^2} = \frac{\hbar^2}{2m} \frac{\mathbf{p}^2}{3} \frac{I(I-1)}{\ell_0 L^2} .$$

ce qui conduit pour l'énergie à :

$$(II-44) \quad E_f(N) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{1}{3} \frac{l^2 p^2}{\ell_0^3} - \frac{1}{3} \frac{l p^2}{\ell_0^3} \frac{1}{N^2} \right) .$$

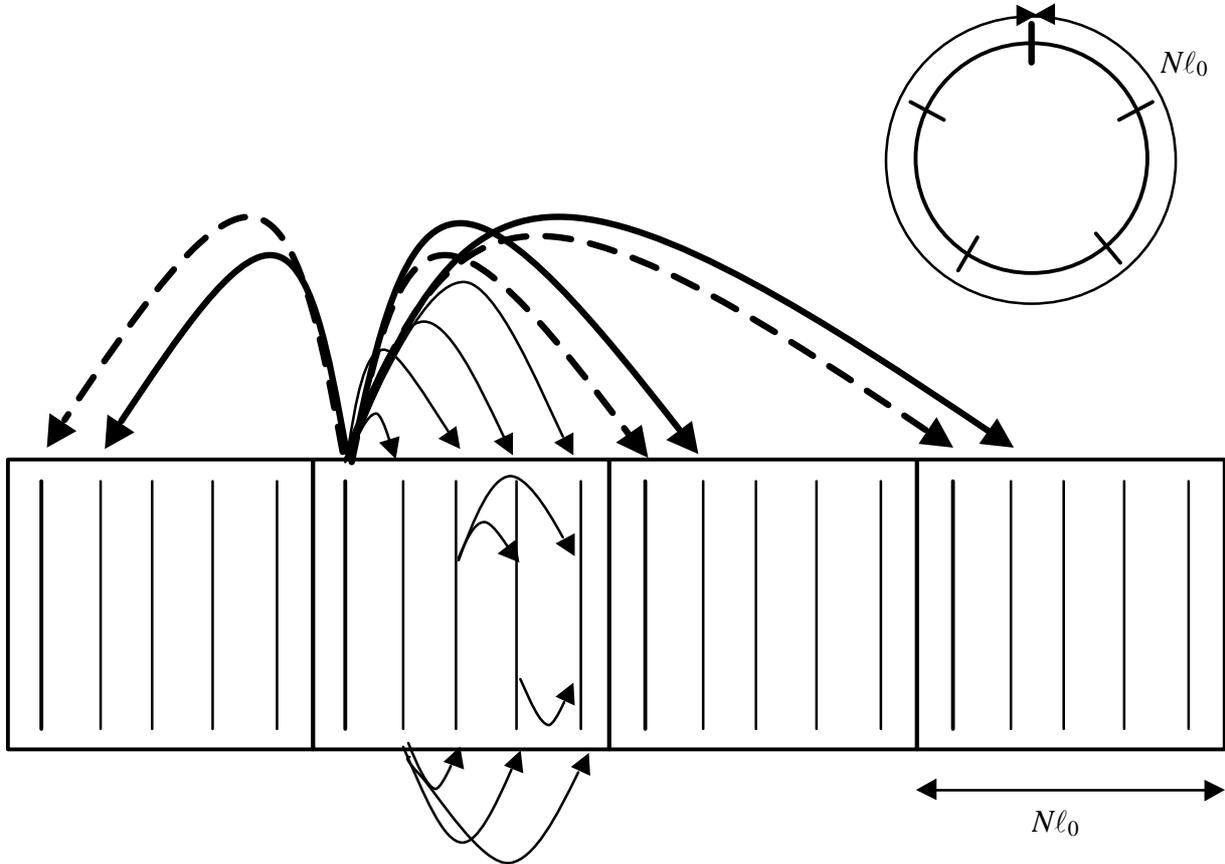


Figure II-5 : Représentation schématique des fermions en interaction : (—) interaction entre les fermions sur l'anneau; (???) exemple d'interaction entre un fermion de l'anneau et une image périodique d'un autre fermion. (? ?) interaction entre un fermion et son image périodique non comptabilisée dans la solution originale de Sutherland. La somme des interactions d'un fermion avec ses images périodiques doit être divisée par 2 afin de ne pas compter deux fois l'interaction. En haut à droite, représentation d'une coupe du cylindre de circonférence $N\ell_0$.

On voit que ce terme n'affecte pas l'énergie pour $N \rightarrow \infty$ mais modifie sa convergence en fonction de la taille du système. Bien que ce terme paraisse anodin, nous verrons par la suite qu'il est essentiel pour obtenir l'accord avec les autres approches (voir méthode du cylindre II-C.5).

L'équivalence avec le système de marches est obtenue en identifiant la rigidité du bord de marches $\tilde{b}(\mathbf{q} = 0, T) = k_B T / b^2(T)$ à la masse m des fermions, la direction le long des marches à un temps imaginaire découpé en intervalle $a_{//}$ et la température $k_B T$ à la constante

de Planck \hbar (voir annexe III). Avec cette équivalence, l'énergie de l'état fondamental du système de fermions devient l'énergie libre d'interaction entre marches à la température T :

$$(II-45) \quad F_{\text{int_mar}}(T) = \frac{1}{3} \frac{(\mathbf{I}_{\text{mar}})^2 \mathbf{P}^2}{\ell_0^3} \frac{k_B T b^2(T)}{2},$$

avec

$$(II-46) \quad \mathbf{I}_{\text{mar}} = \frac{1}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4A}{k_B T b^2(T)}} \right].$$

La solution n'est donc connue que dans le domaine $A \geq -\frac{k_B T b^2(T)}{4}$.

Par la suite on utilisera la notation :

$$(II-47) \quad F_{\text{int_mar}}(T) = \frac{\mathbf{d}_{\text{mar}}(T)}{(\ell_0)^3},$$

où

$$(II-48) \quad \mathbf{d}_{\text{mar}}(T) = \frac{\mathbf{P}^2}{6} k_B T b^2(T) (\mathbf{I}_{\text{mar}})^2.$$

II-C.2.2. Distribution des largeurs de terrasses

Connaissant la solution exacte du modèle des fermions en interaction donnée par Sutherland [19], et les fonctions de corrélation à n corps obtenues pour trois valeurs particulières de l'interaction $g = -1/2, 0$ et 4 (Dyson [20]), Joós *et al.* [21] ont déterminé la distribution des largeurs de terrasses. Pour le système de marches, ces trois valeurs particulières de l'interaction deviennent :

$$(II-49) \quad A_{\text{Suth-}} = -\frac{1}{4} k_B T b^2(T), A=0, \text{ et } A_{\text{Suth+}} = 2k_B T b^2(T).$$

Joós *et al.* [21] ont montré que les distributions des largeurs de terrasses obtenues suivaient une loi d'échelle (voir Figure II-6) :

$$(II-50) \quad \ell_0 D_1(\ell) = f_1\left(\frac{\ell}{\ell_0}\right).$$

Les détails sur le calcul des distributions, sur la justification de ces trois valeurs particulières de l'interaction, ainsi que sur l'origine de la loi d'échelle sont explicités dans l'annexe IV.

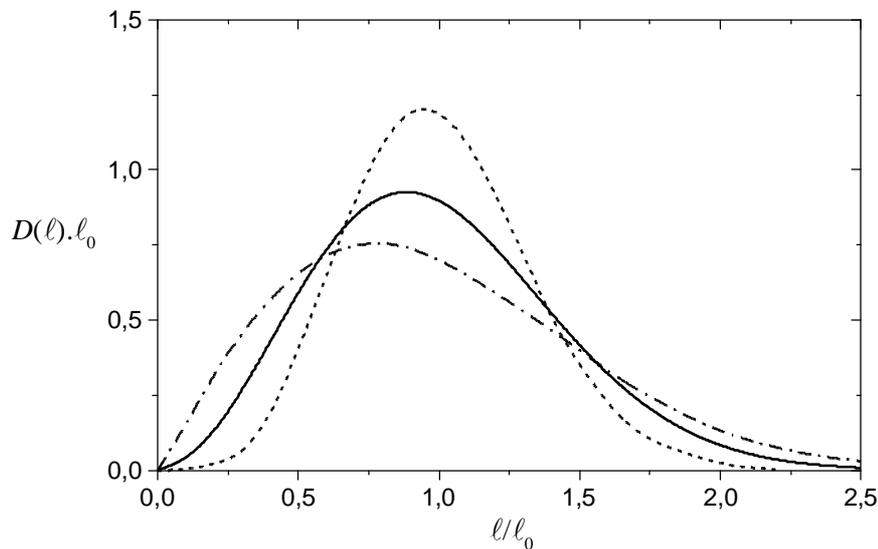


Figure II-6 : Distributions des largeurs de terrasses pour les trois valeurs de l'interaction : A_{Suth+} (---), $A=0$ (—) et A_{Suth-} (-·-·-·-). Joós *et al.* [21] ont montré que ces distributions suivent une loi d'échelle $\ell_0 D_\lambda(\ell) = f_\lambda(\ell/\ell_0)$.

Le modèle des fermions en interaction est un modèle de référence, car c'est une solution exacte. Il permet d'obtenir une expression pour l'énergie libre d'interaction entre marches et l'histogramme des largeurs de terrasses pour trois valeurs particulières de l'interaction.

Il faut cependant rappeler que ce modèle est un modèle continu, contrairement au système de marches cristallines. Nous verrons que cette différence conduit à des comportements contrastés dans le cas d'une interaction attractive.

II-C.3. Le modèle des ondes capillaires

Dans le cadre de ce modèle, décrit par l'expression (II-32) de l'énergie libre, on peut déterminer, en suivant la méthode de J. Villain *et al.* [14], les expressions analytiques des fonctions de corrélation dans les directions perpendiculaire et parallèle aux bords de marches (Les détails des calculs sont précisés dans l'annexe II). On obtient pour $G(m,0)$ et $G(0,y)$:

$$\begin{aligned}
 \text{(II-51)} \quad G(m,0) &= \frac{4k_B T}{(2\mathbf{p})^2} \int_0^{\mathbf{p}} \int_0^{\mathbf{p}} \frac{1 - \cos(q_x m)}{\mathbf{h}_x (1 - \cos(q_x)) + \mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y)) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)} dq_x dq_y \\
 &= \frac{k_B T}{\mathbf{p}} \int_0^{\mathbf{p}} \frac{1 - \cos(q_x m)}{\sqrt{\mathbf{h}_x (1 - \cos q_x) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)} \sqrt{2\mathbf{h}_y + \mathbf{h}_x (1 - \cos(q_x)) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)}} dq_x
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{(II-52)} \quad G(0,y) &= \frac{4k_B T}{(2\mathbf{p})^2} \int_0^{\mathbf{p}} \int_0^{\mathbf{p}} \frac{1 - \cos(q_y y)}{\mathbf{h}_x (1 - \cos(q_x)) + \mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y)) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)} dq_x dq_y \\
 &= \frac{k_B T}{\mathbf{p}} \int_0^{\mathbf{p}} \frac{1 - \cos(q_y y)}{\sqrt{\mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y)) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)} \sqrt{2\mathbf{h}_x + \mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y)) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)}} dq_y
 \end{aligned}$$

L'évaluation numérique de ces intégrales d'une fonction régulière ne pose pas de difficultés particulières.

Le modèle capillaire est un modèle continu, il ne tient pas compte de la structure microscopique de la surface, qui est considérée comme une membrane. Ce modèle paraît donc plus approprié pour les surfaces ayant une distance moyenne entre marches ℓ_0 grande. Néanmoins, comme nous le verrons par la suite dans le cas du Cu(1,1,5) ($\ell_0=2.5$), les résultats obtenus avec ce modèle pour les petits ℓ_0 restent très satisfaisants.

Les expressions (II-51) et (II-52) sont valables aussi bien au-dessus qu'en-dessous de T_R , mais le comportement des fonctions de corrélation est singulièrement différent suivant que la surface est rugueuse ou non. Il est nécessaire, à présent, de préciser les propriétés des fonctions de corrélation ainsi que les expressions des rigidités de surface \mathbf{h}_x et \mathbf{h}_y suivant le domaine de température ($T < T_R$ et $T > T_R$) dans lequel on se place.

II-C.3.1. Cas rugueux ($T^3 T_R$)

Dans le cas d'une surface rugueuse le potentiel de localisation $V_{loc}(T)$ est nul, l'expression (II-32) se réduit alors à :

$$(II-53) \quad F_{cap} = \sum_{q_x < q_{xc}, q_y < q_{yc}} \left[\mathbf{h}_x (1 - \cos(q_x)) + \mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y)) \right] |h_q|^2 \quad ,$$

de même $G(m,0)$ et $G(0,y)$ deviennent :

$$(II-54) \quad G(m,0) = \frac{k_B T}{\mathbf{p}} \int_0^{\mathbf{p}} \frac{1 - \cos(q_x m)}{\sqrt{\mathbf{h}_x (1 - \cos q_x)} \sqrt{2\mathbf{h}_y + \mathbf{h}_x (1 - \cos(q_x))}} dq_x$$

$$(II-55) \quad G(0,y) = \frac{k_B T}{\mathbf{p}} \int_0^{\mathbf{p}} \frac{1 - \cos(q_y y)}{\sqrt{\mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y))} \sqrt{2\mathbf{h}_x + \mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y))}} dq_y \quad .$$

Les rigidités de surface \mathbf{h}_x et \mathbf{h}_y ont été déterminées par L. Barbier *et al.* [6] dans le cas d'une surface rugueuse :

$$(II-56) \quad \mathbf{h}_x = \frac{6F_{int}(\mathbf{q}_0, T)}{(\ell_0)^4}$$

$$(II-57) \quad \mathbf{h}_y = \left[\tilde{\mathbf{b}}(\mathbf{q}_0, T) \right] \cos^3(\mathbf{q}_0) + \frac{1}{(\ell_0)^2} \frac{d^2 F_{int}(\mathbf{q}_0, T)}{d(\tan \mathbf{q})^2}$$

\mathbf{h}_x et le second terme de \mathbf{h}_y dépendent de l'énergie libre d'interaction $F_{int}(\mathbf{q}_0, T)$. Ce terme comprend à la fois la répulsion entropique (condition de non croisement entre les marches) et l'interaction entre marches de type élastique. Ces deux interactions ne s'ajoutent pas linéairement. On peut utiliser comme expression analytique pour l'énergie d'interaction totale, celle donnée par Sutherland [19] (voir chapitre II-C.2)

$$(II-58) \quad F_{int}(\mathbf{q}, T) = \mathbf{d}_{mar}(\mathbf{q}, T) = \frac{\mathbf{p}^2}{6} k_B T b^2(\mathbf{q}, T) (\mathbf{l}_{mar})^2 \quad ,$$

avec

$$\mathbf{l}_{mar} = \frac{1}{2} \left[1 + \sqrt{1 + \frac{4A}{k_B T b^2(\mathbf{q}, T)}} \right] \quad .$$

Il apparaît clairement dans ces expressions que la dépendance en \mathbf{q} et T provient de $b^2(\mathbf{q}, T)$. Pour $\mathbf{q}=0$, $b^2(\mathbf{q}, T)$ est déterminée par l'expression (II-6), tandis que pour $\mathbf{q}\neq 0$, il est nécessaire d'utiliser l'expression donnée par Barbier *et al.* [6]. Connaissant $b^2(\mathbf{q}, T)$, les expressions (II-7) et (II-58) de $\tilde{\mathbf{b}}(\mathbf{q}, T)$ et de $F_{\text{int}}(\mathbf{q}, T)$, les rigidités de surface \mathbf{h}_x et \mathbf{h}_y peuvent être obtenues par les équations (II-56) et (II-57).

Ces expressions analytiques des rigidités obtenues à l'aide du modèle des fermions auront les mêmes caractéristiques que celui-ci : elles ne sont valables que pour $T \gg T_R$ et pour

$$\text{une interaction } A \geq -\frac{k_B T b^2(T)}{4}.$$

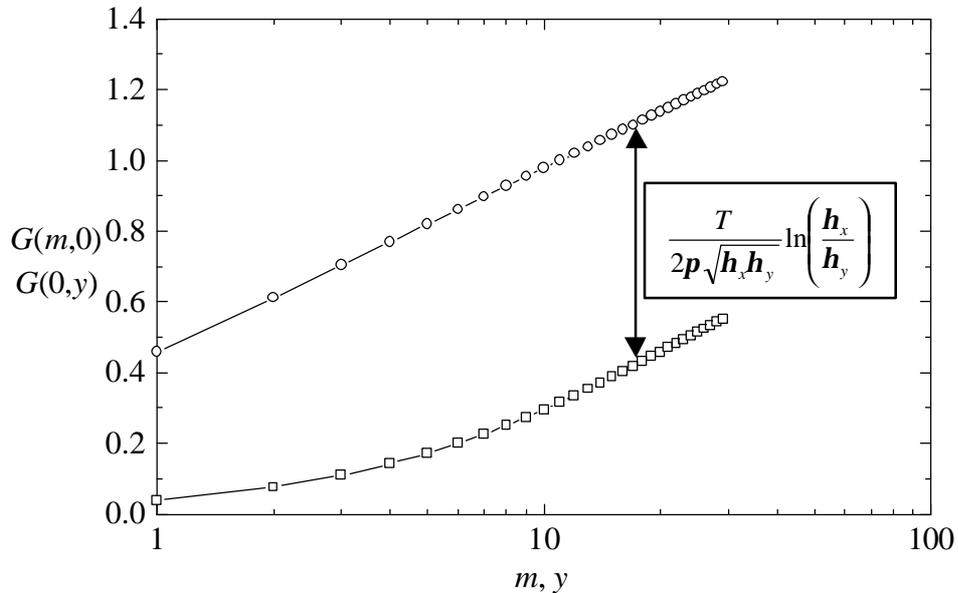


Figure II-7 : Fonctions de corrélation dans le cadre du modèle capillaire pour $\ell_0=2.5$ (face Cu(1,1,5)), $E_k=1430$ K, $A=70$ K et $T=400$ K ($>T_R=340$ K). (O) $G(m,0)$ Eq. (II-54), (?) $G(0,y)$ Eq. (II-55).

Les intégrales (II-54) et (II-55) peuvent, à présent, être calculées numériquement. On obtient (voir Figure II-7) pour $G(0, y)$ un comportement linéaire aux courtes distances. On

* Il n'existe pas non plus de solution analytique dans le cas d'une interaction limitée aux marches premières voisines.

note que la pente initiale, égale à la diffusivité d'une marche sur la surface $G(0,1) = \langle (h_{0,1} - h_{0,0})^2 \rangle$, dépend de l'interaction entre marches. Dans le cas des surfaces très anisotropes ($\mathbf{h}_y \gg \mathbf{h}_x$), $G(0,1)$ se réduit simplement à :

$$(II-59) \quad G(0,1) = \frac{k_B T}{\mathbf{h}_y} .$$

Pour les grandes valeurs de y , on retrouve le comportement logarithmique attendu pour une surface rugueuse et la différence entre les fonctions de corrélation dans les deux directions peut s'écrire [6] :

$$(II-60) \quad G(0, y = m) - G(m, 0) = \frac{T}{2p \sqrt{\mathbf{h}_x \mathbf{h}_y}} \ln \left(\frac{\mathbf{h}_x}{\mathbf{h}_y} \right) .$$

De plus, pour les surfaces très anisotropes ($\mathbf{h}_y \gg \mathbf{h}_x$), $G(m, 0)$ se réduit à [6] :

$$(II-61) \quad G(m, 0) = \frac{T}{p \sqrt{\mathbf{h}_x \mathbf{h}_y}} [\ln(m) + 2] \quad \text{pour } m > 0 \quad \text{et } G(0, 0) = 0 ,$$

soit :

$$(II-62) \quad G(m, 0) = \frac{G(1, 0)}{2} [\ln(m) + 2]$$

Cette formule montre que la connaissance du premier point de la fonction de corrélation détermine toute la courbe et que le préfacteur du logarithme est la moitié de la variance des largeurs de terrasses : $G(1, 0) = \langle (h_{1,0} - h_{0,0})^2 \rangle$. Ce dernier point est un critère important pour savoir si les fluctuations des marches observées sur les images STM sont des fluctuations thermiques ou non [6,22].

A la température de transition rugueuse T_R , le préfacteur des fonctions de corrélation est universel et égal à $\frac{2}{p^2}$, donc [14] :

$$(II-63) \quad \frac{k_B T_R}{p \sqrt{\mathbf{h}_x(T_R) \mathbf{h}_y(T_R)}} = \frac{2}{p^2}$$

Pour des interactions de type élastiques et des rigidités de surfaces telles que ($\mathbf{h}_y \gg \mathbf{h}_x$), le second terme $\left(\frac{1}{(\ell_0)^2} \frac{d^2 F_{\text{int}}(\mathbf{q}_0, T)}{d(\tan \mathbf{q})^2} \right)$ dans \mathbf{h}_y peut être négligé, alors l'équation (II-63) se réécrit en tenant compte des équations (II-56) et (II-57) :

$$(II-64) \quad \boxed{b^2(\mathbf{q}_0, E_k, T_R) k_B T_R = \frac{4A}{\left((\ell_0)^2 - 1 \right)^2 - 1}}.$$

Cette équation permet d'estimer la température de transition rugueuse pour un système de marches. Pour les petites distances moyennes entre marches ou pour des interactions fortes, il est nécessaire de résoudre numériquement l'équation (II-63).

Le modèle capillaire, associé au calcul des rigidités de surface dérivant du modèle des fermions, permet donc de déterminer les fonctions de corrélation dans les directions parallèle et perpendiculaire aux bords de marches pour une surface rugueuse, quelle que soit la distance moyenne entre marches ℓ_0 .

II-C.3.2. Cas non rugueux ($T < T_R$)

Pour les besoins de l'interprétation des expériences sur Cu(1,1,5), j'ai étendu le calcul précédent au cas d'une surface non rugueuse. Le potentiel de localisation $V_{loc}(T)$ est maintenant non nul. L'énergie libre et les fonctions de corrélation dans les directions parallèle et perpendiculaire aux marches sont données respectivement par les équations (II-32), (II-51) et (II-52). Pour ($T < T_R$), le modèle des fermions n'est plus valable, les rigidités de surface ne sont plus déterminées par les expressions (II-56) et (II-57). Il n'existe pas, à ma connaissance, d'expression analytique pour les rigidités de surface dans cette gamme de température.

Il apparaît clairement dans les équations (II-51) et (II-52) que la présence du potentiel de localisation V_{loc} détruit la divergence due aux courtes longueurs d'onde et supprime donc la divergence logarithmique. Ceci s'observe très bien sur la Figure II-8, où sont représentées les fonctions de corrélation calculées à $T=400$ K en utilisant les équations (II-54) et (II-55) (valable pour $T \geq T_R$) et les équations (II-51) et (II-52) (valables pour $T < T_R$) pour $A=180$ K et $E_k=1390$ K, le potentiel de localisation étant fixé arbitrairement à 1 K. Dans les deux cas, les rigidités de surface sont déterminées à partir des expressions (II-56) et (II-57).

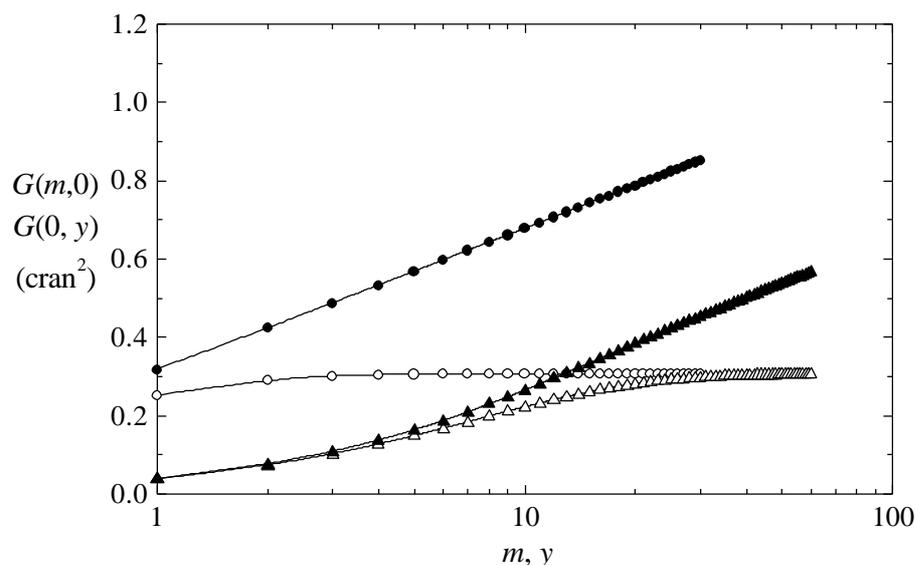


Figure II-8 : suppression de la divergence logarithmique pour $V_{loc} \neq 0$. (●) et (○) fonctions de corrélation obtenues pour $V_{loc}=0$ ((II-54) et (II-55)). (▲) et (△) fonctions de corrélation obtenues pour $V_{loc} \neq 0$ ((II-51) et (II-52)). Pour ces deux calculs les rigidités de surfaces $\mathbf{h}_x=66.5$ K et $\mathbf{h}_y=9654.8$ K sont déterminées à l'aide des expressions (II-56) et (II-57) ($T=400$ K, $A=180$ K, $E_k=1390$ K et V_{loc} choisi arbitrairement à 1 K).

Pour des surfaces très anisotropes ($\mathbf{h}_y \gg \mathbf{h}_x$), $G(0,1)$ se réduit simplement à :

$$(II-65) \quad G(0,1) = \frac{k_B T}{\mathbf{h}_y} \left[1 - \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{2\mathbf{h}_y}{\mathbf{h}_x + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}}}} \right].$$

Le terme entre crochet étant très proche de l'unité, cette égalité montre que l'équation (II-59) est encore valide sous T_R et que \mathbf{h}_y est simplement relié à $G(0,1)$.

De même pour ($\mathbf{h}_y \gg \mathbf{h}_x$), $G(1,0)$ se simplifie en :

$$(II-66) \quad G(1,0) = \frac{45}{64} \frac{k_B T}{\sqrt{\mathbf{h}_y (\mathbf{h}_x + 2\mathbf{p}^2 V_{loc})}} \left[1 - \frac{4}{45} \frac{(11\mathbf{h}_x + 13\mathbf{p}^2 V_{loc}) \mathbf{p}^2 V_{loc}}{(\mathbf{h}_x + 2\mathbf{p}^2 V_{loc})^2} \right]$$

Les fonctions de corrélation saturent toutes les deux à la même valeur donnée par :

$$(II-67) \quad G(0, y \rightarrow \infty) = G(m \rightarrow \infty, 0) = \frac{k_B T}{\sqrt{2h_y (h_x + 4p^2 V_{loc})}} .$$

Les trois paramètres h_x , h_y et V_{loc} peuvent a priori être déterminés à partir de la mesure de $G(1,0)$, $G(0,1)$ et de la valeur asymptotique des fonctions de corrélation. Cependant pour $T < T_R$, il est difficile de fixer la valeur de trois paramètres sur des fonctions de corrélations relativement plates. Seule une étude en température permet de déterminer une solution unique. Ce modèle ne nous permettra pas d'en déduire les paramètres A et E_k , les relations analytiques entre A , E_k et h_x , h_y n'étant connues que dans le cas d'une surface rugueuse. Ces paramètres pourront être déterminés par un calcul Monte Carlo ou la méthode du cylindre qui sont présentés ci-dessous.

II-C.4. La simulation Monte Carlo

II-C.4.1. Généralités

La simulation Monte Carlo [23,24,25] est une méthode numérique permettant de calculer des intégrales, en particulier des intégrales multiples, en ne considérant qu'un ensemble fini de configurations tirées aléatoirement dans l'espace des phases.

En physique statistique, la moyenne thermodynamique dans l'ensemble canonique d'une grandeur B est donnée par :

$$(II-68) \quad \langle B \rangle = \frac{1}{Z} \int B e^{-\frac{H(\mathbf{w})}{k_B T}} d\mathbf{w}$$

où $H(\mathbf{w})$ est l'hamiltonien de la configuration \mathbf{w} et Z est la fonction de partition du système.

L'intégrale portant sur tout le système peut être estimée en sommant les contributions de n configurations \mathbf{w}_i tirées aléatoirement, on a alors :

$$(II-69) \quad \langle B \rangle = \frac{\sum_{i=1}^n B(\mathbf{w}_i) f(\mathbf{w}_i)}{\sum_{i=1}^n f(\mathbf{w}_i)}$$

avec
$$f(\mathbf{w}_i) = e^{-\frac{H(\mathbf{w}_i)}{k_B T}} .$$

L'espace des phases étant en général multidimensionnel, le nombre de configurations nécessaire n pour obtenir une bonne estimation de la valeur moyenne est très grand. Cependant, toutes les configurations n'ont pas le même poids dans l'intégrale. Seules les configurations ayant un facteur de Boltzmann non négligeable seront à prendre en compte. Une façon de rendre accessible le calcul de l'intégrale est de choisir les configurations avec une probabilité $P(\mathbf{w}_i)$: c'est ce que l'on appelle *l'échantillonnage par l'importance*.

En choisissant la probabilité donnée par la distribution à l'équilibre, soit :

$$(II-70) \quad P(\mathbf{w}) = \frac{f(\mathbf{w})}{Z} ,$$

la valeur moyenne de B se réduit à :

$$(II-71) \quad \langle B \rangle = \frac{\sum_{i=1}^n B(\mathbf{w}_i)}{n} .$$

A ce stade il est nécessaire d'avoir un algorithme permettant de générer des états distribués selon $P(\mathbf{w})$ sans avoir à calculer Z . C'est le rôle de l'algorithme de *Métropolis*. En 1953, Métropolis *et al.* [26] ont introduit l'idée qu'un système thermodynamique simulé devait passer d'une configuration d'énergie $H(\mathbf{w}_0)$ à une configuration d'énergie $H(\mathbf{w}_1)$ avec la probabilité :

$$(II-72) \quad P(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_0) = e^{-\frac{(H(\mathbf{w}_1) - H(\mathbf{w}_0))}{k_B T}} .$$

On peut noter que si $H(\mathbf{w}_1) < H(\mathbf{w}_0)$, cette probabilité est supérieure à l'unité, dans ce cas la probabilité $P(\mathbf{w}_1, \mathbf{w}_0)$ est posée égale à 1, c'est-à-dire que le système choisit toujours cette option. Pour obtenir la valeur moyenne, il suffit de choisir une configuration initiale, souvent correspondant à l'état du système à température nulle, d'appliquer l'algorithme de Métropolis et d'utiliser les configurations ainsi obtenues une fois l'équilibre atteint. Le critère d'équilibre doit être choisi en fonction du système étudié.

La méthode Monte Carlo peut être considérée comme une méthode de calcul de valeur moyenne ou d'intégrale (cf. Eq (II-68)), mais elle peut aussi être considérée comme une méthode de simulation de systèmes physiques. En effet, en construisant par l'algorithme de Métropolis des configurations distribuées selon $P(\omega)$, on génère des configurations réelles sur lesquelles s'appuie le calcul des valeurs moyennes. Générer ces configurations revient à simuler numériquement le système thermodynamique étudié. Dans notre cas, il s'agira d'images de la surface telles que celles présentées au chapitre I-D.2. .

II-C.4.2. Cas des surfaces vicinales

La méthode Monte Carlo permet de simuler numériquement une surface connaissant son hamiltonien. L'hamiltonien utilisé ici est donné par l'expression (II-28). L'interaction entre marches est limitée aux marches premières voisines (du fait des contraintes imposées par la vectorisation du programme). Le potentiel peut prendre n'importe quelle forme, nous avons utilisé ici un potentiel d'interaction de type élastique en $\frac{A}{\ell^2}$.

La TWD et les fonctions de corrélation sont calculées, seule l'énergie libre n'est pas accessible par cette méthode car la fonction de partition n'est pas déterminée (c'est tout l'intérêt de l'algorithme de Métropolis).

Le système utilisé pour les simulations est formé de N_m marches comportant chacune N_s sites. Des conditions aux limites périodiques sont imposées dans les deux directions : $h_{N_m+1,y} = h_{1,y}$ et $h_{m,N_s+1} = h_{m,1}$. La configuration initiale est constituée de marches droites séparées par la distance moyenne ℓ_0 (état du système à température nulle).

L'algorithme Monte Carlo sur chaque site (m, y) de la configuration se déroule de la façon suivante :

1. Soit la position de départ $h_{m,y}$.
2. Un premier tirage aléatoire définit une nouvelle position possible $h'_{m,y}$ du site : soit la marche forme un cran simple (positif ou négatif), soit elle reste à la même position.
3. Calcul de la probabilité de transition $P(h'_{m,y}, h_{m,y})$.

4. La nouvelle position est acceptée ou refusée suivant l'algorithme de Métropolis :

a/ si $P(h'_{m,y}, h_{m,y}) = 1$ la nouvelle configuration est conservée.

b/ si $P(h'_{m,y}, h_{m,y}) < 1$ on tire un nombre aléatoire $0 < R < 1$ avec une distribution uniforme et si $R < P(h'_{m,y}, h_{m,y})$ la nouvelle position $h'_{m,y}$ est retenue, dans le cas contraire la configuration initiale $h_{m,y}$ est conservée.

Cet algorithme est appliqué à tous les sites de la surface, ce qui définit un "*pas*" Monte Carlo. Dix pas Monte Carlo séparent deux *configurations* prises en compte dans l'estimation des valeurs moyennes.

Pour notre problème, l'état initial est le réseau parfait de marches associé à la température nulle. La TWD et les fonctions de corrélation ne sont mesurées que sur les configurations à l'équilibre thermodynamique à la température T . Ceci revient à ne pas tenir compte des configurations correspondant à la transition entre le réseau régulier initial et le réseau à l'équilibre thermodynamique. Afin de savoir à partir de quelle configuration la valeur moyenne peut être calculée, il faut étudier l'évolution des fonctions de corrélation au cours du calcul.

La Figure II-9 et la Figure II-10 montrent l'évolution de $G(m=1)$, $G(m=11)$ et $G(y=1)$, $G(y=11)$ en fonction du nombre de configurations $nconf$ construites depuis la configuration initiale. On observe que dans la direction m (cf. Figure II-9) l'équilibre est atteint après 200 configurations Monte Carlo pour $G(m=1)$ et 3500 configurations pour $G(m=11)$. Dans la direction y (cf. Figure II-10) la convergence est rapide aussi bien à longue qu'à courte distance (40 configurations pour $G(y=1)$ et $G(y=11)$). Dans la pratique, pour accélérer la convergence, on prend comme configuration initiale la dernière configuration d'une simulation précédemment réalisée.

Il faut associer aux fonctions de corrélation et à la distribution des largeurs de terrasses obtenues en faisant la moyenne sur des configurations à l'équilibre thermodynamique un intervalle de confiance ou erreur. En toute rigueur, cet intervalle devrait être obtenu en calculant l'écart quadratique moyen sur un grand nombre de calculs Monte Carlo identiques. Afin de limiter les calculs, l'écart quadratique moyen est plus simplement déterminé sur nv valeurs moyennes partielles calculées chacune sur un ensemble de nc configurations distinctes (cf. Figure II-11).

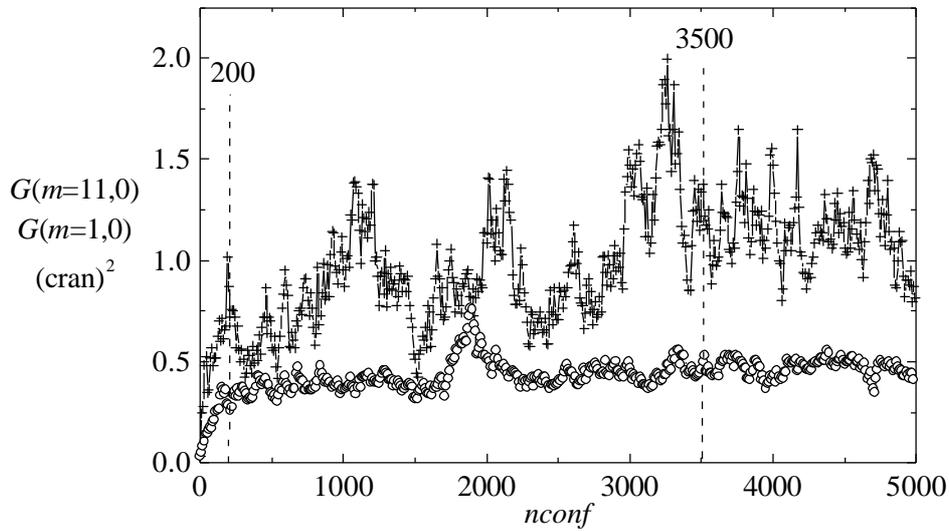


Figure II-9 : Evolution de la fonction de corrélation $G(m,0)$ en $m=1$ (○) et $m=11$ (×) en fonction du nombre de configurations $nconf$ générées à partir de l'état initial. Calcul réalisé sur un système de 76 marches \times 1300 sites, $T=300$ K, $E_k=1430$ K, $A=70$ K et $\ell_0=2.5$.

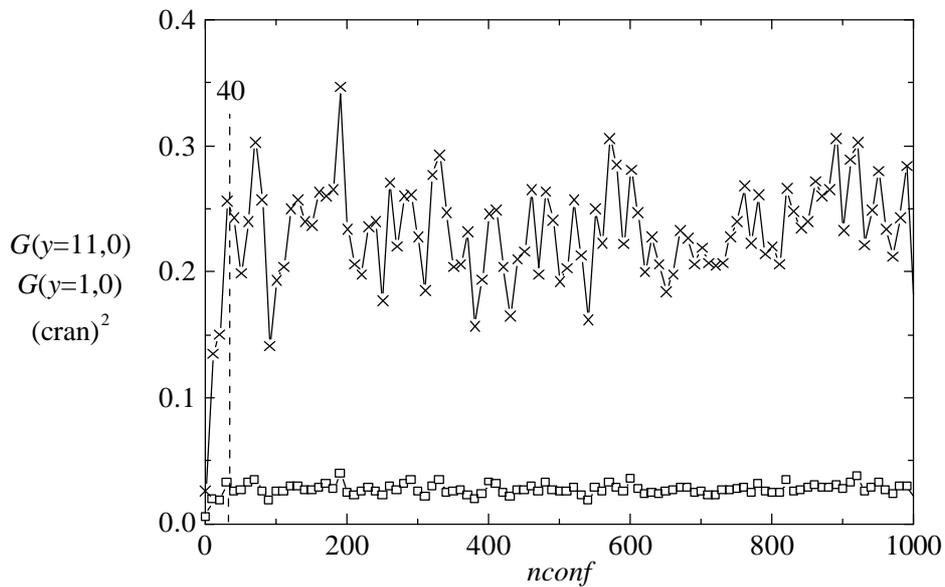


Figure II-10 : Evolution de la fonction de corrélation $G(0,y)$ en $y=1$ (□) et $y=11$ (×) en fonction du nombre de configurations $nconf$ générées à partir de l'état initial. Calcul réalisé sur un système de 76 marches \times 1300 sites, $T=300$ K, $E_k=1430$ K, $A=70$ K et $\ell_0=2.5$.

Le choix de la taille du système utilisé (le nombre de marches et le nombre de sites sur chaque marche) a été guidé par l'observation de deux effets :

- Les fonctions de corrélation ne peuvent être obtenues que pour des distances (m ou y) inférieures à la moitié de la taille du système du fait des conditions aux limites périodiques ($G(m=N_m+1)=0$ et $G(y=N_s+1)=0$).
- La fonction de corrélation dans la direction m révèle un comportement linéaire pour une longueur insuffisante des marches. Ceci est dû au nombre insuffisant de collisions entre marches qui conduit au comportement d'un ensemble de marches isolées [27].

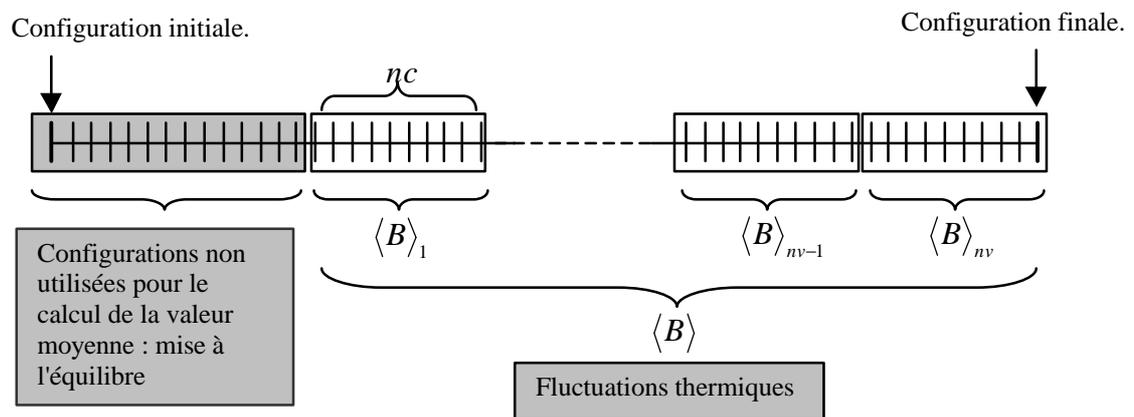


Figure II-11 : Schéma du calcul d'erreur sur la simulation Monte Carlo. Les traits verticaux symbolisent les configurations. La valeur moyenne de la grandeur B (qui peut être un point de la TWD ou des fonctions de corrélation) est calculée sur toutes les configurations à l'équilibre. Les valeurs moyennes partielles $\langle B \rangle_i$ sont, quant à elles, déterminées sur nv intervalles comportant chacun nc configurations à l'équilibre.

Les simulations Monte Carlo permettent de déterminer la distribution des largeurs de terrasses et les fonctions de corrélation parallèlement et perpendiculairement à la direction des marches quelle que soit la température du système. Elles permettent donc de déterminer A et E_k en les ajustant sur les fonctions de corrélation mesurées sur les images STM. De plus, les configurations générées peuvent être directement comparées aux images STM obtenues.

II-C.5. La méthode du cylindre

II-C.5.1. Introduction

Le modèle défini par l'hamiltonien (II-28) peut être résolu par la méthode du cylindre qui est une méthode de matrice de transfert. Cette méthode est appliquée ici pour la première fois au cas des surfaces vicinales [28]. Elle a été utilisée précédemment pour étudier de nombreux systèmes car elle apparaît être le meilleur moyen de déterminer l'énergie libre (voir M. den Nijs *et al* [29], J. M. Luck *et al* [30] ou H. J. Schulz [13]). En plus de l'énergie libre, la distribution des largeurs de terrasses et la fonction de corrélation dans la direction parallèle aux marches $G(0, y)$ peuvent être obtenues.

Cette méthode est une généralisation à plusieurs marches de celle présentée au chapitre II-B.3.3. . Dans une première étape on considère un système constitué d'un petit nombre de marches N de longueur infinie puis, afin d'obtenir les résultats pour une surface infinie, on étudie la convergence en fonction de N ($N \rightarrow \infty$).

II-C.5.2. Présentation de la méthode

Le système initial se compose de N marches de longueur infinie placées sur un cylindre. Dans la direction des marches tous les sites sont équivalents. Dans la direction perpendiculaire, les marches sont séparées en moyenne par ℓ_0 sites et respectent la condition de non croisement. Des conditions aux limites périodiques sont appliquées parallèlement et perpendiculairement à la direction des marches. Le système complet forme un tore qui tend vers un cylindre pour des marches de longueur infinie (voir Figure II-12). La méthode est applicable pour toute forme de potentiel.

La position par rapport à sa position d'équilibre de la marche m sur le site y est notée $h_{m,y}$. Sur chaque site y , une même marche est prise comme **marche de référence** ($m=0$) et est utilisée comme limite périodique. C'est à partir de sa position que sont référencées les positions des autres marches distribuées sur les $N\ell_0-1$ sites restants.

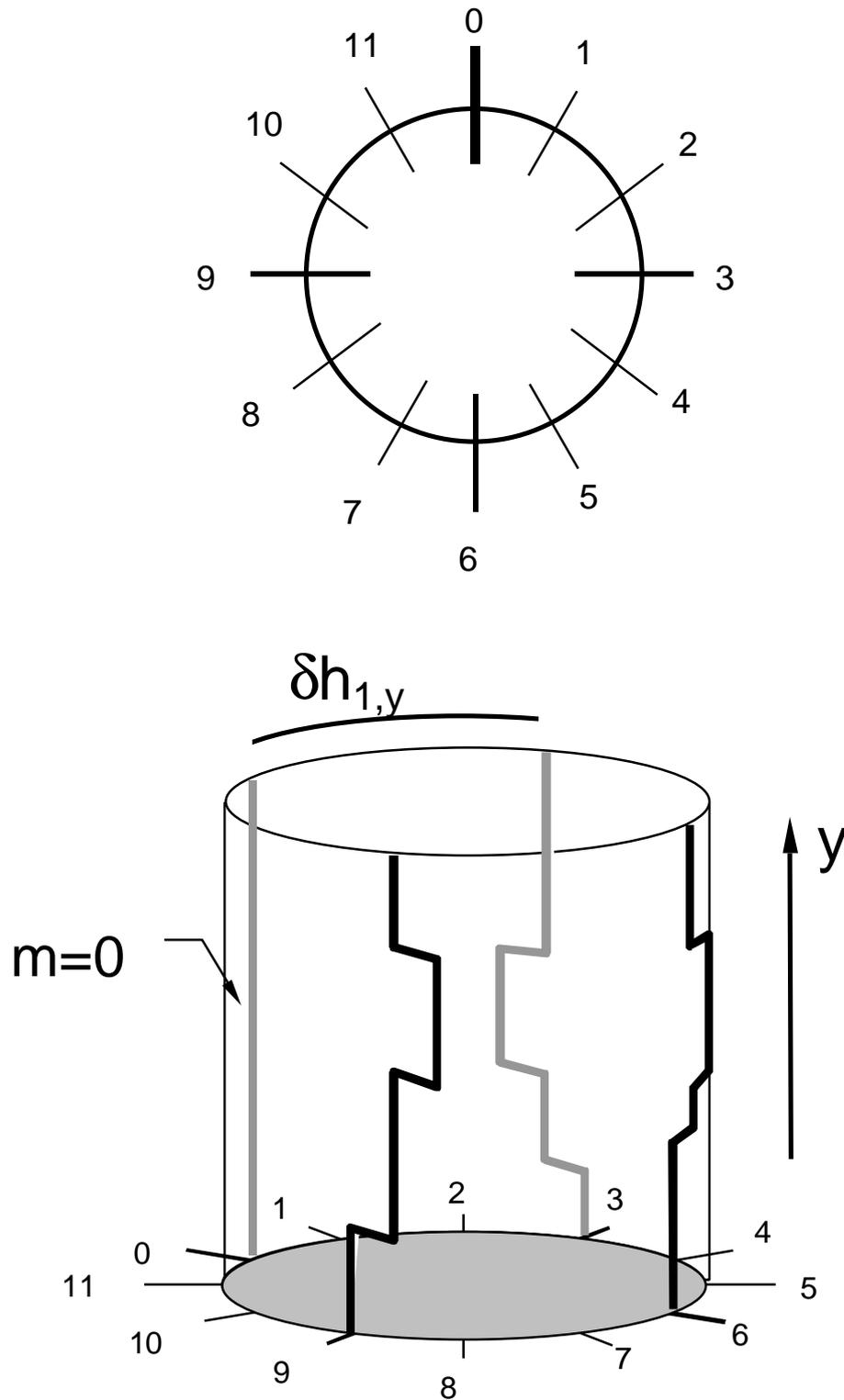


Figure II-12 : Schéma d'un cylindre constitué de $N=4$ marches, $\ell_0=3$. A chaque site y les marches sont localisées par leur position relative $|\Delta h_y\rangle = \{dh_{1,y}, dh_{2,y}, \dots, dh_{N-1,y}\}$ par rapport à la marche de référence. La marche $m=0$ forme des crans mais elle est prise comme origine pour chaque site y .

Une configuration des marches sur un site (pour laquelle on utilisera la notation bracket) est décrite par l'ensemble de ces distances relatives $\mathbf{d}h_{m,y} = h_{m,y} + m\ell_0 - h_{0,y}$:

$$(II-73) \quad \begin{aligned} |\Delta h_y\rangle &= \{(h_{1,y} + \ell_0 - h_{0,y}), (h_{2,y} + 2\ell_0 - h_{0,y}), \dots, (h_{N-1,y} + (N-1)\ell_0 - h_{0,y})\} \\ &= \{\mathbf{d}h_{1,y}, \mathbf{d}h_{2,y}, \dots, \mathbf{d}h_{N-1,y}\} \end{aligned}$$

Pour chaque site y , le nombre total N_C de configurations $|\Delta h\rangle$ est donné par :

$$(II-74) \quad N_C = \frac{(N\ell_0 - 1)!}{(N-1)!(N\ell_0 - N)!}$$

Nombre de marches N	Nombre de configurations N_C					
	Distance moyenne entre marches ℓ_0					
	2	3	4	5	6	7
2	3	5	7	9	11	13
3	10	28	55	91	136	190
4	35	165	455	969	1771	2925
5	126	1001	3876	10626	23751	46376
6	462	6188	33649	118755	324632	749398

Table 1 : nombre de configurations possibles N_C pour un nombre de marches N et une distance moyenne entre marches ℓ_0 donnés. Dans la pratique on se limite à $N_C < 4000$.

Le nombre de configurations N_C croît très rapidement avec N et ℓ_0 comme le montre la Table 1. En pratique, des calculs comportant jusqu'à trois à quatre mille configurations sont réalisables sur un PC ou une station de travail. De plus, comme nous le verrons ultérieurement lors de l'étude de la convergence, les calculs avec $N=2, 3$ et 4 sont suffisants pour déterminer le comportement d'un système infini de marches.

II-C.5.3. Fonction de partition, énergie libre

Calcul de l'énergie libre

L'énergie d'un ensemble de N marches constituées chacune de N_s sites est donnée par :

$$(II-75) \quad H = \sum_{y=0}^{N_s-1} H(y)$$

avec

$$(II-76) \quad H(y) = \sum_{m=0}^{N-1} \left[|h_{m,y+1} - h_{m,y}| E_k + \sum_{m'>m} V_{\text{sym}}(\mathbf{d}h_{m',y+1}, \mathbf{d}h_{m,y+1}, \mathbf{d}h_{m',y}, \mathbf{d}h_{m,y}) \right]$$

où le deuxième terme est le potentiel d'interaction symétrisé :

$$(II-77) \quad V_{\text{sym}}(\mathbf{d}h_{m',y+1}, \mathbf{d}h_{m,y+1}, \mathbf{d}h_{m',y}, \mathbf{d}h_{m,y}) = \frac{V(\mathbf{d}h_{m',y+1} - \mathbf{d}h_{m,y+1}) + V(\mathbf{d}h_{m',y} - \mathbf{d}h_{m,y})}{2}.$$

La fonction de partition du système s'écrit en tenant compte des conditions aux limites périodiques ($h_{N_s} = h_0$) :

$$(II-78) \quad Z = \sum_{\Delta h_0, \Delta h_1, \dots, \Delta h_{N_s-1}} \langle \Delta h_0 | \hat{T} | \Delta h_1 \rangle \langle \Delta h_1 | \hat{T} | \Delta h_2 \rangle \dots \langle \Delta h_{N_s-1} | \hat{T} | \Delta h_0 \rangle$$

avec \hat{T} la **matrice de transfert** dont les éléments sont définis par,

$$(II-79) \quad \langle \Delta h' | \hat{T} | \Delta h \rangle = \langle \Delta h' | \sum_{n=0, \pm 1, \pm 2, \dots} e^{-\frac{\mathbf{d}H_n(y)}{k_B T}} | \Delta h \rangle,$$

où l'énergie $\mathbf{d}H_n(y)$ associée au déplacement $\mathbb{1}h_{0,y+1} = h_{0,y+1} - h_{0,y} = n$ de la marche de référence s'écrit :

$$(II-80) \quad \mathbf{d}H_n(y) = |n| E_k + \sum_{m=1}^{N-1} \left[|\mathbf{d}h_{m,y+1} - \mathbf{d}h_{m,y} + n| E_k + \sum_{m'>m} V(\mathbf{d}h_{m',y+1}, \mathbf{d}h_{m,y+1}, \mathbf{d}h_{m',y}, \mathbf{d}h_{m,y}) \right].$$

La matrice \hat{T} apparaît comme la somme de plusieurs matrices \hat{T}_n associées chacune à une valeur de la taille n des crans de la marche de référence :

$$(II-81) \quad \langle \Delta h' | \hat{T} | \Delta h \rangle = \sum_{n=0, \pm 1, \pm 2, \dots} \langle \Delta h' | \hat{T}_n | \Delta h \rangle = \sum_{n=0, \pm 1, \pm 2, \dots} \langle \Delta h' | e^{-\frac{dH_n(y)}{k_B T}} | \Delta h \rangle.$$

Pour des marches de longueur infinie ($N_S \rightarrow \infty$) Z devient, en utilisant la valeur propre maximale Λ_{\max} de \hat{T} (voir Eq. 33 annexe I),

$$(II-82) \quad Z = \lim_{N_S \rightarrow \infty} (\Lambda_{\max})^{N_S}$$

et l'énergie libre par site et par unité d'aire projetée sur le plan des terrasses s'écrit :

$$(II-83) \quad F_{mar}(N, T) = -\frac{k_B T}{N \ell_0} \ln(\Lambda_{\max}).$$

On obtient ainsi l'énergie libre d'un ensemble de N marches de longueur infinie. L'énergie libre à la limite thermodynamique est déduite par extrapolation pour $N \rightarrow \infty$.

Convergence de l'énergie libre

L'étude de la convergence de l'énergie libre en fonction du nombre N de marches a pour objectif la détermination d'une loi (analyse FSS : Finite Size Scaling) permettant d'extrapoler les résultats pour $N \rightarrow \infty$. Cette analyse est indispensable dans l'étude des systèmes critiques qui présentent une longueur de corrélation des fluctuations infinie [31,32,33].

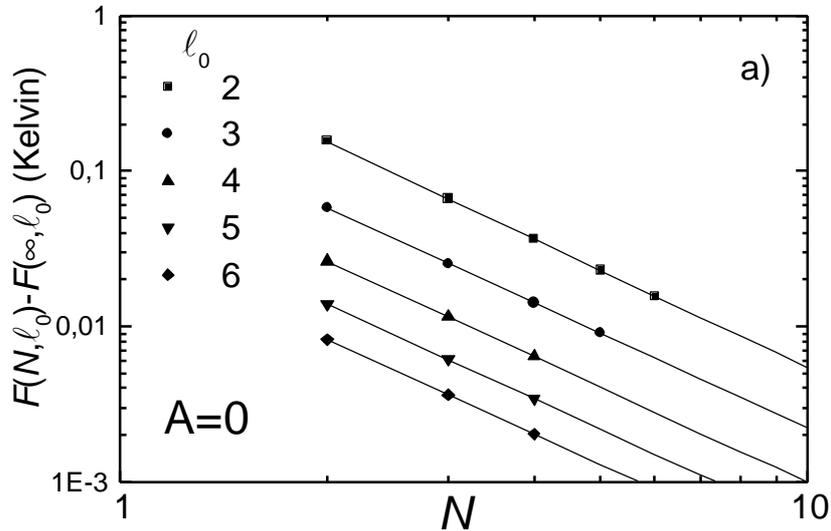
La Figure II-13a montre l'évolution de l'énergie libre par site atomique en fonction du nombre N de marches par la méthode du cylindre pour $A=0$ K. On observe que la convergence suit une loi de puissance en a/N^ϵ $\epsilon \sim 2$. Le même comportement est obtenu pour $A=A_{Suhl}^+$.

Dans le modèle des fermions, la variation de l'énergie libre par site en fonction du nombre de marches N est donnée par l'équation (II-44). En faisant l'équivalence avec le système de marches, on obtient pour l'énergie libre par site :

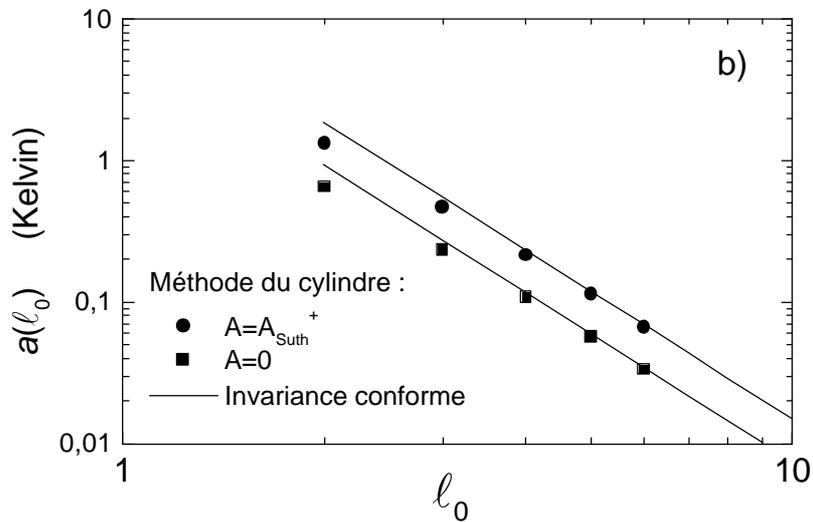
$$(II-84) \quad F_{mar}(N) = F_{mar}(\infty) - a(\ell_0, \mathbf{I}) \frac{1}{(N)^2},$$

où le préfacteur du terme en $1/N^2$ s'écrit :

$$(II-85) \quad a(\ell_0, \mathbf{I}) = \frac{1 p^2 k_B T b^2(T)}{6} \frac{1}{\ell_0^3} .$$



a)



b)

Figure II-13 : Variation de l'énergie libre par site en fonction du nombre de marches N . a) $F(N, \ell_0)$ en fonction de N . (—) ajustement par une loi en $a(\ell_0, \mathbf{I})/N^2$ (pour $A=0$ K, $\ell_0=2$ à 6 , $T=293$ K et $E_k=1430$ K). b) variation du préfacteur $a(\ell_0, \mathbf{I})$ de $1/N^2$ en fonction de ℓ_0 pour $A=0$ K (■) et $A=A_{Suth}^+$ (●). Le préfacteur dépend de l'interaction en accord avec le facteur d'anisotropie: (—) Eq. (II-85) ou (II-92).

Les préfacteurs obtenus par les deux méthodes sont identiques (voir Figure II-13b). Pour la première fois, on montre ici de façon précise qu'un modèle sur sites et le modèle des fermions (sans sites) conduisent au même résultat pour $T^{\mathcal{S}}T_R$.

Le comportement en loi de puissance est en fait très général comme le montre la théorie de *l'invariance conforme* dont une application importante est de décrire les effets de taille finie pour un système critique. Je ne donnerai ici que les idées essentielles permettant de comprendre pourquoi l'invariance conforme est introduite. Il existe dans la littérature plusieurs ouvrages qui traitent du sujet pour le lecteur intéressé [34,35,36].

Une transformation est appelée *conforme* si elle conserve les angles. Il existe une transformation conforme permettant de transformer un plan infini en un cylindre, elle est donnée par :

$$(II-86) \quad w = \frac{L}{2\mathbf{p}} \ln(z) \quad \text{ou} \quad z = \exp\left(\frac{2\mathbf{p} w}{L}\right)$$

où z et w sont respectivement les affixes d'un point dans le plan et sur le cylindre. L est la circonférence du cylindre. Si on pose :

$$(II-87) \quad z = r \exp(iq)$$

on obtient :

$$(II-88) \quad w = \frac{L}{2\mathbf{p}} [\ln(r) + iq] .$$

La Figure II-14 illustre la transformation du plan infini en cylindre. On observe qu'un cercle se transforme en un segment de droite et que les angles sont bien conservés. Au cours de cette transformation, l'introduction de conditions aux limites périodiques introduit dans l'énergie libre d'un système classique à deux dimensions un terme supplémentaire dépendant de la taille du cylindre L . La théorie de l'invariance conforme prédit une dépendance en $1/L^2$ de l'énergie libre par site en fonction de L pour un *système critique isotrope* [37] :

$$(II-89) \quad F_{iso}(L) = F_{iso}(\infty) - \frac{\mathbf{p} c}{6L^2} k_B T ,$$

où c est une constante appelée *anomalie conforme* ou *charge centrale*. Cette constante caractérise le comportement critique du système.

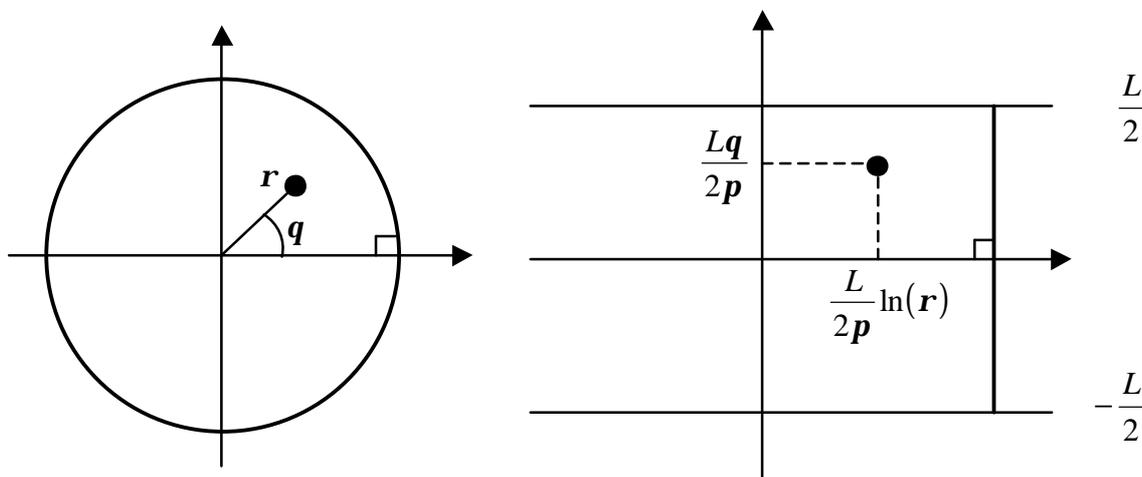


Figure II-14 : Transformation d'un plan infini en un cylindre (conditions aux limites périodiques en $-L/2$ et $L/2$) : transformation d'un point de coordonnées (\mathbf{r}, \mathbf{q}) dans le plan en un point de coordonnées $\left(\frac{L\mathbf{q}}{2\mathbf{p}}, \frac{L}{2\mathbf{p}} \ln(\mathbf{r})\right)$ sur le cylindre. Un cercle dans le plan devient un segment de droite vertical allant de $-L/2$ à $L/2$.

Pour un modèle Gaussien, $c=1$. Or, Knops [38] a montré l'identité entre le modèle SOS et le modèle classique XY qui est du type Gaussien. La charge centrale pour le système de marches est donc $c=1$.

Pour un système quantique anisotrope, une expression similaire est obtenue en introduisant un facteur d'anisotropie \mathbf{n} [37,39]:

$$(II-90) \quad E_0(N) = E_0(\infty) - \frac{\mathbf{p} \, c \, \nu}{6 \, L^2},$$

L'énergie donnée par le modèle de Calogero Sutherland [18,19,40] peut se réécrire en fonction de la taille du système $L=N\ell_0$, de façon identique à (II-90) :

$$(II-91) \quad E_f(N) = E_f(\infty) - \frac{\mathbf{p} \, \nu}{6(N\ell_0)^2}.$$

où $\nu = \frac{2pl}{\ell_0}$ est le facteur traduisant l'anisotropie énergétique et géométrique du système et $c=1$.

La valeur correcte de la charge centrale $c=1$ est obtenue ici à condition de corriger le potentiel périodique utilisé par Sutherland [19] (sinon $c=I$). Cette correction que nous avons introduite au paragraphe II-C.2 résout l'incohérence observée par N. Kawakami *et al.* [40] qui avaient obtenu deux valeurs différentes de la charge centrale : $c=I$ en utilisant la solution donnée par Sutherland pour l'énergie de l'état fondamental et $c=1$ en développant l'énergie libre du système quantique à basse température.

Cependant, le modèle des fermions ne comportant pas de sites, il peut être nécessaire d'avoir une meilleure expression du facteur d'anisotropie afin de tenir compte des effets de réseau pour le système de marches. On peut réécrire le préfacteur $a(\ell_0, I)$ décrit par l'équation (II-85) sous la forme :

$$(II-92) \quad a(\ell_0, I) = \frac{pk_B T}{6\ell_0^2} \left(\frac{plb^2(T)}{\ell_0} \right),$$

le terme entre parenthèse étant le facteur d'anisotropie. Ce terme peut se réécrire en introduisant l'anisotropie énergétique via le rapport des rigidités de surface \mathbf{h}_x et \mathbf{h}_y (obtenu par l'approche capillaire, voir paragraphe II-C.3) et l'anisotropie géométrique $\ell_0/1$:

$$(II-93) \quad \frac{plb^2(T)}{\ell_0} = \ell_0 \sqrt{\frac{\mathbf{h}_x}{\mathbf{h}_y}}, \text{ d'où}$$

$$(II-94) \quad a(\ell_0, \mathbf{h}_x, \mathbf{h}_y) = \frac{pk_B T}{6\ell_0} \sqrt{\frac{\mathbf{h}_x}{\mathbf{h}_y}}.$$

Je conjecture que l'expression (II-94), obtenue à partir de l'équation (II-57) en négligeant le second terme est encore valable avec l'expression complète. Ceci s'appuie sur la comparaison numérique avec la méthode du cylindre en fonction de ℓ_0 , pour $I=1$ et $I=2$, représentée sur la Figure II-13b. La même expression du terme d'anisotropie peut aussi être obtenue par le modèle capillaire pour un système de taille finie sur sites avec des conditions aux limites périodiques [41].

Les effets de taille finie obtenus dans le cadre de l'invariance conforme nécessite que le système soit critique (longueur de corrélation des fluctuations infinie*). Par conséquent l'évolution de l'énergie libre avec la taille du système décrit par l'équation (II-89) n'est valable, pour notre système de marches, qu'au-dessus de T_R , domaine de température où le système est toujours critique. Pour $T < T_R$, cette hypothèse n'est plus vérifiée et la valeur finie de la longueur de corrélation entraîne une convergence plus rapide ($\epsilon > 2$) de l'énergie libre. Le comportement de la convergence permet donc de déterminer si un système est critique ou non, c'est-à-dire dans notre cas si la surface est rugueuse ou non.

Pour la distribution des largeurs de terrasses et la fonction de corrélation dans la direction y , les valeurs convergées sont obtenues de façon similaire en ajustant la variation de ces grandeurs avec le nombre de marches N par une loi en a/N^e .

II-C.5.4. Distribution des largeurs de terrasses

La distribution des largeurs de terrasses $D(dh)$ est déterminée par la probabilité $P(\Delta h_i)$ d'être dans une configuration donnée $|\Delta h_i\rangle$ sur un site y quelconque. Cette probabilité (voir annexe I) est égale au module carré de la composante i du vecteur propre Ψ_{\max} de la matrice de transfert associé à la valeur propre maximum Λ_{\max} , soit :

$$(II-95) \quad P(\Delta h_i) = \left| \langle \Delta h_i | \Psi_{\max} \rangle \right|^2 = \left| (\Psi_{\max})_i \right|^2 .$$

La distribution des largeurs de terrasses s'en déduit simplement :

$$(II-96) \quad D(dh) = \sum_i \left| \langle \Delta h_i | \Psi_{\max} \rangle \right|^2 \langle \Delta h_i | (\mathbf{d}h_{m,y} \hat{=} dh) | \Delta h_i \rangle$$

où l'opérateur $(\mathbf{d}h_{m,y} \hat{=} dh)$ est défini par :

$$(II-97) \quad \langle \Delta h_i | (\mathbf{d}h_{m,y} \hat{=} dh) | \Delta h_i \rangle = 1 \quad si, \quad \left((\mathbf{d}h_{m+1,y})_i - (\mathbf{d}h_{m,y})_i \right) = dh$$

$$= 0 \quad \text{autrement,}$$

* Un ordre de grandeur de la longueur de corrélation est donné par la distance à laquelle les fonctions de corrélation des fluctuations spatiales atteignent leur valeur à l'infini. Cette longueur est finie en-dessous de T_R et diverge au-dessus.

$(dh_{m,y})_i$ désignant la distance entre la marche m et la marche de référence pour la configuration i sur le site y . Les distributions des largeurs de terrasses associées à chacune des N terrasses du modèle sont identiques, car la distribution est indépendante de la marche choisie.

La distribution pour un système infini peut être obtenue en extrapolant en loi de puissance les probabilités associées à chaque largeur de terrasse :

$$(II-98) \quad D_N(h) = D_\infty(h) - \frac{a}{N^e}.$$

En pratique, un calcul avec $N=4$ est suffisant pour obtenir sur ces probabilités une erreur absolue inférieure à 0.01.

II-C.5.5. Fonctions de corrélation

Calcul des fonctions de corrélation

La fonctions de corrélation dans la direction perpendiculaire aux bords de marches $G(m,0) = \langle (x_{m,0} - x_{0,0})^2 \rangle$ (avec $x_{m,y}$ la position absolue de la marche m au site y) s'exprime simplement en fonction de la probabilité $|(\Psi_{\max})_i|^2$ d'être dans une configuration donnée $|\Delta h_i\rangle$ sur un site quelconque y , on a :

$$(II-99) \quad G(m,0) = \langle (x_{m,0} - x_{0,0})^2 \rangle = \langle (dh_{m,0})^2 \rangle = \sum_i \left((dh_{m,0})_i^2 |(\Psi_{\max})_i|^2 \right).$$

On remarque que $G(m=1,0)$ est la largeur quadratique moyenne de la distribution des largeurs de terrasses.

Néanmoins, le calcul de la fonction de corrélation $G(m,0)$ est limité par la taille de la matrice de transfert qui croît très fortement avec le nombre de marches du modèle comme le montre la Table 1. Le nombre de marches étant ainsi limité seule $G(m=1,0)$ peut être obtenue du fait des conditions aux limites périodiques.

Dans la direction parallèle aux bords de marches la fonction de corrélation $G(0, y) = \langle (x_{0,y} - x_{0,0})^2 \rangle$ peut être calculée connaissant (voir annexe I) soit l'ensemble des vecteurs propres $\{\Psi_p\}$ et des valeurs propres $\{\Lambda_p\}$ de la matrice de transfert :

$$(II-100) \quad G(0, y) = y G(0,1) - 2 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^y \left[\sum_p \frac{(\Lambda_p)^{i-j-1}}{(\Lambda_{\max})^{i-j+1}} \left| \langle \Psi_p | \sum_{n=0,\pm 1,\pm 2,\dots} n \hat{T}_n | \Psi_{\max} \rangle \right|^2 \right],$$

soit la valeur propre maximum Λ_{\max} de la matrice et son vecteur propre associé $|\Psi_{\max}\rangle$:

$$(II-101) \quad G(0, y) = y G(0,1) - 2 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^y \left[\frac{\langle \Psi_{\max} | \left[\sum_{n=0,\pm 1,\pm 2,\dots} n \hat{T}_n \right] \hat{T}^{i-j-1} \left[\sum_{n=0,\pm 1,\pm 2,\dots} n \hat{T}_n \right] | \Psi_{\max} \rangle}{(\Lambda_{\max})^{i-j+1}} \right].$$

En contre partie, cette expression nécessite le calcul de puissances de la matrice de transfert \hat{T}^a .

Convergence des fonctions de corrélation

La fonction de corrélation $G(0,y)$ peut être calculée, pour un nombre de marches N , par la méthode du cylindre. L'extrapolation pour $N \rightarrow \infty$ permet d'obtenir la fonction de corrélation de la surface. Afin d'étudier la convergence de $G(0,y)$ nous avons comparé les valeurs de la fonction de corrélation extrapolées par loi de puissance,

$$(II-102) \quad G(0, y)_{N \rightarrow \infty} = G(0, y)_N + \frac{a}{N^e},$$

avec les résultats de simulations Monte Carlo (interaction entre marches premières voisines, $T > T_R$ et $T < T_R$).

La comparaison est faite pour les paramètres suivants : $A=280$ K, $E_k=1390$ K et $\ell_0=2.5$ (réseau CFC). Pour les basses températures ($T < E_k$), nous avons vérifié que l'on pouvait limiter à 2 la taille maximum des crans autorisés dans le calcul par la méthode du cylindre afin de limiter le temps de calcul. La simulation Monte Carlo est réalisée sur un système de 60

marches \times 800 sites. Après 1000 configurations de mise à l'équilibre, la moyenne statistique est calculée sur 4000 configurations.

La Figure II-15 et la Figure II-16 montrent l'évolution des fonctions de corrélation $G(0,y)$ calculées par la méthode du cylindre en fonction du nombre de marches ($N=2, 3, 4, 5$) dans le cas rugueux ($T>T_R$) et non rugueux ($T<T_R$). On note que dès $N=5$ l'accord entre la simulation Monte Carlo et la méthode du cylindre est excellent jusqu'à $y=10$ pour $T>T_R$ et jusqu'à $y=70$ pour $T<T_R$.

Les paramètres de l'extrapolation a et e , obtenus à partir du calcul pour $N=3, 4$ et 5 , sont :

- pour $T>T_R$: $-0.05 \leq a \leq -6.8$ et $1.5 \leq e \leq 2.2$,
- pour $T<T_R$: $-0.2 \leq a \leq -13$ et $e = 5.8$.

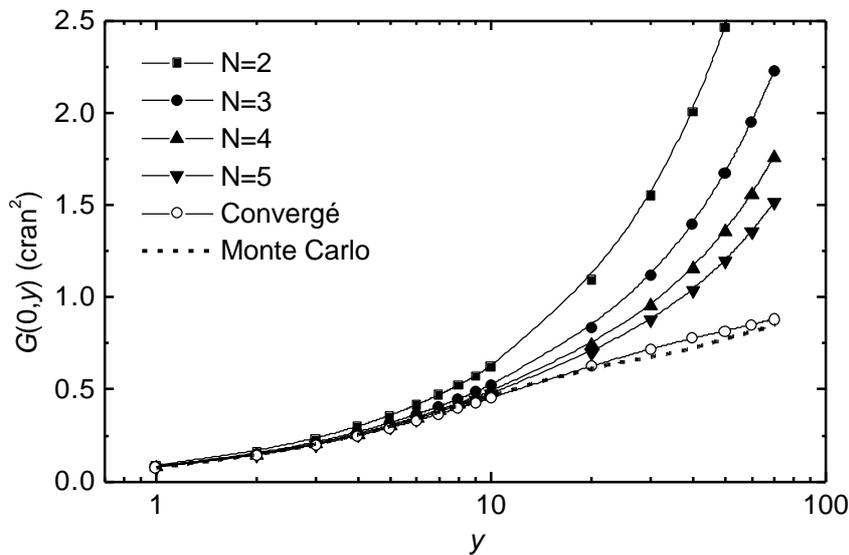


Figure II-15: Fonction de corrélation dans la direction parallèle aux marches $G(0,y)$ en fonction de la distance y . (■, ●, ▲, ▼, ○) Méthode du cylindre pour différents nombres de marches ($N=2,3,4,5$; $\ell_0=2.5$, $E_k=1390$ K, $A=280$ K, $T=500$ K ($>T_R=450$ K)). (○) Extrapolations en loi de puissance en N^e des fonctions de corrélation calculées par la méthode du cylindre pour $N=3,4,5$. (---) : Simulation Monte Carlo.

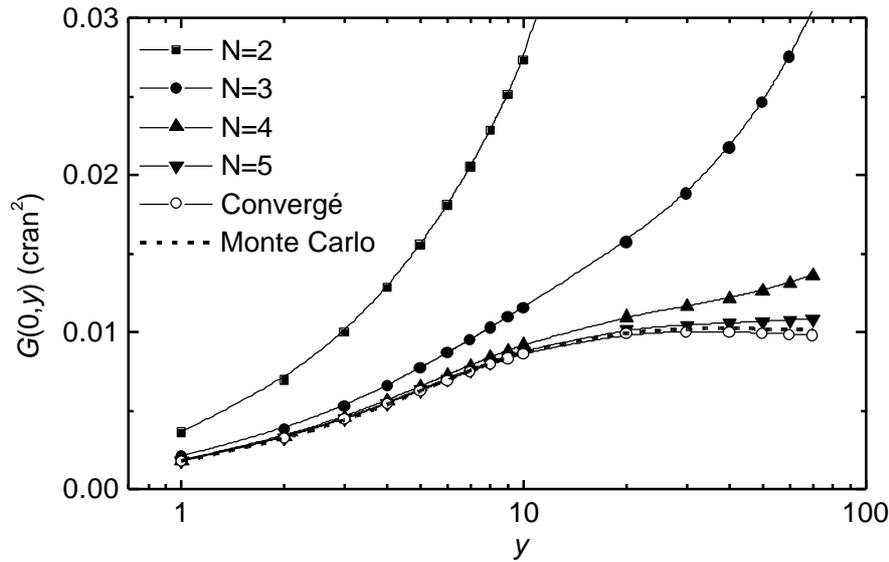


Figure II-16: Fonction de corrélation dans la direction parallèle aux marches $G(0,y)$ en fonction de la distance y . (■, ●, ▲, ▼, ○) Méthode du cylindre pour différents nombres de marches ($N=2,3,4,5$; $\ell_0=2.5$, $E_k=1390$ K, $A=280$ K, $T=300$ K ($<T_R=450$ K)). (○) Extrapolations en loi de puissance en N^e des fonctions de corrélation calculées par la méthode du cylindre pour $N=3,4,5$. ? ? : Simulation Monte Carlo.

On remarque que l'exposant reste proche de 2 dans l'état critique ($T>T_R$), et est bien supérieur à 2 pour $T<T_R$. La convergence est donc beaucoup plus rapide en dessous de T_R du fait de la longueur de corrélation finie.

La méthode du cylindre est exacte, mais conduit à des calculs relativement lourds pour la fonction de corrélation aux grandes distances. La simulation Monte Carlo apparaît plus intéressante pour déterminer la fonction de corrélation $G(0,y)$ (en particulier pour les grandes valeurs de ℓ_0). Elle fournit également $G(m,0)$ qui n'est pas calculable par la méthode du cylindre au-delà de $m=1$.

II-D. Conclusion

Les surfaces vicinales peuvent être étudiées en utilisant un modèle à une ou plusieurs marches. Néanmoins, le modèle à une marche résolu dans le cadre de l'approximation harmonique ou par la méthode de la matrice de transfert ne redonne pas les caractéristiques d'une surface réelle : la transition rugueuse et l'asymétrie de la distribution des largeurs de terrasses. Il est donc nécessaire pour retrouver le comportement d'une surface réelle d'utiliser un modèle à plusieurs marches.

	Type de modèle	Type d'interaction	Portée de l'interaction	Grandeurs calculées	Domaine de validité
Simulation Monte Carlo	sur site	quelconque	Premières voisines	TWD $G(0,y)$ $G(m,0)$	$T \geq T_R$ et $T < T_R$
Méthode du cylindre	sur site	quelconque	quelconque	TWD $G(0,y)$, $F(T)$	$T \geq T_R$ et $T < T_R$
Modèle des fermions	continu	en $\frac{1}{\ell^2}$	toutes marches	TWD, $F(T)$	$A \geq -\frac{k_B T b^2(T)}{4}$ et $T \geq T_R$
Modèle des ondes capillaires	continu	en $\frac{1}{\ell^2}$	toutes marches	$G(0,y)$ $G(m,0)$	$T \geq T_R$ et $T < T_R$ (cf. Eq. (II-51) et (II-52)) h_x, h_y et V_{loc} connus analytiquement pour $T \geq T_R$ et $A \geq -\frac{k_B T b^2(T)}{4}$, (cf. paragraphe II-C.3)

Table 2 : Caractéristiques des différents modèles et méthodes de calculs utilisés pour traiter les surfaces vicinales.

Ce comportement est obtenu en utilisant soit le modèle continu (modèle des ondes capillaires) soit le modèle discret. Le modèle discret, caractérisé par une énergie de cran E_k et une interaction entre marche A , peut être résolu en utilisant l'équivalence avec le modèles des fermions, les simulations Monte Carlo ou la méthode du cylindre. Les caractéristiques de ces quatre solutions au problème des surfaces vicinales sont décrites dans la Table 2.

Avant ce travail de thèse, il n'existait qu'une seule méthode permettant d'étudier une surface au-dessus et en-dessous de la transition rugueuse : les simulations Monte Carlo. Afin d'acquérir des méthodes exactes (contrairement aux simulations qui sont des expériences numériques), le modèle des ondes capillaires a été étendu sous la température de transition rugueuse et la méthode du cylindre a été appliquée pour la première fois aux cas des surfaces vicinales. Nous disposons ainsi de trois méthodes d'étude des faces vicinales quelle que soit la gamme de température explorée.

L'équivalence avec le modèle des fermions, bien que non valable pour $T < T_R$, est très importante car elle permet d'exprimer les rigidités de surfaces \mathbf{h}_x , et \mathbf{h}_y en fonction de A et E_k , réalisant ainsi le lien entre le modèle continu et le modèle discret.

Il est important de noter qu'il n'y a pas une méthode "meilleure" que les autres, mais qu'elles se complètent, car aucune d'entre elles ne permet de déterminer toutes les grandeurs souhaitées quelque soit le domaine de température. Pour analyser des résultats expérimentaux, et principalement sous la température de transition rugueuse, une seule méthode ne suffit pas, il est nécessaire de les combiner. Néanmoins, on peut remarquer que les simulations Monte Carlo et la méthode du cylindre se complètent bien quelle que soit la gamme de température.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] M. Giesen, Surf. Sci. **370** (1997) 55.
- [2] E. D. Williams et N. C. Bartelt, Science **251** (1991) 393.
- [3] N.C. Bartelt, T. L. Einstein et E. D. Williams, Surf. Sci. Lett. **240** (1990) L591.
- [4] B.S. Swartzentruber, Y.-W. Mo, R. Kariotis, M.G. Lagally et M.B. Webb, Phys. Rev. Lett. **65** (1990) 1913.
- [5] M. E. Fisher et D. S. Fisher, Phys. Rev. **B 25** (1981) 3192.
- [6] L. Barbier, L. Masson, J. Cousty et B. Salanon, Surf. Sci. **345** (1996) 197.
- [7] L. Masson, L. Barbier, J. Cousty et B. Salanon, Surf. Sci. Lett. **317** (1994) 1115,
et son erratum : L. Masson, L. Barbier, J. Cousty et B. Salanon, Surf. Sci. Lett. **324** (1995) 378.
- [8] M. Giesen-Seibert, R. Jentjens, M. Poensgen, et H. Ibach Phys Rev. Lett. **71** (1993) 3521.
- [9] E. E. Gruber et W. W. Mullins, J. Phys. Chem. Solids. **28** (1967) 875.
- [10] R. Kariotis et M. G. Lagally, Surf. Sci. **248** (1991) 295.
- [11] J. C. Girard, Thèse , Paris 1993; J. C. Girard, S. Gauthier, S. Rousset et J. Klein, Microsc. Microanal. Microstruct. **4** (1995) 489.
- [12] C. Jayaprakash, W.F. Saam et S. Teitel, Phys. Rev Lett. **50** (1983) 2017.
C. Jayaprakash, C. Rottman et W.F. Saam, Phys. Rev. **B 30** (1984) 6549.
- [13] H. J. Schulz, J. Phys **46** (1985) 257.
- [14] J. Villain, D.R. Grimpel et J. Lapujoulade, J. Phys. **F 15** (1985) 809.
- [15] J.V. José L.P. Kadanoff, S. Kirkpatrick et D.R. Nelson, Phys. Rev. **B 16** (1977) 1217.
- [16] P.-G. de Gennes, J. Chem. Phys. **48** (1968) 2257.
- [17] F. Calogero, J. Math. Phys. **10** (1969) 2191 ; **10** (1969) 2197.

- [18] B. Sutherland, J. Math. Phys. **12** (1971) 246 ; **12** (1971) 251.
- [19] B. Sutherland, Phys. Rev. **A 4** (1971) 2019.
- [20] F. J. Dyson, J. Math. Phys. **3** (1962) 140.
- [21] B. Joós, T. L. Einstein et N.C. Bartelt, Phys. Rev. **B 43** (1991) 8153.
- [22] M.S. Hoogemans, M.A.J. Klik, D.C. Schlösser, L. Kuipers et J.W.M. Frenken, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 1728.
- [23] D.W. Heermann : Computer Simulation Methods (Springer-Verlag 1986).
- [24] W.H. Press, S.A. Teukolsky, W.T. Vetterling et B.P. Flannery : Numerical Recipes (Cambridge Univ. Press. 1992).
- [25] J.P. Nougier : Méthodes de calcul numérique (Masson 1991).
- [26] N. Métropolis, A. Rosenbluth, M. Rosenbluth, A. Teller et E. Teller, J. Chem. Phys. **21** (1953) 1087.
- [27] B. Salanon, Surf. Sci. **350** (1996) 322.
- [28] E. Le Goff, L. Barbier, L. Masson et B. Salanon, Surf. Sci. **432** (1999) 139.
- [29] Jae Dong Noh et M. den Nijs, J. Phys. A: Math. Gen. **30** (1997) 7375.
M. den Nijs Phys. Rev. **B 46** (1992) 10386
- [30] J. M. Luck, S. Leibler et B. Derrida J. Phys. **44** (1983) 1135.
- [31] J. L. Cardy : Finite-Size Scaling (Elsevier Science 1988).
- [32] M. P. M. den Nijs Phys. Rev. **B 46** (1992) 10386.
- [33] H. W. J. Blöte et M. P. M. den Nijs Phys. Rev. **B 37** (1988) 1766.
- [34] P. Christe et M. Henkel : Introduction to Conformal Invariance and Its Applications to Critical Phenomena, Berlin (Springer-Verlag 1993).
- [35] P. Di Francesco, P. Mathieu et D. Sénéchal : Conformal field Theory, (Springer 1997).
- [36] J.L. Cardy : Scaling and renormalisation in statistical physics (P. Goddard 1996).

[37] I. Affleck, Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 746.

[38] H. J. F. Knops, Phys. Rev. Lett. **39** (1977) 766.

[39] H. W. J. Blöte, J. L. Cardy et M. P. Nightingale, Phys. Rev. Lett. **56** (1986) 742.

[40] N. Kawakami et S. K. Yang, Phys. Rev. Lett. **67** (1991) 2493.

[41] B. Salanon communication privée.