

CHAPITRE III :

Etude statistique

des surfaces vicinales

III-A. Diagramme de phases des surfaces vicinales

III-A.1. Introduction

Un premier critère permet de déterminer la stabilité d'une face vicinale :

- Pour une variation convexe de l'énergie libre avec la pente, la surface est stable.
- A l'opposé, une variation concave indique une séparation de phases [1] : pour une pente dont l'énergie libre associée est dans un domaine concave, une énergie libre inférieure est obtenue en séparant le système selon deux facettes dont les orientations sont fixées par la double tangente et dont les proportions sont données par la règle du bras de levier.

La valeur de l'exposant de convergence de l'énergie libre en fonction de la taille du système (méthode FSS) fournit un critère permettant de savoir si une face vicinale est dans un état critique et donc dans un état rugueux.

L'exploration systématique de l'espace des paramètres (E_k, A) et l'application de ces deux critères permettent d'obtenir le diagramme de phases orientationnel (T, p) où apparaîtront les domaines rugueux et les domaines de stabilité des faces vicinales.

Les cas $A \geq 0$ et $A < 0$ seront successivement examinés. Toutes les valeurs de l'énergie libre présentées dans ce chapitre sont des valeurs convergées comme définies au paragraphe II-C.5.3. .

III-A.2. Interaction répulsive ($A \neq 0$)

III-A.2.1. Variation de l'énergie libre avec la vicinalité $A=0$ K

Nous avons vu au paragraphe II-C.1., que l'énergie libre par unité d'aire projetée sur le plan de référence ($\mathbf{f}_0=0$) d'un réseau de marches avec l'orientation \mathbf{q}_0 pouvait se développer en fonction de la pente $p=\tan(\mathbf{f}_0)=h_0/\ell_0$. En combinant les équations (II-29) et (II-58) on obtient :

$$(III-1) \quad f(\mathbf{q}_0, \mathbf{f}_0, T) = f_0(T) + \frac{\mathbf{b}(\mathbf{q}_0, T)}{h_0 \cos(\mathbf{q}_0)} |p| + \frac{\mathbf{d}_{mar}(\mathbf{q}_0, T)}{(h_0)^3} |p|^3 .$$

Cette expression a été proposée par Jayaprakash *et al.* [2] pour une assemblée de marches sans interaction ($A=0$ K).

L'énergie libre calculée par la méthode du cylindre a été comparée à ce développement pour $A=0$ K. A titre d'exemple l'évolution avec la pente $p = h_0/\ell_0$ (h_0 est posée à 1) de l'énergie libre d'interaction F_{cyl_int} , pour $E_k/k_B T=0.2$ a été reportée sur la Figure III-1. Ce terme est déduit de l'énergie libre totale par site F_{cyl} suivant l'expression :

$$(III-2) \quad F_{cyl_int} = F_{cyl} - \frac{\mathbf{b}(\mathbf{q}_0 = 0, T)}{h_0} |p| ,$$

l'énergie libre des terrasses $f_0(T)$ étant fixée à 0.

L'énergie libre F_{cyl_int} montre une dépendance en p^3 en accord avec l'expression (III-1). L'accord est d'autant mieux réalisé que la pente est faible. En effet, plus la densité de sites entre deux marches est grande, plus on se rapproche du modèle des fermions pour lequel les positions des marches sont continues.

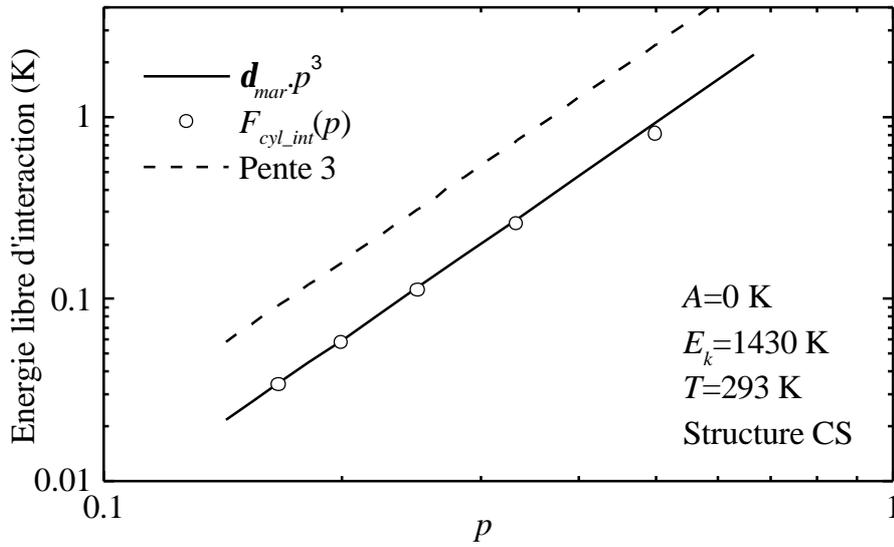


Figure III-1: Représentation en échelle Log-Log de la contribution de l'interaction entre marches à l'énergie libre en fonction de p . (O) : méthode du cylindre pour un cristal cubique simple Eq.(III-2) ($T=293$ K, $E_k=1430$ K, $A=0$ K). (—) : équivalence avec le modèle des fermions Eq.(III-1).

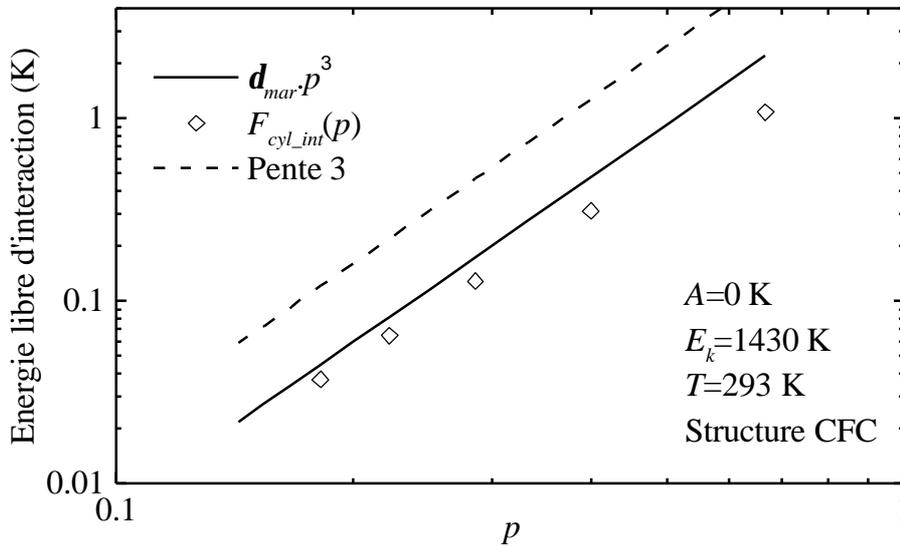


Figure III-2 : Représentation en échelle Log-Log de la contribution de l'interaction entre marches à l'énergie libre en fonction de p . (◇) : méthode du cylindre pour un cristal cubique face centrée Eq.(III-2) ($T=293$ K, $E_k=1430$ K, $A=0$ K). (—) : équivalence avec le modèle des fermions Eq.(III-1).

Figure III-2 la même courbe a été reportée pour un cristal de structure cubique face centrée (ℓ_0 demi-entier). On observe cette fois un désaccord avec l'expression (III-1) qui manifeste un effet de réseau introduit par une distance minimum d'approche non entière (0.5 pour CFC et 1 pour CS).

III-A.2.2. Variation de l'énergie libre avec la vicinalité $A>0$ K

Pour une interaction répulsive ($A>0$), la présence du potentiel en A/ℓ^2 donne un bon accord entre la méthode du cylindre et le modèle des fermions aussi bien dans le cas d'une structure CS que CFC. Ce résultat est illustré par la Figure III-3 ($A=65$ K).

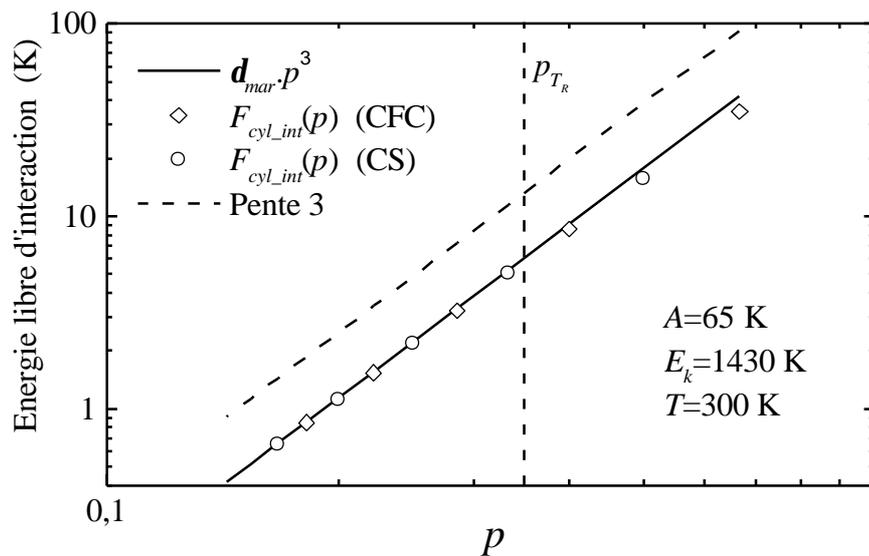


Figure III-3 : Représentation en échelle Log-Log de la contribution de l'interaction entre marches à l'énergie libre en fonction de p . (◇) et (○) : méthode du cylindre pour un cristal cubique face centrée et cubique simple respectivement Eq.(III-2) ($T=300$ K, $E_k=1430$ K, $A=65$ K). (—) : Equivalence avec le modèle des fermions Eq. (III-1).

L'accord est d'autant meilleur que la pente est faible : l'écart est de 15 % pour $p=1/1.5$ et de 0.7 % pour $p=1/6$. On peut noter que cet accord est conservé même pour les surfaces non rugueuses ($p>p_{TR}=1/3$ (Eq. (II-64)), pour $A=65$ K et $E_k=1430$ K).

Pour toutes les valeurs des paramètres (E_k , $A>0$ et T) on obtient, comme pour l'exemple de la Figure III-3, une courbure de $F_{cyl_int}(p)$ positive. Pour une interaction répulsive les faces vicinales sont stables.

III-A.2.3. Variation de l'énergie libre avec la température

Le modèle des fermions n'étant pas sur site, il ne présente pas de transition de phase (pour $A>0$). Le système est toujours dans un état rugueux. Le terme de convergence de l'énergie libre en fonction du nombre de fermions montre une charge centrale égale à 1 et un exposant de convergence égal à 2 quelle que soit la température (cf. Eq. (II-91)).

La méthode des rubans permet d'introduire le réseau sous-jacent et donc une transition rugueuse.

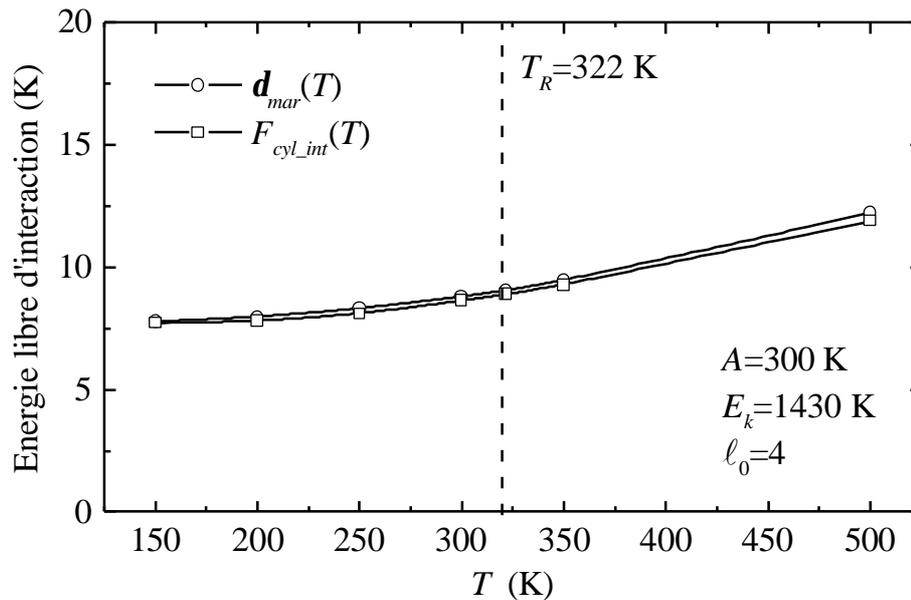


Figure III-4 : Variation de l'énergie libre en fonction de la température pour $A=300$ K (interaction entre toutes les marches), $E_k=1430$ K et $\ell_0=4$ (CS). (?) Energie libre d'interaction calculée par la méthode du cylindre. (O) Energie libre d'interaction obtenue dans le cadre de l'équivalence avec le modèle des fermions par l'expression (II-58).

A titre d'exemple nous avons calculé l'énergie libre d'interaction en fonction de la température pour $E_k=1430$ K, $A=300$ K et $\ell_0=4$. On obtient un bon accord entre l'énergie libre calculée par la méthode du cylindre et celle déterminée par équivalence avec le modèle des

fermions (Eq. (II-58)) dans la gamme de température $T=150$ K $T=500$ K (voir Figure III-4). La courbe obtenue par la méthode du cylindre ne révèle aucun comportement particulier au voisinage de T_R , la connaissance de l'énergie libre seule ne permet donc pas de déterminer la température de transition rugueuse

La convergence de l'énergie libre fournit deux critères permettant de définir si le système est dans un état critique ou non et ainsi permet de déterminer la température de transition rugueuse :

- La variation de l'exposant de convergence (égal à 2 dans l'état critique)
- La variation de la charge centrale (égale à 1 dans l'état critique)

Un autre critère peut être utilisé : la variance de la largeur des terrasses est égale à $\frac{4}{p^2}$ à T_R (Eq.(II-63)). La méthode du cylindre permet de calculer la variance $w^2(N \rightarrow \infty)$ et donc de déterminer la température de transition rugueuse.

L'exposant est obtenu en ajustant la variation de l'énergie libre d'interaction en fonction du nombre de marches N sur la loi :

$$(III-3) \quad F_{cyl_int}(N) = F_{cyl_int}(\infty) - \frac{a}{(N)^e} .$$

La charge centrale est le préfacteur, corrigé de l'anisotropie, du terme en $1/N^e$ lorsque $e=2$. La valeur de $c(N)$ est obtenue en tenant compte du nombre fini de marches dans le calcul :

$$(III-4) \quad F_{cyl_int}(N+1) - F_{cyl_int}(N) = a(\ell_0, \mathbf{h}_x, \mathbf{h}_y) \left[\frac{1}{(N+1)^2} - \frac{1}{N^2} \right] c(N) ,$$

le facteur d'anisotropie $a(\ell_0, \mathbf{h}_x, \mathbf{h}_y)$ étant défini par l'équation (II-94).

Ce facteur n'étant connu que pour $T > T_R$, la charge centrale ne pourra être déterminée que dans cette gamme de température. La valeur de $c=c(\infty)$ est ensuite obtenue en extrapolant les valeurs de $c(N)$ par loi de puissance. On remarque que le critère sur l'exposant est plus fiable car il est indépendant de l'anisotropie.

Sur la Figure III-5 sont reportées les variations de l'exposant de convergence e , de la charge centrale c et de la variance w^2 de la largeur des terrasses ainsi obtenue pour $E_k=1430$ K, $A=300$ K et $\ell_0=4$. Les calculs ont été réalisés pour N variant de 2 à 5. Cette figure montre le bon accord entre ces trois critères conduisant à $T_R=322$ K. Cet accord n'a pu être obtenu qu'après correction du potentiel utilisé par B. Sutherland. Dans le domaine rugueux, e est proche de 2 (≈ 2.03) et c est voisin de 1 (≈ 0.92). En dessous de T_R , l'exposant devient supérieur à 2. Nous avons retenu le critère le plus précis pour déterminer T_R : $w^2(T_R)=4/\pi^2$.

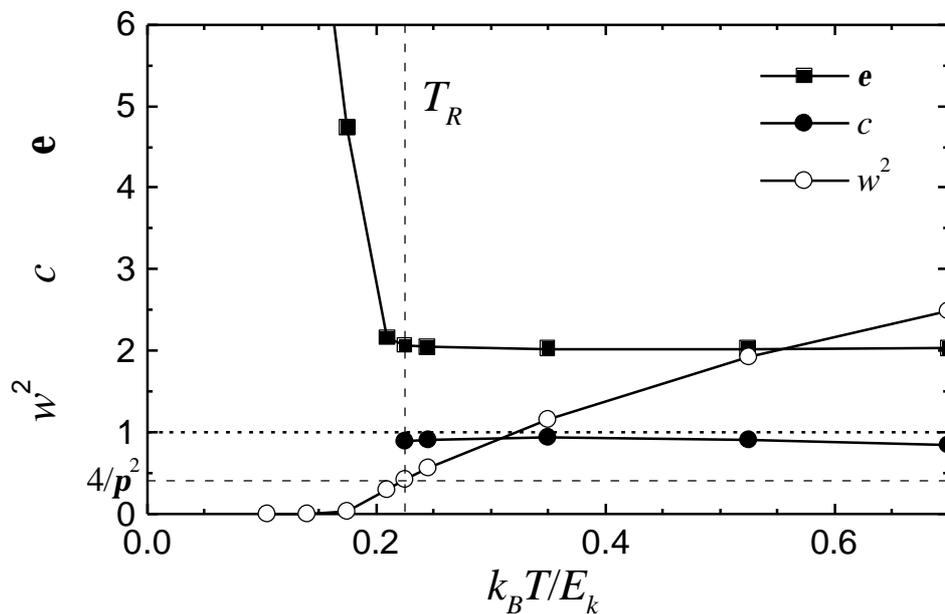


Figure III-5 : Variation de la charge centrale c obtenue en extrapolant les valeurs de $c(N)$ par loi de puissance. Les valeurs de e ont été déterminées en ajustant l'énergie libre à l'aide de l'Eq. (III-3). La variance est calculée par extrapolation en utilisant l'Eq. (II-98), avec le modèle capillaire w^2 est égal à $4/\pi^2$ à T_R .

III-A.2.4. Diagramme de phases pour $A>0$

La méthode du cylindre fournit de bons critères pour déterminer T_R . Ils nous ont permis de construire le diagramme de phases présenté Figure III-6.

L'interaction entre toutes marches du type Sutherland (II-38) utilisée ici étant une interaction de paire, l'hamiltonien (II-28) présente une symétrie marches - trous qui se traduit

par une symétrie $p \rightarrow (1-p)$ sur le diagramme de phases. Cette propriété a été vérifiée numériquement pour $p=0.2$ et 0.33 . Sur ce diagramme sont également représentés les résultats obtenus par le modèle capillaire (Eq. (II-63)) en négligeant le second terme de \mathbf{h}_y , ce qui conduit à l'équation (II-64). Cette équation montrant que A , E_k et T sont reliées par une loi d'échelle en $A/k_B T b^2(T)$, nous avons donc construit le diagramme de phases dans l'espace des paramètres ($g=2A/k_B T b^2(T)$, p). Le paramètre g étant le paramètre d'interaction dans le modèle de Sutherland (cf. Eq. (II-33)).

Sur la Figure III-6, sont représentés les résultats de la méthode du cylindre pour deux valeurs de l'interaction ($A=20$ K et $A=200$ K) et une énergie de cran $E_k=1430$ K. Bien que l'interaction varie d'un facteur 10, la différence sur le diagramme de phases est faible et l'accord est d'autant mieux vérifié que le rapport $2A/Tb^2(T)$ est grand.

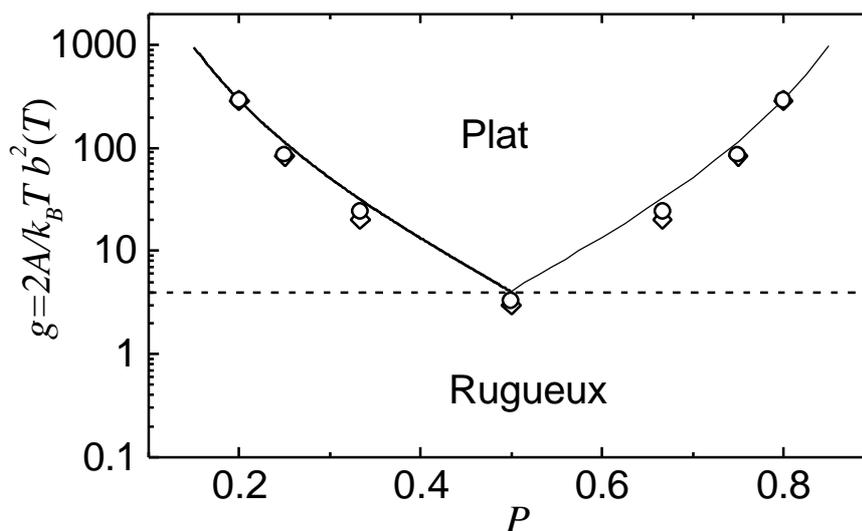


Figure III-6 : Diagramme de phases état rugueux - état non rugueux. Résultats obtenus par la méthode du cylindre pour $E_k=1430$ K, (?) $A=20$ K et (O) $A=200$ K. (—) Modèle capillaire Eq. (II-64).

On observe de même que l'accord entre le modèle capillaire et la méthode du cylindre n'est bien vérifié que pour les grandes valeurs du rapport $2A/k_B T b^2(T)$. Ce comportement est dû aux effets de réseau qui deviennent important pour les grandes valeurs de p . Néanmoins, l'expression (II-64) permet d'obtenir simplement (analytiquement) un bon ordre de grandeur du diagramme de phases. Le diagramme de phases fourni par le modèle capillaire n'étant valable que pour les petites valeurs de la pente, il est limité à $p=0.5$ sur la Figure III-6.

L'interaction, dans ce modèle, étant une interaction de paire (potentiel de type Sutherland (II-38)) le diagramme complet est obtenu par symétrie par rapport à $p=0.5$.

On peut noter que la surface est rugueuse quelle que soit la pente pour $g \leq 4$, $g=4$ étant l'interaction associée à A_{Suth+} .

III-A.2.5. Cas de la face (115)

En liaison avec notre étude expérimentale, nous avons étudié plus particulièrement le cas de la face vicinale (1,1,5) ($\ell_0=2.5$, $A=65$ K (interaction entre toutes les marches) et $E_k=1430$ K). On observe un écart entre l'énergie libre calculée par la méthode du cylindre et celle obtenue par équivalence avec le modèle des fermions (Eq. (II-58)). Il reste du même ordre pour toute la gamme des températures explorées ($T=300$ K à $T=500$ K) (voir Figure III-7).

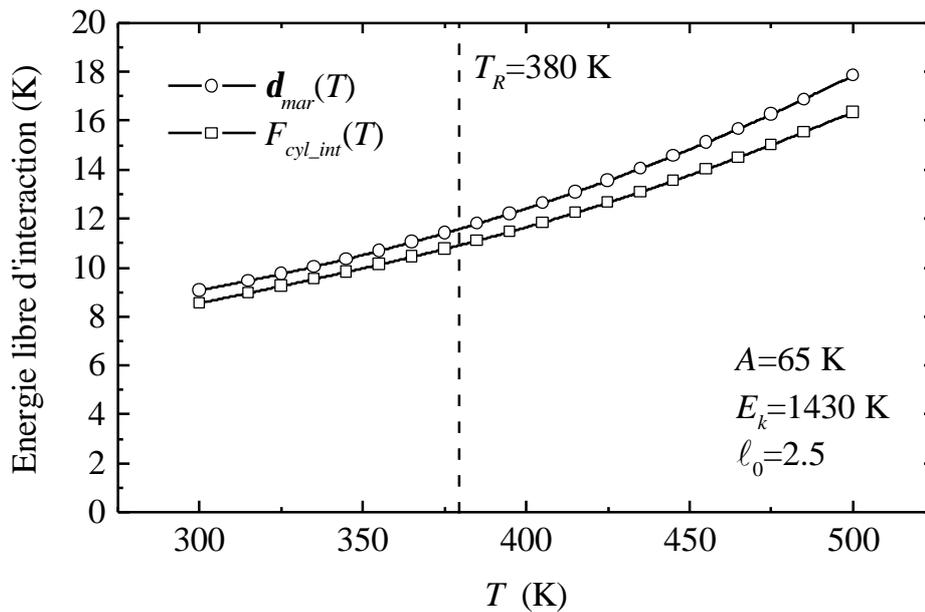


Figure III-7 : Variation de l'énergie libre en fonction de la température pour $A=65$ K (interaction entre toutes les marches), $E_k=1430$ K et $\ell_0=2.5$ (CFC). (?) Energie libre d'interaction calculée par la méthode du cylindre. (O) Energie libre d'interaction obtenue dans le cadre de l'équivalence avec le modèle des fermions par l'expression (II-58).

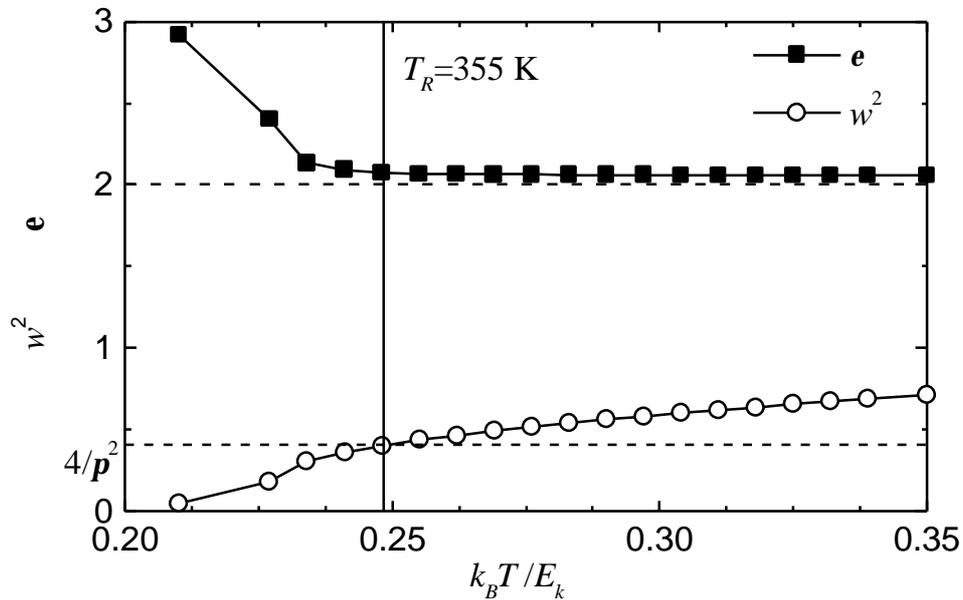


Figure III-8 : : Variation de l'exposant (■) et de la variance de la largeur des terrasses (○) en fonction de la température pour $A=65 \text{ K}$ (interaction entre toutes les marches), $E_k=1430 \text{ K}$ et $\ell_0=2.5$ (CFC).

Sur la Figure III-8, on retrouve bien le comportement précédemment observé pour $\ell_0=4$ (CS) : l'exposant de la loi de puissance (III-3) est proche de 2 (≈ 2.06) pour $T > T_R$ et dévie de cette valeur au voisinage de T_R . T_R étant déterminée par l'égalité à $\frac{4}{p^2}$ de la variance de la largeur des terrasses w^2 .

III-A.3. Stabilité des surfaces vicinales pour une interaction attractive : le modèle de Sutherland attractif

Ce chapitre est constitué d'un article soumis à publication. Il reprend le diagramme de phases pour $A > 0$ et traite en détail le cas $A < 0$. Le résultat essentiel de cet article est le diagramme de phases complet du modèle (II-28).

Dans le cas attractif on obtient un facetage de la surface avec l'apparition d'un point tricritique pour une interaction $A = A_{Suth-}$. Ce résultat contraste avec les conclusions du modèle de Sutherland pour lequel le système s'effondre (les fermions deviennent infiniment proches les uns des autres) pour cette valeur de l'interaction quelle que soit ℓ_0 . La différence de comportement traduit l'effet du réseau.

Pour tenir compte de la symétrie $p \rightarrow (1-p)$ du système nous avons réécrit l'énergie libre d'interaction sous la forme :

$$(III-5) \quad F_{sym}(p) = F_{cyl_int}(p) - p \frac{p^2}{6} A ,$$

pour laquelle nous proposons le développement "à la Landau" suivant :

$$(III-6) \quad F_{sym}(p) = b_0 + b_2 \left(p - \frac{1}{2} \right)^2 + b_4 \left(p - \frac{1}{2} \right)^4 + b_6 \left(p - \frac{1}{2} \right)^6 .$$

III-A.4. Conclusion

La méthode du cylindre s'est donc révélée un outil puissant qui nous a permis de déterminer le diagramme de phases complet ($A>0$ et $A<0$) des surfaces vicinales pour un potentiel d'interaction en A/ℓ^2 .

Ce diagramme de phases a été obtenu en utilisant plusieurs critères :

- La valeur de l'exposant de convergence de l'énergie libre en fonction de la taille du système (étude FSS) ainsi que la variance de la largeur des terrasses nous fournissent deux critères permettant de savoir si une face vicinale est rugueuse ou non.
- La stabilité d'une face vicinale est donnée par la convexité de l'énergie libre avec la pente.

Dans le cas répulsif, on obtient un bon accord entre le modèle capillaire et la méthode du cylindre, ce qui montre que les effets de réseau sont faibles. Dans le cas attractif, la méthode du cylindre, contrairement au modèle des fermions, conduit à un facetage qui révèle l'importance du réseau sous-jacent.

III-B. Etude statistique des surfaces vicinales

L'analyse statistique des images STM fournit :

- la distribution des largeurs de terrasses,
- les fonctions de corrélation dans les directions parallèle et perpendiculaire aux bords de marches.

Ces grandeurs expérimentales peuvent être interprétées à l'aide des modèles présentés précédemment (Chapitre II) que nous allons maintenant comparer. L'objectif est de choisir le plus adapté à la détermination des paramètres microscopiques E_k et A .

III-B.1. Distribution des largeurs de terrasses

III-B.1.1. Comparaison modèle continu, modèle discret

Le modèle des fermions donne la distribution des largeurs de terrasses pour trois valeurs particulières de l'interaction, $A = A_{Suth-}$, 0 et A_{Suth+} (voir annexe IV). Ces résultats sont comparés ici avec les distributions calculées par simulations Monte Carlo (interaction limitée aux marches premières voisines) et par la méthode du cylindre qui tiennent compte du réseau sous-jacent.

Pour une interaction purement entropique ($A=0$ K), l'accord entre les distributions déterminées par ces trois méthodes est excellent (voir Figure III-9). L'influence du réseau est donc faible pour l'interaction nulle. Rappelons que dans ce cas la distribution ne dépend que de la distance moyenne entre marches ℓ_0 et suit la loi d'échelle (II-50).

Dans le cas de l'interaction répulsive $A_{Suth+} = 2k_B T b^2(T)$, l'accord entre les trois méthodes est conservé comme l'illustre la Figure III-10 pour $\ell_0=3$. Rappelons que pour cette

valeur de l'interaction la surface est rugueuse quelle que soit la distance entre marches (cf. Figure III-6).

Dans le cas attractif $A_{S_{\text{sub}}} = -\frac{1}{4}k_B T b^2(T)$, (voir Figure III-11 pour $\ell_0=3$) on observe un bon accord entre la simulation Monte Carlo et la méthode du cylindre. Le modèle des fermions conduit à un résultat différent. Ceci traduit un effet de réseau. La présence des sites introduit une coupure du potentiel pour $\ell < 1$, à l'origine de cette différence entre les distributions.

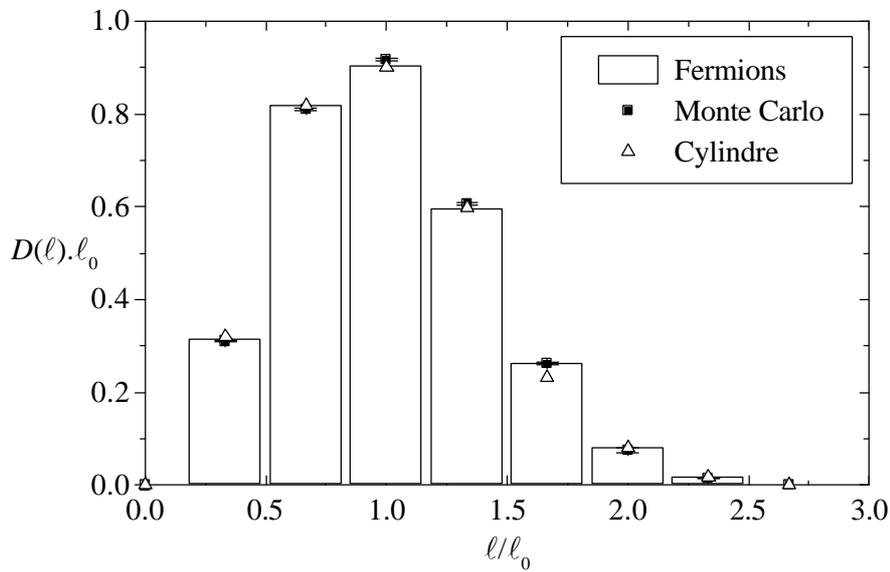


Figure III-9 : Distributions des largeurs de terrasses pour $A=0$ K et $\ell_0=3$ obtenues par le modèle des fermions libres (histogramme), la méthode du cylindre (Δ) et une simulation calcul Monte Carlo (\blacksquare) ($T=300$ K, $A=0$ K et $E_k=1430$ K, 76 marches \times 1300 sites, moyenne statistique sur 4000 configurations, erreur calculée sur $n\nu=20$ intervalles de $nc=200$ configurations).

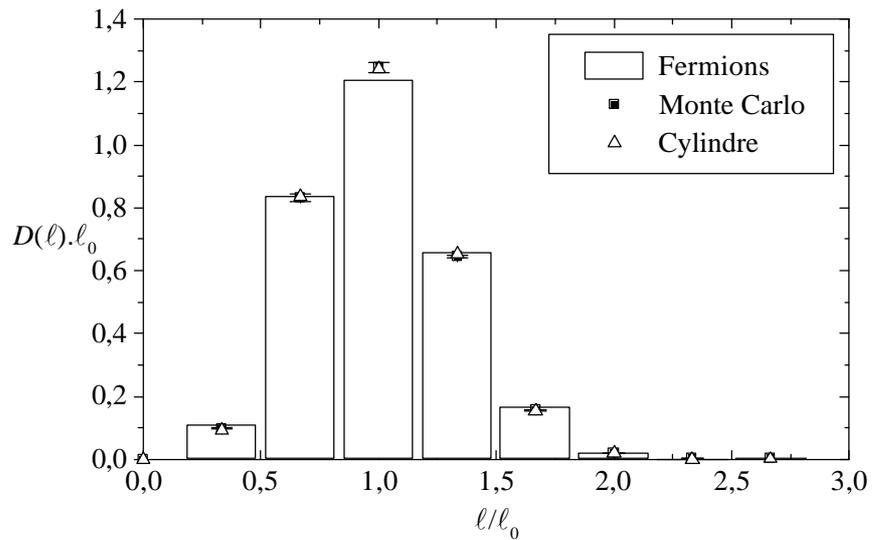


Figure III-10 : Distributions des largeurs de terrasses pour $A=A_{Suth+}$ et $l_0=3$ obtenues par le modèle des fermions libres (histogramme), la méthode du cylindre (Δ) et une simulation calcul Monte Carlo (\blacksquare) ($T=300$ K, $A= A_{Suth+}=10.38$ K et $E_k=1430$ K, conditions identiques au calcul reporté Figure III-9).

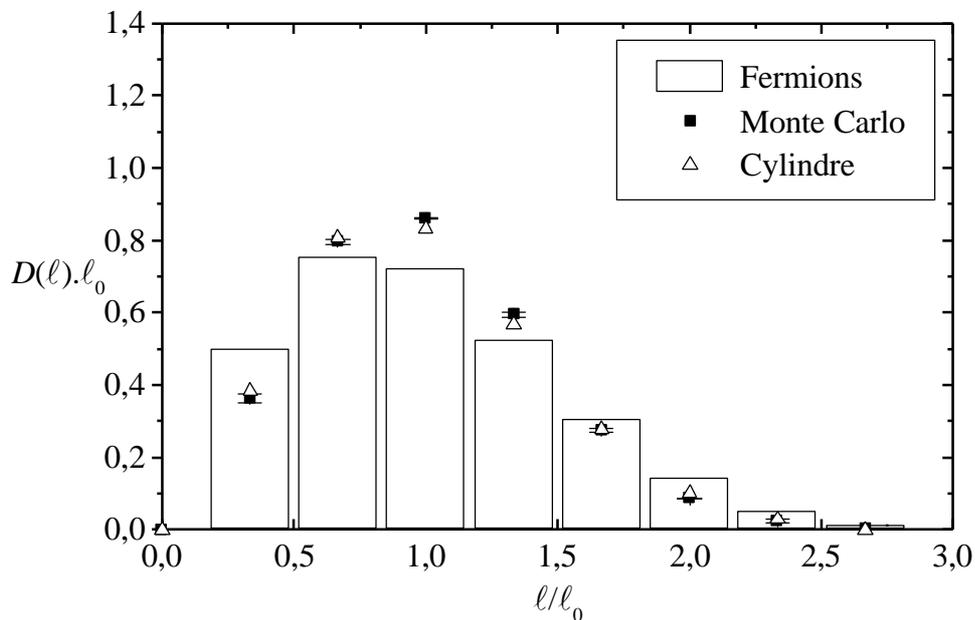


Figure III-11 : Distributions des largeurs de terrasses pour $A=A_{Suth-}$ et $l_0=3$ obtenues par le modèle des fermions libres (histogramme), la méthode du cylindre (Δ) et une simulation calcul Monte Carlo (\blacksquare) ($T=300$ K, $A= A_{Suth-}=-1.30$ K et $E_k=1430$ K, conditions identiques au calcul reporté Figure III-9).

Enfin, signalons que T. Guhr *et al* [3] ont déterminé une expression, appelée GWS (Gaussian Wigner Surmise), permettant d'interpoler les distributions des largeurs de terrasses entre ces trois valeurs, soit :

$$(III-7) \quad P_{I_{mar}}(h) = a_{I_{mar}} h^{2I_{mar}} \exp(-b_{I_{mar}} h^2)$$

$$\text{où} \quad b_{I_{mar}} = \left[\frac{\Gamma(I_{mar} + 1)}{\Gamma\left(\frac{2I_{mar} + 1}{2}\right)} \right]^2 \quad \text{et} \quad a_{I_{mar}} = \left[\frac{2(b_{I_{mar}})^{\frac{2I_{mar} + 1}{2}}}{\Gamma\left(\frac{2I_{mar} + 1}{2}\right)} \right]$$

I_{mar} étant défini par l'équation (II-46). Cette formule a été reprise et discutée par T. L. Einstein *et al.* [4].

On retrouve donc sur les distributions des largeurs de terrasses l'influence du réseau dans le cas $A < 0$ observée précédemment sur l'énergie libre.

L'équivalence avec un modèle de fermions est une solution analytique exacte, très utile pour valider de nouvelles méthodes. Cependant, elle ne permet pas de traiter des cas expérimentaux, car la distribution des largeurs de terrasses ne peut être calculée que pour trois valeurs particulières de l'interaction ($A = A_{suth-}$, $A = 0$ et $A = A_{suth+}$).

III-B.1.2. La variance des largeurs de terrasses

Une grandeur utile pour caractériser la distribution des largeurs de terrasses est son moment d'ordre 2 ou variance w^2 définie par :

$$(III-8) \quad G(1,0) = \langle (h_{1,0} - h_{0,0})^2 \rangle .$$

Cette grandeur peut être obtenue par les différentes méthodes que nous avons introduites.

Une première expression analytique de w^2 peut être obtenue dans le cadre du modèle capillaire en négligeant le second terme de l'équation (II-57) définissant \mathbf{h}_y , soit :

$$(III-9) \quad w_{cap}^2 = \frac{2}{\mathbf{p}^2 I_{mar}} \ell_0^2 = \frac{4}{\mathbf{p}^2} \left(1 + \sqrt{1 + \frac{4A}{k_B T b^2(T)}} \right)^{-1} \ell_0^2 .$$

La comparaison suivante reprendra les résultats des modèles à une seule marche largement utilisés dans la littérature.

Marches sans interaction ($A=0$)

Dans le modèle de Grubber et Mullins [5] (marche libre entre deux murs durs ($-\ell_0$ et $+\ell_0$)), la variance s'écrit (voir § II-B.3.1.):

$$(III-10) \quad w_{GM}^2 = \ell_0^2 \cdot \left[1 - \frac{6}{\mathbf{p}^2} \right],$$

On obtient par comparaison avec l'expression (III-9)) pour $A=0$:

$$(III-11) \quad w_{cap}^2 = \frac{2}{\mathbf{p}^2 - 6} w_{GM}^2 \approx 0.52 w_{GM}^2,$$

quelle que soit la distance moyenne entre marches.

Marches en interaction ($A>0$)

La variance obtenue pour une marche fluctuant dans un potentiel harmonique (voir § II-B.3.2.) s'écrit :

$$(III-12) \quad w_{har}^2 = \sqrt{\frac{k_B T b^2(T)}{48A}} \ell_0^2 \quad \text{d'où} \quad w_{cap}^2 \approx \frac{8\sqrt{3}}{\mathbf{p}^2} w_{har}^2;$$

pour $A \gg k_B T b^2(T)$, tout en conservant $T > T_R$.

Il en résulte que les modèles à une marche, du fait de l'absence de fluctuations des marches voisines, ne conduisent pas à des valeurs correctes de la variance de la largeur des terrasses.

T. Ihle *et al.* [6] ont étudié un système de marches à l'équilibre en se basant sur les équations non locales de Langevin issues du modèle de Burton-Cabrera-Frank [7]. Ce modèle les a conduits à proposer l'expression suivante pour la variance ($J=0.775$) :

$$(III-13) \quad w_{BCF}^2 = \frac{\sqrt{48} J}{\mathbf{p}} \sqrt{\frac{k_B T b^2(T)}{48A}} \ell_0^2 \quad \text{d'où} \quad w_{cap}^2 = 0.821 w_{BCF}^2 .$$

Ce modèle surestime la variance car, contrairement au modèle capillaire, il ne tient pas compte de la répulsion entropique.

Les variances dans le cadre du modèle capillaire, pour les valeurs particulières, $A=0$ et $A=A_{suth+}$, de l'interaction sont en accord (voir Tableau III-1) avec l'approche des fermions de Joós *et al.* [8, Annexe IV]. Pour $A=A_{suth-}$, le second terme de l'équation (II-57) définissant la rigidité \mathbf{h}_y diverge, et l'expression (III-9) n'est plus valable.

	$A=A_{suth-}$	$A=0$	$A=A_{suth+}$
$\frac{w_{cap}^2(A)}{\ell_0^2}$		$2/\pi^2$	$1/\pi^2$
$\frac{w_{fer}^2(A)}{\ell_0^2}$	0.25	0.18	0.10

Tableau III-1: Variances obtenues selon le modèle capillaire et le modèle des fermions.

Afin d'évaluer le domaine de validité de w_{har}^2 , de w_{cap}^2 et de w_{GWS}^2 (variance calculée selon l'expression (III-7)) un ensemble de valeurs de la variance a été calculée par la méthode du cylindre (w_{cyl}^2) pour différentes valeurs de E_k , A , T et ℓ_0 telles que $T > T_R$. En remarquant que les variances varient quadratiquement avec ℓ_0 et dépendent (comme \mathbf{I}) de T , E_k et A seulement via le rapport $\frac{A}{k_B T b^2(T)}$, nous avons reporté Figure III-12 les quantités $w^2/\ell_0^2 = f(A/k_B T b^2(T))$.

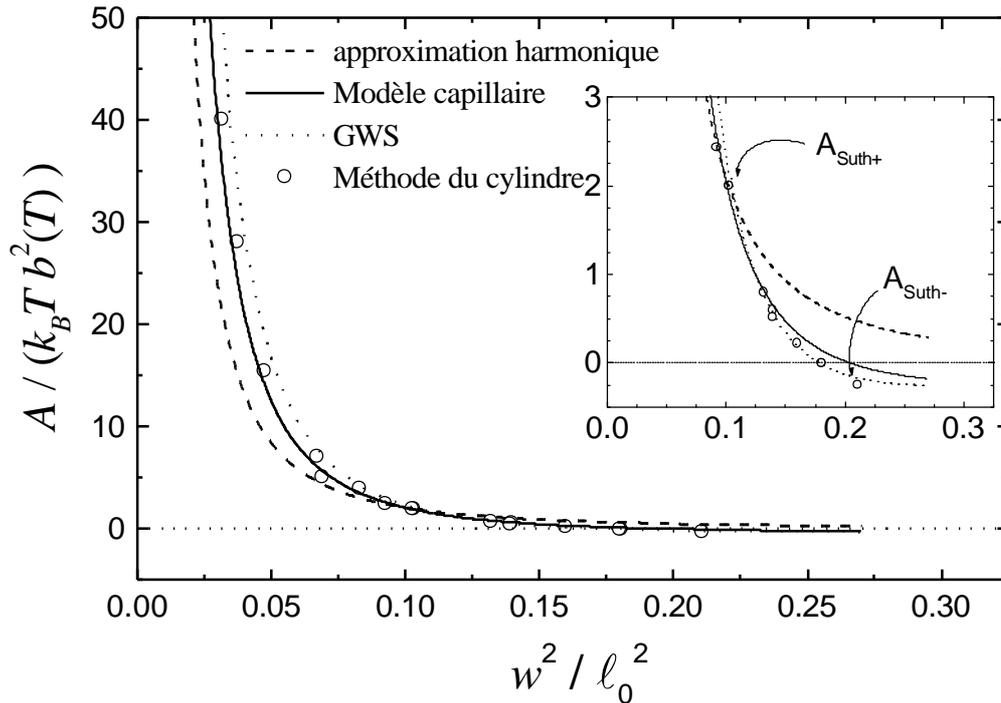


Figure III-12 : Pour $T > T_R$ la variance des largeurs de terrasses varie en $w^2/l_0^2 = f(A/k_B T b^2(T))$. (○) résultats de la méthode du cylindre pour différentes valeurs de A (-1 à 300 K), l_0 (2.5 à 6), et T (250 à 500 K). L'encadré est un agrandissement pour les petites valeurs de $A/k_B T b^2(T)$.

Ainsi nous montrons, par la comparaison avec les résultats de la méthode du cylindre, la validité de l'expression w_{GWS}^2 pour $A < A_{suth+}$. Rappelons cependant que la distribution associée n'est pas correcte pour un système sur réseau pour $A = A_{suth-}$. L'expression analytique w_{cap}^2 est en accord avec w_{cyl}^2 pour $A > A_{suth+}$ et $T > T_R$, ce qui montre que les effets de réseau sont bien négligeables dans cette gamme de température. Cependant, nous verrons dans le chapitre suivant, que cette formule approchée n'est plus valable pour $T \leq T_R$.

III-B.1.3. Distribution universelle des largeurs de terrasses à $T=T_R$

Les expressions analytiques précédentes ne sont valables que pour $T > T_R$. Nous avons alors examiné la distribution des largeurs de terrasses autour de T_R .

Un critère permettant de définir la température de transition rugueuse est l'égalité à $\frac{2}{p^2}$ du préfacteur du logarithme dans $G(m,0)$. En utilisant la relation (II-62), w_{cap}^2 à T_R est donnée par :

$$(III-14) \quad w_{cap}^2 = \frac{4}{p^2} .$$

La variance a donc une valeur universelle à T_R et en particulier elle ne dépend pas de ℓ_0 .

L'équation (III-14) montre que la loi d'échelle $w^2/\ell_0^2 = f(A/k_B T b^2(T))$ obtenue au-dessus de T_R , n'est plus vérifiée à T_R . Sur la Figure III-13 on observe bien qu'au voisinage et en dessous de T_R , les approches analytiques (approximation harmonique (III-12), modèle capillaire (III-9) et interpolation GWS (III-7)) ne sont plus valides.

Pour une excitation des marches limitée à $\ell_0 \pm 1$, on pourrait penser que l'approximation harmonique est correcte. Il n'en est rien car le potentiel harmonique est beaucoup plus faible que le potentiel réel pour $\ell_0 \pm 2$ (voir Figure III-14). Ainsi, la probabilité d'avoir des terrasses de longueur $\ell_0 \pm 2$ est non négligeable, ce qui conduit à une surestimation de la variance.

Expérimentalement, Hoogemans *et al.* [9] ont déterminé T_R pour la face Ag(1,1,5) en mesurant le préfacteur du logarithme. A T_R ils ont obtenu une variance $w_{exp}^2 \approx 0.38$, en accord avec l'équation (III-14). Dans un autre exemple, la distribution mesurée sur la face Cu(1,1,7) par M. Giesen *et al.* [10] ($w_{exp}^2 \approx 0.66$ à $T=300$ K) montre que T_R se situe légèrement sous la température ambiante pour cette surface.

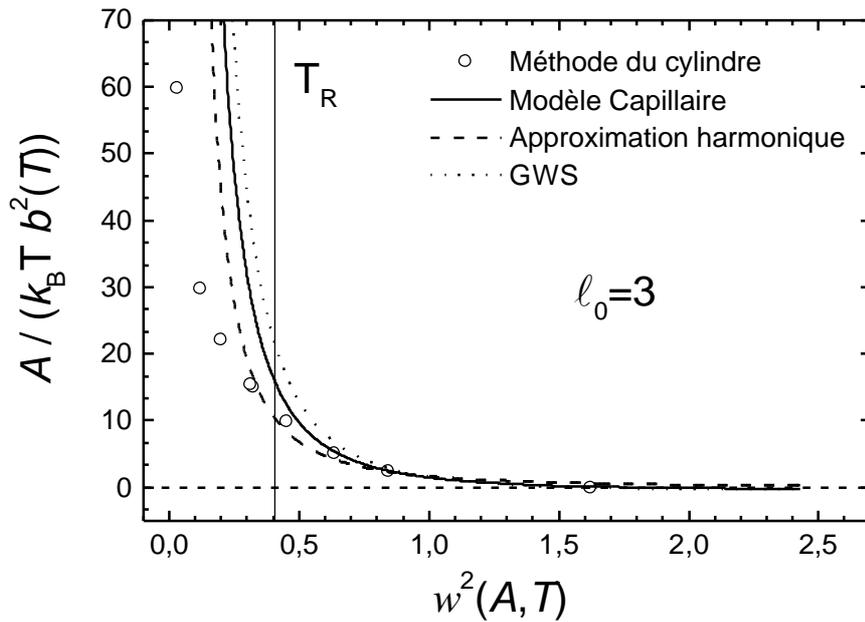


Figure III-13 : variance de la distribution des largeurs de terrasses pour $\ell_0=3$. ($E_k=1430$ K, $T=293$ K, A variant de 0 à 270 K). $w^2(A, T)$ calculée par la méthode du cylindre suit le modèle capillaire pour $T > T_R$. Au voisinage de T_R , $w^2(A, T)$ dévie du modèle capillaire pour rejoindre sa valeur universelle $4/\pi^2$.

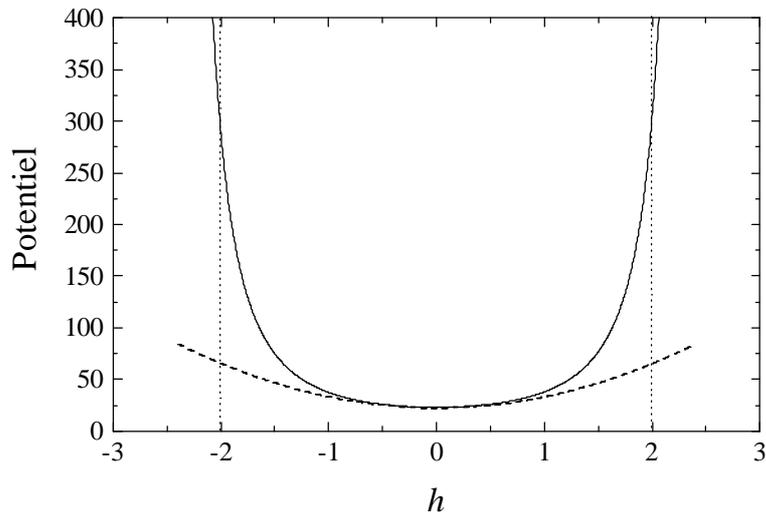


Figure III-14 : Potentiel subi par une marche entourées de deux marches droites : (—) potentiel réel en A/ℓ^2 (Eq (II-13)). (---) Approximation harmonique du potentiel précédent (Eq (II-14)).

La distribution des largeurs de terrasses a été calculée par la méthode du cylindre à T_R pour différentes faces vicinales (de $\ell_0=2.5$ à 5.5) pour une interaction entre toutes les marches $A=70$ K et $E_k=1430$ K. T_R a été déterminée en utilisant l'équation (II-63) avec l'expression complète de \mathbf{h}_y . Les résultats sont présentés sur la Figure III-15. On observe que l'histogramme est indépendant de ℓ_0 . Nous avons de plus vérifié que ce résultat est indépendant des valeurs de A et E_k .

On observe sur la distribution des largeurs de terrasses à T_R que les probabilités d'avoir des terrasses de longueur ℓ_0+2 ou ℓ_0-2 est quasiment nulle. En les supposant négligeables, les probabilités d'avoir des terrasses de longueur $\ell_0\pm 1$ sont données par : $P_{+1} = P_{-1} = \frac{2}{p^2}$ et $P_0 = 1 - \frac{4}{p^2}$. La distribution est donc très simple.

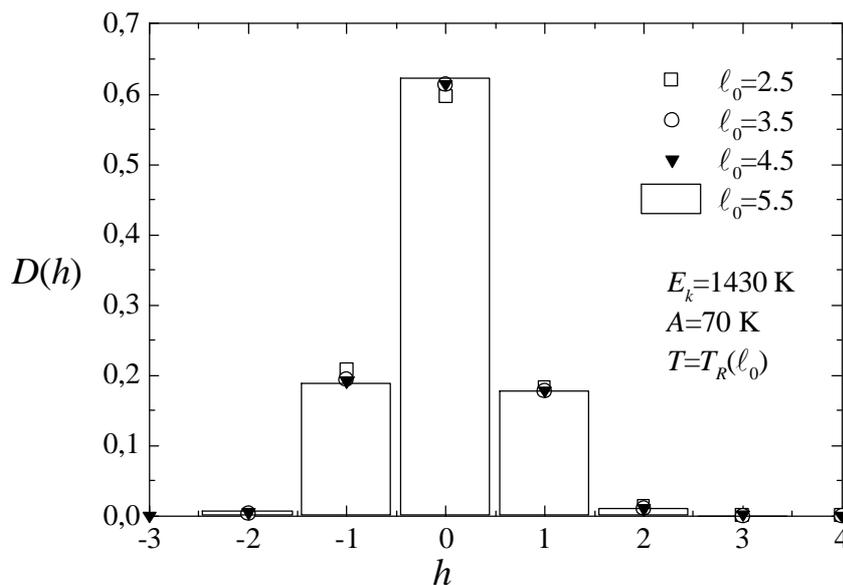


Figure III-15 : Distribution des largeurs de terrasses obtenue par la méthode du cylindre pour $E_k=1430$ K, $A=70$ K (interaction entre toutes les marches) et $\ell_0=2.5$ à 5.5 pour $T=T_R(\ell_0)$ (Eq. (II-63) en utilisant les expressions complètes de \mathbf{h}_x (II-56) et de \mathbf{h}_y (II-57)).

En conclusion, seules les méthodes tenant compte de la position discrète des marches telles que la méthode du cylindre ou les simulations Monte Carlo permettent d'obtenir des valeurs correctes de la variance de la largeur des terrasses au passage de la transition rugueuse.

Nous avons montré que l'histogramme des largeurs de terrasses est universel à T_R . La simplicité d'utilisation de la méthode du cylindre nous a permis de largement vérifier ce point.

La température de transition rugueuse peut être déterminée en ne mesurant que la distribution des largeurs de terrasses. Nous obtenons ainsi un critère local pour la rugosité.

III-B.2. Rigidité et potentiel de localisation pour $T < T_R$

Au-dessus de T_R on dispose de formules analytiques permettant de déterminer les paramètres énergétiques A et E_k à partir des fonctions de corrélation via les rigidités de surface \mathbf{h}_x et \mathbf{h}_y . Ce n'est plus le cas sous T_R , où l'évolution en températures de \mathbf{h}_x , \mathbf{h}_y et V_{loc} n'est pas connue. Nous avons alors examiné le comportement au passage de la transition rugueuse de ces paramètres sur un exemple particulier ($A_{MC}=280$ K et $E_k=1390$ K).

Pour ceci \mathbf{h}_x , \mathbf{h}_y et V_{loc} , ont été déterminés en ajustant les fonctions de corrélation $G(m,0)$ et $G(0,y)$ du modèle capillaire sur celles obtenues par simulation Monte Carlo.

Notre algorithme Monte Carlo impose de considérer une interaction entre marches premières voisines. Un ajustement des fonctions de corrélation pour $T > T_R$ conduit à $V_{loc}=0$ et à une valeur de $A_{cap}=170$ K naturellement inférieure à A_{MC} , que nous avons conservée pour $T < T_R$. Villain *et al.* [11] ont montré que l'on peut négliger les effets de la renormalisation sur \mathbf{h}_x . L'expression (II-56) peut donc être utilisée au-dessus et en-dessous de T_R .*

L'ajustement des fonctions de corrélation sous T_R est réalisé avec les deux derniers paramètres \mathbf{h}_y et V_{loc} .

Deux exemples des ajustements ainsi réalisés, l'un au-dessus et l'autre en-dessous de T_R , sont représentés sur la Figure III-16 et la Figure III-17.

* Cette approximation a été vérifiée dans le petit domaine de température sous T_R où $G(m,0)$ varie significativement avec m .

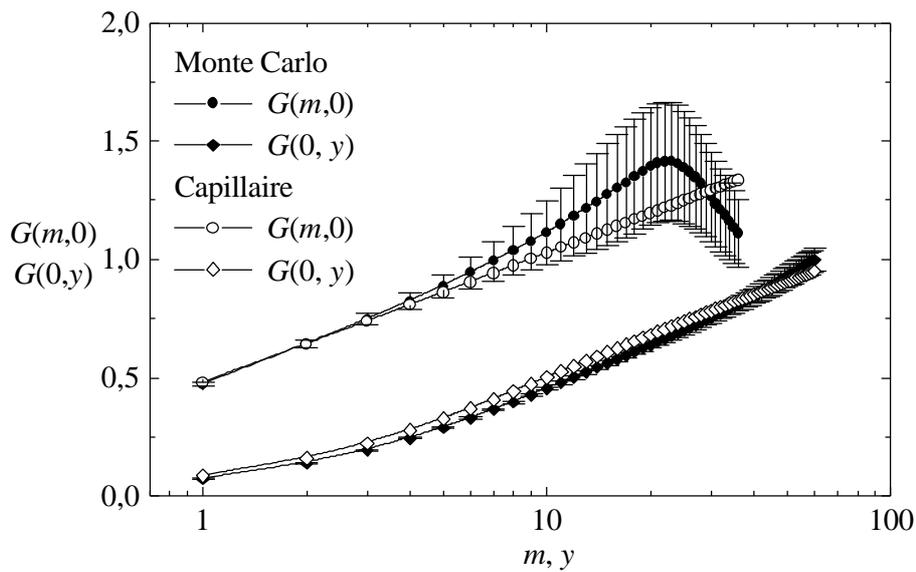


Figure III-16 : Ajustement à $T=500\text{ K} (>T_R=450\text{ K})$ des fonctions de corrélation calculées par le modèle capillaire sur les fonctions de corrélation obtenues par simulations Monte Carlo. Ces simulations sont réalisées sur un système de 76 marches \times 1300 sites. Après 6000 configurations de mise à l'équilibre, la moyenne statistique est calculée sur 4000 configurations.

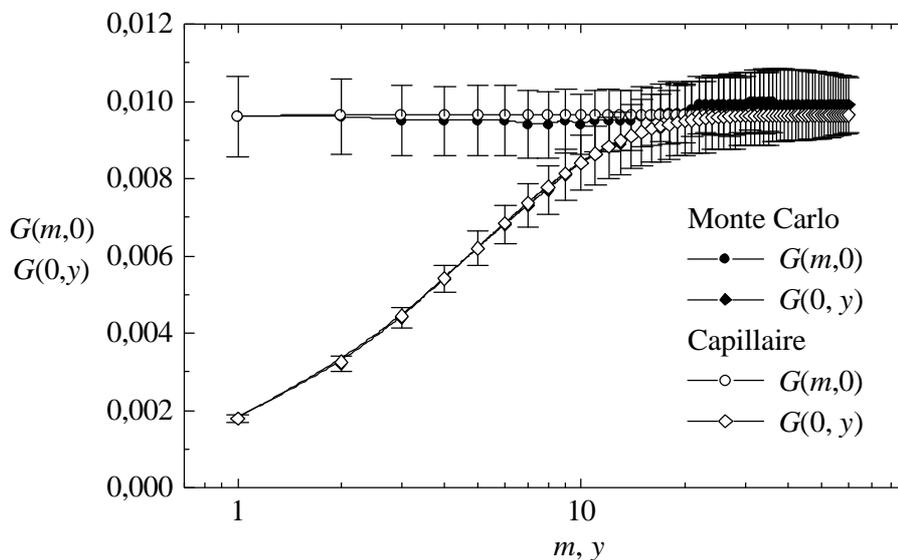


Figure III-17 : Ajustement à $T=300\text{ K} (<T_R=450\text{ K})$ des fonctions de corrélation calculées par le modèle capillaire sur les fonctions de corrélation obtenues par simulations Monte Carlo. Ces simulations sont réalisées sur un système de 76 marches \times 1300 sites. Après 6000 configurations de mise à l'équilibre, la moyenne statistique est calculée sur 4000 configurations.

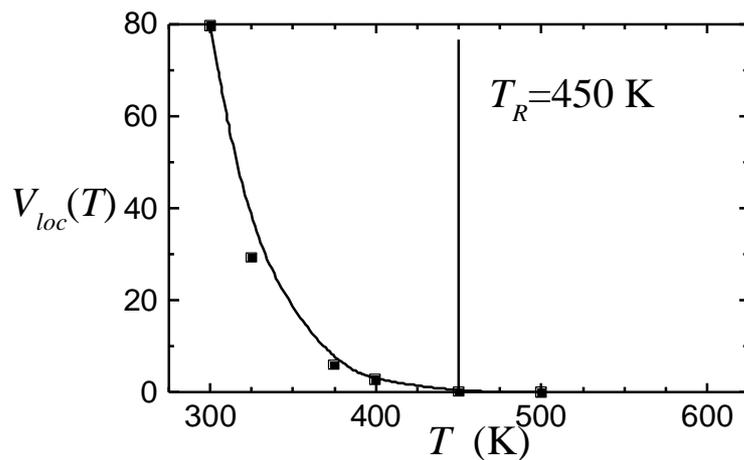
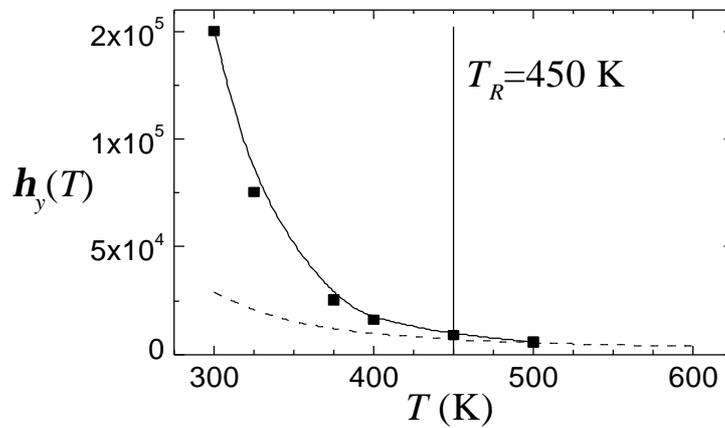
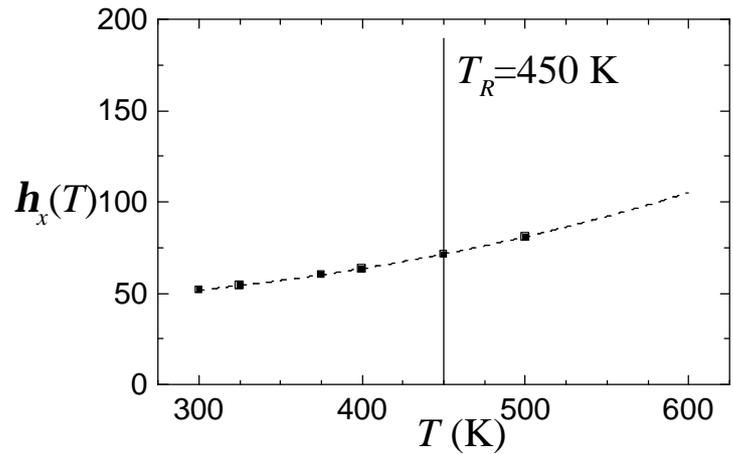


Figure III-18 : h_x , h_y et V_{loc} (en Kelvin) en fonction de T ($E_k=1390$ K, $A_{cap}=170$ K, $\ell_0=2.5$). (■) valeurs obtenues en ajustant les fonctions de corrélation avec les équations (II-51) et (II-52) sur des simulations Monte Carlo ($E_k=1390$ K, $A_{MC}=280$ K, $\ell_0=2.5$), les lignes continues sont des guides pour les yeux. Les tirets : h_x et h_y donnés par les équations (II-56) et (II-57).

L'évolution de h_x , h_y et V_{loc} en fonction de la température est représentée sur la Figure III-18. On observe que sous T_R , V_{loc} devient non nul et que h_y diffère très fortement de sa valeur donnée par Eq. (II-57).

Ces résultats montrent qu'à partir des fonctions de corrélation mesurées sur des images STM sous T_R , on peut déterminer les trois paramètres h_x , h_y et V_{loc} . Cependant, comme nous l'avons déjà signalé, nous ne disposons pas de relation permettant de connaître A et E_k , dont la détermination nécessite l'utilisation d'un calcul Monte Carlo ou de la méthode du cylindre.

III-B.3. Conclusion

L'analyse des résultats expérimentaux, c'est-à-dire de la distribution des largeurs de terrasses et des fonctions de corrélation $G(m,0)$ et $G(0,y)$, peut se faire en utilisant des modèles à une ou plusieurs marches.

Les méthodes à une marche ne conduisent pas à des résultats satisfaisants ni pour l'énergie d'interaction ni pour l'énergie de cran. Il est donc nécessaire d'utiliser des modèles à plusieurs marches qui retranscrivent correctement le comportement d'une surface réelle.

Pour traiter les modèles à plusieurs marches, nous avons introduit le modèle capillaire, la simulation Monte Carlo et la méthode du cylindre, appliquée ici pour la première fois aux cas des surfaces vicinales.

Au-dessus de T_R , les formules analytiques du modèle capillaire permettent la détermination de A et E_k (pas d'effet de réseau).

Nous avons montré qu'à T_R l'histogramme des largeurs de terrasses est universel. Ceci fournit un critère local pour la détermination de T_R .

Sous T_R , les rigidités h_x , h_y et le potentiel de localisation V_{loc} peuvent être déterminés à partir des fonctions de corrélation du modèle capillaire, qui a été étendu sous la température de transition rugueuse. Seules les simulations numériques Monte Carlo et la méthode du cylindre, qui tiennent compte du réseau, permettent d'atteindre A et E_k dans ce cas.

BIBLIOGRAPHIE

- [1] C. Herring, Phys. Rev. **82** (1951) 87.
- [2] 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.
- [3] T. Guhr, A. Müller-Groeling et H.A. Weidenmüller, Phys. Rept. **299** (1998) 189.
- [4] T.L. Einstein et O. Pierre-Louis, Surf. Sci. **424** (1999) L299.
- [5] E.E. Gruber et W.W. Mullins, J. Phys. Chem. Solids. **28** (1967) 875.
- [6] T. Ihle, C. Misbah et O. Pierre-Louis, Phys. Rev. **B 58** (1998) 2289.
- [7] W.K. Burton, N. Cabrera et F.C. Frank, Philos. Trans. R. Soc. London, Ser. **A 243** (1951) 299.
- [8] B. Joós, T.L. Einstein et N.C. Bartelt, Phys. Rev. **B 43** (1991) 8153.
- [9] M.S. Hoogeman, M.A.J. Klik, D.C. Schlösser, L. Kuipers et J.W.M. Frenken, Phys. Rev. Lett. **82** (1999) 1728.
- [10] J. Frohn, M. Giesen, M. Poensgen, J.F. Wolf, et H. Ibach, Phys Rev. Lett. **67** (1991) 3543.
- [11] J. Villain, D.R. Grimpel et J. Lapujoulade, J. Phys. **F 15** (1985) 809.