

# **ANNEXES**



## ANNEXE I:

### La méthode de la matrice de transfert

L'hamiltonien d'un système formé d'une marche entre deux marches droites ou constitué d'un ensemble de  $N$  marches fluctuantes peut être résolu par la méthode de la matrice de transfert. Cette annexe présente en détail cette méthode. Dans le cas d'un ensemble de marches, la méthode de la matrice de transfert est encore appelée *méthode du cylindre*.

### I. La méthode de la matrice de transfert à une marche

#### I-1. Présentation du modèle

On considère une marche fluctuant dans le potentiel créé par deux marches voisines supposées droites et localisées en  $h=-\ell_0$  et  $h=+\ell_0$  (voir Figure 1). La position de la marche sur un site  $y$ , par rapport à sa position d'équilibre, est donnée par  $h_y$ . Soit  $N_s$  le nombre de sites de la marche, avec la condition aux limites périodiques  $h_{N_s} = h_0$ . L'hamiltonien symétrisé de ce système dans le cas du modèle ASOS (énergie de cran proportionnelle à sa longueur) est donné par :

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

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

Le potentiel  $V(h)$  peut prendre n'importe quelle forme. Pour une interaction de type élastique il s'écrira :

$$(3) \quad V(h) = \frac{A}{(\ell_0 + h)^2} + \frac{A}{(\ell_0 - h)^2} .$$

La configuration de la marche est complètement décrite par l'ensemble des positions  $\{h_0, \dots, h_{N_s-1}\}$ . Dans la notation bracket, qui sera largement utilisée ici, la position de la marche au site  $y$  sera notée  $|h_y\rangle$ . Dans ce modèle, tous les sites de la marche sont équivalents.

La méthode de la matrice de transfert permet de calculer pour ce modèle l'énergie libre, la distribution des largeurs de terrasses ainsi que la fonction de corrélation le long du bord de marche.

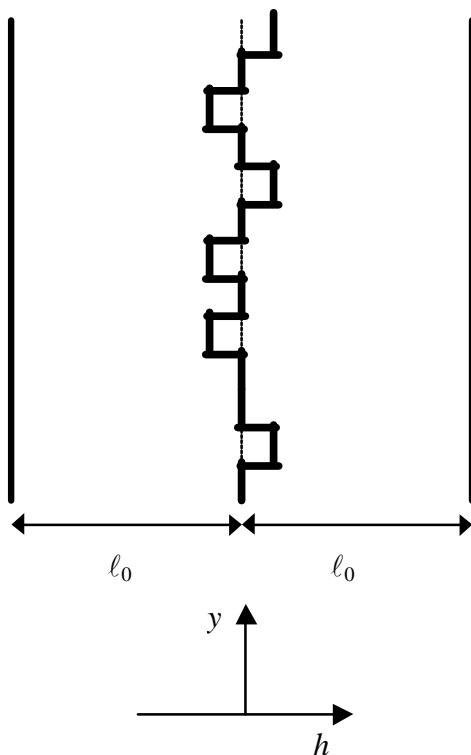


Figure 1 : Schéma du modèle à une marche.

## I-2. Fonction de partition, énergie libre

La fonction de partition de cette marche comportant  $N_s$  sites s'écrit,

$$(4) \quad Z = \sum_{\{h_0, \dots, h_{N_s-1}\}} \left[ \prod_{y=0}^{N_s-1} e^{-\frac{H(h_{y+1}, h_y)}{k_B T}} \right] = \sum_{\{h_0, \dots, h_{N_s-1}\}} \left[ \prod_{y=0}^{N_s-1} \langle h_{y+1} | \hat{T} | h_y \rangle \right] = \text{Tr}(\hat{T}^{N_s}) ,$$

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

$$(5) \quad \langle h' | \hat{T} | h \rangle = e^{-\frac{H(h',h)}{k_B T}},$$

avec  $k_B$  la constante de Boltzmann.

La somme dans l'expression (4) de la fonction de partition se fait sur toutes les configurations possibles  $\{h_0, \dots, h_{N_s-1}\}$  de la marche. La matrice de transfert est une matrice  $m \times m$ ,  $m$  étant le nombre de valeurs possibles pour  $h$ .

Soit  $\{\Lambda_p\}$  l'ensemble des valeurs propres de  $\hat{T}$  et  $\{\Psi_p\}$  l'ensemble de leurs vecteurs propres associés, l'équation(4) devient alors,

$$(6) \quad Z = \sum_{p=1}^m (\Lambda_p)^{N_s},$$

qui à la limite thermodynamique ( $N_s \rightarrow \infty$ ), se réduit à,

$$(7) \quad Z = \lim_{N_s \rightarrow \infty} (\Lambda_{\max})^{N_s} \sum_{p=1}^m \left( \frac{\Lambda_p}{\Lambda_{\max}} \right)^{N_s} = \lim_{N_s \rightarrow \infty} (\Lambda_{\max})^{N_s},$$

avec  $\Lambda_{\max}$  la plus grande valeur propre.

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

$$(8) \quad F = -\frac{k_B T}{2 \ell_0} \ln(\Lambda_{\max}).$$

Il est intéressant de noter, afin de mieux comprendre les calculs qui vont suivre, que le rapport  $\frac{\langle h' | \hat{T} | h \rangle}{Z}$  est la probabilité que la marche soit à la position  $h'$  sur le site  $y+1$ , sachant qu'elle était à la position  $h$  sur le site  $y$ .

### I-3. Distribution des largeurs de terrasses

La distribution des largeurs de terrasses est déterminée par la probabilité que la marche soit à la position  $h$  sur un site  $y$  quelconque. Cette probabilité s'exprime en fonction des éléments de la matrice de transfert comme :

$$(9) \quad P(h_y = h) = \frac{\sum_{h_0, h_1, \dots, h_{N_s-1}} \langle h_0 | \hat{T} | h_1 \rangle \langle h_1 | \hat{T} | h_2 \rangle \dots \langle h_{y-1} | \hat{T} (h_y = h) h_y \rangle \langle h_y | \hat{T} | h_{y+1} \rangle \dots \langle h_{N_s-1} | \hat{T} | h_0 \rangle}{Z},$$

qui en utilisant la relation de fermeture  $\sum_{h_j} |h_j\rangle \langle h_j| = 1$ , se simplifie en,

$$(10) \quad P(h_y = h) = \frac{\langle h_y | \hat{T}^{N_s} (h_y = h) h_y \rangle}{Z}.$$

En appliquant la relation de fermeture  $\sum_p |\Psi_p\rangle \langle \Psi_p| = 1$  de part et d'autre de la matrice de transfert et en utilisant l'orthonormalisation des vecteurs propres  $\langle \Psi_p | \Psi_{p'} \rangle = \mathbf{d}_{p,p'}$ , la relation précédente devient :

$$(11) \quad P(h_y = h) = \sum_{p,p'} \frac{\langle h | \Psi_p \rangle \langle \Psi_p | \hat{T}^{N_s} | \Psi_{p'} \rangle \langle \Psi_{p'} | h \rangle}{Z} = \sum_p \frac{(\Lambda_p)^{N_s}}{Z} |\langle h | \Psi_p \rangle|^2,$$

qui pour une marche de longueur infinie ( $N_s \rightarrow \infty$ ) se réduit à,

$$(12) \quad P(h_y = h) = \lim_{N_s \rightarrow \infty} \sum_p \frac{(\Lambda_p)^{N_s}}{(\Lambda_{\max})^{N_s}} |\langle h | \Psi_p \rangle|^2 = |\langle h | \Psi_{\max} \rangle|^2 = |(\Psi_{\max})_h|^2,$$

avec  $|\Psi_{\max}\rangle$  le vecteur propre associé à la valeur propre  $\Lambda_{\max}$ .

Tous les sites étant équivalents, la probabilité que la marche soit positionnée en  $h$ , sur un site  $y$  quelconque est égale au module carré  $|(\Psi_{\max})_h|^2$  de la composante  $h$  (les positions possibles  $\{h\}$ ) de la marche sur un site quelconque étant la base de la matrice de transfert  $\hat{T}$ ) du vecteur propre associé à la valeur propre maximum.

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

$$(13) \quad D(\ell) = P(\ell - \ell_0) .$$

#### I-4. Fonction de corrélation le long du bord de marche

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

$$(14) \quad G(y) = \langle (h_y - h_0)^2 \rangle = 2 \langle h_0^2 \rangle - 2 \langle h_0 h_y \rangle ,$$

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

Le premier terme de la fonction de corrélation s'exprime simplement :

$$(15) \quad \langle h_0^2 \rangle = \sum_h h^2 |\langle h | \Psi_{\max} \rangle|^2 .$$

Le deuxième terme, quant à lui, s'écrit :

$$(16) \quad \langle h_0 h_y \rangle = \frac{\sum_{h_0, h_y} h_0 \langle h_0 | \hat{T}^y | h_y \rangle h_y \langle h_y | \hat{T}^{N_s - y} | h_0 \rangle}{Z} .$$

En introduisant la relation de fermeture  $\sum_p |\Psi_p\rangle \langle \Psi_p| = 1$  de part et d'autre de la matrice de transfert, on obtient :

$$(17) \quad \langle h_0 h_y \rangle = \frac{\sum_{h_0, h_y} h_0 h_y \left[ \sum_{p, p', p'', p'''} \langle h_0 | \Psi_p \rangle \langle \Psi_p | \hat{T}^y | \Psi_{p'} \rangle \langle \Psi_{p'} | h_y \rangle \langle h_y | \Psi_{p''} \rangle \langle \Psi_{p''} | \hat{T}^{N_s - y} | \Psi_{p'''} \rangle \langle \Psi_{p'''} | h_0 \rangle \right]}{Z} ,$$

qui se simplifie en :

$$(18) \quad \langle h_0 h_y \rangle = \frac{\sum_{h_0, h_y} h_0 h_y \left[ \sum_{p, p'} \langle h_0 | \Psi_p \rangle (\Lambda_p)^y \langle \Psi_p | h_y \rangle \langle h_y | \Psi_{p'} \rangle (\Lambda_{p'})^{Ns-y} \langle \Psi_{p'} | h_0 \rangle \right]}{Z}.$$

En remarquant que :

$$(19) \quad \lim_{Ns \rightarrow \infty} \frac{(\Lambda_{p'})^{Ns-y}}{Z} = \lim_{Ns \rightarrow \infty} \frac{(\Lambda_{p'})^{Ns-y}}{(\Lambda_{\max})^{Ns}} = 0 \quad \text{si} \quad \Lambda_{p'} \neq \Lambda_{\max}$$

On obtient à la limite thermodynamique ( $Ns \rightarrow \infty$ ),

$$(20) \quad \langle h_0 h_y \rangle = \frac{\sum_{h_0, h_y} h_0 h_y \left[ \sum_p \langle \Psi_{\max} | h_0 \rangle \langle h_0 | \Psi_p \rangle (\Lambda_p)^y \langle \Psi_p | h_y \rangle \langle h_y | \Psi_{\max} \rangle \right]}{(\Lambda_{\max})^y},$$

La fonction de corrélation des déplacements du bord de marche s'écrit finalement :

$$(21) \quad G(y) = 2 \sum_h h^2 \left| \langle h | \Psi_{\max} \rangle \right|^2 - 2 \frac{\sum_{h_0, h_y} h_0 h_y \left[ \sum_p \langle \Psi_{\max} | h_0 \rangle \langle h_0 | \Psi_p \rangle (\Lambda_p)^y \langle \Psi_p | h_y \rangle \langle h_y | \Psi_{\max} \rangle \right]}{(\Lambda_{\max})^y}.$$

## **II. La méthode du cylindre**

### **II-1. Présentation de la méthode**

La méthode du cylindre permet de traiter le problème d'un ensemble de marches interagissant sur une surface. Le système se compose de  $N$  marches de longueur infinie séparées en moyenne par  $\ell_0$  sites et respectant une condition de non croisement. Dans la direction des marches tous les sites sont équivalents. Des conditions aux limites périodiques sont appliquées parallèlement et perpendiculairement à la direction des marches. Dans la direction perpendiculaire, une marche particulière, appelée *marche de référence*, est utilisée



comme limite périodique. Dans la direction parallèle aux marches, ces dernières se bouclent sur elle même. Le système complet forme un tore qui tend vers un cylindre pour des marches de longueur infinie (voir Figure 2). La méthode est applicable à toute forme de potentiel.

La position de la marche  $m$  sur le site  $y$  par rapport à sa position d'équilibre est notée  $h_{m,y}$ . Sur chaque site  $y$ , la même marche est prise comme marche de référence, les autres marches sont positionnées sur les  $N\ell_0-1$  sites restant du tore. La configuration des marches sur un site (pour laquelle on utilisera la notation bracket) est décrite par l'ensemble des distances relatives séparant la marche de référence ( $m=0$ ) des  $N-1$  autres marches :

$$(22) \quad \begin{aligned} |\Delta h_y\rangle &= \{(h_{1,y} + \ell_0 - h_{0,y}), (h_{2,y} + 2\ell_0 - h_{0,y}), \dots, (h_{N-1,y} + (N-1)\ell_0 - h_{0,y})\} \\ &= \{\mathbf{d}h_{1,y}, \mathbf{d}h_{2,y}, \dots, \mathbf{d}h_{N-1,y}\} \end{aligned}$$

avec  $\mathbf{d}h_{n,y} = h_{n,y} + n\ell_0 - h_{0,y}$  .

L'énergie d'un tel système de marches constituées chacune de  $N_s$  sites est donnée par :

$$(23) \quad H = \sum_{y=0}^{N_s-1} H(y)$$

avec :

$$(24) \quad H(y) = \sum_{m=0}^{N-1} \left[ |h_{m,y+1} - h_{m,y}| E_k + \sum_{m'>m} V_{sym}(\mathbf{d}h_{m',y+1}, \mathbf{d}h_{m,y+1}, \mathbf{d}h_{m',y}, \mathbf{d}h_{m,y}) \right],$$

où  $E_k$  est l'énergie de formation d'un cran simple. Dans le modèle ASOS (Absolute Solid On Solid) utilisé ici, l'énergie de cran, correspondant au premier terme, est linéaire avec la taille du cran. Le deuxième terme est, quant à lui, associé à l'interaction entre les marches par l'intermédiaire d'un potentiel symétrisé :

$$(25) \quad V_{sym}(\mathbf{d}h_{m',y+1}, \mathbf{d}h_{m,y+1}, \mathbf{d}h_{m',y}, \mathbf{d}h_{m,y}) = \frac{V(\mathbf{d}h_{m',y+1} - \mathbf{d}h_{m,y+1}) + V(\mathbf{d}h_{m',y} - \mathbf{d}h_{m,y})}{2}.$$

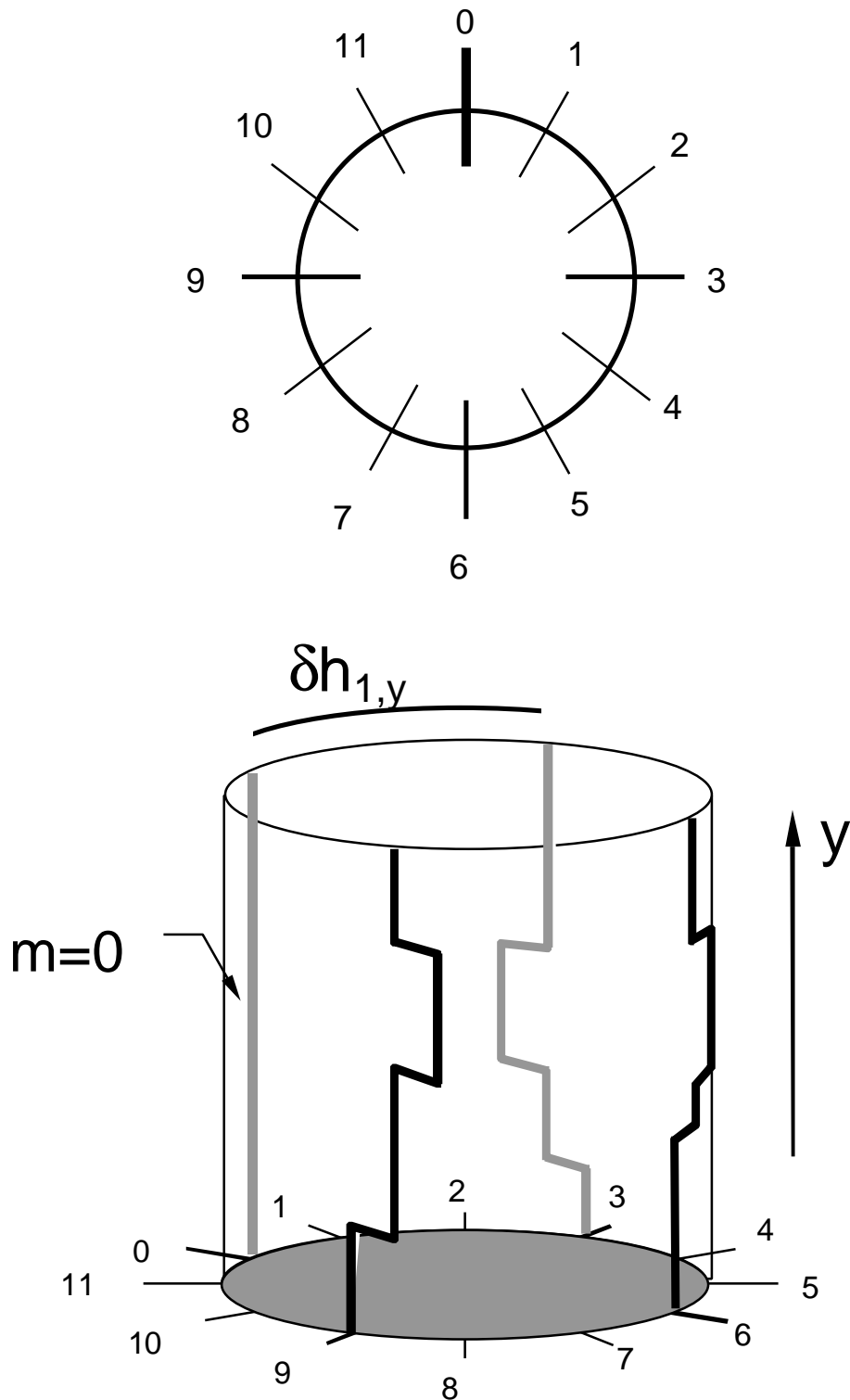


Figure 2 : Schéma du cylindre pour  $N=4$  marches,  $\ell_0=3$ . A chaque site ( $y$ ) les marches sont localisées par leurs positions relatives  $|\Delta h_y\rangle = \{\mathbf{d}h_{1,y}, \mathbf{d}h_{2,y}, \dots, \mathbf{d}h_{N-1,y}\}$  par rapport à la marche de référence. La marche  $m=0$  a des crans mais elle est prise comme origine à chaque sites  $y$ .

Les déplacements de la marche de référence d'un site  $y$  au site  $y+1$ , sont notés  $\mathcal{H}_{0,y+1} = (h_{0,y+1} - h_{0,y})$ .

La méthode de matrice de transfert appliquée à un système de  $N$  marches permet de déterminer l'énergie libre, la distribution des largeurs de terrasses et les fonctions de corrélation des marches d'une surface vicinale.

## II-2. Fonction de partition, énergie libre

On définit les éléments de la matrice  $\hat{T}$ , appelée *matrice de transfert*, par :

$$(26) \quad \langle \Delta h' | \hat{T} | \Delta h \rangle = \langle \Delta h' | \sum_{n=0, \pm 1, \pm 2, \dots} e^{\frac{\mathbf{d}H_n}{k_B T}} | \Delta h \rangle .$$

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

$$(27) \quad \mathbf{d}H_n(y) = |n|E_k + \sum_{m=1}^{N-1} \left[ \mathbf{d}h_{m,y+1} - \mathbf{d}h_{m,y} + n|E_k + \sum_{m'>m} V(\mathbf{d}h_{m',y+1}, \mathbf{d}h_{m,y+1}, \mathbf{d}h_{m',y}, \mathbf{d}h_{m,y}) \right] .$$

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 possibles de la marche de référence (pour  $T \ll E_k$   $n$  peut se limiter à 2):

$$(28) \quad \langle \Delta h' | \hat{T} | \Delta h \rangle = \sum_{n=0, \pm 1, \pm 2, \dots} \langle \Delta h' | \hat{T}_n | \Delta h \rangle = \sum_{n=0, \pm 1, \pm 2, \dots} \langle \Delta h' | e^{\frac{\mathbf{d}H_n}{k_B T}} | \Delta h \rangle .$$

On peut remarquer que la matrice  $\hat{T}_{-n}$  est la transposée de la matrice  $\hat{T}_n$ . La taille de la matrice de transfert  $\hat{T}$  est donnée par le nombre total  $N_C$  de configurations possibles  $\{\Delta h\}$  sur chaque site  $y$  :

$$(29) \quad N_C = \frac{(N \ell_0 - 1)!}{(N-1)!(N \ell_0 - N)!} .$$

La fonction de partition du système étudié s'écrit en fonction de la matrice de transfert :

$$(30) \quad Z = \sum_{\Delta h_0, \Delta h_1, \dots, \Delta h_{N_s-1}} \langle \Delta h_0 | \hat{T} | \Delta h_1 \rangle \langle \Delta h_1 | \hat{T} | \Delta h_2 \rangle \dots \langle \Delta h_{N_s-1} | \hat{T} | \Delta h_0 \rangle ,$$

avec la condition aux limites périodiques  $|\Delta h_{N_s}\rangle = |\Delta h_0\rangle$ .

En utilisant la relation de fermeture  $\sum_{\Delta h_i} |\Delta h_i\rangle \langle \Delta h_i| = 1$ , l'expression (30) se simplifie

en :

$$(31) \quad Z = \sum_{\Delta h_0} \langle \Delta h_0 | \hat{T}^{N_s} | \Delta h_0 \rangle = \text{Tr}(\hat{T}^{N_s}) .$$

Soit  $\{\Lambda_p\}$  l'ensemble des valeurs propres de  $\hat{T}$  et  $\{\Psi_p\}$  l'ensemble de leurs vecteurs propres associés, la fonction de partition s'écrira finalement

$$(32) \quad Z = \sum_p \Lambda_p^{N_s} .$$

Pour des marches de longueur infinie ( $N_s \rightarrow \infty$ )  $Z$  s'exprime en fonction de  $\Lambda_{\max}$ , la plus grande valeur propre :

$$(33) \quad Z = \lim_{N_s \rightarrow \infty} \left\{ (\Lambda_{\max})^{N_s} \left[ 1 + \sum_{p \neq p_{\max}} \left( \frac{\Lambda_p}{\Lambda_{\max}} \right)^{N_s} \right] \right\} = \lim_{N_s \rightarrow \infty} (\Lambda_{\max})^{N_s} ,$$

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

$$(34) \quad F(T) = -\frac{k_B T}{N \ell_0} \ln(\Lambda_{\max}) .$$

### II-3. Distribution des largeurs de terrasses

La distribution des largeurs de terrasses  $D(dh)$  est déterminée par la probabilité  $P(|\Delta h_i\rangle)$  d'être dans une configuration donnée  $|\Delta h_i\rangle$  sur un site  $y$  quelconque. Cette probabilité est donnée par :

(35)

$$P(\Delta h_y = \Delta h_i) = \frac{\sum_{\Delta h_0, \Delta h_1, \dots, \Delta h_{N_s-1}} \langle \Delta h_0 | \hat{T} | \Delta h_1 \rangle \langle \Delta h_1 | \hat{T} | \Delta h_2 \rangle \dots \langle \Delta h_{y-1} | \hat{T} (\Delta h_y = \Delta h_i) \Delta h_y \rangle \langle \Delta h_y | \hat{T} | \Delta h_{y+1} \rangle \dots \langle \Delta h_{N_s-1} | \hat{T} | \Delta h_0 \rangle}{Z} .$$

En utilisant la relation de fermeture  $\sum_{\Delta h_i} |\Delta h_i\rangle \langle \Delta h_i| = 1$ , on obtient :

$$(36) \quad P(\Delta h_y = \Delta h_i) = \frac{\langle \Delta h_y | \hat{T}^{N_s} (\Delta h_y = \Delta h_i) \Delta h_y \rangle}{Z} .$$

En appliquant la relation de fermeture  $\sum_p |\Psi_p\rangle \langle \Psi_p| = 1$  de part et d'autre de la matrice de transfert et en utilisant l'orthonormalisation des vecteurs propres  $\langle \Psi_p | \Psi_{p'} \rangle = \mathbf{d}_{p,p'}$ , la relation précédente devient :

(37)

$$P(\Delta h_y = \Delta h_i) = \sum_{p,p'} \frac{\langle \Delta h_i | \Psi_p \rangle \langle \Psi_p | \hat{T}^{N_s} | \Psi_{p'} \rangle \langle \Psi_{p'} | \Delta h_i \rangle}{Z} = \sum_p \frac{(\Lambda_p)^{N_s}}{Z} |\langle \Delta h_i | \Psi_p \rangle|^2$$

qui pour des marches de longueur infinie ( $N_s \rightarrow \infty$ ), se réduit à :

$$(38) \quad P(\Delta h_y = \Delta h_i) = \lim_{N_s \rightarrow \infty} \sum_p \frac{(\Lambda_p)^{N_s}}{(\Lambda_{\max})^{N_s}} |\langle \Delta h_i | \Psi_p \rangle|^2 = |\langle \Delta h_i | \Psi_{\max} \rangle|^2 = |(\Psi_{\max})_i|^2 .$$

Tous les sites du modèle étant équivalents, la probabilité d'être dans une configuration donnée  $|\Delta h_i\rangle$  sur un site quelconque  $y$  est le module carré de la composante  $i$  du vecteur propre  $|\Psi_{\max}\rangle$ .

Connaissant la probabilité d'être dans une configuration donnée  $|\langle \Delta h_i | \Psi_{\max} \rangle|^2$ , la distribution des largeurs de terrasses s'en déduit simplement :

$$(39) \quad D(dh) = \sum_i |\langle \Delta h_i | \Psi_{\max} \rangle|^2 \langle \Delta h_i | (\mathbf{d}h_{m,y} \hat{=} dh) | \Delta h_i \rangle$$

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

$$(40) \quad \langle \Delta h_i | (\mathbf{d}h_{m,y} \hat{=} dh) | \Delta h_i \rangle = 1 \quad \text{si,} \quad ((\mathbf{d}h_{m+1,y})_i - (\mathbf{d}h_{m,y})_i) = dh$$

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

$(\mathbf{d}h_{m,y})_i$  désignant la distance entre la marche  $m$  et la marche de référence pour la configuration  $i$  sur le site  $y$ .

#### II-4. Fonctions de corrélation spatiale

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

$$(41) \quad G(m,0) = \langle (h_{m,0} - h_{0,0})^2 \rangle = \langle (\mathbf{d}h_{m,0} - n \cdot \ell_0)^2 \rangle = \sum_i \left( ([\mathbf{d}h_{m,0} - n \cdot \ell_0]_i)^2 |\langle \Psi_{\max} \rangle_i|^2 \right) .$$

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 du chapitre II-C.5.2. . Le nombre de marches étant ainsi limité, seule  $G(m=1,0)$  peut être obtenue du fait des conditions aux limites périodiques ( $G(m,0)$  est symétrique par rapport à  $m = \frac{N}{2}$ ).

Dans le cas de la fonction de corrélation dans la direction parallèle aux marches  $G(0, y) = \langle (h_{0,y} - h_{0,0})^2 \rangle$ , la longueur des marches étant infinie, il n'y a pas de limitation sur la valeur maximum de  $y$ .

La fonction  $G(0,y)$  peut se développer en termes de longueur de cran  $\mathbb{H}_{m,j} = h_{m,j} - h_{m,j-1}$  pour chaque site compris entre 0 et  $y$  :

$$(42) \quad G(0, y) = \left\langle \left( \sum_{j=1}^y \partial h_{m,j} \right)^2 \right\rangle = \sum_{j=1}^y \langle \partial h_{m,j}^2 \rangle + 2 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^y \langle \partial h_{m,j} \cdot \partial h_{m,i} \rangle .$$

Tous les éléments de la première somme dans l'expression ci-dessus sont identiques et égaux à  $G(0,1)$  :

$$(43) \quad \sum_{j=1}^y \langle \partial h_{m,j}^2 \rangle = y \langle \partial h_{m,1}^2 \rangle = y G(0,1) .$$

$G(0,1) = \langle \partial h_{m,1}^2 \rangle$  peut s'écrire dans la base des vecteurs propres de la matrice de transfert comme :

$$(44) \quad G(0,1) = \frac{1}{Z} \sum_{\{p,p'\}} \langle \Psi_p | \hat{\partial} h_{m,1}^2 \hat{T} | \Psi_{p'} \rangle \langle \Psi_{p'} | \hat{T}^{N_s-1} | \Psi_p \rangle ,$$

avec  $\hat{\partial} h_{m,j}$  l'opérateur donnant la taille  $n$  des crans de la marche  $m$  entre les sites  $j$  et  $j-1$ . Les propriétés d'orthonormalisation de la base des vecteurs propres nous conduisent à :

$$(45) \quad G(0,1) = \sum_p \frac{(\Lambda_p)^{N_s-1}}{Z} \langle \Psi_p | \hat{\partial} h_{m,1}^2 \hat{T} | \Psi_p \rangle$$

qui pour  $N_s \rightarrow \infty$  devient

$$(46) \quad G(0,1) = \frac{\langle \Psi_{\max} | \hat{\partial} h_{m,1}^2 \hat{T} | \Psi_{\max} \rangle}{\Lambda_{\max}} = \frac{\langle \Psi_{\max} | \sum_{n=0,\pm 1,\pm 2} n^2 \cdot \hat{T}_n | \Psi_{\max} \rangle}{\Lambda_{\max}} .$$

Chaque terme de la seconde somme de (42) s'écrit :

(47)

$$\langle \partial h_{m,j} \cdot \partial h_{m,i} \rangle = \frac{\sum_{p,p',p''} \langle \Psi_p | \hat{\partial} h_{m,i} \hat{T} | \Psi_{p'} \rangle \langle \Psi_{p'} | \hat{T}^{i-j-1} | \Psi_{p''} \rangle \langle \Psi_{p''} | \hat{\partial} h_{m,j} \hat{T} | \Psi_{p''} \rangle \langle \Psi_{p''} | \hat{T}^{N_s-i+j-1} | \Psi_p \rangle}{Z}$$



Pour un cran positif ou négatif de longueur  $n$  on a la relation :

$$\langle \Psi_p | n.\hat{T}_n | \Psi_{p'} \rangle = -\langle \Psi_{p'} | n.\hat{T}_{-n} | \Psi_p \rangle,$$

qui conduit à

$$\langle \Psi_p | \hat{\partial}h_{m,i} \hat{T} | \Psi_{p'} \rangle = \sum_{n=0,\pm 1,\pm 2,\dots} \langle \Psi_p | n.\hat{T}_n | \Psi_{p'} \rangle = -\langle \Psi_{p'} | \hat{\partial}h_{m,i} \hat{T} | \Psi_p \rangle,$$

de plus, tous les sites sont équivalents :

$$\langle \Psi_p | \hat{\partial}h_{m,i} \hat{T} | \Psi_{p'} \rangle = \langle \Psi_p | \hat{\partial}h_{m,j} \hat{T} | \Psi_{p'} \rangle = \langle \Psi_p | \hat{\partial}h_{m,1} \hat{T} | \Psi_{p'} \rangle.$$

En utilisant les deux relations précédentes ainsi que l'orthonormalisation des vecteurs propres  $\langle \Psi_p | \Psi_{p'} \rangle = \mathbf{d}_{p,p'}$ , (47) se réduit à :

$$(48) \quad \langle \partial h_{m,j} \partial h_{m,i} \rangle = -\frac{\sum_{p,p'} (\Lambda_{p'})^{i-j-1} \left| \langle \Psi_{p'} | \hat{\partial}h_{m,1} \hat{T} | \Psi_p \rangle \right|^2 (\Lambda_p)^{N_s-i+j-1}}{Z},$$

qui pour  $N_s \rightarrow \infty$  devient

$$(49) \quad \langle \partial h_{m,j} \partial h_{m,i} \rangle = -\sum_p \frac{(\Lambda_p)^{i-j-1}}{(\Lambda_{\max})^{i-j+1}} \left| \langle \Psi_p | \sum_{n=0,\pm 1,\pm 2,\dots} n.\hat{T}_n | \Psi_{\max} \rangle \right|^2$$

$$(50) \quad \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^y \langle \partial h_{m,j} \partial h_{m,i} \rangle = -\sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^y \left[ \sum_p \frac{(\Lambda_p)^{i-j-1}}{(\Lambda_{\max})^{i-j+1}} \left| \langle \Psi_p | \sum_{n=0,\pm 1,\pm 2,\dots} n.\hat{T}_n | \Psi_{\max} \rangle \right|^2 \right]$$

$G(0,y)$  étant la somme de (43) et (50), on obtient finalement :

$$(51) \quad G(0, y) = y G(0,1) - 2 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^y \left[ \sum_p \frac{(\Lambda_p)^{i-j-1}}{(\Lambda_{\max})^{i-j+1}} \left| \langle \Psi_p | \sum_{n=0,\pm 1,\pm 2,\dots} n.\hat{T}_n | \Psi_{\max} \rangle \right|^2 \right]$$

L'expression ci-dessus, nécessite le calcul de toutes les valeurs propres et vecteurs propres de la matrice de transfert.

On peut également calculer le second terme de l'équation (42) sans utiliser la relation de fermeture, on a alors :

$$(52) \quad \langle \partial h_{m,j} \cdot \partial h_{m,i} \rangle = \frac{\sum_p \langle \Psi_p | \hat{\partial} h_{m,i} \hat{T} (\hat{T}^{i-j-1}) (\hat{\partial} h_{m,j} \hat{T}) \hat{T}^{N_s-i+j-1} | \Psi_p \rangle}{Z}$$

qui se simplifie en :

$$(53) \quad \langle \partial h_{m,j} \cdot \partial h_{m,i} \rangle = \frac{\sum_p (\Lambda_p)^{N_s-i+j-1} \langle \Psi_p | (\hat{\partial} h_{m,i} \hat{T}) (\hat{T}^{i-j-1}) (\hat{\partial} h_{m,j} \hat{T}) | \Psi_p \rangle}{Z} .$$

Pour  $N_s \rightarrow \infty$ , la relation précédente devient :

$$(54) \quad \langle \partial h_{m,j} \cdot \partial h_{m,i} \rangle = \frac{\langle \Psi_{\max} | (\hat{\partial} h_{m,i} \hat{T}) (\hat{T}^{i-j-1}) (\hat{\partial} h_{m,j} \hat{T}) | \Psi_{\max} \rangle}{(\Lambda_{\max})^{i-j+1}} .$$

Finalement  $G(0,y)$  peut se calculer par cette autre expression :

$$(55) \quad G(0, y) = y G(0,1) - 2 \sum_{\substack{i,j=1 \\ i>j}}^y \left[ \frac{\langle \Psi_{\max} | \left[ \sum_{n=0,\pm 1,\pm 2,\dots} n \hat{T}_n \right] \hat{T}^{i-j-1} \left[ \sum_{n=0,\pm 1,\pm 2,\dots} n \hat{T}_n \right] | \Psi_{\max} \rangle}{(\Lambda_{\max})^{i-j+1}} \right] ,$$

qui ne nécessite, elle, que la connaissance de la valeur propre maximum et de son vecteur propre associé. En contrepartie elle impose de calculer des puissances de  $\hat{T}$  .

Nous disposons ainsi de tous les éléments pour réaliser un calcul de matrice de transfert pour un système à  $N$  marches en interaction. Le résultat pour un nombre infini de marches (surface réelle) est obtenu en étudiant la convergence, pour chacune des grandeurs calculées, en fonction du nombre de marches  $N$ . Cette étude de convergence, ainsi que ses liens avec la théorie de l'invariance conforme, sont présentés chapitre II-C.5.3. .

## ANNEXE II :

### Calcul des fonctions de corrélation dans le cadre du modèle des ondes capillaires

Dans le modèle des ondes capillaires, l'interface solide/vidé est considérée comme une membrane fluctuante. J. Villain *et al.* [1] et José *et al.* [2] ont introduit l'idée que l'énergie libre de cette membrane  $F_{cap}$  pouvait s'écrire :

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

où  $\mathbf{h}_x$  et  $\mathbf{h}_y$  sont respectivement les rigidités de la membrane dans la direction perpendiculaire et parallèle aux marches.  $h_{m,y}$  est le déplacement de la marche  $m$  au site  $y$  par rapport à sa position d'équilibre.  $V_{loc}(T)$  est un potentiel de localisation favorisant les déplacements entiers des marches.

En remplaçant, le cosinus par son développement de Taylor au second ordre, on a :

$$(2) \quad F_{cap} = \sum_{m,y} \left[ \frac{\mathbf{h}_x}{2} (h_{m+1,y} - h_{m,y})^2 + \frac{\mathbf{h}_y}{2} (h_{m,y+1} - h_{m,y})^2 \right] + V_{loc}(T) \sum_{m,y} 4\mathbf{p}^2 (h_{m,y})^2,$$

Le développement en série de Fourier du déplacement  $h_{m,y}$  de la marche  $m$  au site  $y$  s'écrit :

$$(3) \quad h_{m,y} = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}} \sum_{q_x < q_{xc}, q_y < q_{yc}} h_q \exp(i q_x m + i q_y y),$$

où  $N_x$  et  $N_y$  sont respectivement le nombre de marches et le nombre de sites par marche,  $q_{xc}$  et  $q_{yc}$  sont des fréquences de coupure et  $h_q$  sont les amplitudes des composantes de Fourier.

Les expressions apparaissant dans la première somme de (2) s'expriment sous la forme :

$$(4) \quad (h_{m+1,y} - h_{m,y}) = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}} \sum_{q_x, q_y} [h_q \cdot \exp(i q_x \cdot m + i q_y \cdot y) (\exp(i q_x \cdot 1) - 1)]$$

$$(5) \quad (h_{m,y+1} - h_{m,y}) = \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}} \sum_{q_x, q_y} [h_q \cdot \exp(i q_x \cdot m + i q_y \cdot y) (\exp(i q_y \cdot 1) - 1)] .$$

Les termes quadratiques se simplifient de la façon suivante :

$$(6) \quad \sum_{m,y} [(h_{m+1,y} - h_{m,y})^2]$$

$$= \frac{1}{N_x N_y} \sum_{m,y} \sum_{\substack{q_x, q'_x \\ q_y, q'_y}} [h_q \cdot \exp(i q_x \cdot m + i q_y \cdot y) (\exp(i q_x) - 1)] [h_{q'} \cdot \exp(i q'_x \cdot m + i q'_y \cdot y) (\exp(i q'_x) - 1)]$$

en effectuant la somme sur  $m, y$  :

$$(7) \quad \sum_{m,y} [(h_{m+1,y} - h_{m,y})^2] = \sum_{\substack{q_x, q'_x \\ q_y, q'_y}} [h_q \cdot (\exp(i q_x) - 1)] [h_{q'} \cdot (\exp(i q'_x) - 1)] \mathbf{d}(q_x + q'_x) \mathbf{d}(q_y + q'_y)$$

puis la somme sur  $q'_x, q'_y$ , on obtient :

$$(8) \quad \sum_{m,y} [(h_{m+1,y} - h_{m,y})^2] = \sum_{q_x, q_y} [h_q \cdot (\exp(i q_x) - 1)] [h_{-q} \cdot (\exp(-i q_x) - 1)]$$

$$= \sum_{q_x, q_y} 2(1 - \cos(q_x)) |h_q|^2$$

En réalisant le même calcul pour les autres termes :

$$(9) \quad F_{cap} = \sum_{q_x < q_{xc}, q_y < q_{yc}} [h_x (1 - \cos(q_x)) + h_y (1 - \cos(q_y))] |h_q|^2 + V_{loc}(T) \sum_{q_x < q_{xc}, q_y < q_{yc}} 4\mathbf{p}^2 |h_q|^2$$

La fonction de corrélation des déplacements des bords de marches est définie par :

$$(10) \quad G(m, y) = \langle (h_{m,y} - h_{0,0})^2 \rangle .$$

En suivant la méthode de J. Villain *et al.* [1], on peut déterminer les expressions analytiques des fonctions de corrélation dans les directions perpendiculaire et parallèle aux bords de marches.

En fonction des composantes de Fourier de  $h_{m,y}$ ,  $G(m, y)$  s'écrit :

$$(11) \quad G(m, y) = \left\langle \left( \frac{1}{\sqrt{N_x N_y}} \sum_{q_x, q_y} h_q (\exp(iq_x m + iq_y y) - 1) \right)^2 \right\rangle \\ = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{q_x, q_y, q'_x, q'_y} \langle h_q h_{q'} \rangle (\exp(iq_x m + iq_y y) - 1) (\exp(iq'_x m + iq'_y y) - 1).$$

Le premier terme de la fonction de corrélation  $\langle h_q h_{q'} \rangle$  est non nul dès lors que  $h_q$  et  $h_{q'}$  ne sont pas indépendants, c'est-à-dire pour  $q = q'$  ou  $q = -q'$  ( $h_q$  et  $h_{-q}$  étant complexes conjugués  $h_{-q} = h_q^*$ ).

En écrivant  $h_q$  sous la forme  $h_q = a_q + ib_q$ , on obtient pour  $q = q'$  :

$$(12) \quad \langle h_q h_{q'} \rangle = \langle (h_q)^2 \rangle = \langle (a_q)^2 \rangle - \langle (b_q)^2 \rangle + 2i \langle a_q b_q \rangle$$

La partie réelle  $a_q$  et la partie imaginaire  $b_q$  de  $h_q$  sont les amplitudes de deux modes indépendants, car déphasés de  $\frac{\mathbf{p}}{2}$ , et de même fréquence. Ceci entraîne que la moyenne thermodynamique  $\langle a_q b_q \rangle$  est nulle et que les moyennes thermodynamiques  $\langle (a_q)^2 \rangle$  et  $\langle (b_q)^2 \rangle$  sont égales. On a alors,  $\langle (h_q)^2 \rangle = 0$ .

$$\text{Pour } q = -q' : \quad \langle h_q h_{q'} \rangle = \langle |h_q|^2 \rangle.$$

D'où :

$$(13) \quad G(m, y) = \frac{1}{N_x N_y} \sum_{q_x, q_y} \langle |h_q|^2 \rangle |\exp(iq_x m + iq_y y) - 1|^2 = \frac{2}{N_x N_y} \sum_{q_x, q_y} \langle |h_q|^2 \rangle (1 - \cos(q_x m + q_y y)).$$

En appliquant l'équipartition de l'énergie à  $F_{cap}$ , on obtient :

$$(14) \quad \left\langle \left[ \mathbf{h}_x (1 - \cos(q_x)) + \mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y)) \right] + V_{loc}(T) 4\mathbf{p}^2 \right\rangle \left\langle |h_q|^2 \right\rangle = \frac{k_B T}{2},$$

et la fonction de corrélation (13) s'écrit :

$$(15) \quad G(m, y) = \frac{k_B T}{N_x N_y} \sum_{q_x, q_y} \frac{1 - \cos(q_x m + q_y y)}{\mathbf{h}_x (1 - \cos(q_x)) + \mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y)) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)}.$$

En remplaçant la somme discrète par une intégrale, on obtient pour  $G(m, 0)$  et  $G(0, y)$  :

$$(16) \quad G(m, 0) = \frac{4k_B T}{(2\mathbf{p})^2} \int_0^{\mathbf{p}} \int_0^{\mathbf{p}} \frac{1 - \cos(q_x m)}{\mathbf{h}_x (1 - \cos(q_x)) + \mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y)) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)} dq_x dq_y$$

$$= \frac{k_B T}{\mathbf{p}} \int_0^{\mathbf{p}} \frac{1 - \cos(q_x m)}{\sqrt{\mathbf{h}_x (1 - \cos q_x) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)} \sqrt{2\mathbf{h}_y + \mathbf{h}_x (1 - \cos(q_x)) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)}} dq_x$$

$$(17) \quad G(0, y) = \frac{4k_B T}{(2\mathbf{p})^2} \int_0^{\mathbf{p}} \int_0^{\mathbf{p}} \frac{1 - \cos(q_y y)}{\mathbf{h}_x (1 - \cos(q_x)) + \mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y)) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)} dq_x dq_y$$

$$= \frac{k_B T}{\mathbf{p}} \int_0^{\mathbf{p}} \frac{1 - \cos(q_y y)}{\sqrt{\mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y)) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)} \sqrt{2\mathbf{h}_x + \mathbf{h}_y (1 - \cos(q_y)) + 4\mathbf{p}^2 V_{loc}(T)}} dq_y.$$

## Bibliographie

- 
- [1] J. Villain, D.R. Grimpel et J. Lapujoulade, J. Phys. **F 15** (1985) 809.

- [2] J.V. José, L.P. Kadanoff, S. Kirkpatrick et D.R. Nelson, Phys. Rev. **B 16** (1977) 1217.

---

**ANNEXE III:**

Equivalence entre un ensemble de marches fluctuant dans un potentiel et une assemblée de particules quantiques se déplaçant dans un potentiel à une dimension.

Le comportement quantique d'une assemblée de fermions sur une ligne est équivalent à un modèle décrivant le comportement d'objets linéaires tels que les marches à la surface d'un cristal. Cette équivalence a été établie par P. G. De Gennes [1] dans le cas d'objets sans interaction et a été étendue au cas d'objets en interaction par Bartelt *et al.* [2].

L'équivalence entre les deux modèles, quantique et thermodynamique, présente un grand intérêt puisque le modèle des fermions en interaction par un potentiel de paire en  $A/\ell^2$  (avec  $\ell$  la distance entre fermions) ou modèle de Calogero-Sutherland [3] est exactement soluble. Joós *et al.* [4] ont utilisé cette équivalence pour traiter spécifiquement le cas d'une surface vicinale.

La démonstration de cette équivalence se trouvant dispersée sur plusieurs publications étalées sur de nombreuses années, il nous a paru utile de reprendre dans cette annexe le cheminement complet.

Pour ce faire, nous rappellerons tout d'abord le formalisme de Feynman [5] qui permet, dans le cas d'une particule plongée dans un potentiel, de déterminer une fonction d'onde vérifiant l'équation de Schrödinger, à partir de son Lagrangien. La fonction d'onde ainsi obtenue peut être comparée de façon formelle au coefficient de Boltzmann associé à la présence de la marche sur un site donné, ce qui permet d'en déduire l'équivalence entre les fluctuations quantiques d'une particule et les fluctuations thermodynamiques d'une marche. Ce résultat sera ensuite généralisé au cas d'un ensemble de marches, la condition de non croisement des marches étant équivalente à l'antisymétrisation de la fonction d'onde d'une assemblée de fermions.



## I. Formulation lagrangienne de la mécanique quantique

### **I-1. Notions de chemin d'espace temps, d'opérateur d'évolution et d'opérateur de propagation**

Soit une particule de masse  $m$  plongée dans un potentiel  $V(x)$  se déplaçant sur un axe  $x$ . Entre les instants  $t_1$  et  $t_2$  la fonction  $x(t)$  donnant à chaque instant  $t$  la position  $x$  de la particule définit dans l'espace temps une trajectoire appelée *chemin d'espace temps*. Il existe entre deux instants quelconques  $t_1$  et  $t_2$  une infinité de chemin d'espace temps possibles.

La fonction d'onde  $|\Psi(t)\rangle$  décrivant la particule est définie par l'équation de Schrödinger :

$$(1) \quad \hat{H}|\Psi(t)\rangle = i\hbar \frac{\partial |\Psi(t)\rangle}{\partial t} .$$

La dérivée  $\frac{\partial}{\partial t}|\Psi(t)\rangle$  donne l'évolution de la fonction d'onde au cours du temps. Etant donnée la fonction d'onde  $|\Psi(t_1)\rangle$  à l'instant  $t_1$  on peut obtenir la fonction d'onde  $|\Psi(t_2)\rangle$  à l'instant ultérieur  $t_2$  en appliquant l'opérateur d'évolution  $\hat{U}(t_2, t_1)$  comme suit [6] :

$$(2) \quad |\Psi(t_2)\rangle = \hat{U}(t_2, t_1)|\Psi(t_1)\rangle .$$

En reportant (2) dans l'équation de Schrödinger (1) on obtient :

$$(3) \quad \hat{H}\hat{U}(t_2, t_1) = i\hbar \frac{\partial \hat{U}(t_2, t_1)}{\partial t_2} ,$$

qui pour un hamiltonien indépendant du temps, comme c'est le cas ici, s'intègre simplement en :

$$(4) \quad \hat{U}(t_2, t_1) = \exp\left[-\frac{i\hat{H}}{\hbar}(t_2 - t_1)\right] .$$

On connaît donc l'évolution au cours du temps de  $|\Psi(t)\rangle$ .

La fonction d'onde  $\Psi(x_2, t_2) = \langle x_2 | \Psi(t_2) \rangle$  au point  $x_2$  à l'instant  $t_2$  peut être déterminée connaissant en tous points  $x_1$  la fonction d'onde  $\Psi(x_1, t_1) = \langle x_1 | \Psi(t_1) \rangle$  à l'instant  $t_1$  (avec  $t_2 > t_1$ ), en utilisant l'opérateur de propagation  $\hat{K}(x_2, t_2 | x_1, t_1)$  défini par [6] :

$$(5) \quad \langle x_2 | \Psi(t_2) \rangle = \int \hat{K}(x_2, t_2 | x_1, t_1) \langle x_1 | \Psi(t_1) \rangle dx_1 .$$

L'opérateur de propagation représente l'amplitude de probabilité pour que, étant partie initialement du point  $x_1$  à l'instant  $t_1$ , la particule aboutisse au point  $x_2$  à l'instant ultérieur  $t_2$ .

Ces deux opérateurs de propagation et d'évolution sont liés entre eux. En effet, en insérant la relation de fermeture  $\int dx_1 |x_1\rangle\langle x_1| = 1$  dans l'équation (2),  $\Psi(x_2, t_2)$  s'écrit :

$$(6) \quad \Psi(x_2, t_2) = \langle x_2 | \Psi(t_2) \rangle = \int dx_1 \langle x_2 | \hat{U}(t_2, t_1) | x_1 \rangle \langle x_1 | \Psi(t_1) \rangle$$

On obtient ainsi une formule identique à (5), à condition de poser :

$$(7) \quad \hat{K}(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \langle x_2 | \hat{U}(t_2, t_1) | x_1 \rangle .$$

Soit  $\Psi_s(x)$  les états propres et  $E_s$  les valeurs propres vérifiant l'équation de Schrödinger stationnaire :

$$(8) \quad -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{d^2 \Psi_s(x)}{dx^2} + V(x) \Psi_s(x) = E_s \Psi_s(x) .$$

On peut déterminer l'amplitude de probabilité  $\hat{K}(x_2, t_2 | x_1, t_1)$  en insérant deux fois la relation de fermeture  $\sum_s |\Psi_s\rangle\langle \Psi_s| = 1$  dans l'expression (7) :

$$(9) \quad \hat{K}(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \sum_{s, s'} \langle x_2 | \Psi_s \rangle \langle \Psi_s | \hat{U}(t_2, t_1) | \Psi_{s'} \rangle \langle \Psi_{s'} | x_1 \rangle$$

qui devient en utilisant l'expression (4) explicitant l'opérateur évolution :

$$(10) \quad \hat{K}(x_2, t_2 | x_1, t_1) = \sum_s \exp\left[-\frac{iE_s(t_2 - t_1)}{\hbar}\right] \cdot \Psi_s(x_2) \Psi_s^*(x_1) .$$

L'opérateur de propagation  $\hat{K}(x_2, t_2 | x_1, t_1)$  correspond à l'opérateur d'évolution  $\hat{U}(t_2, t_1)$  en ne considérant qu'un point initial et final de la fonction d'onde et non sa globalité. Les opérateurs d'évolution et de propagation sont deux façons d'aborder l'évolution de la fonction d'onde au cours du temps.

## I-2. Postulats de Feynman, fonction d'onde, équation de Schrödinger

Les notions de chemin d'espace temps et d'opérateur de propagation ont permis à Feynman de donner une nouvelle formulation de l'évolution d'un système physique dans le temps. Cette formulation est basée sur deux postulats dont nous allons indiquer ici les idées générales [5].

On définit  $\hat{K}(i+1, i) = \hat{K}(x_{i+1}, t_{i+1} | x_i, t_i)$  comme l'amplitude de probabilité pour que la particule partie en  $x_i$  à l'instant  $t_i$  arrive en  $x_{i+1}$  à l'instant  $t_{i+1}$ . On postule ensuite que :

(i)  $\hat{K}(i+1, i)$  est la somme d'une infinité d'amplitudes partielles  $\hat{K}_\Gamma(i+1, i)$  liées à l'infinité des chemins d'espace temps possibles reliant  $(x_i, t_i)$  à  $(x_{i+1}, t_{i+1})$ .

(ii) L'amplitude partielle  $\hat{K}_\Gamma(i+1, i)$  associée à un chemin  $\Gamma$  s'écrit :

$$(11) \quad \hat{K}_\Gamma(i+1, i) = C \exp\left[\frac{i}{\hbar} S_\Gamma(x_{i+1}, x_i)\right]$$

où  $C$  est une constante de normalisation et  $S_\Gamma(x_{i+1}, x_i)$  est l'action classique calculée le long du chemin  $\Gamma$  entre  $x_{i+1}$  et  $x_i$ , définie par :

$$(12) \quad S_{\Gamma}(x_{i+1}, x_i) = \left[ \int_{t_i}^{t_{i+1}} L(\dot{x}(t), x(t)) dt \right]_{\Gamma}$$

avec  $L(\dot{x}(t), x(t))$  le lagrangien de la particule, qui s'écrit dans notre cas :

$$(13) \quad L(\dot{x}(t), x(t)) = \frac{1}{2} m \dot{x}(t)^2 - V(x) .$$

Pour calculer l'action  $S_{\Gamma}$ , il est nécessaire de connaître tous les points du chemin  $\Gamma$ , les points  $x_i$  et  $x_{i+1}$  ne sont pas suffisant. Feynman [5] postule alors que la particule suit entre les instants  $t_i$  et  $t_{i+1}$  le chemin suivi par la particule classique. Le chemin classique est celui qui minimise l'action, soit :

$$(14) \quad S_C(x_{i+1}, x_i) = \text{Min} \int_{t_i}^{t_{i+1}} L(\dot{x}(t), x(t)) dt ,$$

et  $\hat{K}(i+1, i)$  se réduit à,

$$(15) \quad \hat{K}(i+1, i) = C \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S_C(x_{i+1}, x_i) \right] .$$

Les postulats de Feynman nous ont permis de définir un opérateur de propagation. L'équation (5) s'écrit maintenant :

$$(16) \quad \Psi(x_{k+1}, t + \mathbf{e}) = \int \exp \left[ \frac{i}{\hbar} S_C(x_{k+1}, x_k) \right] \Psi(x_k, t) \frac{dx_k}{A} ,$$

où  $A = \frac{1}{C}$ .

L'intégrale se fait sur tous les points de départ possibles  $x_k$ . On suppose ici que le temps  $t$  correspond à un point particulier  $k$  de la subdivision du temps en pas de  $\mathbf{e}$ , c'est à dire  $t = t_k = k \cdot \mathbf{e}$  et  $x_k = x(k \cdot \mathbf{e})$ , avec  $\mathbf{e} \rightarrow 0$ .

Dans le cas d'une particule de masse  $m$  se déplaçant sur une ligne et plongée dans un potentiel  $V(x)$ , l'action entre deux points infiniment proches s'écrit :

$$(17) \quad S_C(x_{k+1}, x_k) = \frac{m\mathbf{e}}{2} \left( \frac{x_{k+1} - x_k}{\mathbf{e}} \right)^2 - \mathbf{e}V(x_{k+1})$$

et l'équation (16) devient :

$$(18) \quad \Psi(x_{k+1}, t + \mathbf{e}) = \int \exp \left[ \frac{i\mathbf{e}}{\hbar} \left\{ \frac{m}{2} \left( \frac{x_{k+1} - x_k}{\mathbf{e}} \right)^2 - V(x_{k+1}) \right\} \right] \Psi(x_k, t) \frac{dx_k}{A} .$$

Feynman montre [5] que la fonction d'onde ainsi définie est solution de l'équation de Schrödinger,

$$(19) \quad -\frac{\hbar}{i} \frac{\partial \Psi(x, t)}{\partial t} = -\frac{\hbar^2}{2m} \frac{\partial^2 \Psi(x, t)}{\partial x^2} + V(x) \Psi(x, t) .$$

Ainsi, la donnée de l'équation de Schrödinger est équivalente à la donnée de l'opérateur de propagation construit à partir des postulats de Feynman.

## **II. Fluctuations statistiques d'une marche, équivalence quantique**

L'équivalence entre un ensemble de chaînes flexibles à deux dimensions sans interactions et une assemblée de particules quantiques a été étudiée par P. G. De Gennes [1]. Nous allons appliquer ici la même méthode au cas des marches interagissantes.

Considérons une marche serpentant entre deux marches droites séparées par une distance  $2\ell_0$ , la configuration de la marche est donnée, à chaque instant, par  $x(y)$  comme représenté sur la Figure 1. L'énergie totale de cette marche pour une configuration donnée  $x(y)$  s'écrit [2] (voir aussi [7] et [8]) :

$$(20) \quad E_{x(y)} = \int dy \left[ \mathbf{b}(T) + \frac{1}{2} \tilde{\mathbf{b}}(T) \left( \frac{dx}{dy} \right)^2 + V(x(y)) \right]$$

où  $\mathbf{b}(T)$  est l'énergie de création par unité de longueur  $a_y$  d'une marche orientée dans la direction moyenne (parallèlement à  $y$ ) et  $\tilde{\mathbf{b}}(T)$  est la rigidité du bord de marche par unité de

longueur  $a_{\parallel}$ . Ces deux paramètres caractérisent une marche isolée. Le potentiel  $V(x(y))$  fixe l'interaction entre la marche et les marches droites adjacentes.

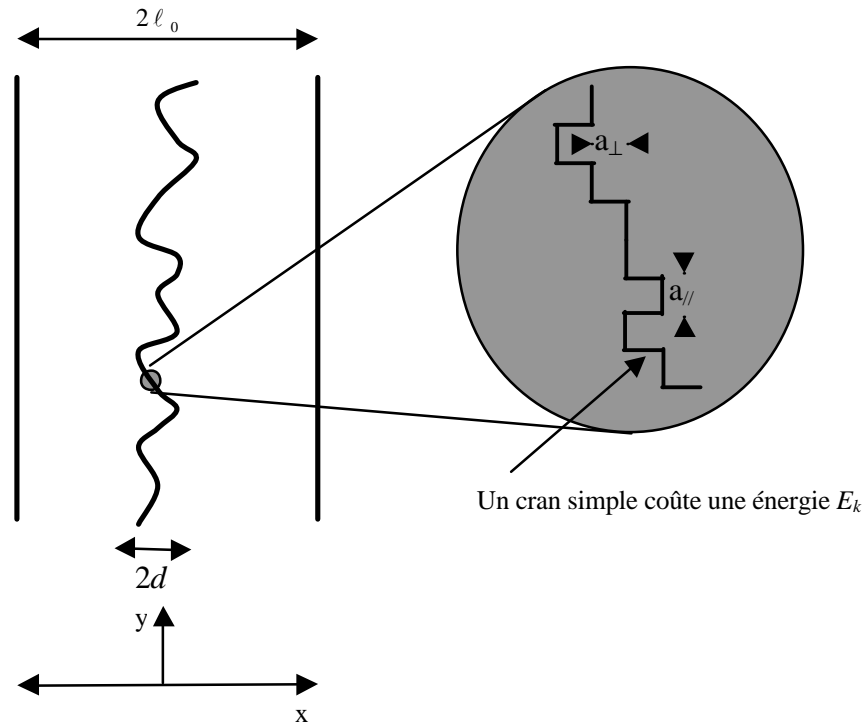


Figure 1 : A gauche, représentation schématique d'une marche serpentant entre deux marches droites séparées par  $2\ell_0$ . Les interactions dues aux marches voisines limitent le déplacement de la marche à  $2d$ . A droite, structure en crans du bord de marche correspondant aux fluctuations de la marche.  $a_{\parallel}$  et  $a_{\perp}$  sont les distances entre sites parallèlement et perpendiculairement à la direction des marches.

La variation avec la température de  $\tilde{b}(T)$  est discutée dans [8,9], on obtient :

$$(21) \quad \tilde{b}(T) = \frac{k_B T}{b^2(T)},$$

avec  $k_B$  la constante de Boltzmann et  $b^2(T)$  la diffusivité d'une marche libre définie par :

$$(22) \quad b^2(T) = \frac{2 \sum_{n=1}^{\infty} (n a_{\perp})^2 \exp(-n E_k / k_B T)}{1 + 2 \sum_{n=1}^{\infty} \exp(-n E_k / k_B T)},$$

où  $E_k$  est l'énergie nécessaire pour créer un cran simple de longueur  $a_{\perp}$  (voir Figure 1). L'expression de la diffusivité est donnée ici dans le cadre d'un modèle ASOS (Absolute Solid On Solid), pour lequel l'énergie d'un cran est proportionnel à sa taille  $n$ . Il faut souligner ici que l'expression (20) n'est valable que pour les faibles températures, pour lesquelles les déplacements de la marche sont petits, c'est à dire tels que  $\sqrt{b^2} \ll a_{\perp}$  [2].

Appelons  $G(x'', y'' | x', y')$  le poids statistique total de toutes les configurations de la marche liant les sites  $(x', y')$  et  $(x'', y'')$ ; ( $y'' > y'$ ).  $G$  peut s'écrire [1] comme la somme  $\int_{D_{x', x''}}$  des facteurs de Boltzmann de tous les chemins  $x(y)$  liant les deux points  $x$  et  $x''$ :

$$(23) \quad G(x'', y'' | x', y') = \int_{D_{x', x''}} \exp - \frac{\int_{y'}^{y''} \frac{\tilde{b}}{2} \left( \frac{dx}{dy} \right)^2 + V(x(y)) dy}{k_B T}$$

Le premier terme de l'énergie de la marche  $b$  étant indépendant du chemin suivis, il n'introduit qu'une constante multiplicative.

Réécrivons l'équation (23) pour  $y'' = y'' + a_{//}$ , en posant

$$x_i = x(y'') \text{ et } x_{i+1} = x(y'' + a_{//}),$$

(24)

$$G(x_{i+1}, y'' + a_{//} | x', y') = \int_{D_{x', x_{i+1}}} \exp - \frac{\left[ a_{//} \frac{\tilde{b}}{2} \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{a_{//}} \right)^2 + a_{//} V(x_{i+1}) \right] + \left[ \int_{y'}^{y''} \frac{\tilde{b}}{2} \left( \frac{dx}{dy} \right)^2 + V(x(y)) dy \right]}{k_B T}$$

qui se simplifie en :

$$(25) \quad G(x_{i+1}, y'' + a_{//} | x', y') = \int \exp - \frac{a_{//} \left[ \frac{\tilde{b}}{2} \left( \frac{x_{i+1} - x_i}{a_{//}} \right)^2 + V(x_{i+1}) \right]}{k_B T} G(x_i, y'' | x', y') dx_i$$

En comparant l'équation (25) décrivant une marche dans un potentiel et l'équation (18) décrivant une particule quantique dans un potentiel unidimensionnel, on observe que ces deux équations sont formellement identiques en faisant l'identification :

$$\begin{cases} i\mathbf{e} \rightarrow a_{//} \\ \hbar \rightarrow k_B T \\ m \rightarrow \tilde{\mathbf{b}} \end{cases} .$$

La fonction  $G(x'', y'' | x', y')$  qui est donc solution de l'équation de type "Schrödinger" :

$$(26) \quad -k_B T \frac{\partial G(x'', y'' | x', y')}{\partial y''} = -\frac{(k_B T)^2}{2\tilde{\mathbf{b}}} \frac{\partial^2 G(x'', y'' | x', y')}{\partial x''^2} + V(x'') G(x'', y'' | x', y') ,$$

représente l'amplitude de probabilité quantique qu'une particule partie en  $x'$  à l'instant  $y'$ , arrive en  $x''$  à l'instant  $y''$ .

Le problème d'une marche fluctuant dans un potentiel est donc équivalent à celui d'une particule quantique de masse  $\tilde{\mathbf{b}}(T)$  dans un potentiel à une dimension. Cette particule se déplace au cours d'un temps imaginaire découpé en intervalle  $a_{//}$  et dont l'énergie est définie par rapport à  $k_B T$ .

On obtient une expression pour l'amplitude de probabilité  $G(x'', y'' | x', y')$  en utilisant l'expression (10) explicitant l'opérateur propagation :

$$(27) \quad G(x'', y'' | x', y') = \sum_s \exp\left[-\frac{E_s(y'' - y')}{k_B T}\right] \cdot \Psi_s(x'') \Psi_s^*(x')$$

Il faut bien remarquer que cette analogie marche-particule n'est valable qu'à basse température, c'est-à-dire plus précisément pour une faible excitation du bord de marche. Ce n'est que dans ce cas que l'équation de départ (20) est valable.



### III. Problème à $N$ marches

Considérons un ensemble de  $N$  marches placées entre deux marches droites et caractérisées, à chaque instant, par  $x_1(y), x_2(y), \dots, x_N(y)$ . On peut définir, comme précédemment, le poids statistique total  $G_N(x'_1, x'_2, \dots, x'_N, y' | x''_1, x''_2, \dots, x''_N, y'')$  de toutes les configurations possibles liant les sites  $(x'_1, x'_2, \dots, x'_N)$  à l'instant  $y'$  et les sites  $(x''_1, x''_2, \dots, x''_N)$  à l'instant ultérieur  $y''$ ; avec  $(y' < y'')$ . Pour simplifier les notations on écrira  $X = (x_1, x_2, \dots, x_N)$ .

$G_N(X'', y'' | X', y')$  peut se développer en termes des fonctions propres  $\Psi_s(x_1, x_2, \dots, x_N)$  du problème à  $N$  corps :

$$(28) \quad G_N(X'', y'' | X', y') = \sum_s \exp\left[-\frac{E_s}{k_B T}(y'' - y')\right] \Psi_s(X'') \Psi_s^*(X') \quad \text{avec } (y' < y'')$$

Mais nous voulons ici, de plus, que les marches ne se croisent pas, c'est-à-dire que  $G$  s'annule lorsque deux arguments  $x'_n$  et  $x'_m$  (ou  $x''_n$  et  $x''_m$ ) coïncident. Cette condition est vérifiée par antisymétrisation. Plus précisément, on obtient une correspondance univoque entre la fonction d'onde  $\Psi_s(x)$  de notre problème de marches et la fonction d'onde  $\Phi_s$  de  $N$  fermions interagissant le long de l'axe  $x$ , en prenant [1] :

$$(29) \quad \begin{aligned} \Psi_s(x_1, x_2, \dots, x_N) &= (N!)^{1/2} \Phi_s(x_1, x_2, \dots, x_N) \quad \text{pour } X \in R_1, \\ &= 0 \quad \text{ailleurs,} \end{aligned}$$

où  $R_1$  est la région physiquement acceptable pour notre problème de marches et définie par :

$$0 < x_1 < x_2 < \dots < x_N < L_N \quad .$$

Le facteur  $(N!)^{1/2}$  est nécessaire pour la normalisation et  $L_N = (N+1)\ell_0$  est la taille totale du système de marches. Les niveaux d'énergie de  $\Psi_s$  et  $\Phi_s$  sont les mêmes.

---

## IV. Conclusion

L'équivalence entre un ensemble de marches fluctuant dans un potentiel et une assemblée de fermions se déplaçant dans un potentiel unidimensionnel est obtenue en identifiant la rigidité du bord des marches  $\tilde{b}(T)$  à la masse des particules et la direction le long des marches à un temps imaginaire.

Calogero et Sutherland [3] ayant obtenu une solution exacte pour le problème quantique d'une assemblée de fermions interagissant par l'intermédiaire d'un potentiel en  $A/\ell^2$ , une solution est donc connue pour le problème des marches avec une interaction de type élastique présentant la même dépendance ( $A/\ell^2$ ).

Cependant, il existe une différence très importante entre le modèle de Calogero-Sutherland et le système de marches. En effet, les positions des marches sont discrètes, les marches sont localisées sur des sites, tandis que le modèle des fermions est continu. Les fermions peuvent s'approcher aussi près les uns des autres qu'ils le veulent, alors qu'il existe, pour les marches, une distance minimale d'approche.

Cette différence qui ne se fait pas trop sentir dans le cas d'une interaction répulsive ou nulle, introduira un comportement radicalement différent dans le cas d'une interaction attractive.

## BIBLIOGRAPHIE

---

- [1] P.-G. de Gennes, J. Chem. Phys. **48** (1968) 2257.
- [2] N.C. Bartelt, T.L. Einstein et E.D. Williams, Surf. Sci. Lett. **240** (1990) L591.
- [3] F. Calogero, J. Math. Phys. **10** (1969) 2191 ; **10** (1969) 2197 ; B. Sutherland, J. Math. Phys. **12** (1971) 246 ; **12** (1971) 251 ; Phys. Rev. A **4** (1971) 2019.
- [4] B. Joós, T.L. Einstein et N.C. Bartelt, Phys. Rev. B **43** (1991) 8153.

- [5] R.P. Feynman, Rev. Mod. Phys. **20** (1948) 367.
- [6] Mécanique Quantique, C . Cohen-Tannoudji, B. Diu et F. Laloë page 308 et 328.
- [7] R. Kariotis, B.S. Swartzentruber et M.G. Lagally, J. Appl. Phys. **67** (1990) 2848.
- [8] M.E. Fisher, J. Chem. Soc. Faraday Trans. 2, **82** (1986) 1569.
- [9] M.E. Fisher et D.S. Fisher, Phys. Rev. **B 25** (1982) 3192.

---

## ANNEXE IV :

### Les distributions des largeurs de terrasses dans le modèle des fermions.

Comme il a été montré dans l'annexe III, le comportement quantique d'une assemblée de fermions sur une ligne est équivalent à un modèle décrivant le comportement d'objets linéaires tels que les marches à la surface d'un cristal. A partir de cette équivalence, Joós *et al.* [1] ont déterminé la distribution des largeurs de terrasses d'une surface à marches, connaissant la solution exacte du modèle des fermions interagissant<sup>1</sup> en  $g/\ell^2$  ( $\ell$  la distance entre fermions) donnée par Sutherland [2,3].

Ce calcul exact de la distribution des largeurs de terrasses est une référence très utilisée dans la littérature. Cependant, le calcul de la solution exacte n'est possible que pour trois valeurs particulières de l'interaction  $g$  ( $g=0$ , une valeur attractive et une valeur répulsive). Il n'est explicité, dans la littérature [1], que dans le cas le plus simple correspondant à l'interaction nulle. Ils nous a donc apparu utile d'explicitier dans cette annexe les calculs associés aux trois valeurs possibles de l'interaction, ce qui nous permettra de préciser l'origine de ces trois valeurs particulières.

La solution exacte du modèle des fermions de Sutherland est tout d'abord rappelée, avant de décrire le calcul de la distribution des largeurs de terrasses.

---

<sup>1</sup> L'amplitude de l'interaction est notée  $g$  dans le cas du modèle des fermions et  $A$  pour le modèle de marches, le lien entre ces deux constantes est précisé au chapitre II-C.2.2.

## I. Le modèle des fermions

Dans ce modèle,  $N$  fermions sont disposés sur un anneau de circonférence  $L=N.\ell_0$ , avec  $\ell_0$  la distance moyenne entre fermions. Ces fermions interagissent via un potentiel périodique de la forme [2] :

$$(1) \quad V(r) = g \sum_{n=-\infty}^{\infty} (r+nL)^{-2} = \frac{g\mathbf{p}^2}{L^2} \left[ \sin\left(\frac{\mathbf{p}r}{L}\right) \right]^{-2}.$$

Pour un système suffisamment grand les termes additionnels correspondant à plus d'un tour d'anneau deviennent négligeables. Néanmoins, le traitement mathématique est considérablement simplifié en partant d'équations périodiques.

L'Hamiltonien du système s'écrit :

$$(2) \quad H = -\sum_{i=1}^N \frac{\partial^2}{\partial x_i^2} + \frac{g\mathbf{p}^2}{L^2} \sum_{i>j} \left[ \sin\left(\frac{\mathbf{p}(x_i - x_j)}{L}\right) \right]^{-2} + \frac{\mathbf{p}^2}{6} \frac{g}{L^2}.$$

Le troisième terme dans l'expression de  $H$ , correspondant à l'interaction d'une marche avec elle-même après plusieurs tours, est manquant dans la solution originale de Sutherland [2] (voir § II-C.2.1). Sutherland a résolu l'équation de Schrödinger associée à cet Hamiltonien. Il a obtenu, pour l'état fondamental, la fonction propre [2] :

$$(3) \quad \Psi = \sqrt{C} \prod_{j>l} \left| e^{iq_j} - e^{iq_l} \right|^l, \quad \mathbf{q}_j > \mathbf{q}_l$$

$$(4) \quad \Psi^2 = C \prod_{j>l} \left| e^{iq_j} - e^{iq_l} \right|^{2l},$$

où le paramètre  $\lambda$  est relié à l'amplitude  $g$  de l'interaction par

$$(5) \quad 2\mathbf{I}(\mathbf{I} - 1) = g \quad \text{ou} \quad \mathbf{I} = \frac{1}{2} \left[ 1 + (1 + 2g)^{\frac{1}{2}} \right],$$

$C$  est une constante de normalisation et  $\mathbf{q}_j$  s'écrit en fonction de la position  $x_j$  du fermion  $j$

$$(6) \quad \mathbf{q}_j = \frac{2\mathbf{p}x_j}{L} \quad .$$

L'énergie totale de l'état fondamental s'écrit sous la forme :

$$(7) \quad E = \frac{1}{3} \frac{I^2 \mathbf{p}^2 N(N^2 - 1)}{L^2} \quad .$$

Connaissant la fonction d'onde de l'état fondamental nous pouvons déterminer la probabilité que deux fermions soient séparés par  $\ell-1$  sites inoccupés, ce qui correspond, en faisant l'équivalence avec le système de marches, à la distribution des largeurs de terrasses  $D(\ell)$ . Dans cette annexe, le calcul est poursuivi dans le cadre du modèle des fermions. L'équivalence entre les paramètres du modèle de particules quantiques et ceux du modèle de marches est explicitée dans l'annexe III.

## **II. Distribution des largeurs de terrasses**

### **II-1. Expression de la distribution des largeurs de terrasses**

Considérons un système de fermions de densité  $Q = \frac{1}{\ell_0}$ . Soit  $G(\ell, Q)$  la fonction de corrélation de deux fermions plus proches voisins.  $G(\ell, Q)$  est égale à la probabilité  $Q = \frac{1}{\ell_0}$  d'avoir un fermion à une position quelconque (prise comme origine), multipliée par la probabilité  $D(\ell)$  de trouver deux fermions voisins séparés par une distance  $\ell$ .

On a donc [1] :

$$(8) \quad D(\ell) = \frac{G(\ell, Q)}{Q}$$

Plaçons maintenant un réseau sous-jacent de pas unité ( $a=1$ ).  $G(\ell, Q)$  est la probabilité d'avoir un fermion au site origine et au site  $\ell a$ , séparés par  $\ell-1$  trous juxtaposés. En

introduisant les opérateurs  $a_j^+$  et  $a_j$  de création et d'annihilation d'un fermion sur un site  $j$ ,  $G(\ell, \mathcal{Q})$  s'écrit :

$$(9) \quad G(\ell, \mathcal{Q}) = \langle 0 | a_0^+ a_0 (1 - a_1^+ a_1) \dots (1 - a_{\ell-1}^+ a_{\ell-1}) a_\ell^+ a_\ell | 0 \rangle .$$

où  $|0\rangle$  symbolise l'état fondamental.

En développant cette relation on obtient  $2^{\ell-1}$  termes de la forme :

$$(10) \quad (-1)^n \langle 0 | a_0^+ a_0 a_m^+ a_m \dots a_p^+ a_p \dots a_q^+ a_q a_\ell^+ a_\ell | 0 \rangle ,$$

avec  $0 < m < p < q < \ell$  et  $n$  le nombre de couple d'opérateurs  $a_j^+ a_j$ .

Pour déterminer  $D(\ell)$  il suffit de connaître les fonctions de corrélation à  $n$  corps :

$$(11) \quad P_n(0, m, \dots, p, \dots, q, \ell) = \langle 0 | a_0^+ a_0 a_m^+ a_m \dots a_p^+ a_p \dots a_q^+ a_q a_\ell^+ a_\ell | 0 \rangle .$$

## II-2. Fonction de corrélation à $n$ corps

La distribution de probabilité des configurations des fermions est donnée par la relation (4). Joós *et al.* [1] ont remarqué que cette expression est identique à la distribution de probabilité d'une série complète d'angles  $(\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2, \dots, \mathbf{q}_N)$  dans un ensemble circulaire :

$$(12) \quad \mathcal{Q}_{Nl}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_N) = C_{Nl} \prod_{j < k} |e^{iq_j} - e^{iq_k}|^{2l} .$$

pour laquelle Dyson [4,5] a obtenu pour  $l = \frac{1}{2}, 1$  et  $2$  (soit  $g = -\frac{1}{2}, 0$  et  $4$ ) la fonction de corrélation à  $n$  corps  $P_{nl}(\mathbf{q}_1, \dots, \mathbf{q}_n)$  dans la limite  $N \rightarrow \infty$ . En utilisant le résultat de Dyson et

en identifiant  $\mathbf{q}_j = \frac{2\mathbf{p}}{N\ell_0} x_j$ , on a :

---

$$(13) \quad P_{nl}(x_1, x_2, \dots, x_n) = (\ell_0)^{-n} \sqrt{\text{Det} \left[ A \left( \mathbf{s}_1 \left( \frac{x_i - x_j}{\ell_0} \right) \right) \right]_{i,j=1,2,\dots,n}} .$$



Dans cette expression  $A$  est une matrice dont les éléments  $\mathbf{s}_I(r)$  sont des quaternions, qui en représentation matricielle  $[2 \times 2]$  s'écrivent :

$$(14) \quad \mathbf{s}_{1/2}(r) = \begin{bmatrix} s(r) & Ds(r) \\ Js(r) & s(r) \end{bmatrix},$$

$$(15) \quad \mathbf{s}_2(r) = \begin{bmatrix} s(2r) & Ds(2r) \\ Is(2r) & s(2r) \end{bmatrix},$$

pour  $I=1$ ,  $\mathbf{s}_I(r)$  se réduit à une fonction scalaire

$$(16) \quad \mathbf{s}_1(r) = s(r) .$$

Les fonctions  $s(r)$ ,  $Ds(r)$ ,  $Is(r)$  et  $Js(r)$  sont définies par

$$(17) \quad s(r) = \frac{\sin(\mathbf{p}r)}{\mathbf{p}r},$$

$$(18) \quad Ds(r) = \frac{ds(r)}{dr},$$

$$(19) \quad Is(r) = \int_0^r s(r') dr',$$

$$(20) \quad Js(r) = Is(r) - \mathbf{e}(r),$$

où  $\mathbf{e}(r)$  est la fonction marche

$$\mathbf{e}(r) = \frac{1}{2}, \quad (r > 0),$$
$$= 0, \quad (r = 0),$$

---

$$= -\frac{1}{2} \quad (r < 0).$$

Pour  $I=1$ ,  $\mathbf{s}_1(r)$  se réduisant à une fonction scalaire, on a simplement :

$$(21) \quad P_{n1}(x_1, x_2, \dots, x_n) = (\ell_0)^{-n} \sqrt{\text{Det} \left( \left[ \mathbf{s}_1 \left( \frac{x_i - x_j}{\ell_0} \right) \right]_{i,j=1,2,\dots,n} \right)}.$$

Afin de fixer les idées, considérons un système de trois fermions sur quatre sites et la configuration (1,1,0,1). Les 1 représentent les sites occupés par les fermions et les 0 symbolisent les sites occupés par les trous. Cette configuration fait partie du développement de  $G(\ell = 3, Q)$  (cf. Eq. (9)). La probabilité de cette configuration  $P_{3\frac{1}{2}}(0,1,3)$ , pour  $I=1/2$  est

obtenue en calculant le déterminant suivant :

$$\begin{vmatrix} \mathbf{s}_{1/2} \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & \mathbf{s}_{1/2} \begin{pmatrix} -1 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & \mathbf{s}_{1/2} \begin{pmatrix} -3 \\ \ell_0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{s}_{1/2} \begin{pmatrix} 1 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & \mathbf{s}_{1/2} \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & \mathbf{s}_{1/2} \begin{pmatrix} -2 \\ \ell_0 \end{pmatrix} \\ \mathbf{s}_{1/2} \begin{pmatrix} 3 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & \mathbf{s}_{1/2} \begin{pmatrix} 2 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & \mathbf{s}_{1/2} \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} s \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Ds \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} -1 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Ds \begin{pmatrix} -1 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} -3 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Ds \begin{pmatrix} -3 \\ \ell_0 \end{pmatrix} \\ Js \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Js \begin{pmatrix} -1 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} -1 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Js \begin{pmatrix} -3 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} -3 \\ \ell_0 \end{pmatrix} \\ s \begin{pmatrix} 1 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Ds \begin{pmatrix} 1 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Ds \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} -2 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Ds \begin{pmatrix} -2 \\ \ell_0 \end{pmatrix} \\ Js \begin{pmatrix} 1 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} 1 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Js \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Js \begin{pmatrix} -2 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} -2 \\ \ell_0 \end{pmatrix} \\ s \begin{pmatrix} 3 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Ds \begin{pmatrix} 3 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} 2 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Ds \begin{pmatrix} 2 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Ds \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} \\ Js \begin{pmatrix} 3 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} 3 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Js \begin{pmatrix} 2 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} 2 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & Js \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} & s \begin{pmatrix} 0 \\ \ell_0 \end{pmatrix} \end{vmatrix}$$

Pour  $I=2$ , il suffit de remplacer  $Js(r)$  par  $Is(r)$  et  $r$  par  $2r$ , pour  $I=1$ ,  $\mathbf{s}_1 \left( \frac{r}{\ell_0} \right)$  est une fonction scalaire.

Il faut bien remarquer que le calcul de la probabilité d'une configuration particulière ne fait intervenir que la distribution de fermions sur les  $\ell+1$  premiers sites, quelle que soit la configuration des sites suivants.

### II-3. Distributions de largeur de terrasses

L'allure de la distribution doit être indépendante du pas du réseau que l'on considère. Elle ne dépend que de la densité des fermions. Ceci résulte du caractère continu des positions des fermions. Cette propriété se traduit par une loi d'échelle. Pour chaque valeur de  $I$ , on peut

définir une distribution continue  $f_I\left(\frac{\ell}{\ell_0}\right)$  traduisant cette loi d'échelle, soit [1]

$$(22) \quad D_I(\ell).\ell_0 = f_I\left(\frac{\ell}{\ell_0}\right) .$$

Sur la Figure 1, la Figure 2 et la Figure 3 sont représentées les distributions  $\ell_0 D_I(\ell)$  en fonction de  $\ell/\ell_0$  pour  $I=1/2$ ,  $I=1$  et  $I=2$  (respectivement). Pour  $I=1/2$  et  $I=2$  les résultats obtenus sont comparés aux calculs originaux de Joós *et al.* tirés de la référence [1] qui ont été réalisés pour  $\ell_0=10$ . Dans le cas des fermions libres ( $I=1$ ) la courbe en pointillé a été obtenue pour la même densité de fermions mais en utilisant ici la propriété de symétrie particule-trou [1]. Le calcul utilisant cette symétrie, décrit au paragraphe II-4, permet de déterminer plus aisément que par le calcul direct des quaternions la distribution pour des grandes valeurs de  $\ell_0$  dans le cas des fermions libres.

Comme on l'observe sur ces trois figures, la distribution  $\ell_0 D_I(\ell)$  en fonction de  $\ell/\ell_0$  suit bien une loi d'échelle : quelles que soient les valeurs de  $\ell_0$  toutes les courbes sont superposées. L'augmentation de la distance moyenne entre fermions conduit simplement à un accroissement de la densité de points sur la courbe.

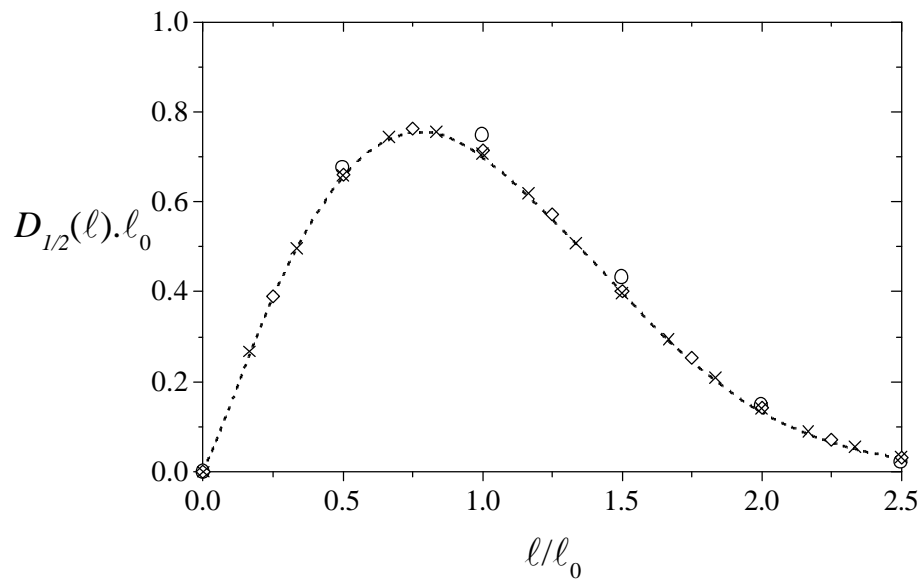


Figure 1 : Distribution des largeurs de terrasses  $\ell_0 D_{1/2}(\ell)$  en fonction de  $\ell/\ell_0$  pour  $I=1/2$  ( $g=-1/2$ ). (○)  $\ell_0=2$ , (□)  $\ell_0=4$  et (×)  $\ell_0=6$ . Les distributions sont obtenues à partir des expressions (9) et (13). (---)  $\ell_0=10$  tirée de [1]. Les distributions suivent la loi d'échelle  $D_I(\ell) \cdot \ell_0 = f_I\left(\frac{\ell}{\ell_0}\right)$ .

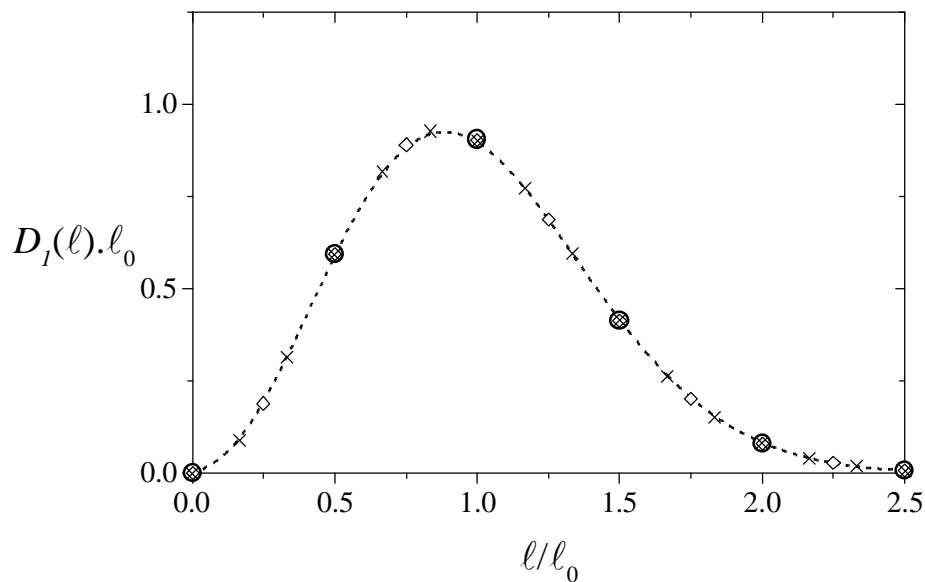


Figure 2 : Distribution des largeurs de terrasses  $\ell_0 D_1(\ell)$  en fonction de  $\ell/\ell_0$  pour  $I=1$  ( $g=0$ ). (○)  $\ell_0=2$ , (□)  $\ell_0=4$  et (×)  $\ell_0=6$ . Les distributions sont obtenues à partir des expressions (9) et (13).

(---)  $\ell_0=10$  calculée en utilisant la symétrie particule-trou. Les distributions suivent la loi d'échelle

$$D_1(\ell).\ell_0 = f_I\left(\frac{\ell}{\ell_0}\right).$$

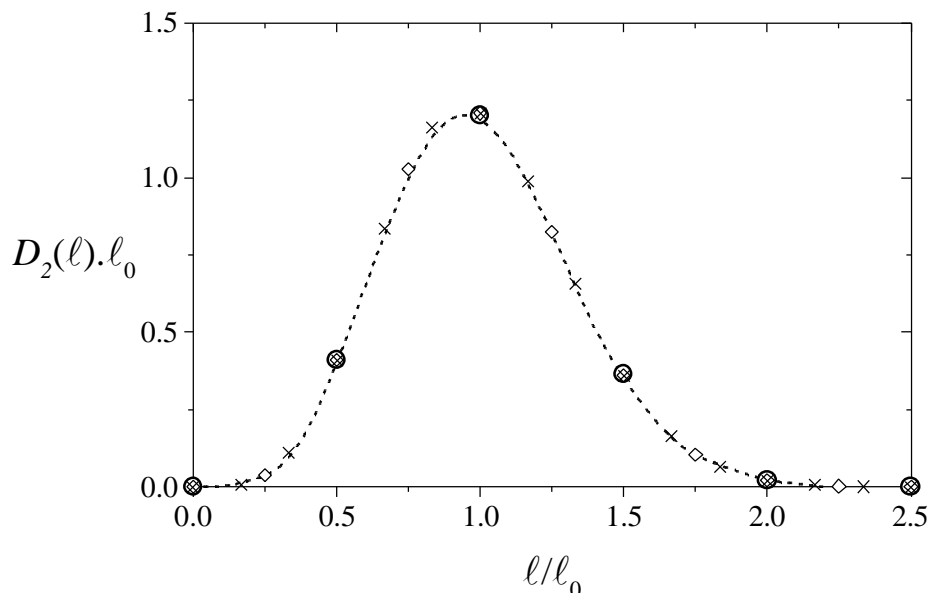


Figure 3 : Distribution des largeurs de terrasses  $\ell_0 D_1(\ell)$  en fonction de  $\ell/\ell_0$  pour  $I=2$  ( $g=4$ ).  
 (?)  $\ell_0=2$ , (.)  $\ell_0=4$  et (x)  $\ell_0=6$ . Les distributions sont obtenues à partir des expressions (9) et (13).  
 (---)  $\ell_0=10$  tirée de [1]. Les distributions suivent la loi d'échelle  $D_1(\ell).\ell_0 = f_I\left(\frac{\ell}{\ell_0}\right)$ .

#### II-4. Symétrie particule-trou

Pour chaque calcul de  $D_1(\ell)$  il est nécessaire de déterminer  $2^{\ell-1}$  termes  $P_{n1}$ . Dans le cas des fermions libres ( $I=1$ ) le calcul se simplifie en utilisant la symétrie particule-trou [1]. La relation (9) devient :

$$(23) \quad G(\ell, Q) = G(\ell, 1-Q) = \langle 0 | (1 - a_0^+ a_0) a_1^+ a_1 \dots a_{\ell-1}^+ a_{\ell-1} (1 - a_\ell^+ a_\ell) | 0 \rangle ,$$

en développant, on fait apparaître des termes de la forme :

$$(24) \quad G_p(\ell, 1-Q) = \langle 0 | a_0^+ a_0 a_1^+ a_1 \dots a_{\ell-1}^+ a_{\ell-1} a_\ell^+ a_\ell | 0 \rangle = P_{\ell+1}(0, 1, \dots, \ell) ,$$

correspondant à la probabilité d'avoir  $\ell+1$  particules occupant  $\ell+1$  sites consécutifs.

On obtient :

$$(25) \quad G(\ell, 1-Q) = G_p(\ell, 1-Q) - 2G_p(\ell-1, 1-Q) + G_p(\ell-2, 1-Q) .$$

où les termes  $G_p(\ell, 1-Q)$  sont calculés à l'aide de l'expression (21). Ainsi trois déterminants seulement sont nécessaires au calcul de la distribution dans le cas des fermions libres. L'avantage de cette méthode est qu'elle permet de calculer simplement les distributions pour des grandes valeurs de  $\ell_0$ . Le résultat pour  $\ell_0 = 10$  reporté Figure 2 a été obtenu par cette méthode.

A titre de vérification la distribution  $D_{I=1}(\ell)$  pour  $\ell_0 = 6$  a été calculée par la méthode des quaternions de Dyson et par la méthode décrite ci-dessus. La Figure 4 montre que l'on obtient bien le même résultat.

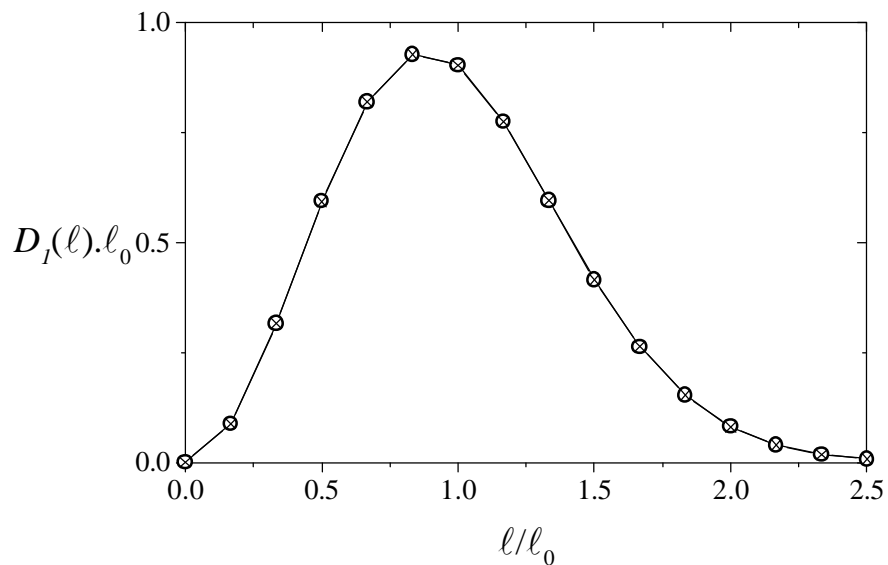


Figure 4 : Distribution des largeurs de terrasses  $\ell_0 D_{I=1}(\ell)$  pour  $\ell_0=6$  en fonction de  $l/l_0$  dans le cas  $I=1$  ( $g=0$  fermions libres). Les cercles correspondent au calcul direct des quaternions de Dyson et les croix sont associées au calcul utilisant la symétrie particule-trou.

---

### **III. Conclusion**

Nous avons vu dans cette annexe comment déterminer les distributions des largeurs de terrasses dans le cadre du modèle des fermions. Le calcul est possible pour trois valeurs particulières de l'interaction  $I = \frac{1}{2}, 1$  et  $2$  (soit  $g = -\frac{1}{2}, 0$  et  $4$ ). Les distributions suivent une

loi d'échelle  $f_I\left(\frac{\ell}{\ell_0}\right)$ .

La mise en œuvre de ce calcul n'est pas simple du fait du grand nombre de configurations nécessaires pour les grandes valeurs de  $\ell_0$ . Dans le cas des fermions libres la symétrie particule-trou simplifie considérablement le calcul.

Des expressions analytiques approchées de ces distributions ont été proposées par T.L. Einstein et O. Pierre-Louis [6].

### **BIBLIOGRAPHIE**

---

- [1] B. Joós, T.L. Einstein et N.C. Bartelt, Phys. Rev. **B 43** (1991) 8153.
- [2] B. Sutherland, Phys. Rev. **A 4** (1971) 2019.
- [3] B. Sutherland, J. Math. Phys. **12** (1971) 246.
- [4] F.J. Dyson, Commun. Math. Phys. **19** (1970) 235.
- [5] F.J. Dyson, J. Math. Phys. **3** (1962) 140.



[6]T.L. Einstein et O. Pierre-Louis, Surf. Sci. **424** (1999) L299.