



**HAL**  
open science

# Structures chaotiques dans les phases incommensurables et ondes de densité de spin

Gilles Abramovici

► **To cite this version:**

Gilles Abramovici. Structures chaotiques dans les phases incommensurables et ondes de densité de spin. Physique [physics]. Université Pierre & Marie Curie, 1990. Français. NNT : . tel-03947938

**HAL Id: tel-03947938**

**<https://universite-paris-saclay.hal.science/tel-03947938v1>**

Submitted on 19 Jan 2023

**HAL** is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.



Distributed under a Creative Commons Attribution - NonCommercial - NoDerivatives 4.0  
International License

Thèse de Doctorat de l'Université Pierre & Marie Curie

Spécialité :  
Physique Théorique

Présentée par  
Gilles Abramovici

Pour obtenir le titre de  
Docteur de l'Université Pierre & Marie Curie

Sujet

Structures chaotiques  
dans les phases incommensurables et  
ondes de densité de spin

Soutenue le 28 mai 1990 – devant le jury composé de MM. :

Prof. Michel Gourdin	Président
Jean Bellissard	
Robert Mc Kay	Rapporteur
yves Pomeau	Rapporteur
Serge Aubry	

Préface à la seconde édition de ma thèse.

J'ai récupéré les fichiers  $\text{\TeX}$ d'origine (sauf l'erratum que j'ai dû récrire) et je n'ai corrigé que les fautes explicites (de français ou de mathématiques), en coloriant en rouge les passages modifiés ; toutefois, les signes de ponctuation supprimés n'apparaissent pas, afin de garder une lecture fluide. Par ailleurs, il n'y a presque jamais de ponctuation dans les formules mathématiques, ce que j'ai laissé en l'état. J'ai actualisé les références, qui ne pouvait être complètes à l'époque, vu que certains articles n'étaient même pas encore soumis, et je les ai corrigées éventuellement. De plus, j'ai mis des liens vers les articles partout où je l'ai pu.

J'ai laissé toutes les maladresses et lourdeurs, de syntaxe comme de raisonnement, y compris certaines confusions entre les valeurs 1 et  $-1$  des énergies du modèle de Holstein-Peierls, qui me semblent surmontables. Je savais qu'il y avait une erreur numérique dans le calcul présenté dans l'erratum car Serge Aubry s'est rendu compte que la valeur du couplage était trop grande. J'ai, je l'espère, corrigé les erreurs et remplacé la figure correspondante. Du coup, le couplage obtenu est décevant mais il s'agit juste de trouver une borne, pas une valeur optimisée.

Seule deux courbes diffèrent de celles de la première édition : la figure 22, que je viens de mentionner, où on observait, dans la version originale, une chute de  $\ell$  quand  $\tau \rightarrow 0$  ; la nouvelle figure présente une discontinuité, qui n'est pas un artefact mais est due à la partie entière dans la formule de majoration correspondante ; et la figure 6, qui représente les états fondamentaux pour le remplissage  $\frac{3}{5}$  ; il existe plusieurs façons de présenter les états fondamentaux et j'ai repris celle du manuscrit original. Toutefois, un artefact y est visible : j'ai analysé ce diagramme en terme des longueurs entre particules et, alors que les solutions sont sensées, pour ce remplissage, être gouvernées par une succession de trois longueurs (une courte, une moyenne et une longue), on y trouvait une quatrième longueur courte, inférieure aux autres.

D'autres courbes ont été refaites par les moyens modernes dont je ne disposais pas à l'époque mais je me suis efforcé d'en préserver l'allure et l'esprit systématiquement. Les courbes que je n'ai pas refaites ont été scannées d'après un manuscrit de ma thèse ou de revue ou d'après les articles en ligne car je ne possède pas les originaux.

Je n'ai pas suivi la pagination de l'édition d'origine, ni la numérotation, que j'ai révisée à plusieurs niveaux. J'ai supprimé à une occasion un mot de liaison pour permettre une meilleure compilation du  $\text{\LaTeX}$  et j'ai fait attention à ce que la pagination soit optimisée pour la lecture du document.

Paris, le 18 janvier 2023.

Je remercie Mme M. Lambert et M. G. Jannink de m'avoir accueilli dans leur laboratoire, où j'ai pu réaliser ce travail de thèse dans d'excellentes conditions. je remercie M. le professeur M. Gourdin d'avoir accepté d'être mon directeur de thèse officiel auprès de l'Université Pierre & Marie Curie, puis d'avoir également assumé les fonctions de président du jury. Je tiens à remercier chaleureusement tous les membres du jury, MM. M. Gourdin, J. Bellisard, R. Griffith, Y. Pomeau et S. Aubry.

Je tiens aussi à remercier toutes les personnes du laboratoire pour leur aide, Mmes Defrance, Pomeau et Mlle Laurent. Un coup d'œil complice à la salle café de l'Orme pour Roro, le Babs, Michou et les autres. Je remercie en particulier toutes les personnes qui ont aidé à réaliser ce texte par leurs conseils ou leur lecture attentive, S. Aubry, Popol, Pascal, Y. Pomeau et mon père.

*Machines, robots, bombes,  
C'est la vie d'aujourd'hui, et il faut faire avec.  
Et si le monde court à sa fin  
C'est que nous n'aurons pas assez lutté,  
Nous, les Hommes de la Terre.*

*Machines, robots, bombes,  
Les gens sont devenus des individus, ils croient se passer les uns des autres ;  
Et ils se trompent.  
Sans doute, nous en sommes les complices,  
Nous, les Hommes de Science.*

*Confort, Robots, bombes.  
Et si le monde étouffe, sous le manteau lourd et froid  
De la technique,  
C'est que nous n'aurons pas assez agi,  
Nous, les Hommes de la Terre.*

*Confort, robots, guerre.  
Nous devons parler, lever la voix,  
car nous connaissons les clefs, nous savons qu'on ne sait rien,  
Ou si peu ;  
Nous, Les Hommes de Science.*

*Paix et Guerre.  
Pour vivre mieux et bâtir  
Un monde plus juste, un monde moins froid,  
Nous devons nous entendre, nous devons nous connaître,  
Nous, les Hommes de la Terre, et nous, les Hommes de Science.*

# Table des matières

<b>A</b>	<b>Introduction</b>	<b>1</b>
1	Présentation . . . . .	1
a	Étude à petit couplage . . . . .	2
2	Résultats expérimentaux . . . . .	2
a	Phénomène de distorsion de Peierls . . . . .	2
$\alpha$	Calcul dans un potentiel dimérisé . . . . .	2
$\beta$	Onde de densité de charge . . . . .	4
b	Supraconductivité . . . . .	4
c	Théorie des phasons et des amplitons . . . . .	4
d	Transports non linéaires dans les matériaux ondes-de-densité-de-charge . . . . .	5
e	Accrochage au réseau . . . . .	5
f	Théories de défauts . . . . .	7
3	Modèles de phase incommensurable . . . . .	8
a	Le modèle de Frenkel & Kontorowa . . . . .	8
b	Le modèle de Holstein-Peierls . . . . .	9
$\alpha$	Modèle quantique . . . . .	9
$\beta$	Modèle semi-quantique . . . . .	10
$\gamma$	Dérivation des équations de stationnarité . . . . .	10
<b>B</b>	<b>Étude des états fondamentaux</b>	<b>13</b>
1	États commensurables. Phase . . . . .	13
a	Périodicité des états fondamentaux commensurables . . . . .	14
b	Symétries . . . . .	15
c	Classification des états commensurables . . . . .	15
d	Définition spatiale de la phase . . . . .	16
e	Exemple . . . . .	18
f	Défauts de phase. Base de défauts . . . . .	19
g	Energie de Peierls-Nabarro . . . . .	20
h	Fonction enveloppe . . . . .	20

i	Construction des états incommensurables . . . . .	21
	$\alpha$ Choix d'un approximant diophantien . . . . .	21
	$\beta$ Exemple de construction . . . . .	22
	$\gamma$ Base canonique de défauts pour construire les états incommensurables . . . . .	24
2	Description des états incommensurables . . . . .	24
a	Définition d'une fonction enveloppe . . . . .	24
b	Définition d'une phase . . . . .	25
c	Existence de deux régimes . . . . .	26
d	Équation fonctionnelle de stationnarité . . . . .	26
e	Régime analytique . . . . .	27
	$\alpha$ Étude à couplage strictement infini . . . . .	27
	$\beta$ Invariance par translation : boson de Goldstone . . . . .	28
	$\gamma$ Transport électrique . . . . .	29
	$\delta$ Comportement critique . . . . .	29
f	Régime non-analytique . . . . .	30
	$\alpha$ Accrochage au réseau : barrière de Peierls-Nabarro . . . . .	30
	$\beta$ Étude à couplage strictement nul . . . . .	31
	$\gamma$ Décomposition de la fonction enveloppe à petit couplage . . . . .	31
	$\delta$ Étude des discontinuités . . . . .	33
	$\epsilon$ Discommensurations effectives . . . . .	34
	$\zeta$ Défectibilité . . . . .	35
g	Transition : brisure de symétrie sur l'espace des états fondamentaux . . . . .	36
<b>C</b>	<b>Étude des solutions en perturbation</b> . . . . .	<b>39</b>
1	Motivations . . . . .	39
2	Développement autour du couplage infini . . . . .	39
	a Théorème de K.A.M. . . . .	40
	b Cas du modèle de Holstein-Peierls . . . . .	40
3	Développement autour du couplage nul . . . . .	43
	a Principe de base . . . . .	43
	b Développement en série entière . . . . .	43
	c Application du théorème du point fixe . . . . .	43
	d Théorème dual de K.A.M. . . . .	44
	$\alpha$ Étude à couplage nul . . . . .	44
	$\beta$ Étude à couplage non nul . . . . .	45
	$\gamma$ "Gap" de phonon . . . . .	47
	$\delta$ Caractérisation simple états métastables-états stationnaires . . . . .	47
	$\epsilon$ Modèle exact de pseudo-spin . . . . .	49

e	Cas du modèle de Holstein-Peierls . . . . .	50
$\alpha$	Cas du couplage nul . . . . .	50
$\beta$	Cas général . . . . .	51
$\gamma$	“Gap” de phonon . . . . .	54
$\delta$	Métastabilité des solutions obtenues pour le modèle de Holstein-Peierls . . . . .	54
$\epsilon$	Introduction d’un spin physique . . . . .	55
$\zeta$	Dispersion de phonon . . . . .	55
<b>D</b>	<b>Localisation. Structure chaotique</b>	<b>57</b>
1	Localisation . . . . .	57
a	Cohérence finie. Défauts . . . . .	58
$\alpha$	Longueur de cohérence . . . . .	58
$\beta$	Défauts. Ancrage au réseau . . . . .	59
b	Corrélations . . . . .	59
$\alpha$	Structure fine . . . . .	59
$\beta$	Structure grossière . . . . .	60
2	Chaos . . . . .	60
a	Introduction . . . . .	60
b	Chaos dynamique . . . . .	61
$\alpha$	Codage aléatoire . . . . .	61
$\beta$	Non-intégrabilité . . . . .	61
<b>E</b>	<b>Dualité</b>	<b>63</b>
1	Modèle de Harper . . . . .	63
a	Équation duale . . . . .	63
b	Détermination d’une transition . . . . .	64
2	Dualité par Fourier . . . . .	64
a	Équations de Fourier . . . . .	64
$\alpha$	Calcul à partir de l’équation de stationnarité en $f$ . . . . .	65
b	Développement en Fourier . . . . .	66
$\alpha$	Calcul direct . . . . .	66
$\beta$	Calcul par les distributions . . . . .	67
$\gamma$	Transition analytique-non-analytique . . . . .	68
3	Résolution par dualité . . . . .	68
<b>F</b>	<b>Conclusion</b>	<b>69</b>



<b>Annexes</b>	<b>71</b>
I Principaux résultats de base sur les systèmes incommensurables uni-dimensionnels . . . . .	71
a Schéma général . . . . .	71
b Lemmes fondamentaux . . . . .	72
c Construction des états commensurables . . . . .	72
d Propriétés des états commensurables . . . . .	73
e Construction des états incommensurables . . . . .	74
f Propriétés des états incommensurables . . . . .	75
g Construction des états métastables . . . . .	75
II Caractérisation des états fondamentaux par les numéros de puits . . . . .	76
a Bandes interdites . . . . .	76
b Unicité : utilisation de la convexité . . . . .	77
II bis Formules exactes dans le cas de fonds de puits paraboliques . . . . .	78
III Théorème sur la partie continue d'une fonction croissante . . . . .	78
a Démonstration directe . . . . .	79
b Cas général : décomposition d'une mesure positive . . . . .	79
IV Boson de Goldstone . . . . .	80
a Hamiltonien dépendant d'une fonctionnelle . . . . .	80
$\alpha$ Variable conjuguée . . . . .	80
$\beta$ Hamiltonien . . . . .	80
$\gamma$ Fonction de partition . . . . .	83
$\delta$ Résolution des équations de stationnarité du modèle continu . . . . .	83
$\epsilon$ Invariance des états par translation . . . . .	83
b Invariance sous une symétrie quelconque . . . . .	84
c Boson de Goldstone . . . . .	85
d Cas particulier où l'action n'a pas de terme de quantité de mouvement . . . . .	86
e Absence de boson de Goldstone à petit couplage : discrétisation de symétrie . . . . .	87
f Forme des bosons de Goldstone . . . . .	88
g Dynamique des phonons . . . . .	88
V Dispersion à couplage nul . . . . .	89
a Résolution exacte, sans dispersion, à couplage nul . . . . .	89
b Résolution exacte, avec dispersion, à couplage nul . . . . .	91
VI Résolution en perturbation du modèle de Holstein-Peierls à petit couplage . . . . .	93
a Définition d'un opérateur exprimant les équations de stationnarité . . . . .	93
b Stabilité de $\mathcal{A}_\tau$ sous l'action de $F$ . . . . .	94
$\alpha$ Premier encadrement des $U'_n$ . . . . .	95
$\beta$ Deuxième encadrement des $U'_n$ . . . . .	96
c Contraction de $F$ . . . . .	97

d	Optimisation de $\tau$ . . . . .	98
e	Modèle avec une dispersion . . . . .	99
VII	Développement en série entière du modèle original de Frenkel & Kontorowa . . . . .	100
a	Notations . . . . .	100
b	Calcul formel des termes du développement . . . . .	100
	$\alpha$ Choix d'un paramètre de développement . . . . .	101
	$\beta$ Équations de récurrence en $k$ sur les $U_i^k$ . . . . .	102
	$\gamma$ Équations de récurrence pour les $\delta$ et les $\rho$ . . . . .	103
c	Majorations indépendantes de $i$ . . . . .	104
d	Choix d'une majoration . . . . .	105
e	Résolution de (VII,7) . . . . .	106
	$\alpha$ Cas où $j < [k^{5/12}]^+$ . . . . .	107
	$\beta$ Majoration de $A_{j,k}^p$ quand $j \geq [k^{4/5}]^+$ . . . . .	108
	$\gamma$ Majoration de $A_{j,k}^p$ quand $[k^{5/12}]^+ \leq j \leq [k^{4/5}]^+$ . . . . .	108
	$\delta$ Majoration de $B_{j,k}^p$ quand $[k^{5/12}]^+ \leq j \leq [k/3]^+$ . . . . .	111
	$\epsilon$ Majoration de $B_{j,k}^p$ quand $[k/3]^+ < j \leq [k/2]^+$ . . . . .	112
	$\zeta$ Majoration de $B_{j,k}^p$ quand $j > [k/2]^+$ . . . . .	112
	$\eta$ Majorations des premiers ordres : restriction du domaine de validité . . . . .	113
f	Vérification de l'hypothèse majoration des $ U_i^k $ : restriction du domaine . . . . .	113
g	Expression du minorant du rayon de convergence . . . . .	114
h	Paramètre d'échelle supplémentaire . . . . .	115
i	Autre choix du paramètre de développement . . . . .	115
j	Généralisation du majorant . . . . .	116
k	Résumé des expressions de récurrence . . . . .	117
VIII	Développement en perturbation pour le modèle de Frenkel & Kontorowa . . . . .	117
a	Notations . . . . .	117
b	Définition d'un opérateur exprimant les équations de stationnarité . . . . .	118
c	Stabilité de $\mathcal{A}$ sous l'action de $F$ . . . . .	119
d	Contraction de $F$ . . . . .	120
e	Continuité en $\ell$ de la solution . . . . .	120
f	"Gap" de phonon . . . . .	121
IX	Résultats numériques . . . . .	122
a	Formules pour les cas commensurables . . . . .	122
b	Réalisation numérique . . . . .	123
c	Conclusion . . . . .	126

## Préambule : notations

Dans le texte, on adoptera les notations suivantes, que je rappellerai dans la mesure du possible.

On notera  $\mathcal{H}$  les hamiltoniens classiques, et  $H$  les hamiltoniens quantiques ainsi que  $\mathcal{E}$  les énergies classiques, et  $E$  les énergies quantiques, correspondantes.

De même,  $\psi$  représentera les fonctions d'ondes quantiques, et  $\phi$  les fonctions d'ondes classiques, qui évolueront dans des espaces de Hilbert de dimension finie ou infinie.

Et  $(U_n)_{[n \in \mathbb{Z}]}$  ou  $(V_n)_{[n \in \mathbb{Z}]}$  désigneront plus généralement les variables classiques scalaires, définies dans un espace de Banach approprié. On notera parfois les états quantiques par des ket  $\langle k|$  ou même extensivement  $\langle \psi|$ , avec  $\langle \psi|n \rangle = \psi(n)$ , et encore  $\langle \psi|H|\psi' \rangle$  quand on applique un opérateur  $H$  entre deux états quantiques.

$D$  représentera systématiquement la matrice dynamique classique, de terme général  $\frac{\partial^2 [\mathcal{H}]}{\partial u \partial u}$ .

$\xi$  représente la longueur de cohérence, et  $C$  la matrice des corrélations.

$F$  représentera systématiquement l'opérateur agissant sur les variables  $U_n$  pour lequel on cherchera à appliquer le théorème du point fixe et  $\mathcal{A}$  l'espace fermé sur lequel cet opérateur s'applique.

$\varphi$  et  $\alpha$  désignent la phase qui permet de décrire les systèmes incommensurables.

$\zeta$  représentera systématiquement le rapport de commensurabilité des systèmes étudiés.

$g$  et  $\ell$  seront les paramètres de couplages des interactions en compétition.

$a$  représentera systématiquement la période du potentiel et  $l$  la longueur à vide des ressorts, pour le modèle de Frenkel & Kontorowa.

Pour les systèmes commensurables finis,  $R$  désignera le nombre de périodes du potentiel pour le modèle de Frenkel & Kontorowa, ou le nombre d'électrons pour le modèle de Holstein-Peierls, tandis que  $S$  désignera le nombre d'atomes. Par contre,  $\frac{r}{s}$  représentera la fraction irréductible, exprimant le rapport commensurable  $\zeta = \frac{R}{S}$ .

On notera enfin  $G_1$  et  $G_2$  les deux groupes de symétries que vérifie le hamiltonien discret de Frenkel & Kontorowa.

Le signe  $\delta$  désignera alternativement la fonction de Dirac ou le symbole de Chrönecker. De façon plus générale, on utilisera le symbole  $\delta$  pour noter la variation infinitésimale d'une quantité, et  $\Delta$  pour toute variation réelle.

On écrira les dérivées partielles par  $\frac{\partial}{\partial x}$ , ou accessoirement, par un indice  $x, y$  ou  $t$  pour alléger les formules.  $\partial^2$  désigne l'opérateur de d'Alembert ( $\partial_t^2 - \partial_x^2$  à une dimension).

$\langle f \rangle$  désignera la moyenne d'une fonction (ou d'une variable) sans préciser de quelle manière.

$O(f(N))$  est la fonction  $O$  de Landau, ce qui signifie que  $O(f(N))$  est une fonction équivalente à  $f(N)$  quand  $N \rightarrow \infty$ .

$[ ]^+$  est la fonction partie entière, et de façon plus générale,  $f^+$  (resp.  $f^-$ ) désignera la détermination continue à droite (resp. à gauche) d'une fonction  $f$ . Par exemple,  $[ ]^-$ , que l'on rencontrera parfois dans le texte, est la fonction qui vaut  $[x]^+ + 1$  pour tout  $x \in \mathbb{R} \setminus \mathbb{N}$ , et qui vaut  $n$  pour tout  $n \in \mathbb{N}$ .

$\chi_{[a,b]}$  est la fonction caractéristique de l'intervalle  $[a, b]$ .

On notera  $f(x^+) = \lim_{y \rightarrow x} \int_{y > x} f(y)$  et  $f(x^-) = \lim_{y \rightarrow x} \int_{y < x} f(y)$  pour toute fonction réglée.

$*$  est l'opérateur de convolution des fonctions : on a

$$f * g(x) = \int f(t)g(x - t)dt$$

$\Re$  signifie partie réelle.

Par ailleurs, j'adopterai la convention suivante : les signes  $\sum$ ,  $\int$ ,  $\inf$ ,  $\sup$  ou  $\lim$  s'appliqueront toujours implicitement à tous les termes indicés qui les suivent, jusqu'au premier terme non indicé. Cependant, j'omettrai parfois l'indice dans les cas de formules simples.



# A Introduction

## 1 Présentation

La compétition entre deux phénomènes incompatibles, par exemple deux interactions ayant des longueurs caractéristiques de rapport irrationnel, engendre des structures originales, appelées “phases incommensurables”. Ces systèmes ont des propriétés intermédiaires entre les réseaux cristallins et le vrai chaos. Leur étude est capitale. Leurs états fondamentaux présentent donc une frustration vis-à-vis de chaque interaction de base. Ils présentent souvent (cela est démontré à une dimension) des structures quasi-périodiques.

Les systèmes qui engendrent des phases incommensurables ont permis de comprendre les ondes de densité de charge, qui sont liées à l’anomalie de Kohn<sup>(1)</sup>, que l’on observe dans le spectre de phonons. Certains composés présentent un mode mou dans le spectre de phonon autour d’une valeur incommensurable de la quantité de mouvement. Fröhlich<sup>(2)</sup> s’est également intéressé aux phases incommensurables : vers 1955, il a développé un nouveau modèle de supraconductivité unidimensionnel à partir de telles structures. Même si ces idées restent incertaines, elles ouvraient un nouveau champ d’investigation.

Pour comprendre ces structures, on étudie des modèles simples, qui engendrent bien des systèmes incommensurables, en essayant de dégager les propriétés essentielles.

On se placera généralement dans des espaces discrétisés, et on introduira un paramètre de couplage  $\ell$  entre les interactions de base. Nous verrons de façon plus précise comment on construit ces modèles, génériquement, mais on peut, dès à présent, dégager deux idées majeures :

-D’une part, la discrétisation de réseau est fondamentale, et les modèles continus ne prédisent qu’une partie des résultats.

-D’autre part, dans ces modèles, le paramètre de couplage joue un rôle essentiel : on distingue en effet, à température nulle, deux régions très distinctes :

\* Une région à grand couplage : le système a une structure quasi-périodique, très proche de la structure périodique non perturbée.

\*\* Une région à petit couplage : le fondamental est toujours décrit par des fonctions quasi-périodiques, mais il apparaît alors une large classe d’états métastables et d’états stationnaires, que l’on peut décrire par une distribution aléatoire de défauts. On observe aussi un “gap” dans le spectre de phonon.

\*\*\* Entre ces deux régions, on a observé numériquement une transition, dite, transition par brisure d’analyticité, y compris à une dimension d’espace (le système est à température nulle).

## a Étude à petit couplage

L’objectif principal du travail présent est l’étude des régimes à petit couplage. Elle se présente sous deux axes. D’une part, une analyse approfondie des états fondamentaux, dont on extrait les excitations élémentaires, et d’autre part, une méthode par perturbation des états à couplage nul, qui sont exactement solubles.

Dans la première approche, on a voulu éclaircir les concepts de bases, comme la “phase”, en les définissant pour les états commensurables, et en construisant méthodiquement les états incommensurables et leurs propriétés à partir des systèmes commensurables. On montre par ailleurs la nature de la transition par brisure d’analyticité : il s’agit du passage d’une symétrie continue à la symétrie discrète correspondante.

Dans la seconde approche, on généralise les résultats connus pour une perturbation infinitésimale à une vraie perturbation finie, en prolongeant analytiquement les états fondamentaux à couplage nul dans l’espace de tous les états métastables pour un petit couplage. Pour cela, on a développé une méthode mathématique plus spécifique, fondée sur le théorème du point fixe, et analogue aux travaux déjà existants sur les régimes à grand couplage.

De nombreux détails de calculs sont reportés en annexe, par exemple, l’étude des bosons de Goldstone ou la démonstration de l’analyticité des variables décrivant les discommensurations, à petit couplage, qui remplace l’analyticité des variables de position à grand couplage. Une petite partie finale est d’ailleurs consacrée à la dualité entre les deux régimes.

Je vais maintenant aborder les différents phénomènes physiques qui concernent les phases incommensurables, en commençant d’abord par décrire le mécanisme de distorsion de Peierls<sup>(3)</sup>, puis en rappelant notamment le phénomène d’ancrage des ondes de densité de charge, dont l’origine est encore incomprise, et dont un mécanisme possible est présenté ici.

Puis, j’introduirai les modèles étudiés, de façon aussi complète que possible.

## 2 Résultats expérimentaux

### a Phénomène de distorsion de Peierls

Peierls a prédit, à une dimension, une instabilité des états libres électroniques<sup>(3)</sup>. L’ouverture d’un “gap” dans le spectre des électrons est, notamment, due à la singularité de la susceptibilité électronique à basse dimension (figure 1). Regardons comment se produit la distorsion sur un cas simple.

#### $\alpha$ Calcul dans un potentiel dimérisé

Considérons des électrons dans un réseau d’atomes. En première approximation, les électrons sont libres. Mais, la dégénérescence entre les niveaux  $(-k, +k)$  peut être levée au niveau de Fermi  $(-k_f, +k_f)$  : le système gagne de l’énergie électronique en favorisant l’apparition d’une modulation de période  $\frac{\pi}{k_f}$ . Si  $\Delta$  est un petit paramètre de couplage entre les états  $| -k_f \rangle$  et  $| k_f \rangle$ , on a typiquement l’hamiltonien suivant, pour

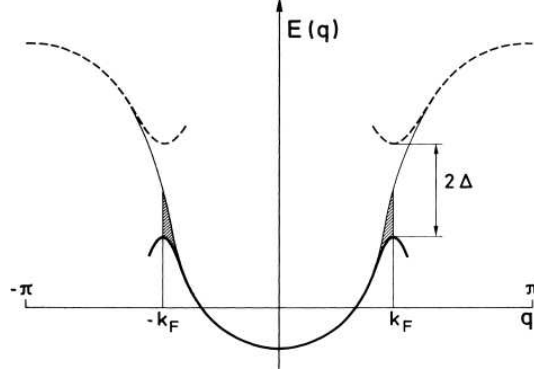


FIGURE 1 – Schéma de la distorsion de Peierls, à une dimension. Il y a ouverture d’un “gap”  $\Delta$ , quand on lève la dégénérescence entre les états  $-k_f, +k_f$  (d’après<sup>(4)</sup>).

les électrons :

$$\mathcal{H} \text{ projeté dans l'espace } | -k_f \rangle \oplus | k_f \rangle = \begin{pmatrix} \epsilon_f & \Delta \\ \Delta & \epsilon_f \end{pmatrix}$$

L’état  $| -k_f \rangle - | k_f \rangle$  a une énergie électronique  $\epsilon - \Delta$  et  $2\Delta$  représente également le “gap” dans le spectre d’énergie électronique. Il y a un phénomène de compétition entre l’énergie électronique et l’énergie élastique. La distorsion du réseau apparaîtra lorsque le gain en énergie électronique,  $\Delta$ , dépasse la perte en énergie élastique. On peut, par exemple, citer un calcul, dans un potentiel dimérisé, afin de mesurer quantitativement l’importance respective de ces énergies. On considère une onde électronique régie par l’hamiltonien  $H$  :

$$H|_{n,m} = -\ell\delta_{n,m+1} - \ell\delta_{n+1,m} + \Delta_n\delta_{n,m}$$

avec  $\Delta_n = \Delta^* + (-1)^n\Delta$

Les énergies des électrons sont

$$E(q) = \Delta^* \pm \sqrt{4\ell^2 \cos^2(q) + \Delta^2}$$

et l’énergie électronique totale du fondamental sera donc :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{elec}} &= \frac{2}{\pi} \int_0^{\pi/2} \Delta' - \sqrt{4\ell^2 \cos^2(q) + \Delta^2} dq \\ &\text{qui se développe comme} \\ &= \Delta' - 4\ell + \frac{1}{4\pi\ell} \Delta^2 \ln^2(\Delta) \end{aligned}$$

tandis que l’énergie élastique s’écrit

$$\mathcal{E}_{\text{élas}} = \frac{1}{2} \frac{K'}{g'^2} \Delta'^2 + \frac{1}{2} \frac{K}{g^2} \Delta^2$$

où  $g$  (resp.  $g'$ ) est la constante de couplage électron-phonon, et  $K$  (resp.  $K'$ ) la constante élastique de déformation du vecteur d’onde  $k = 0$  (resp.  $k = \pi$ ).

Finalement, lorsque l’on minimise la somme des énergies,  $\mathcal{E}_{\text{elec}} + \mathcal{E}_{\text{élas}}$ , on trouve une valeur non nulle de  $\Delta$ , ce qui traduit l’apparition d’une modulation de longueur d’onde  $\frac{\pi}{k_f}$ .



## $\beta$ Onde de densité de charge

Le réseau atomique et la densité électronique sont tous deux modulés de façon cohérente, cette modulation est appelée onde de densité de charge. La modulation du réseau, de longueur d'onde  $\frac{\pi}{k_f}$ , peut être statique ou se déplacer sous l'influence d'un champ électrique (cf les problèmes de dégénérescence et d'accrochage au réseau plus loin).

## b Supraconductivité

Comme les longueurs en compétition sont de rapport irrationnel, le système est généralement invariant par translation d'une combinaison quelconque de ces longueurs, et par densité, par une translation quelconque suivant un axe (ou un plan) privilégié (voir l'étude des états fondamentaux). Ainsi, Fröhlich a imaginé que les ondes de densité de charge pourraient glisser sans frottement, et il a conjecturé<sup>(2)</sup> l'existence d'un état supraconducteur, dans ces systèmes.

Par ailleurs, Kohn<sup>(1)</sup> a prédit, pour l'ensemble des cristaux, un ramollissement autour de la valeur  $2k_f$  dans le spectre de phonon. Le phénomène, bien que non contesté dans son principe, n'a jamais été observé, sauf dans les matériaux onde-de-densité-de-charge.

## c Théorie des phasons et des amplitons

Overhauser<sup>(5)</sup> a unifié ces théories par une approche empirique simple. Lorsque l'on fait décroître la température d'un échantillon, on observe un ramollissement des phonons autour de la valeur  $2k_f$ , c'est-à-dire une diminution du "gap" (la plus petite fréquence non nulle) dans le spectre de dispersion, jusqu'à une température de transition  $T_c$ , où le "gap" disparaît, ce qui correspond à l'apparition d'une distorsion du réseau. En dessous de la température  $T_c$ , la dégénérescence  $(+k_f, -k_f)$  est levée, et on décompose les phonons selon deux modes, un phason, de "gap" nul à  $T_c$ , et un ampliton, de "gap" non nul. On peut faire les calculs par une approximation de champ moyen<sup>(5)</sup>, où les variables extra-dimensionnelles sont prises en compte dans un champ moyen, et on prédit alors une transition à une dimension (figure 2). Le rapport  $\frac{\Delta}{kT_p}$  duquel on s'approche ainsi est généralement très éloigné des mesures expérimentales. On peut également déterminer l'allure grossière d'une courbe, en tenant compte explicitement des couplages extra-dimensionnels<sup>(6)</sup> (quasi uni-dimensionnels). On trouve alors un assez bon accord avec l'expérience, surtout quand on prend en compte les effets d'impuretés (figures 2 et 3), mais il apparaît en réalité un pic central, qui n'est encore pas bien compris<sup>(7)</sup> (figure 3).

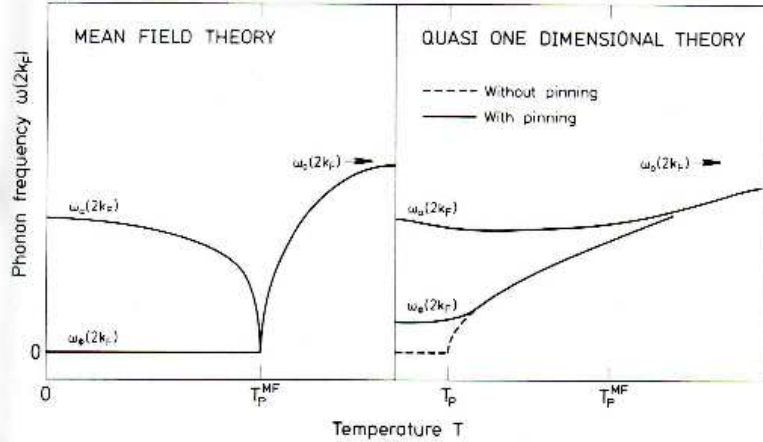


FIGURE 2 – Courbes<sup>(6)</sup> simulées des phonons en fonction de la température. Le phonon de fréquence  $\omega_o$  se ramollit<sup>(1)</sup> quand la température décroît, puis se divise, en dessous de la transition, en un ampliton de fréquence  $\omega_\alpha$  et un phason de fréquence  $\omega_\varphi$ . La courbe de gauche est obtenue par un calcul de champ moyen<sup>(5)</sup> et celle de droite est tracée d’après des calculs en quasi-une-dimension

#### d Transports non linéaires dans les matériaux ondes-de-densité-de-charge

Les ondes de densité de charge ont été observées dans de nombreux matériaux<sup>(8)</sup>. On les détecte entre autres dans des matériaux d’origine organique, comme  $TTF - TCNQ$ ,  $(TMTSF)_2X$ ,  $KCP$  qui sont uni-dimensionnels<sup>(9)</sup>, ou minérale, comme les trichalcogénures, les tétrachalcogénures halogénés, qui sont uni-dimensionnels, ou les bronzes qui sont bi-dimensionnels, sauf le bronze bleu de Molybdène  $Ko_{0,3}MoO_3$  qui est uni-dimensionnel<sup>(10)</sup>.

Quand on applique un champ électrique, on détecte plus particulièrement une conductivité non-linéaire. Les premières mesures de conductivité remontent à Monceau<sup>(11)</sup>, sur des échantillons de  $NbSe_3$ . Ce sont les seuls chalcogénures à rester métalliques à très basse température. Depuis, on a mesuré des conductivités extrêmement élevées dans ces composés (ils sont supraconducteur sous pression<sup>(12)</sup>). Rappelons par ailleurs qu’un bon tiers des bronzes sont supraconducteurs à de très basses températures. On mesure un champ seuil dans ces divers matériaux, à partir duquel le système a une réponse non linéaire (figure 4) : on observe un comportement assez proche des verres de spin, avec de forts hystérésis, et une mauvaise reproductibilité des courbes<sup>(8)</sup>.

#### e Accrochage au réseau

En l’absence de champ, les ondes de densité de charge sont fixés au réseau ; quand on augmente le champ électrique, on passe par une transition, et les ondes peuvent glisser le long de certaines directions privilégiées. On peut souvent attribuer sans ambiguïté la conductivité non-linéaire au désaccrochage et au glissement des ondes de densité de

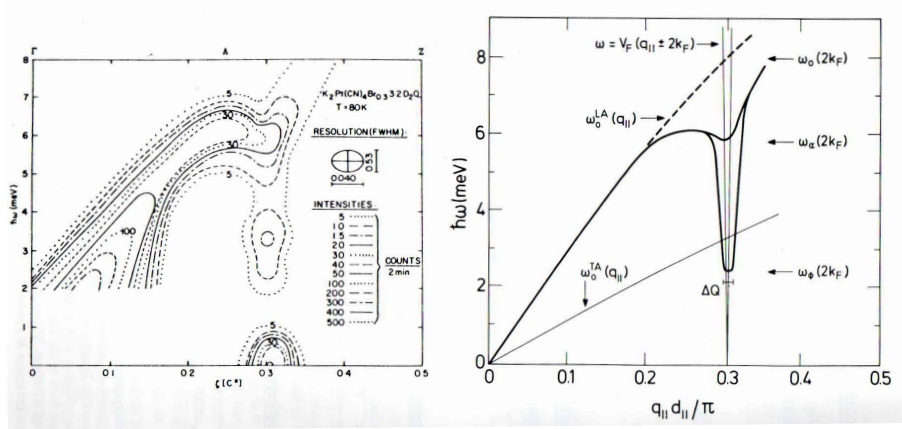


FIGURE 3 – Intensités de la diffusion neutronique autour de  $q = (0, 0, 2k_f)$ , dans KCP (à gauche<sup>(6)</sup>). La courbe de droite correspond exactement à celle de droite dans la figure précédente. On y voit un mode dit sur-amorti (dont la fréquence s’annule), c’est le phason. On voit également un autre phason amorti, qui n’atteint pas la fréquence nulle, qui est déduit d’une correction par des impuretés. Et, on distingue aussi l’ampliton, qui est à peine amorti. Par contre, sur la courbe expérimentale, à gauche, on voit apparaître un pic central, qui n’est pas reproduit par la courbe théorique (à droite<sup>(6)</sup>).

charge<sup>(11)</sup>.

Aussi se demande-t-on pourquoi le système est accroché en l’absence de champ. Trois mécanismes sont proposés :

\* L’accrochage commensurable : quand le système est commensurable, c’est-à-dire que les longueurs en compétition sont rationnelles, on retrouve un vrai cristal, et les ondes de densité de charge sont fixes ; en particulier, lorsque la concentration d’électrons libres, qui joue le rôle du rapport de commensurabilité, comme on le verra pour le modèle de Holstein-Peierls, est rationnelle. Ce phénomène est facile à mettre en évidence expérimentalement<sup>(8)</sup> (on le retrouvera dans l’étude des états fondamentaux), et bien qu’on l’observe parfois, il n’explique pas toujours l’accrochage des ondes de densité de charge.

\*\* Les modèles d’impureté : les expérimentateurs expliquent donc souvent cet accrochage par la présence d’impuretés dans la matrice atomique. Les impuretés permettent notamment de comprendre la stabilité de ces ondes de densité de charge. Si les impuretés sont magnétiques, elles seront peu denses et fortement couplées au réseau. Si elles ne sont pas magnétiques, elles seront plus denses, mais interagiraient plus faiblement avec le réseau. Il existe des preuves expérimentales de la présence d’impuretés magnétiques dans les structures de Molybdène. Certains modèles d’impuretés magnétiques ont été introduits (voir par exemple Lee et Rice<sup>(13)</sup>) ; mais ils n’expliquent qu’une partie des résultats : dans les trichalcogénures, les expérimentateurs ne savent pas déterminer avec certitude la concentration d’impuretés : la grande sensibilité à une modification de la densité électronique (insertion de donneurs ou d’accepteurs supplémentaires) indique une concentration élevée d’impuretés, tandis que la très faible sensibilité à des substitutions des alcalins indiquerait plutôt une petite concentration d’impuretés<sup>(8)</sup>.

\*\*\* L’accrochage par brisure d’analyticit  : Serge Aubry<sup>(14)</sup> a, par contre, démontr 

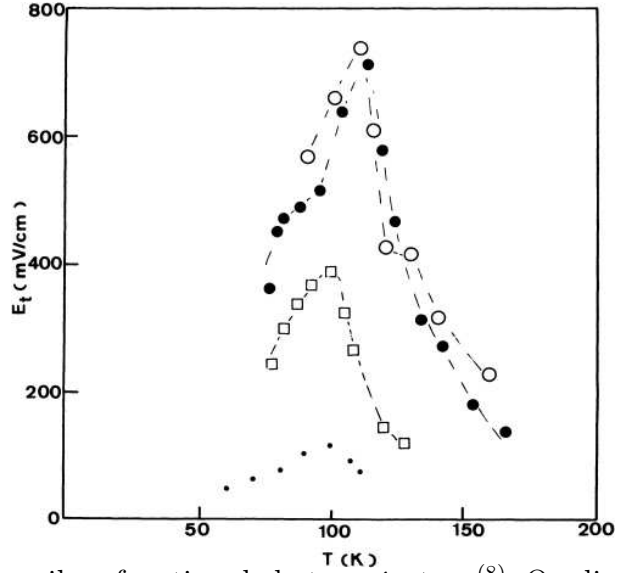


FIGURE 4 – Champ seuil en fonction de la température<sup>(8)</sup>. On distingue assez bien une température critique.

l'existence d'un accrochage intrinsèque des systèmes incommensurables, qui ne tient pas compte des impuretés, et ce travail présente justement l'étude théorique de tels régimes accrochés à un niveau très fondamental, et en particulier, leurs justifications rigoureuses.

## f Théories de défauts

Dans les composés bi-dimensionnels, les échantillons présentent des domaines avec des parois assez analogues aux domaines de Bloch, que l'on interprète comme des défauts de phases, ou discommensurations, des ondes de densité de charge. Dans le modèle d'accrochage intrinsèque proposé par Serge Aubry, on explique toute la dynamique comme une dynamique des discommensurations, et non des ondes de densité de charge elles-mêmes<sup>(15)</sup>. On peut notamment citer les travaux de Dumas et Feinberg<sup>(16)</sup>, qui montrent que seules les discommensurations participent à la mobilité dans leurs composés. Certains modèles d'impuretés dynamiques ont été également proposés<sup>(13)</sup>, et on ne sait pas trancher, actuellement, entre les différents modèles.

Pour conclure ce chapitre, rappelons la très grande complexité de ces systèmes, qui fait qu'aucune théorie ne couvre convenablement l'ensemble des résultats et également la très grande difficulté à interpréter les mesures, souvent fort délicates -par exemple, on doute parfois même du caractère uni-dimensionnel des matériaux (transitions une-trois dimensions ?)-.

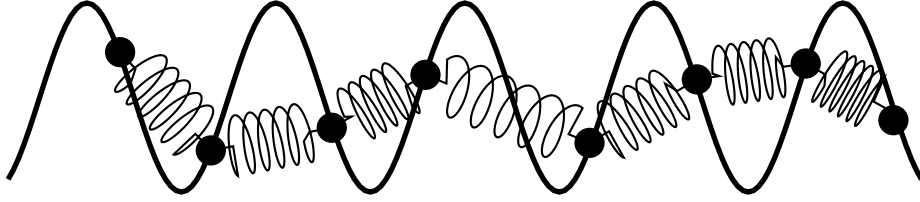


FIGURE 5 – Représentation d’une chaîne d’atomes de Frenkel & Kontorowa par des ressorts et des puits.

### 3 Modèles de phase incommensurable

Etudions maintenant les modèles incommensurables, sur lesquels sont basés tous les résultats du texte.

#### a Le modèle de Frenkel & Kontorowa

On place une chaîne infinie d’atomes classiques à une dimension repérés par  $U_n$ , dans un potentiel périodique. On se place dans un espace de Banach associé aux  $U_n$  et on considère l’hamiltonien :

$$\mathcal{H} = \sum_n L(U_n, U_{n+1})$$

avec  $L(U_n, U_{n+1}) = \ell W(U_{n+1} - U_n) + gV(U_n)$ , où  $W$  est convexe et représente l’énergie élastique et  $V$  représente le potentiel périodique.

Pour le modèle de Frenkel & Kontorowa original, on prend

$$\begin{aligned} W &= \frac{1}{2}(x - l)^2 \\ V &= 1 - \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \end{aligned}$$

où  $a$  sera la période du potentiel.

On obtient une compétition entre la longueur  $l$  caractéristique de l’énergie élastique et la période  $a$  liée au potentiel. Le rapport d’incommensurabilité est  $\frac{l}{a}$ .

On adopte l’image, quelque peu éronnée mais très intuitive, d’atomes reliés par des ressorts, ce qu’exprime le terme de potentiel élastique, “tombant” dans des puits, qui correspondent au potentiel périodique de période  $a$ . Les atomes auront tous une même masse gravitationnelle arbitraire (figure 5). L’image donnée par les auteurs originalemment est plus correcte, mais moins facile à interpréter<sup>(17)</sup>.

La somme infinie nécessite quelques précautions. On doit choisir des conditions aux bords précises. En particulier, pour un système fini  $n \in -\frac{S}{2}, \dots, \frac{S}{2}$  où  $S$  représente donc le nombre d’atomes, les termes en  $l$  donne une contribution  $-l(U_{-S/2} - U_{S/2}) + \frac{l^2}{2}S$  qui est indéterminée. Pour fixer sans ambiguïté la façon dont on calcule ces termes, il suffira de fixer une densité globale d’atomes  $\eta$

$$(U_{-S/2} - U_{S/2}) \sim S\eta$$

Par exemple, pour  $W = \frac{1}{2}(x - l)^2$ , et  $g = 0$ , le fondamental est évidemment donné par :  $U_n = \alpha n + \beta$ , donc on prendra ici  $\alpha = \eta$ . On a alors une densité d'énergie :

$$\frac{L_o}{S} = \frac{l^2}{2} + \frac{\eta^2}{2} - l\eta$$

et donc,

$$\frac{dL_o}{Sdl} = l - \eta$$

l'énergie est minimale pour  $\eta = l$ .  $l$  a bien servi à imposer la densité d'état.

Si l'on impose la densité, les termes en  $l$  deviennent inutiles. Pour un système fini, soit  $R$  le nombre de périodes du potentiel, (si c'est un potentiel simple, avec un seul puits par période,  $R$  est le nombre de puits), on a :

$$L = \text{longueur de la chaîne} = Sl = Ra$$

donc, soit  $\zeta$  le rapport d'incommensurabilité du système du système infini,

$$\zeta = \frac{l}{a} = \lim_{S \rightarrow \infty} \frac{R}{S} \quad (1)$$

$\zeta$  est aussi la densité d'atomes par puits et on trouve encore  $\eta = l$ , soit

$$\lim_{\substack{n \rightarrow -\infty \\ m \rightarrow +\infty}} \frac{U_n - U_m}{n - m} = l$$

et on en déduit que  $|U_n - nl|$  est borné, pour toute configuration.

Enfin, remarquons que l'on peut toujours redéfinir l'énergie de façon à éliminer un des termes de couplage. On passe de l'un à l'autre par la relation simple  $t^* = 1/g$ . On appellera  $\ell$  le couplage et on exprimera l'ensemble des équations en fonction de ce couplage. Cependant, dans la partie sur le développement à grand couplage, j'utiliserai le paramètre  $g$  par commodité, car les solutions sont continues par rapport à  $g$ .

## b Le modèle de Holstein-Peierls

Dans l'exemple précédent, on crée explicitement une compétition entre deux longueurs. Cependant, le phénomène peut être intrinsèque, comme on le voit pour le phénomène de distorsion de Peierls : le modèle de Holstein-Peierls est basé sur cette modulation spontanée qui peut apparaître dans certains régimes.

### $\alpha$ Modèle quantique

On considère l'hamiltonien suivant :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{el}} + \mathcal{H}_{\text{ph}} + \mathcal{H}_{\text{el-ph}}$$

où  $\mathcal{H}_{\text{el}}$  est un hamiltonien d'électrons libres, plus un terme d'interaction à courte distance :

$$\mathcal{H}_{\text{el}} = -\mathcal{E}_{\text{fermi}} \sum_{i,\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma} - \ell \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{j,\sigma}$$

les  $c$  et  $c^+$  étant les opérateurs d'annihilation et de création des électrons, et  $\mathcal{H}_{\text{ph}}$  un hamiltonien de phonons à une fréquence déterminée  $w_o$  :

$$\mathcal{H}_{\text{ph}} = \hbar w_o \sum_i a_i^+ a_i + \frac{1}{2}$$

les  $a$  et  $a^+$  étant les opérateurs d'annihilation et de création des phonons et enfin  $\mathcal{H}_{\text{el-ph}}$  est un hamiltonien d'interaction électron-phonon avec un paramètre de couplage  $g$  :

$$\mathcal{H}_{\text{el-ph}} = g \sum_i (a_i^+ + a_i) \sum_{\sigma} c_{i,\sigma}^+ c_{i,\sigma}$$

Le rapport  $\gamma = \frac{\hbar w_o}{\ell}$  mesure les effets quantiques des atomes. On pourra faire différents types d'étude ; par exemple, faire un développement en  $\gamma$ , ou d'autres. Les paramètres  $\ell$  et  $g$  sont liés entre eux par un changement de variable  $g^* = 1/\ell^2$ . On impose enfin la concentration électronique totale  $\rho$ , qui constitue, après  $\gamma$  et  $\ell$  le troisième et dernier paramètre libre du système.

### $\beta$ Modèle semi-quantique

Quand on prend la limite adiabatique,  $\gamma \rightarrow 0$ , les phonons deviennent classiques, et on obtient un modèle semi-quantique avec une énergie :

$$\mathcal{E} = \sum_n \frac{1}{2} U_n^2 + \sum_{\mu \text{ occupé}} E^{\mu}_{\text{elec}}$$

où les  $U_n$  sont les variables des phonons (atomes) et les  $E^{\mu}$  les énergies des états électroniques dont les fonctions d'onde  $\psi$  évoluent dans un espace de Hilbert (fonctions sommables) et sont régies par l'hamiltonien  $H$  :

$$\langle n | H | \psi \rangle = -t\psi_{n+1} - t\psi_{n-1} + U_n \psi_n$$

Les équations de Schrödinger s'écrivent :

$$-\ell\psi_{n+1}^{\mu} - \ell\psi_{n-1}^{\mu} + gU_n\psi_n^{\mu} = E^{\mu}\psi_n^{\mu}$$

### $\gamma$ Dérivation des équations de stationnarité

On travaillera désormais toujours avec le modèle semi-quantique, et je vais résoudre les équations de stationnarité afin de mieux le comprendre.

$H$  étant minimisé suivant les  $U_n$ , les états électroniques occupés seront les états propres du hamiltonien avec ces valeurs des  $U_n$ . Inversement, on écrit que  $\mathcal{E}$  est extrémale par rapport aux  $U_n$ , soit :

$$U_n = - \sum_{\mu \text{ occ}} \frac{\partial E^{\mu}}{\partial U_n}$$

Or, en multipliant l'équation au valeur propre par  $\bar{\psi}_n^{\mu}$  et en sommant sur  $n$ , on trouve<sup>1</sup> :

$$E^{\mu} = \sum_{n \in \mathbb{Z}} -2\ell \Re(\bar{\psi}_{n+1}^{\mu} \psi_n^{\mu}) + gU_n |\psi_n^{\mu}|^2$$

---

1.  $\Re$  signifie partie réelle.

donc

$$\frac{\partial E^\mu}{\partial U_n} = \Re \left( \sum_{m \in \mathbb{Z}} \frac{\partial \bar{\psi}_m^\mu}{\partial U_n} (-2\ell \psi_{m+1}^\mu - 2\ell \psi_{m-1}^\mu + 2g U_m \psi_m^\mu) \right) + g |\psi_n^\mu|^2$$

On reconnaît l'équation de stationnarité dans le premier signe somme. On obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E^\mu}{\partial U_n} &= \Re \left( \sum_{m \in \mathbb{Z}} 2E^\mu \frac{\partial \bar{\psi}_m^\mu}{\partial U_n} \psi_m^\mu \right) + g |\psi_n^\mu|^2 \\ &= E^\mu \frac{\partial |\psi_n^\mu|^2}{\partial U_n} + g |\psi_n^\mu|^2 \\ &\quad \text{et comme les fonctions d'ondes sont normalisées} \\ &= g |\psi_n^\mu|^2 \end{aligned}$$

On aurait bien sûr trouvé ce résultat par un développement en perturbation.

Donc on a :

$$\begin{aligned} U_n &= -g \sum_{\mu \text{ occ}} |\psi_n^\mu|^2 \\ &= -g \rho_n \end{aligned} \tag{2}$$

où  $\rho_n$  est la densité électronique au site  $n$  :

$$\rho_n \leq 1$$

On peut maintenant préciser l'espace dans lequel évolue la variable  $U_n$  : il s'agit d'un espace de Banach  $I^{\mathbb{Z}}$ , où  $I$  est un intervalle fermé.

Le rapport  $\zeta$  sera défini comme la concentration électronique  $\rho$ ,

$$\zeta = \rho = \frac{R}{S}$$

où  $R$  est le nombre d'électrons et  $S$  le nombre d'atomes.

Comme  $g$  et  $1/\ell^2$  jouent le même rôle, on ne gardera qu'un seul paramètre :  $\ell$ , qu'on appellera le couplage (bien que le couplage électron-phonon qui est utilisé souvent corresponde à  $g$ ). On obtient maintenant un modèle avec deux paramètres,  $\zeta$  et  $\ell$ . Cependant, j'utiliserai le paramètre  $g$  par commodité pour les développements à grand couplage.

L'équation de stationnarité, écrite avec le couplage  $\ell$ ,

$$\begin{aligned} U_n &= - \sum_{\mu \text{ occ}} |\psi_n^\mu|^2 \\ \langle U_n \rangle &= -c \\ \text{donc } \frac{\sum_n U_n}{S} &= -c \end{aligned} \tag{3}$$

est beaucoup plus facile à manier, car indépendante du paramètre : en effet les  $U_n$  ne varient pas (au premier ordre) extensivement avec le couplage  $\ell$ , et on pourra donc les développer en fonction de ce couplage.





# B Étude des états fondamentaux

Ayant ainsi présenté les modèles que l'on étudie, je vais commencer le travail, en faisant d'abord une étude approfondie des états fondamentaux.

Une des idées maîtresses de cette étude est de construire les états de phase incommensurable par des états de rapport commensurable. En effet, les états d'une chaîne infinie sont généralement obtenus comme la limite d'une chaîne finie, on les construit donc par des états dont les longueurs en compétition sont de rapport rationnel. On optimise le processus de limite en prenant les approximations rationnelles successives du rapport incommensurable que l'on veut atteindre. Pour le modèle de Frenkel & Kontorowa, avec un potentiel de paraboles raccordées, on démontre rigoureusement que ces approximations jouent un très grand rôle (cf S. Aubry<sup>(18)</sup> & F. Vallet<sup>(19)</sup>).

Il n'est pas garanti, certes, que soient atteints tous les états, et il n'est pas impossible que l'on puisse tirer un enseignement de la découverte d'états métastables supplémentaires. Mais, il s'agit ainsi de résultats exacts, pour une très large classe d'états, qui sont très supérieurs à ceux obtenus pour les modèles où l'on prolonge l'espace réel en un continuum : on prédit (cf S.Aubry<sup>(20)</sup>) des propriétés, qui n'existent pas dans ces modèles.

Le but est donc de trouver des quantités physiques qui dépendent continûment du rapport  $\zeta$ , afin de pouvoir en déduire des résultats pour les rapports incommensurables.

Dans toute cette partie, je reprends l'ensemble des résultats déjà obtenus par S.Aubry, P.Y.Le Daeron et F.Vallet, pour le modèle de Frenkel & Kontorowa. Des travaux analogues sont possibles sur d'autres systèmes mais celui-ci permet une présentation plus claire et plus pédagogique.

Nous allons donc tout d'abord étudier, dans le chapitre suivant, les états commensurables, et définir les notions de phase, fonction enveloppe, défaut de phase, puis construire explicitement des états incommensurables à partir des états commensurables en insérant une distribution particulière de défauts.

Dans le second et dernier chapitre de la partie, on étudiera alors les états incommensurables, en montrant que la phase et la fonction enveloppe admettent bien une limite. Par contre, la notion de défaut ne subsiste qu'à petit couplage : à grand couplage, je rappelle l'existence de bosons de Goldstone ; puis, à petit couplage, on montre que la fonction enveloppe est une somme de discontinuités dont on extrait les défauts (ceci est un résultat nouveau).

## 1 Etats commensurables. Phase

Avant de m'intéresser plus particulièrement aux états commensurables du modèle de Frenkel & Kontorowa, je voudrais introduire rapidement la notion de phase, qui est un support très physique et très utilisé de tous les phénomènes liés aux phases incommensurables et aux ondes de densité de charge.

Quand le couplage est infini, on trouve pour chaque système une solution cristalline. On constate alors, pour le modèle de Frenkel & Kontorowa, que l'ensemble des solutions est invariant par translation, quelles que soient les conditions aux bords que l'on a choisies.

Ce phénomène est accidentel. En effet, pour un système commensurable, il n'y a normalement pas de degré de liberté : il y a  $s$  équations

$$\frac{\partial L}{\partial x}(U_n, U_{n+1}) + \frac{\partial L}{\partial y}(U_{n-1}, U_n) = 0 \quad (4)$$

pour décrire les  $s$  composantes  $U_n$ ,  $n = 1, \dots, s$ . Pour  $\ell = \infty$ , il y a en fait une phase libre supplémentaire (les atomes sont libres, le système peut évidemment glisser sur l'axe) que l'on peut, par exemple, décrire par

$$\frac{1}{s} \sum_{i=0}^{s-1} U_i$$

mais pour  $\ell$  non infini, ce degré de liberté disparaît. Le système est naturellement accroché au réseau.

Par contre, pour les systèmes incommensurables, l'espace des états fondamentaux vérifie encore cette symétrie continue, pour un couplage assez grand. On verra, par la suite, que la nature de cette symétrie est modifiée pour les plus petits couplages. **On a donc besoin d'introduire une phase pour décrire ce degré de liberté à l'intérieur de l'espace des états fondamentaux.**

Je vais commencer maintenant l'étude des états fondamentaux par la description des états fondamentaux commensurables du modèle de Frenkel & Kontorowa.

## a Périodicité des états fondamentaux commensurables

Pour construire un état fondamental dans un système infini, qui corresponde à un rapport  $\zeta = \frac{r}{s}$  commensurable, on doit simplement assurer la condition (1) :

$$\lim_{S \rightarrow \infty} \frac{R}{S} = \frac{r}{s} = \zeta$$

où  $R$  est le nombre de puits et  $S$  le nombre d'atomes d'un système fini.

Cependant, on s'attend à ce qu'une structure périodique soit un minimum de l'énergie : le système est réductible à la période  $r.a$ .

La somme infinie impose encore de prendre des précautions pour définir les états fondamentaux. On les définit par les variations locales et finies d'énergie. On vérifie alors, à une dimension, que les structures fondamentales sont bien les structures  $r.a$ -périodiques, et, alors, on impose simplement une condition de périodicité :

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad U_{n+s} = U_n + r.a \quad (5)$$

qui assure la condition (1) (d'après les travaux de S. Aubry<sup>(21)</sup>, cf annexe I)

On considère, par la suite, des états de rapport commensurable  $\frac{r}{s}$  vérifiant la condition (5).

## b Symétries

On trouve diverses symétries dans l'hamiltonien  $\mathcal{H}$ . En dehors de la symétrie par rapport à un sommet, qui n'existe pas pour les potentiels non symétriques, si on écrit sous la forme très générale,

$$\mathcal{H} = \sum_n L(U_n, U_{n+1})$$

où  $L$  vérifie la condition très générale  $L(x+a, y+a) = L(x, y) \forall x, y \in R$ , on constate que  $\mathcal{H}$  est invariant sous l'action d'un groupe discret à deux générateurs :

$$\begin{aligned} G_1: & (U_n) \rightarrow (U'_n = U_{n+1}) \\ G_2: & (U_n) \rightarrow (U'_n = U_n + a) \end{aligned}$$

L'espace des configurations fondamentales doit vérifier globalement les mêmes invariances, mais par contre, chaque état fondamental ne pourra vérifier ces symétries, car elles conduiraient à un état trivial. On montre alors, par la théorie des groupes, qu'à chaque degré de liberté de symétrie qui est perdu pour les états fondamentaux correspond un degré de liberté qui permet de décrire l'espace des fondamentaux tout entier. On montre que les symétries en question correspondent à une dégénérescence de translation. Il existe donc une phase qui permet de décrire les différents états fondamentaux, en les distinguant. On trouve une quantité qui convient bien, qu'on appellera donc phase, et notera  $\varphi$  :

$$\varphi = \frac{1}{s} \sum_{i=0}^{s-1} U_i$$

Sous l'action de  $G_1$ ,  $\varphi$  devient  $\varphi + \frac{r}{s}a$ , et sous l'action de  $G_2$ ,  $\varphi$  devient  $\varphi + a$ . En effet, on a vu que  $U_n = U_0 + a$ , d'où le résultat pour  $G_1$ , et celui pour  $G_2$  est trivial.<sup>2</sup>

## c Classification des états commensurables

On peut classer les états fondamentaux commensurables en fonction de la phase : A moins de dégénérescences accidentelles, donc, dans le cas général,  $\varphi$  exprime toutes les symétries du problème, donc elle suffit à décrire tous ces états. Chaque état fondamental prend une valeur unique de la phase, et pour obtenir un autre état, il faut et il suffit de faire agir les groupes  $G_1$  et  $G_2$ . On notera finalement que :

---

2. Remarque : si l'hamiltonien est également invariant par renversement de l'espace, on peut alors imposer qu'un minimum du potentiel passe par 0, et alors, la symétrie opère sur les états de la façon suivante :

$$U_n \rightarrow 2\beta - U_{-n}$$

où  $\beta$  est le centre de symétrie.

On montre facilement que, avec ces conventions,  $\beta$  est nécessairement de la forme  $\alpha = \frac{k.a}{2}, k \in \mathbb{Z}$ , à condition que  $a$  soit la vraie période du potentiel. Donc, la phase devient sous l'action du groupe :

$$\begin{aligned} \varphi \rightarrow k.a - \frac{1}{s} \sum_{i=0}^{s-1} U_{-i} &= -\frac{1}{s} \sum_{i=-s+1}^0 U_i \text{ modulo } a \\ &= -\varphi - \frac{r.a}{s} \end{aligned}$$

-la plus petite différence de phase possible entre deux états est donc  $\frac{a}{s}$ .

-La phase est définie sur  $\mathbb{R}$  tout entier. Cependant, si l'on ne définit la phase que sur les  $U_n$  modulo  $a$ , ce qui sera le cas implicitement à la section 2.2, les  $U_n$  modulo  $a$  étant invariant sous l'action de  $G_2$ , la phase n'est plus définie que modulo  $a$ .

Finalement, d'après ces deux remarques, on démontre qu'il y a exactement  $s$  états ordonnés correspondant aux phases  $0, \frac{a}{s}, \dots, \frac{(s-1)a}{s}$  (j'ai arbitrairement fixé une des phases à 0).

On pourrait déjà représenter schématiquement les configurations d'énergie minimale, à l'aide de ces premières indications ; cependant, nous allons d'abord donner un sens plus physique à la phase ainsi introduite, en la définissant comme un déphasage dans l'espace réel.

## d Définition spatiale de la phase

Dans le cas où le potentiel n'a qu'un seul minimum par période, on numérotera les puits, par un indice  $M$  : l'atome  $n$  sera à la position  $U_n$ , dans le puits  $M_n$ . On supposera alors, de façon systématique, qu'un minimum du potentiel correspond à l'abscisse nulle (ce qui est cohérent avec la note discutant l'éventuelle symétrie  $x \rightarrow -x$ ), et la position des puits  $M$  (ou  $M_n$ ) sera simplement d'abscisse  $Ma$  (ou  $M_na$ ). On se restreindra à ce cas, pour tout ce qui suit.

Comme on le montre dans l'annexe I, la condition de périodicité (5)

$$U_{n+s} = U_n + r.a$$

impose que  $[\frac{U_n}{a}]^+$ , où  $[\ ]^+$  est la fonction partie entière, se comporte très régulièrement ; plus précisément, comme  $[\frac{nl+\alpha}{a}]^+ = [n\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+$ .

On trouve de façon analogue que les  $M_n$  sont égaux à  $[\frac{nl+\alpha}{a}]^+$ , et qu'ils suffisent à caractériser les états fondamentaux. Ce dernier point n'est pas tout à fait correct : on montrera cependant que, lorsque le couplage devient suffisamment faible, ceci est exact ; on en trouvera une démonstration en annexe II, qui utilise le fait qu'en ce cas, les atomes "tombent" dans le fond des puits, supposé convexe. Cependant, ce point est également redémontré, de façon indirecte, lors de l'étude du développement des régimes non-analytiques.

L'étude du fondamental peut être, au moins partiellement, réduite à celle des numéros de puits, donc, à l'étude des suites  $[n\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+$ . On a introduit une nouvelle phase,  $\alpha$ , et on va montrer maintenant que, à un décalage arbitraire près, cette phase  $\alpha$  est égale à la phase  $\varphi$  précédemment introduite.

Examinons d'abord comment les opérateurs  $G_1$  et  $G_2$  agissent sur les suites  $[n\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+$ .

$$\begin{aligned} G_1: U_n &\rightarrow U'_n = U_{n+1} \\ [n\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+ &\mapsto [(n+1)\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+ = [n\zeta + \frac{(\alpha + \zeta a)}{a}]^+ \\ G_2: U_n &\rightarrow U'_n = U_n + a \end{aligned}$$

il s'agit d'une translation d'une longueur du potentiel, donc la numérotation sera simplement translatée de 1, donc :

$$[n\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+ \mapsto [n\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+ + 1 = [n\zeta + \frac{(\alpha + a)}{a}]^+$$

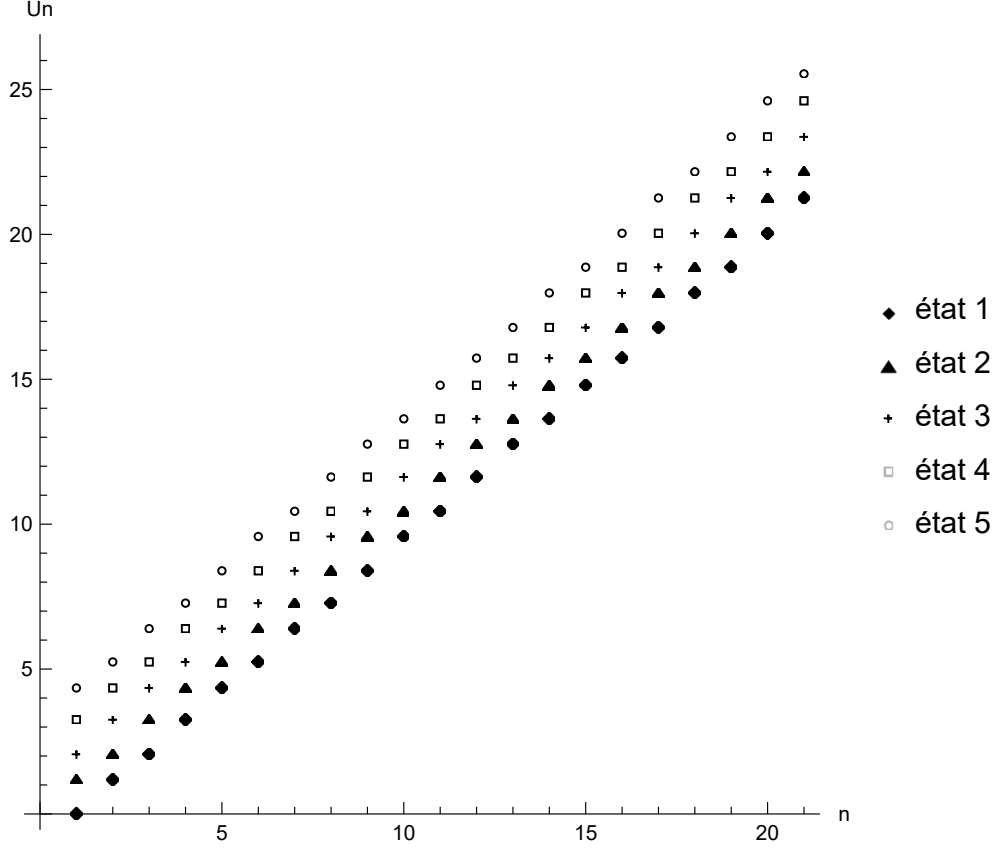


FIGURE 6 – Diagramme des états fondamentaux dans l'espace  $(n, U_n)$ . Les états respectent une structure ordonnée. Ici,  $\frac{R}{S} = \frac{3}{5}$ , donc on trouve cinq états différents.

donc, sous  $G_1$ ,  $\alpha$  devient  $\alpha + \frac{r}{s}a$ , et sous  $G_2$ ,  $\alpha$  devient  $\alpha + a$  : on constate bien que  $\alpha$  se transforme de la même façon que  $\varphi$ . Donc, comme on peut obtenir tous les états fondamentaux en appliquant les opérateurs  $G_1$  et  $G_2$  à un état fondamental donné, et comme les deux phases sont translatées de la même quantité, le décalage entre elles est constant sur l'ensemble des états fondamentaux.

De plus, le déphasage est arbitraire : Tout d'abord, on peut constater que  $\alpha$  est défini à  $\frac{a}{2s}$  près, plus précisément, que, si on impose une phase  $\alpha = \frac{ka}{s}$ ,  $k \in \mathbb{Z}$ , alors toute phase  $\alpha' = \alpha + \frac{\epsilon a}{s}$  avec  $0 \leq \epsilon \leq 1$  est équivalente :

En effet, on a, pour tout  $n \in \mathbb{Z}$ ,

$$\left[ n\zeta + \frac{\alpha}{a} \right]^+ = \left[ n\frac{r}{s} + \frac{ka}{sa} \right]^+ = \left[ \frac{nr + k}{s} \right]^+ = \left[ \frac{nr + k + \epsilon}{s} \right]^+ = \left[ n\zeta + \frac{\alpha'}{a} \right]^+$$

On peut donc librement imposer que  $\varphi - \alpha$  prenne ses valeurs dans  $\frac{a}{s}\mathbb{Z}$ . Une valeur particulière du déphasage correspond à un positionnement particulier de la numérotation des puits (et donc de celle des atomes, à peu de chose près), par rapport à l'axe.

On peut par exemple imposer  $\varphi = \alpha$ . Grâce à l'équivalence entre  $\varphi$  et  $\alpha$ , on a donné une signification physique plus grande, à la phase : un déphasage  $\delta\varphi$  entre deux états signifie que l'un se situe au dessus de l'autre dans une représentation dans l'espace  $(n, U_n)$ . Et bien sûr, un déphasage de  $a$  signifie que l'on a fait une translation de  $a$ , donc, comme on s'intéressera aux  $U_n$  modulo  $a$ , on retrouve le même état.

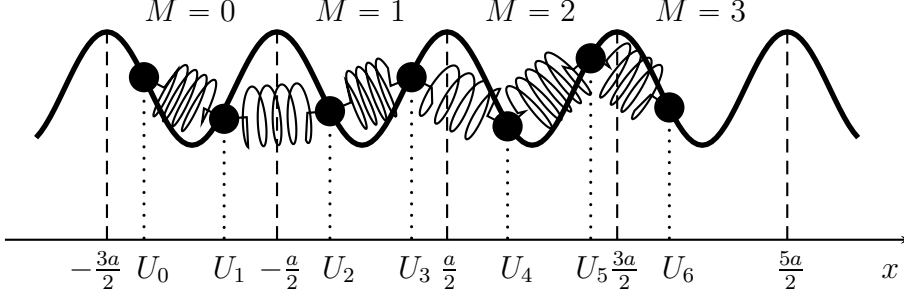


FIGURE 7 – Configuration des atomes suivant la prescription du texte : le puits dans lequel se trouve chaque atome est entièrement déterminé par ces conditions.

On a une représentation schématique des états, pour un rapport donné, grâce à cette classification. Elle ne donne pas le détail de la structure, mais précise l'allure générale, et la position relative de chaque état (voir figure 6).

## e Exemple

On présente ici un exemple, uniquement destiné à montrer les rapports entre les diverses définitions de la phase, et la façon dont les numéros de puits peuvent caractériser les états. Cette section n'éclaire pas le sujet par l'apport de notions nouvelles, et peut être omise en première lecture.

On prendra  $\zeta = \frac{4}{7}$  et on cherchera la solution pour  $\varphi = \alpha = 0$ . On a donc :

$$\begin{array}{cccccccc}
 M_0 = [0]^+, & M_1 = [\frac{4}{7}]^+, & M_2 = [\frac{8}{7}]^+, & M_3 = [\frac{12}{7}]^+, & M_4 = [\frac{16}{7}]^+, & M_5 = [\frac{20}{7}]^+, & M_6 = [\frac{24}{7}]^+ \\
 = 0 & = 0 & = 1 & = 1 & = 2 & = 2 & = 3
 \end{array}$$

avec la condition  $U_0 + \dots + U_6 = 0$ . On impose qu'un minimum passe par  $x = 0$ . Les atomes se positionnent alors comme cela est montré sur la figure 7.

En effet, si on translate l'axe de  $+a$ , on obtient :

$$\begin{aligned}
 U_0, U_1 &\in \left[-\frac{5a}{2}, -\frac{3a}{2}\right] \\
 U_2, U_3 &\in \left[-\frac{3a}{2}, -\frac{a}{2}\right] \\
 U_4, U_5 &\in \left[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right] \\
 U_6 &\in \left[\frac{a}{2}, \frac{3a}{2}\right]
 \end{aligned}$$

d'où  $U_0 + \dots + U_6 \leq -3a - a + a + \frac{3a}{2} = -\frac{3a}{2}$  : impossible.

Et si l'on translate de  $-a$ , on obtient :

$$\begin{aligned}
 U_0, U_1 &\in \left[-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right] \\
 U_2, U_3 &\in \left[\frac{a}{2}, \frac{3a}{2}\right] \\
 U_4, U_5 &\in \left[\frac{3a}{2}, \frac{5a}{2}\right] \\
 U_6 &\in \left[\frac{5a}{2}, \frac{7a}{2}\right]
 \end{aligned}$$

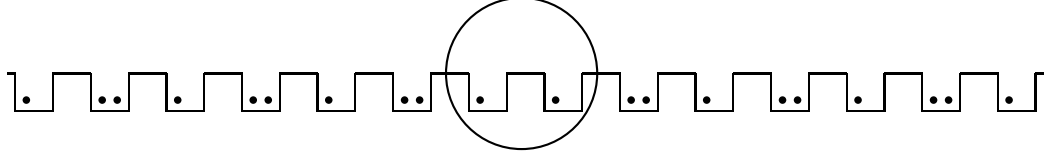


FIGURE 8 – Exemple de défaut de structure. Ici, la structure fondamentale correspond au rapport  $\frac{R}{S} = \frac{2}{3}$ , et le défaut de phase apparaît très clairement.

d'où  $U_0 + \dots + U_6 \geq -a + a + 3a + \frac{5a}{2} = \frac{11a}{2}$  : impossible.

## f Défauts de phase. Base de défauts

On va étudier maintenant les défauts de structure des états fondamentaux commensurables.

On cherche à décomposer les excitations sur une base d'excitations élémentaires irréductibles. Bien sûr, on espère que ces excitations élémentaires seront bien localisées et engendrées par des défauts ; aussi, pour que cette notion ait un sens, on analysera par ailleurs leur portée et leur stabilité.

Pour engendrer un défaut de structure, on peut perturber un état fondamental localement ; puis, on le laisse relaxer : on l'appellera alors excitation de première espèce. Cependant, il peut être infiniment proche d'un état fondamental.

Par contre, si l'on prend une configuration, qui est asymptotique à deux états fondamentaux différents (l'un quand  $n \rightarrow -\infty$ , l'autre quand  $n \rightarrow +\infty$ ), la structure ne pourra pas relaxer vers un état fondamental, car il faudrait déplacer un nombre infini d'atomes, donc franchir une barrière énergétique infinie pour éliminer le défaut (figure 8).

On va alors caractériser une base d'excitations d'énergie minimale et irréductibles : la plus petite excitation de base sera constituée par une configuration asymptotique à deux états fondamentaux voisins, c'est-à-dire déphasés l'un par rapport à l'autre de  $\delta\varphi = \pm\frac{a}{s}$ . Dans le cas simple où il n'y a qu'un seul puits par période, on peut utiliser le formalisme développé dans la section précédente : pour la construire, on met les atomes suivant un des états, qui est caractérisé par des numéros de puits  $M_n = [n\zeta + \frac{a}{a}]^+$ , pour  $n < n_o$ , puis on passe brutalement à l'autre état, qui est donc caractérisé par des numéros de puits  $M_n = [n\zeta + \frac{a}{a} \pm \frac{1}{s}]^+$ , pour  $n \geq n_o$ . Cette excitation va relaxer vers une structure métastable, qui est clairement irréductible, et asymptotique en  $-\infty$  à l'un des états fondamentaux et en  $+\infty$  à l'autre état fondamental (voir annexe I). On appelle cette structure localisée, engendrée par un défaut de structure, discommensuration. Suivant le signe du déphasage, on distingue une discommensuration avance ou retard. Cette discommensuration sera caractérisée par un défaut de phase  $\delta\varphi_{n_o}$  localisé au site  $n_o$ . On obtient bien une base de défauts ; en particulier, on peut exprimer les excitations de la première espèce (perturbation d'un état fondamental) dans cette base. On dira que le système, lorsqu'il accepte ainsi la création de défauts localisés stables, est défectible. Aussi, les systèmes commensurables sont-ils tous défectibles.

On démontre, de façon indirecte, lors de l'étude du développement des régimes non-analytiques, bien qu'elle ne concerne à priori que les systèmes incommensurables,



que les discommensurations tendent de façon exponentielle vers les états fondamentaux auxquelles elles sont asymptotiques, à condition que les atomes tombent dans les parties strictement convexes des puits de potentiel.

On peut alors décrire la dynamique des plus basses excitations en termes de défauts : on peut, à une structure de base, caractérisée par  $[n\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+$ , ajouter un certain nombre de défauts de phase,  $\delta\alpha_1, \delta\alpha_5, \delta\alpha_m, \delta\alpha_n, \dots$ , sans toutefois que la concentration soit trop importante, car, les défauts ayant une certaine extension, il ne faut pas qu'ils se recouvrent pour qu'on puisse les considérer comme indépendants.

## g Energie de Peierls-Nabarro

Lorsque l'on introduit un défaut élémentaire dans une structure commensurable, le système ne peut relaxer vers un état fondamental sans apport d'énergie. On définit l'énergie de Peierls-Nabarro comme l'énergie minimale qu'il faut dépenser pour passer d'un état fondamental (ou métastable) à un autre. On la notera  $E^{PN}$ .

Pour un potentiel de paraboles raccordées, on trouve exactement<sup>(22)</sup> :

$$E^{PN} = \frac{1}{2} \frac{a^2}{\sqrt{4\ell^3 + \ell^2}} \left( \frac{1 + \eta^s}{1 - \eta^s} \right)^s$$

avec

$$\eta = 1 + \frac{1}{2\ell} - \frac{\sqrt{\ell + \frac{1}{4}}}{\ell}$$

## h Fonction enveloppe

Nous allons maintenant introduire la fonction enveloppe pour les systèmes commensurables : On peut décrire les états fondamentaux de la façon suivante : Soit un état  $U_n$ , on introduit :

$$\begin{aligned} M_n &= \left[ \frac{U_n}{a} \right]^+ \\ \bar{U}_n &= U_n \text{ modulo } a \end{aligned}$$

$U_n$  est bien décrit par le couple  $(M_n, \bar{U}_n)$ .

L'étude précédente ne concerne que la structure de la suite  $M_n$ , qui est quasi-périodique : nous avons défini une phase  $\varphi$  et montré que cette suite est du type  $M_n = \left[ \frac{nl + \alpha}{a} \right]^+$ . Nous avons également montré que les plus basses excitations s'obtiennent en introduisant une petite densité de défauts de phase localisés.

On va maintenant s'intéresser à la suite  $(\bar{U}_n)$ . On montre (cf S. Aubry<sup>(21)</sup>, annexe I) que  $\bar{U}_n$  ne dépend que de  $nl$  modulo  $a$  (et non de  $n$ ). On peut alors définir une "fonction"  $f$ , sur  $0, \frac{a}{s}, \dots, \frac{(s-1)a}{s}$  par :

$$\bar{U}_n = f(\bar{nl})$$

où je note dorénavant modulo  $a$  par une barre conventionnelle. On voit que le premier déphasage  $G_1$  correspond à un changement de  $l$ .

Si on généralise la fonction  $f$  par  $f(x + a) = f(x) + a$ , elle est définie sur  $\frac{a}{s}\mathbb{Z}$  et on a :

$$\forall n \in \mathbb{Z}, U_n = f(nl) \tag{6}$$

En effet, supposons  $\alpha = 0$ , pour simplifier,

$$\begin{aligned} U_n &= \bar{U}_n + aM_n \\ &= \bar{U}_n + a[n\zeta]^+ \\ &= f(\bar{n}\zeta + [a\zeta]^+) \\ &= f(nl) \end{aligned}$$

Mais d'autre part, à un déphasage  $\delta$  près,  $f$  sera identique pour deux états : on passe de l'un à l'autre en faisant agir  $G_1$  et  $G_2$  sur  $[n\zeta]^+$ , et ceci conduit simplement à un déphasage de  $\frac{ka}{s}$ . Donc, il existe une fonction enveloppe unique  $f_{\frac{r}{s}}$ , pour une valeur du couplage  $g$  donnée, telle que tous les états s'écrivent :

$$U_n = f(nl + \alpha) \tag{7}$$

où  $\alpha$  est la phase de l'état (par rapport à un état de référence choisi).

Par construction, les symétries  $G_1$  et  $G_2$  agissent sur les états fondamentaux en induisant un déphasage de la phase  $\alpha$ , qui est dans l'argument de  $f$  : à  $G_1$  correspond un déphasage de  $l = \frac{r}{s}a$ , à  $G_2$  un déphasage de  $a$ .

On peut prolonger la fonction  $f$  sur  $\mathbb{R}$  tout entier : en effet, si l'on ajoute à l'argument de  $f$  un déphasage irrationnel quelconque, alors on peut décomposer ce déphasage en un déphasage  $\frac{ka}{a}$  et un déphasage  $\frac{\epsilon a}{s}$  avec  $0 \leq \epsilon < 1$ . Alors, en s'inspirant de la remarque de la section 1.4, où l'on exprime que la phase  $\alpha$  est définie à  $\frac{a}{2\pi}$  près, on constate que le premier déphasage correspond à un changement de l'état fondamental de référence, tandis que le second laisse les états invariants.

Donc,  $f$  sera constante sur des plateaux de largeur  $\frac{a}{s}$ .

Enfin, on vérifie que  $f$  est croissante (cf annexe I) et, par construction, vérifie la relation :

$$f(x + a) = f(x) + a \tag{8}$$

## i Construction des états incommensurables

Nous allons maintenant construire les états incommensurables, puis montrer que la phase et la fonction enveloppe peuvent être encore définies, par leur limite, quand le rapport  $\frac{r}{s}$  tend vers  $\zeta$  incommensurable, pour ces états.

La formule  $[n\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+$  peut être généralisée à toute configuration obtenue comme limite, quand  $\zeta$  varie, de configurations commensurables<sup>(21)</sup> (voir annexe I).

Soit donc  $\zeta = \frac{r}{s}$  comme précédemment, et  $\zeta'$  quelconque. On se place dans un régime défectible.

Les numéros de puits  $[n\zeta' + \frac{\alpha'}{a}]^+$  peuvent être interprétés comme la suite  $[n\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+$  où l'on aura introduit une distribution (nécessairement infinie) de défauts de phase,  $\delta\varphi_n$ , pour obtenir une identité. Or, on démontre (cf F. Vallet, thèse de doctorat<sup>(19)</sup>) qu'il suffit d'une densité de déphasage finie, et égale à  $|\zeta' - \zeta|$ .

### $\alpha$ Choix d'un approximant diophantien

On a donc construit une structure incommensurable, en introduisant une simple distribution de défauts à une structure commensurable donnée. Cette distribution n'est

pas du tout unique. Et de plus, elle ne sera intéressante que si, au fur et à mesure que l'on insère les défauts, les quantités physiques, comme l'énergie ou la position des atomes, convergent. Lorsqu'on insère plus d'un défaut par période, le second défaut "voit" une structure déjà modifiée, donc il possède une énergie supérieure au premier. Aussi est-il préférable d'interdire plus d'un défaut par période.

Or, la densité de déphasage vaut ici  $|\zeta - \frac{r}{s}|$ , et comme on l'a vu, chaque défaut correspond à un déphasage de  $\frac{1}{s}$ , donc, il y a  $s|\zeta - \frac{r}{s}|$  défauts par site, donc  $s^2|\zeta - \frac{r}{s}|$  défauts par période, et on imposera finalement :

$$|\zeta - \frac{r}{s}| < \frac{1}{s^2} \quad (9)$$

Cette condition est exactement réalisée par les approximations diophantiennes de  $\zeta$ . Aussi est-on naturellement conduit à construire les états incommensurables en suivant récursivement les approximations diophantiennes  $\zeta_n$  de  $\zeta$ , et en introduisant à chaque ordre de récurrence les défauts qui permettent de passer d'une structure de rapport  $\zeta_n$  à une structure de rapport  $\zeta_{n+1}$ .

### $\beta$ Exemple de construction

A tout rapport  $\zeta$  est associé une structure incommensurable  $A$ . Je reprends rapidement la méthode de Farey<sup>(23)</sup>, qui permet de construire une structure incommensurable quelconque  $A$  à partir des approximations successives de  $\zeta$ .

On représente les diverses structures par une suite infinie  $\sigma_i$  de 0 et de 1. Pour le cas d'un potentiel à un puits par période, on prend pour le fondamental  $\sigma_i = M_{i+1} - M_i$  (C'est bien une variable à valeurs dans 0, 1, voir section 8.2 dans l'annexe VIII, ou encore l'annexe I).

Soit  $\zeta \in [0, 1]$ ; on construit d'abord des structures périodiques  $A_n$  et  $B_n$ , où l'on ne représente qu'une seule période, associées aux rapports  $a_n = r_n/s_n$  et  $b_n = p_n/q_n$ , de telle sorte que, quand  $n$  tend vers l'infini,  $a_n$  et  $b_n$  tendent vers  $\zeta$  et que les structures  $A_n$  et  $B_n$  tendent vers une structure incommensurable  $A$  correspondant au rapport  $\zeta$ .

On définit les suites  $(a_n, b_n)$  de rationnels et  $(A_n, B_n)$  les structures qui les représentent par récurrence :

On représente le rapport  $a_0 = \frac{0}{1}$  par la structure  $A_0 = '0'$  et  $b_0 = \frac{1}{1}$  par la structure  $B_0 = '1'$ . Soient  $(a_n, b_n)$  et  $(A_n, B_n)$  déjà construits, soit

$$x = \frac{r_n + p_n}{s_n + q_n}$$

Si  $x > \zeta$ , on pose  $a_{n+1} = a_n$  et  $b_{n+1} = x$  et  $A_{n+1} = A_n$  et  $B_{n+1}$  est la concaténation de  $A_n$  et  $B_n$ <sup>3</sup>.

Si  $x \leq \zeta$ , on pose  $a_{n+1} = x$  et  $b_{n+1} = b_n$  et  $A_{n+1}$  est la concaténation de  $A_n$  et  $B_n$  et  $B_{n+1} = B_n$ .

Les suites  $(a_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  et  $(b_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  convergent vers  $\zeta$ . Ce sont les approximations diophantiennes de  $\zeta$ , ils possèdent de nombreuses propriétés, par exemple  $p_n s_n - q_n r_n = 1$ , ou encore la propriété (9). La suite  $(A_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  est obtenue de façon univoque à partir de  $(a_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  (et  $(B_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  de  $(b_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ ); et elles convergent vers une

---

3. Il faut adopter un ordre systématique, par exemple ' $A_n$ ' ' $B_n$ ' comme on le voit sur l'exemple suivant

structure  $A$  infinie : ce procédé fournit une représentation exacte d'une structure unidimensionnelle.

A chaque étape,  $A_{n+1}$  (resp.  $B_{n+1}$ ) est donc, soit égal à  $A_n$  (resp.  $B_n$ ), soit formé par une juxtaposition de  $A_{n-1}$  et  $A_n$  (resp.  $B_{n-1}$  et  $B_n$ ). Les défauts que l'on introduit à cet ordre  $n + 1$ , et au delà, ne détruiront plus les structures  $A_{n-1}, A_{n-2}, \dots, A_0$  (resp.  $B_{n-1}, B_{n-2}, \dots, B_0$ ) que l'on retrouve dans les structures suivantes; ils consistent seulement en des insertions de blocs  $A_{n-1}$  entre des blocs  $A_n$  (resp.  $B_{n-1}$  entre des blocs  $B_n$ ). Aussi, les défauts, à l'ordre  $n + 1$ , sont éloignés d'au moins la taille des blocs  $A_n$  ou  $B_n$ , qui augmente avec  $n$ . Autrement dit, les défauts que l'on insère seront de plus en plus éloignés.

Prenons par exemple  $\zeta = \frac{1}{\sqrt{2}}$ . On a alors :

$$\begin{array}{ll}
 a_0 = \frac{0}{1} & b_0 = \frac{1}{1} \\
 A_0 = '0' & B_0 = '1' \\
 a_1 = \frac{1}{2} & b_1 = \frac{1}{1} \\
 A_1 = '01' & B_1 = '1' \\
 a_2 = \frac{2}{3} & b_2 = \frac{1}{1} \\
 A_2 = '011' & B_2 = '1' \\
 a_3 = \frac{2}{3} & b_3 = \frac{3}{4} \\
 A_3 = '011' & B_3 = '0111' \\
 a_4 = \frac{2}{3} & b_4 = \frac{5}{7} \\
 A_4 = '011' & B_4 = '0110111' \\
 a_5 = \frac{7}{10} & b_5 = \frac{5}{7} \\
 A_5 = '0110110111' & B_5 = '0110111' \\
 a_6 = \frac{12}{17} & b_6 = \frac{5}{7} \\
 A_6 = '01101101110110111' & B_6 = '0110111' \\
 & b_7 = \frac{17}{24} \\
 & B_7 = '01101101110110110111' \\
 & \dots
 \end{array}$$

Cette construction n'est valable que si la somme des contributions des défauts est convergente. Pour un potentiel avec un seul minimum par puits, d'une chaîne de Frenkel & Kontorowa, si l'on place de force ( $\ell$  nul) tous les atomes dans les minima des puits, leur position sera  $aM_n$ , et la décomposition en défauts sera valable formellement. Pour un couplage donné, suffisamment petit, tel que les atomes restent dans le fond des puits (voir annexe II), on montre que les contributions des défauts sont convergentes, et qu'ils ne se recouvrent pratiquement pas. Cela correspond à la défectibilité des systèmes incommensurables (cf partie suivante).

## $\gamma$ Base canonique de défauts pour construire les états incommensurables

On peut maintenant définir une famille de défauts, qui permette d'engendrer n'importe quel état incommensurable : on prend l'ensemble des bases de défauts correspondant à chaque structure commensurable. Si on impose de construire les états incommensurables à partir des approximants diophantiens de  $\zeta$ , de la façon présentée au paragraphe ci-dessus, qui est univoque, on trouve une décomposition unique dans cette famille, donc on aura bien défini une base de défauts. Par contre, si l'on n'impose pas de condition (c'est-à-dire de façon de construire les états), cette famille ne constitue pas une base, puisque l'on peut évidemment décomposer les états incommensurables de multiples manières : chacune des bases de défauts correspondant à un  $\frac{r}{s}$ , dont on a pris l'union, suffit à engendrer les états incommensurables, comme on l'a vu au début de la section 1.9 . Cette base-ci est fondamentale, car ainsi, chaque état est décomposé de manière intrinsèque.

De plus, on peut également caractériser les états excités de façon unique dans cette base : il suffit de procéder de façon minimale : On traite l'état considéré comme un état fondamental jusqu'à l'ordre le plus petit possible. Les énergies des défauts à cet ordre de commensurabilité seront justement caractéristiques de l'énergie d'excitation de cet état.

Certains détails techniques et les démonstrations sont analysés dans la thèse de F.Vallet<sup>(19)</sup>.

## 2 Description des états incommensurables

Toute l'étude des états commensurables nous a permis de construire les états de phase incommensurable et va nous servir à analyser leurs propriétés. Nous allons voir que l'on peut étendre les notions de fonction enveloppe, de phase. Par contre, les défauts ne subsistent que pour les faibles couplages, dans le régime dit non-analytique, tandis que les excitations du système à fort couplage sont décrites en termes de phonons étendus.

### a Définition d'une fonction enveloppe

Intéressons-nous tout d'abord à la fonction enveloppe. On montre dans l'annexe I qu'elle admet une limite. Il en existe plusieurs déterminations selon que l'on prend la limite continue à gauche, ou continue à droite, etc.

Les propriétés suivantes établies pour les fonctions enveloppe des systèmes commensurables restent vraies, par passage à la limite :  $f$  est croissante et vérifie la relation (6) :

$$f(x + a) = f(x) + a$$

où  $a$  est toujours la période du potentiel.

La fonction enveloppe d'un état commensurable est définie de façon unique pour tous les états d'un même rapport  $\frac{r}{s}$  (et pour un couplage  $\ell$  donné) à une phase  $\varphi$  près. Nous allons voir que de même, il existe une phase  $\tilde{\alpha}$  qui permet de décrire les états incommensurables, et la fonction enveloppe incommensurable est unique, au déphasage  $\tilde{\alpha}$  près, pour  $\zeta$  et  $g$  fixés : les états sont encore ordonnés.

## b Définition d'une phase

Soit une phase  $\tilde{\alpha}$ , et un rapport incommensurable  $\zeta$ , fixés.

Pour tout rapport de commensurabilité  $\frac{r}{s}$ , on peut définir

$$U_n = f_{\frac{r}{s}}(nl + \tilde{\alpha})$$

où  $f_{\frac{r}{s}}$  est la fonction enveloppe correspondant à un état de référence. Soit  $\tilde{\alpha} = k\frac{ra}{s} + \frac{\epsilon a}{s}$  avec  $0 \leq \epsilon < 1$ , on a bien sûr

$$U_n = f_{\frac{r}{s}}(nl + \frac{kr}{s}a)$$

$U_n$  est un état fondamental de commensurabilité  $\frac{r}{s}$  et tend vers un état de rapport incommensurable  $\zeta$  quand  $s \rightarrow \infty$  (cf annexe I).

La phase  $\varphi$ , définie comme à la section 1.3 pour chaque  $U_n = f_{\frac{r}{s}}(nl + \tilde{\alpha})$ , admet une limite qui vaut  $\tilde{\alpha}$ , quand  $s$  tend vers  $+\infty$ . Cela se voit directement à partir de la définition spatiale de la phase. On a en effet, pour tout rapport  $\frac{r}{s}$ , soit  $\alpha = k\frac{ra}{s}$  la phase de l'état commensurable, elle vérifie :

$$|\tilde{\alpha} - \alpha| < \frac{a}{s}$$

ce qui montre bien que  $\varphi$ , ou plutôt  $\alpha$  qui est équivalente, tend vers  $\tilde{\alpha}$ .

On peut également trouver la limite de  $\varphi$  à partir de la définition algébrique donnée à la section 1.3, ce qui prouvera qu'on peut généraliser cette définition aux états incommensurables. Pour tout rapport commensurable  $\frac{r}{s}$ ,  $\varphi$  s'écrit :

$$\begin{aligned} \varphi &= \frac{1}{s} \sum_{n=0}^{s-1} U_n \\ &= \frac{1}{s} \sum_{n=0}^{s-1} f_{\frac{r}{s}}(nl + \tilde{\alpha}) \\ &= \frac{1}{s} \sum_{n=0}^{s-1} f_{\frac{r}{s}}\left(\frac{nr \text{ modulo } s}{s}a + \tilde{\alpha}\right) \end{aligned}$$

$r$  et  $s$  étant premiers entre eux, la fonction  $\mathbb{Z}/s\mathbb{Z} \rightarrow \mathbb{Z}/s\mathbb{Z}$ :  $n \mapsto rn$  est bijective, donc, en renumérotant, on trouve

$$= \frac{1}{s} \sum_{n=0}^{s-1} f_{\frac{r}{s}}\left(\frac{na}{s} + \tilde{\alpha}\right)$$

$f_{\frac{r}{s}}$  tend vers la fonction enveloppe  $f$  croissante, donc réglée,

et d'après les théorèmes sur les sommes de Riemann, on trouve une limite<sup>4</sup>

$$\begin{aligned} \varphi &= \frac{1}{a} \int_0^a f(x + \tilde{\alpha})dx \\ &= \frac{1}{a} \int_0^a f(x)dx + \tilde{\alpha} \end{aligned}$$

À un déphasage près, qui dépend uniquement de l'état de référence, la phase admet bien la même limite. Et l'état fondamental incommensurable obtenu comme limite vérifie la relation (7) :

$$U_n = f(nl + \tilde{\alpha})$$

En particulier, les symétries  $G_1$  et  $G_2$  agissent toujours sur les états fondamentaux en induisant un déphasage de  $l$  et  $a$ . L'énergie des états fondamentaux incommensurables est dégénérée par rapport à tout déphasage du type  $nl + ma$ ,  $(n, m) \in \mathbb{Z}$ . Cette propriété s'étend à n'importe quel déphasage réel, et l'espace des états fondamentaux est dégénéré par rapport à la phase<sup>5</sup>.

### c Existence de deux régimes

Nous allons enfin discuter l'existence et la stabilité éventuelle de défauts (et en particulier de défauts de phase) dans les systèmes incommensurables, donc la défectibilité de tels systèmes. Pour cela, nous pouvons maintenant analyser plus en détail les états fondamentaux de ces systèmes. Nous allons montrer qu'ils possèdent des propriétés particulières.

La fonction enveloppe est analytique, quand le couplage  $\ell$  est assez grand; par contre,  $f$  devient discontinue quand le couplage diminue. Cela a d'abord été vérifié numériquement (cf la thèse de P.Y. Le Daeron<sup>(24)</sup>). Le présent travail en donnera une base plus analytique.

On définit donc ainsi deux régimes, comme je l'ai annoncé en introduction; une zone analytique, où  $f$  est analytique, une zone non-analytique, où  $f$  est non-analytique c'est-à-dire totalement discontinue, sans partie continue non triviale, (plus précisément, comme une fonction en marche d'escalier avec un nombre dénombrable de discontinuités).

Entre ces deux régimes, on observe une transition dite transition par brisure d'analyticité, et on définit un couplage critique  $\ell_c$ .

On va montrer que le système ne reste défectible que dans le régime non-analytique. Par contre, dans le régime analytique, la dégénérescence continue par rapport à la phase  $\varphi$ , va entraîner la création de modes glissants, qui s'opposeront à l'accrochage spontané du système au réseau, et donc à l'existence de défauts localisés.

**Tout ceci est aussi bien vrai pour le modèle de Holstein-Peierls.** Mais, nous continuerons à étudier en détail les états fondamentaux pour le modèle de Frenkel & Kontorowa.

### d Équation fonctionnelle de stationnarité

Nous allons tout d'abord dériver les équations de stationnarité qui nous permettront de faire l'étude des états fondamentaux du modèle de Frenkel & Kontorowa. Les états fondamentaux des systèmes incommensurables vérifient l'équation (7) :

$$U_n = f(nl + \alpha)$$

avec une phase  $\alpha$  arbitraire. Si l'on substitue dans l'équation (4), on trouve

$$\frac{\partial L}{\partial x} \left( f(nl + \alpha), f(nl + l + \alpha) \right) + \frac{\partial L}{\partial y} \left( f(nl - l + \alpha), f(nl + \alpha) \right) = 0$$

---

5. On en trouvera une démonstration à l'annexe IV. Cette propriété découle directement de ce que l'on peut construire les états fondamentaux incommensurables comme une limite d'états commensurables.

d'où finalement une équation

$$\frac{\partial L}{\partial x}(f(x), f(x+l)) + \frac{\partial L}{\partial y}(f(x-l), f(x)) = 0 \quad (10)$$

qui est d'abord vérifiée, d'après la précédente, sur tous les éléments de  $pl + qa + \alpha$ , et donc, par densité, sur  $\mathbb{R}$  tout entier lorsque l'on prend la détermination continue à gauche (ou à droite, etc). On en trouvera une autre justification dans l'annexe IV.

On se restreint au cas  $L(U_n, U_{n+1}) = \ell W(U_{n+1} - U_n) + V(U_n)$  où l'énergie est la somme d'un terme élastique et d'un terme de potentiel  $a$ -périodique. L'équation (10) devient :

$$-\ell W'(f(x+l) - f(x)) + \ell W'(f(x) - f(x-l)) + V'(f(x)) = 0 \quad (11)$$

Cette équation n'est valable que pour les états fondamentaux : la fonction enveloppe n'est pas définie pour tous les états métastables.

Nous allons maintenant pouvoir étudier plus en détail les états fondamentaux dans les différents régimes du couplage.

## e Régime analytique

Réolvons d'abord rapidement le système à couplage infini.

### $\alpha$ Étude à couplage strictement infini

Le système est alors purement cristallin. Il est infiniment rigide<sup>6</sup>.

Pour un potentiel élastique ordinaire :  $W(x) = \frac{1}{2}x^2$ , quand le couplage est strictement infini, l'équation (11) devient :

$$f(x+l) + f(x-l) - 2f(x) = 0$$

que l'on peut encore écrire :

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad f(x+nl) - f(x+(n-1)l) - f(x) + f(x-l) = 0$$

puis encore :

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad f(x+nl) - f(x) - f(x) + f(x-nl) = 0$$

et finalement

$$\forall n, m \in \mathbb{Z}, \quad f(x+nl+ma) - 2f(x) + f(x-nl-ma) = 0$$

On peut faire tendre  $nl + ma$  vers zéro, et comme  $f$  est analytique, on trouve que  $f'' = 0$ . Donc,  $f$  s'écrit  $f(x) = Cx + \delta$ , et  $C = 1$ , à cause de la relation (8), ce que l'on aurait bien sûr trouvé directement en considérant les équations discrètes :

$$U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n = 0$$

---

6. Ce dernier point est entièrement cohérent avec les différentes propriétés connues du régime analytique, puisque comme je le signale à la fin de ce chapitre, la rigidité décroît jusqu'à s'annuler à la transition (cependant que le système sera accroché par les défauts en deçà). De même, pour le modèle de Holstein-Peierls, les atomes sont fixes à couplage infini (cependant que peuvent se propager des phonons sous forme d'ondes planes indépendantes).



## $\beta$ Invariance par translation : boson de Goldstone

A grand couplage, la fonction enveloppe est analytique. Cela se démontre grâce au théorème de K.A.M. (Kolmogorov, Arnol'd, Moser). Ce théorème est énoncé dans la partie suivante, section 2.1.

Comme on l'a vu, les états fondamentaux sont dégénérés par rapport à la phase. Dans l'annexe IV, on étend cette propriété à tous les états que l'on peut décrire par une fonction enveloppe arbitraire, et, quand on se restreint à ces états, on obtient un modèle où l'énergie est invariante par translation. Cela devrait permettre a priori d'utiliser le théorème de Goldstone et de conclure qu'il existe une phase libre, et donc un phason de fréquence nulle pour n'importe quelle valeur du couplage : les états fondamentaux brisent spontanément la symétrie (l'état uniforme n'est pas même un état physique) et il y a une dégénérescence par rapport à la phase  $\alpha$  introduite précédemment.

Cependant, on montre alors que le phason est simplement décrit par  $f'$ , ce que l'on peut retrouver directement dans le formalisme discret. En effet, on obtient, en dérivant analytiquement l'équation (11) :

$$\begin{aligned} \ell(f'(x) - f(x+l))W''(f(x+l) - f(x)) + \ell(f'(x) - f(x-l))W''(f(x) - f(x-l)) \\ + f'(x)V''(f(x)) = 0 \end{aligned}$$

d'où, en l'appliquant à  $x = nl$

$$\begin{aligned} \ell(f'(nl) - f((n+1)l))W''(U_{n+1} - U_n) + \ell(f'(nl) - f((n-1)l))W''(U_n - U_{n-1}) \\ + f'(nl)V''(U_n) = 0 \end{aligned}$$

Or les phasons sont régis par l'équation des petits mouvements  $\delta_n$  autour d'un état  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ , qui s'écrit (voir annexe IV) :

$$\begin{aligned} \ddot{\delta}_n &= -\delta_n(\ell W''(U_{n+1} - U_n) + \ell W''(U_n - U_{n-1}) + V''(U_n)) \\ &\quad + \ell \delta_{n+1} W''(U_{n+1} - U_n) + \ell \delta_{n-1} W''(U_n - U_{n-1}) \\ &\quad \text{et par ailleurs} \\ &= \omega^2 \delta_n \end{aligned}$$

donc,  $f'(nl)$  est bien un phason de masse nulle.

Aussi, le théorème de Goldstone ne s'applique que lorsque  $f'$  est bien définie. Or, on montrera bientôt que  $f'$  est une somme de Dirac en deçà de la transition et ce théorème n'est alors pas valable (figure 9).

Dans le régime analytique, on montre finalement que les états fondamentaux sont continûment dégénérés par rapport à la phase  $\varphi$  et que des modes de Goldstone se propagent librement dans l'espace des états fondamentaux. Le spectre de dispersion des phonons présente un "gap" nul. Du coup, des défauts fixes et localisés ne peuvent demeurer stables, et le système est indéfectible : En effet, si l'on décompose n'importe quelle perturbation infinitésimale localisée sur les états propres de la matrice dynamique, la composante sur les phasons de fréquence nulle sera, génériquement, non nulle. Donc, cette perturbation se propagera et ne pourra rester stable. C'est vrai pour presque<sup>7</sup> toutes les excitations infinitésimales, et donc, à fortiori, ça reste vrai pour les perturbations réelles finies.

---

7. au sens mathématique d'une mesure nulle.

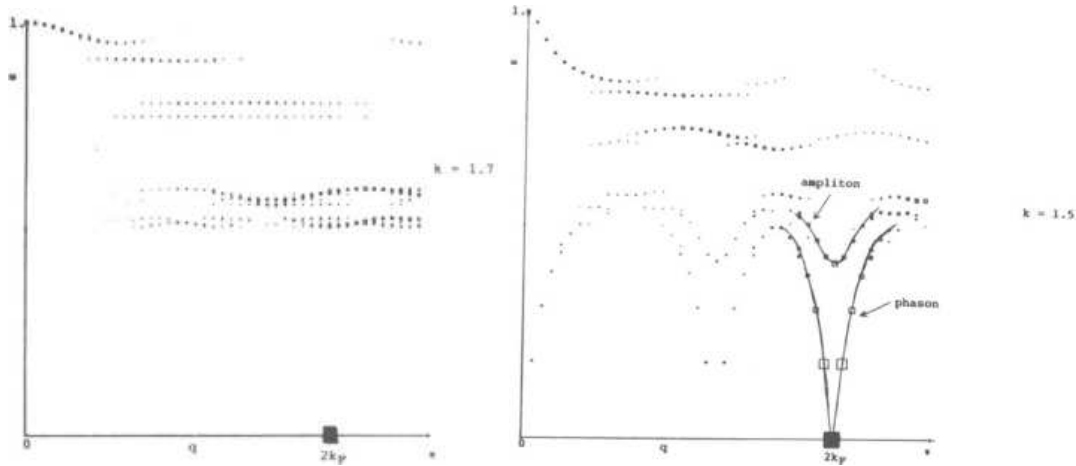


FIGURE 9 – Courbes simulées des relations de dispersion des phasons et des amplitons, pour le régime non-analytique (à gauche) et analytique (à droite) (d’après [4]). On voit apparaître un “gap” nul dans le régime analytique.

On prouve également, dans l’annexe IV, que les phasons de masse nulle sont découplés entre eux, aux premiers ordres de l’énergie<sup>8</sup>. Donc, les états fondamentaux seront constitués par une superposition aléatoire de modes mous. Cela évoque fortement le caractère aléatoire des états métastables, dans l’espace réel, que nous allons démontrer dans le régime non-analytique. Le problème de correspondance entre les deux régimes sera rapidement abordé dans la partie sur la dualité. Evidemment, de même que pour un gaz parfait, il faut tenir compte des termes d’interactions plus faibles pour maintenir une dynamique non triviale (sinon, le système s’effondrerait).

### $\gamma$ Transport électrique

Dans ces régimes, peuvent se développer, à priori, des ondes de densité de charge. Malgré l’existence d’une phase libre, ces ondes ne glissent pas sans frottement. Il se crée des phénomènes de vibrations internes résonnantes, qui interdisent le mécanisme de supraconductivité lorsque l’on applique un champ électrique<sup>[25]</sup>.

### $\delta$ Comportement critique

Diverses quantités physiques ont un comportement critique, lorsque l’on approche de la transition : l’extension du vecteur d’onde devient infinie ; le coefficient de friction effectif, quand on ajoute un terme d’amortissement, tend vers zéro. On trouve en fait un terme proportionnel à  $\langle f'^2 \rangle$ , comme pour la valeur moyenne de l’élasticité  $\Gamma$ . Autrement dit, la chaîne devient entièrement molle en dessous de la transition (mais elle sera “accrochée” dès que le couplage est inférieur au couplage critique  $\ell_c$ ). On peut également calculer une masse renormalisée,  $m$ , qui diverge à  $\ell_c$ , et du coup, la vitesse de propagation du son, qui est proportionnelle à  $\sqrt{\gamma/m}$ , tend également vers zéro<sup>[4]</sup>.

Toute cette approche n’est donc plus valable en deçà d’un certain couplage  $\ell_c$ , et on s’installe alors dans un régime non-analytique, que nous allons maintenant étudier plus en détail.

8. Le vecteur d’onde de ces modes n’est pas très bien défini : la dispersion autour d’une valeur est très importante, car le système est non-périodique.

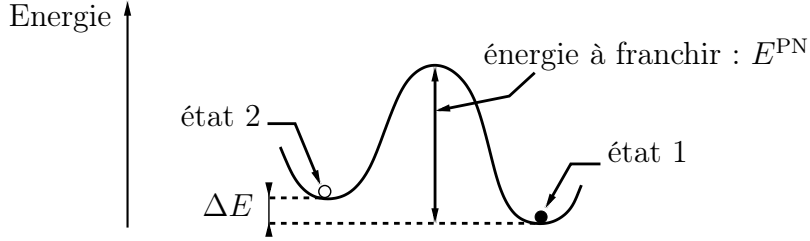


FIGURE 10 – Schéma d’un atome franchissant la barrière de Peierls-Nabarro, selon une représentation abstraite. L’énergie à fournir est indépendante de la différence d’énergie  $\Delta E$  qui existe entre les états.

## f Régime non-analytique

Le régime non-analytique est déficient, à l’inverse du précédent. Nous montrerons que la fonction enveloppe est entièrement discrète, et qu’on peut décrire alors le système par une variable discrète : on décompose les états fondamentaux en défauts que l’on extrait de la fonction enveloppe elle-même.

### $\alpha$ Accrochage au réseau : barrière de Peierls-Nabarro

Les défauts que l’on a introduits pour les systèmes commensurables sont généralement fixes, c’est-à-dire qu’ils ne peuvent pas se déplacer le long de la chaîne. Cette propriété est liée à la discontinuité de la fonction enveloppe.

On va généraliser ces propriétés aux états incommensurables dans le régime non-analytique. Ces états sont de nouveau accrochés, c’est-à-dire qu’un saut de phase même infinitésimal nécessite une dépense d’énergie. C’est la barrière de Peierls-Nabarro, (l’énergie minimale qu’il faut dépenser pour passer d’un état fondamental à un autre, voir figure 10). C’est la limite de l’énergie de Peierls-Nabarro que j’ai introduite pour les états commensurables, lorsque le rapport  $\zeta_n$  tend vers un rapport  $\zeta$  irrationnel.

Ce phénomène<sup>[26]</sup> est très important, et encore trop méconnu dans la littérature, notamment chez les expérimentateurs. Ils ont tendance à interpréter les accrochages au réseau comme une conséquence d’un passage d’un état de rapport commensurable  $\frac{r}{s}$  à un rapport incommensurable  $\zeta$ , ce qui existe certes théoriquement. Ou bien par l’existence d’impuretés aléatoirement distribuées. Mais, ceci donne souvent des schémas expérimentalement incohérents<sup>[8]</sup>, et il serait plus profond d’expliquer les expériences par un accrochage incommensurable, tel qu’il a été introduit ici.

On peut facilement interpréter ce phénomène d’ancrage au réseau, par une description physique simple : comme on le reverra par la suite, les atomes, pour un état fondamental, et quand le couplage est assez petit, “tombent” au fond des puits de potentiel ; de plus, dans le régime non-analytique, comme je l’ai déjà annoncé, les numéros  $M_n$  du puits dans lequel ils sont caractérisent entièrement les états (cf annexe II). Donc, pour passer d’un état fondamental à un autre, il faudra nécessairement qu’un atome “gravisse” un sommet du potentiel, et cela coûtera une certaine énergie. Ce qui montre dans ces conditions l’existence d’une barrière de Peierls-Nabarro.

On a seulement démontré qu’il faudrait franchir une barrière énergétique pour passer d’un état métastable à un autre, mais cela ne prouve pas pour autant que n’importe

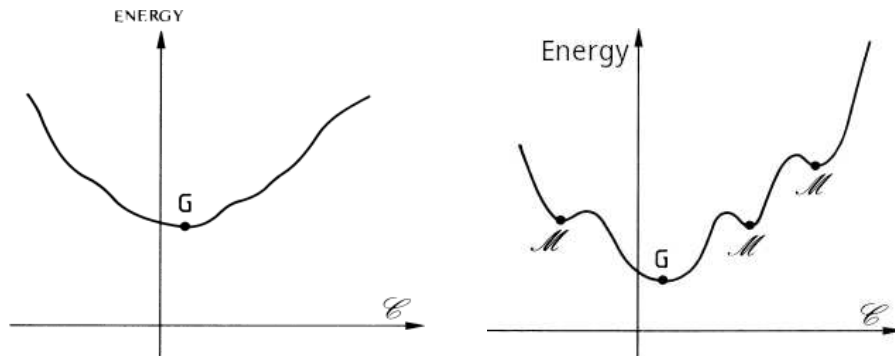


FIGURE 11 – Diagrammes de phases d’un système indéfectible (à gauche) et d’un système défectible (à droite), dans une représentation abstraite. Les états métastables sont bloqués par une barrière de Peierls-Nabarro dans le cas défectible.

quelle configuration  $(M_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  soit possible. On vérifiera l’existence de tous ces états dans la partie suivante, et on en déduira que les systèmes à petit couplage sont défectibles, c’est-à-dire, par définition, qu’il existe divers états métastables asymptotiques, séparés par des barrières de Peiers-Nabarro, et non un état fondamental unique (figure 10). Le système accepte la création de défauts localisés, fixes, que l’on interprétera comme des défauts de phase ponctuels (figure 11).

### $\beta$ Étude à couplage strictement nul

Je ne vais pas résoudre le vrai système à couplage nul, car, bien que ceci concerne à priori les états fondamentaux, cette étude sort amplement de ce cadre et nous la ferons lors de l’étude des états métastables par développement autour du couplage nul. Si l’on envisage le système à couplage nul comme la limite des très petits couplages  $\ell$ , et que l’on s’intéresse aux seuls états fondamentaux, il est naturel (et exact) de prendre la limite de l’équation (10) ou (11) quand  $\ell$  tend vers zéro. On trouve alors :

$$V'(f(x)) = 0$$

La fonction enveloppe prend ses valeurs sur l’espace (que l’on supposera fini modulo  $a$ ) des minima du potentiel.

On va d’abord montrer, dans les sections suivantes, qu’on peut récrire les états et les énergies en fonction de variables discrètes  $\sigma_n$  qui varient dans  $0, 1$ , définies à partir des numéros de puits.

### $\gamma$ Décomposition de la fonction enveloppe à petit couplage

Les fonctions enveloppe qui correspondent aux états fondamentaux sont complètement discontinues. Nous allons maintenant donner un sens à cette notion.

Je reprends l’équation (11) sous la forme

$$\ell W'(f(x+l) - f(x)) - \ell W'(f(x) - f(x-l)) = V'(f(x)) \quad (12)$$

On va prendre la partie continue de l’équation.<sup>9</sup>

---

9. On peut décomposer toute fonction en une partie continue, une partie totalement discontinue, et éventuellement une partie singulière continue (cf annexe III).

$W'(f(x+l) - f(x))$  étant  $a$ -périodique, notons que la partie discontinue du terme de gauche est aussi périodique<sup>10</sup>.

Donc sa partie continue est également périodique. Dans la partie continue de (12), le terme de gauche est donc une fonction  $a$ -périodique.

Mais, par ailleurs, la partie de droite de (11) est une fonction croissante sauf en un nombre dénombrable de points. En effet, comme on le montre dans l'annexe II, lorsque le couplage est suffisamment faible, les atomes sont assurés de rester dans les parties convexes de puits et on en déduit le résultat<sup>11</sup>. Donc sa partie continue est une fonction croissante. (En annexe III, on montre en effet que la partie continue d'une fonction croissante est croissante).

Donc, la partie continue de la fonction de droite de l'égalité (11) est croissante, celle de gauche est  $a$ -périodique, elles sont en fait constantes.  $V'$  étant continue, on a<sup>12</sup>  $(V' \circ f)_{\text{cont}} = V' \circ (f_{\text{cont}})$ . Donc  $f_{\text{cont}}$  est bien constante.

On a finalement démontré que  $f$  est une fonction purement discontinue, c'est-à-dire qu'elle est une fonction constante avec un nombre dénombrable de discontinuités, comme la généralisation d'une fonction en escalier (ce n'est pas un escalier du diable, qui lui est une fonction singulière continue! voir l'annexe III).

---

10. On a en effet, soit la fonction  $h(x) = W'(f(x) - f(x-l))$ , les discontinuités de  $h(x+l) - h(x)$  en les points  $x_i$  peuvent s'écrire  $c_i \mathbb{Y}(x - x_i)$ , où  $\mathbb{Y}$  est la fonction de Heaviside, et on a :

$$\begin{aligned} & \forall (p, q) \in \mathbb{Z}^2, h_{\text{disc}}(x+l+a) - h_{\text{disc}}(x+a) - h_{\text{disc}}(x+l) + h_{\text{disc}}(x) \\ &= \sum_i c_i \mathbb{Y}(x+a+l-x_i) - \sum_i c_i \mathbb{Y}(x+a-x_i) - \sum_i c_i \mathbb{Y}(x+l-x_i) + \sum_i c_i \mathbb{Y}(x-x_i) \\ &= \sum_i \chi_{[x+l, x+l+a]}(x-x_i) - \sum_i \chi_{[x, x+a]}(x_i) \end{aligned}$$

où  $\chi_{[a,b]}$  représente la fonction caractéristique de l'intervalle  $[a, b]$ . Or, la fonction définie en les points  $x_i$ ,  $x_i \mapsto c_i$  est  $a$ -périodique; donc, on peut regrouper les points  $x_i$  en classes modulo  $a$  et choisir un représentant pour chacune, dans un intervalle quelconque fixé de longueur  $a$ . En particulier, la somme de toutes les images  $c_i$  de ces représentants est bien définie. Elle ne diverge pas, car,  $W'$  étant strictement croissante, la somme des discontinuités, sur une période, de  $W'(f(x+l) - f(x))$  sera convergente si et seulement si celle des discontinuités de  $f(x+l) - f(x)$  est convergente; donc, si et seulement si celle des discontinuités de  $f$  elle-même est convergente. Or, cela est toujours assuré car  $f$  est croissante, et la somme de ses discontinuités ne peut être plus grande que la variation de la fonction sur le même intervalle, à savoir  $f(x+a) - f(x) = a$  ici. On soustrait cette somme  $\sum c_i$  à elle-même dans la dernière équation considérée. Donc,  $W'_{\text{disc}}(f(x+l) - f(x))$  est bien  $a$ -périodique.

11. L'ensemble fermé des points sur lequel  $V$  est convexe est de la forme

$\bigcup n \in \mathbb{Z}na + \left( I_1 \cup I_2 \cup \dots \cup I_u \right)$  où les  $I_i$  sont des intervalles disjoints inclus dans un intervalle de longueur  $a$  :  $I = I_1 \cup I_2 \cup \dots \cup I_u \subset [x_o, x_o + a]$ ,  $x_o \in \mathbb{R}$  et j'ai supposé que  $V$  admet  $u$  minima par période et que  $V''$  existe.  $f(nl) = U_n$  prend toutes ses valeurs sur cet ensemble,  $f(nl + ma)$  également, et donc  $f(x)$ ,  $\forall x \in \mathbb{R}$  aussi, quelle que soit la façon dont on prolonge  $f$ , puisque  $I$  est fermé. Comme  $f$  est croissante,  $f^{-1}(I_1), \dots, f^{-1}(I_u)$  sont des intervalles, et d'après ce qui précède, ils forment une partition de  $f^{-1}([x_o, x_o + a]) = [f^{-1}(x_o), f^{-1}(x_o) + a]$ . Sur chacun des ouverts de ces intervalles  $f^{-1}(I_i)$ ,  $V' \circ f$  est strictement croissante. On en conclut que la partie continue est croissante sur la fermeture de ces intervalles, donc partout.

12.  $f$  étant croissante, elle admet un nombre dénombrable de discontinuités. Donc,  $V' \circ (f_{\text{cont}})$  ne diffère de  $V' \circ f$  que par un nombre dénombrable de discontinuités. Or, c'est une fonction continue, donc une détermination de  $(V' \circ f)_{\text{cont}}$ .

## $\delta$ Étude des discontinuités

On va étudier les discontinuités de la fonction enveloppe, et dans un premier temps, on veut savoir où elles se situent.

Une autre application<sup>[21]</sup> de l'invariance de l'espace des états fondamentaux sous l'action des groupes  $G_1$  et  $G_2$  est que, si  $f$  est discontinue en un point  $x_o$ , elle l'est aussi en les points  $x_o + pl + qa$ , pour tout  $(p, q) \in \mathbb{Z}^2$ . On va considérer la variable  $U_n$ , et, toujours quand le couplage est suffisamment petit pour que les atomes des configurations fondamentales tombent dans les parties convexes des puits, je vais montrer que ce sont alors les seules discontinuités, autrement dit que les discontinuités de la fonction enveloppe appartiennent à un réseau du type  $x_o + pl + qa$ ,  $(p, q) \in \mathbb{Z}^2$ .

Remarquons d'abord que la fonction

$$x \mapsto \left[ \frac{f(x + \alpha)}{a} \right]^+$$

où  $\alpha$  est quelconque, est une fonction du type

$$x \mapsto \left[ \frac{x + \beta}{a} \right]^+$$

à cause de la propriété (8)  $f(x + a) = f(x) + a$ .

Soit donc une discontinuité située au point  $\alpha$ , et  $\beta$  tel que

$$\forall x \in \mathbb{R}, \left[ \frac{f(x + \alpha)}{a} \right]^+ = \left[ \frac{x + \beta}{a} \right]^+$$

Soient  $(U_n = f(nl + \alpha^+))_{n \in \mathbb{N}}$  et  $(V_n = f(nl + \alpha^-))_{n \in \mathbb{N}}$ , ce sont deux états fondamentaux, où j'ai pris respectivement la limite à droite et la limite à gauche. Comme  $f$  est discontinue en  $\alpha$ , ces états sont différents, donc, comme dans ce domaine de couplage  $\ell$  les numéros de puits caractérisent totalement les états, il existe au moins un atome  $n$  n'appartenant pas au même puits suivant les deux états. Les numéros de puits étant

$$\begin{aligned} \left[ \frac{U_n}{a} \right]^+ &= \left[ \frac{f(x + \alpha^+)}{a} \right]^+ = \left[ \frac{x + \beta^+}{a} \right]^+ \text{ et} \\ \left[ \frac{V_n}{a} \right]^+ &= \left[ \frac{f(x + \alpha^-)}{a} \right]^+ = \left[ \frac{x + \beta^-}{a} \right]^+ \end{aligned}$$

on est à une discontinuité de la fonction  $x \mapsto \left[ \frac{x + \beta}{a} \right]^+$ , donc

$$nl + \beta = pa, \quad p \in \mathbb{Z}$$

soit encore

$$\alpha = nl + pa + (\alpha - \beta)$$

Mais

$$\forall x \in \mathbb{R}, \left[ \frac{f(x + \alpha)}{a} \right]^+ = \left[ \frac{x + \beta}{a} \right]^+$$

peut encore s'écrire :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \left[ \frac{f(x)}{a} \right]^+ = \left[ \frac{x + (\beta - \alpha)}{a} \right]^+$$

aussi  $(\alpha - \beta)$  est-il fixé et ne dépend que de  $f$ , on peut le noter  $x_f$  et on a finalement  $\alpha = -nl + pa + x_f$  comme annoncé.

Pour conclure l'analyse des discontinuités, on peut remarquer que, soit  $b_{p,q}$  la discontinuité au point  $x_o + pl + qa$  du réseau sur lequel la fonction est discontinue,  $b_{p,q}$  ne dépend pas de l'indice  $q$  : en effet,  $f - Id$  est  $a$ -périodique et toutes les discontinuités sont simplement translatées de période en période. Donc,  $b_{p,q} = b_{p,q'}$  puisqu'il s'agit de discontinuités en des points séparés de  $(q' - q)a$ , et on le notera  $b_p$ . On a finalement <sup>13</sup> :

$$\sum_p b_p = a$$

De plus, on vérifie que  $b_p$  décroît exponentiellement quand  $p$  tend vers  $\pm\infty$  (cf partie suivante ou S. Aubry<sup>[27]</sup>).

### ε Discommensurations effectives

Nous allons enfin pouvoir établir l'existence et la forme des défauts élémentaires (discommensurations) qui permettent de décrire les états fondamentaux dans le régime à petit couplage. On va extraire les discommensurations à partir des discontinuités de la fonction enveloppe. On va donc maintenant préciser la forme exacte de  $f$ . Par exemple, lorsque j'ai écrit ci-dessus une décomposition de  $W'(f(x+l) - f(x))$ , tout n'a pas été justifié et, en particulier, des problèmes de constantes et de normalisations surgissent, qui n'auraient joué aucun rôle à cause des soustractions. Je me place à petit couplage, dans les mêmes hypothèses que précédemment et je choisis la détermination continue à droite de  $f$ .

A priori,  $f$  s'écrit :

$$x \mapsto f(x) = f(x_o^+) + \sum_{x_o < pl + qa \leq x} b_p - \sum_{x < pl + qa \leq x_o} b_p$$

où les  $b_p$  décrivent la taille des discontinuités et  $x_o$  est un point de référence pour l'instant complètement quelconque.

On a :

$$f(x) = f(x_o^+) + \sum_{pl + qa > x_o} b_p \mathbb{Y}^+(x - pl - qa) - \sum_{pl + qa \leq x_o} b_p \mathbb{Y}^-(pl + qa - x)$$

où  $\mathbb{Y}^+$  est la fonction de Heaviside continue à droite, et  $\mathbb{Y}^-$  celle continue à gauche.

$$f(x) = f(x_o^+) + \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p \sum_{q > \frac{x_o - pl}{a}} \mathbb{Y}^+(x - pl - qa) - \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p \sum_{q \leq \frac{x_o - pl}{a}} \mathbb{Y}^-(pl + qa - x)$$

que l'on peut encore écrire :

$$\begin{aligned} f(x) = f(x_o^+) + & \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p \sum_{q' = q - [\frac{x_o - pl}{a}]^+ \geq 1} \mathbb{Y}^+(x - pl - [\frac{x_o - p}{a}]^+ a - q'a) \\ & - \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p \sum_{q' = q - [\frac{x_o - pl}{a}]^+ \leq 0} \mathbb{Y}^-(pl + [\frac{x_o - pl}{a}]^+ a + q'a - x) \end{aligned}$$

---

13. En effet :

$$\sum_p b_p = \sum_{p,q} [-\frac{pl}{a}]^- b_{p,q} = \sum_{0 \leq pl + qa < a} f(pl + qa^+) - f(pl + qa^-) = f(a) - f(0) = a$$

car  $f$  est totalement discontinue.

Or on reconnaît dans  $\sum_{n \geq 1} \mathbb{Y}^+(x-n) - \sum_{n < 0} \mathbb{Y}^-(n-x)$  la fonction partie entière  $[ ]^+$ .  
Donc :

$$f(x) = f(x_o^+) + \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p \left[ \frac{x-pl}{a} - \left[ \frac{x_o-pl}{a} \right]^+ \right]^+ \quad (13)$$

Soit un état de phase  $\delta$ , on a :

$$\begin{aligned} \forall n \in \mathbb{Z}, \quad U_n &= f(nl + \delta^+) \\ &= f(x_o^+) + \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p \left[ \frac{(n-p)l + \delta}{a} - \left[ \frac{x_o-pl}{a} \right]^+ \right]^+ \end{aligned}$$

On prendra donc  $x_o = \delta$  et on pose  $M_n = \left[ \frac{nl + \delta}{a} \right]^+$ . On trouve :

$$\begin{aligned} U_n &= f(\delta^+) + \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p (M_{n-p} - M_{-p}) \\ &= f(\delta^+) + \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p (M_{n-p} - M_{n-p-1} + M_{n-p-1} - M_{n-p-2} + \dots \\ &\quad + M_{1-p} - M_{1-p} - M_{-p}) \end{aligned}$$

Soit  $\sigma_n = M_{n+1} - M_n$ , on a  $\sigma_n = 0$  ou  $1$  (cf annexe VIII). Soit  $d_n = \sum_{k=-\infty}^{n-1} b_k$ , alors :

$$\begin{aligned} U_n &= f(\delta^+) + \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p (\sigma_{n-p-1} + \sigma_{n-p-2} + \dots + \sigma_{-p}) \\ &= f(\delta^+) + \sum_{p \in \mathbb{Z}} \sigma_p (d_{n-p} - d_{-p}) \end{aligned} \quad (14)$$

Les  $d_n$  sont les discommensurations effectives (figure 12) ; on a exprimé les états fondamentaux comme une somme de discommensurations. Cette décomposition a déjà été introduite lors de la construction des états incommensurables, sous la forme d'une distribution de défauts de phase. Il s'agissait dans ce cas de fixer la structure des numéros de puits  $M_n$ , et les atomes, partant d'une configuration  $U_n = aM_n$  ne devaient pas relaxer trop loin. Ici, les atomes ne s'éloignent pas non plus de la position  $aM_n$  ; il y a une correspondance immédiate entre les deux décompositions.

Quand on décrit un état incommensurable par une distribution de défauts, l'énergie de l'état incommensurable sera donnée par celle de l'état à partir duquel on l'a construit, plus la somme des énergies des défauts. Ceci ne donne pas une contribution infinie à l'énergie de l'état incommensurable, puisque, lorsqu'on l'approche à partir des approximations diophantiens  $\zeta_p$ , la densité de défauts (exprimée en unité de phase) supplémentaire à chaque étape vaut  $|\zeta_{p+1} - \zeta_p|$  et tend rapidement vers zéro.

## $\zeta$ Défectibilité

Pour obtenir cette décomposition, on a introduit la variable discrète  $\sigma_n \in 0, 1$  qui est liée à  $M_n$ . Les suites  $\sigma_n$  (et  $M_n$ ) autorisées sont celles qui représentent les structures incommensurables à la section 1.8. Si l'on choisit une autre suite  $\sigma_n^o$  (et  $M_n^o$ ), quelconque, on introduit des défauts de structure : on peut les décomposer comme une distribution de défauts de phase  $\delta\varphi_n$ . Supposons par exemple qu'on a introduit le défaut de phase  $\delta\varphi = \delta_{n,n_o} \delta\varphi$  localisé au site  $n_o$ . La question de la défectibilité revient finalement au



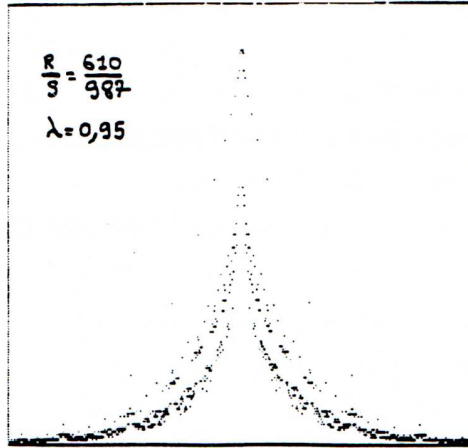


FIGURE 12 – Discommensuration effective obtenue par ordinateur, pour le modèle de Frenkel & Kontorowa.

problème suivant. Si on met les atomes  $n$  dans les puits  $M_n = [\frac{nl+\alpha+\delta\varphi_n}{a}]^+$ , vont-ils relaxer vers la configuration

$$\begin{aligned} U_n &= f(\delta^+) + \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p (M_{n-p}^o - M_{-p}^o) \\ &= f(\delta^+) + \sum_{p \in \mathbb{Z}} \sigma_p^o (d_{n-p} - d_{-p}) \end{aligned}$$

Si oui, l'insertion d'un défaut de structure localisé en  $n_o$ ,  $\delta\varphi$ , aura simplement causé une modification de structure  $b_{n-n_o}$ , donc très localisée autour de  $n_o$ .

On pourra alors analyser les défauts suivant la décomposition d'un rapport incommensurable  $\zeta$  en approximants rationnels. Les défauts d'un état excité apparaissent lorsqu'on ne peut plus décomposer sa structure à l'ordre de commensurabilité  $\zeta_n = r_n/s_n$  comme une répartition fondamentale,  $\zeta_n$  étant la  $n^{\text{ème}}$  approximation diophantienne de  $\zeta$ .

La défectibilité est prouvée à la partie suivante. Ce résultat est en fait approximatif, et d'autant plus valable que les états sont peu excités. On obtiendra alors un modèle de pseudo-spin, représentés par les  $\sigma_n$ , qui peuvent prendre des valeurs arbitraires.

Quand on récrit l'hamiltonien en fonction des  $\sigma_n$ , pour un couplage assez petit, on trouve une interaction à nombre fini de particules, et à distance finie. Mais, quand on se rapproche de la transition, le nombre de particules en interaction et la portée de ces interactions vont augmenter pour exploser à la transition. On ne peut plus alors décrire le système par une variable discrète, et cette approche sera invalide.

## g Transition : brisure de symétrie sur l'espace des états fondamentaux

On passe par une transition quand on fait varier le couplage. Ce résultat qui est obtenu à une dimension n'est pas une anomalie, puisqu'on le définit uniquement dans

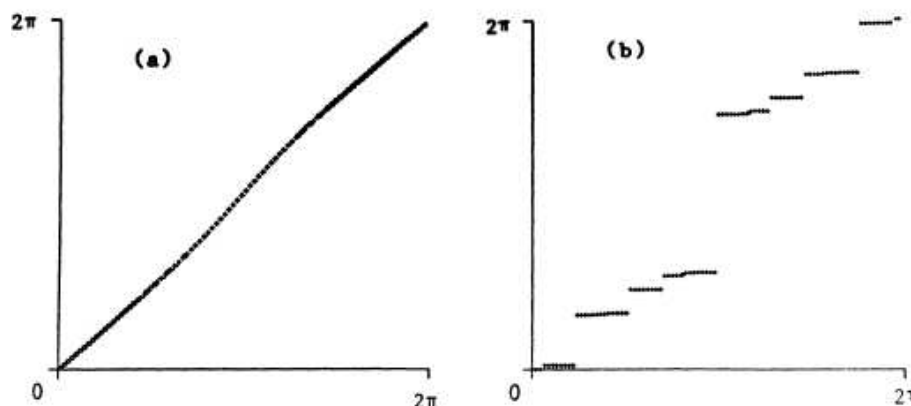


FIGURE 13 – Courbes numériques de la fonction enveloppe, pour le modèle de Frenkel & Kontorowa<sup>[17]</sup>. On a représenté deux situations extrêmes, où la fonction est très proche du système cristallin (à gauche) ou du système aléatoire (à droite). Mais, la transition est très accentuée, et on observerait ces différences pour des couplages proches de la transition.

l'espace des états fondamentaux, dont la dynamique se trouve alors figée; autrement dit, on se place toujours à température nulle.

Cette transition est due à un changement de symétrie des états fondamentaux. Cependant, il ne s'agit pas de la symétrie vérifiée par chacun, mais de la symétrie vérifiée par l'ensemble de ces états. L'action initiale étant invariante par les symétries  $G_1$  et  $G_2$ , cet espace vérifie obligatoirement les mêmes symétries. Cependant, il existe un changement fondamental à la transition : la symétrie qui opère continûment, comme cela est attendu, pour les forts couplages, opère de façon discrète sur cet ensemble, en deçà de la transition. (Voir à la fin de l'annexe IV). On peut notamment décrire le système à petit couplage par une variable discrète (le pseudo-spin, qui a été introduit à la section précédente; ça ne concerne pas spécialement les états fondamentaux, et on le reverra dans les parties suivantes).

Pour mettre explicitement en valeur le changement de symétrie qui a lieu au niveau de la transition, on admet que les fonctions enveloppe, dont on sait qu'elles sont analytiques à suffisamment grand couplage (en application du théorème de K.A.M.) restent analytiques dans tout le domaine où elles sont continues. Et, de même, qu'elles deviennent totalement discontinues dès que l'on est au dessous de la transition, ce que l'on sait démontrer seulement pour les petits couplages. Il était donc bien justifié d'introduire un paramètre de transition  $\ell_c$ .

Cette transition n'est définie que pour les régimes incommensurables, mais comme les fonctions enveloppe des approximants diophantiens  $\zeta_i$  de  $\zeta$  convergent uniformément vers la fonction enveloppe  $f$  associée à  $\zeta$  (cf annexe I), on verra numériquement la transition apparaître progressivement sur l'image des fonctions enveloppe des rapports commensurables, qui sont les seules que l'on sache calculer par ordinateur, au fur et à mesure que  $\zeta_i$  tend vers  $\zeta$  (fig 13).

On a donc bien observé numériquement cette transition<sup>[24]</sup>. On a aussi pu généraliser ces résultats pour le modèle de Holstein-Peierls : on peut en effet introduire une fonction

enveloppe pour ce modèle, bien qu'on n'ait pas démontré son existence<sup>[24]</sup>.

D'autre part, on montre que le couplage critique  $\ell_c$  est infini pour les systèmes commensurables<sup>[4]</sup>, ce qui était prévisible, puisque ces états ne sont pas, d'une part, concernés par le changement de symétrie, et d'autre part, la fonction enveloppe de ces états commensurables est une fonction discontinue, qui correspond donc au régime non-analytique, et ces systèmes sont effectivement défectibles.

Aussi paradoxalement, les états commensurables nous permettent d'observer les propriétés des états analytiques, quand on fait tendre le rapport de commensurabilité vers un irrationnel - et ce grâce à la continuité de nombreuses quantités physiques en fonction de ce rapport - ; et ils possèdent pourtant les caractéristiques des états non-analytiques.

# C Étude des solutions en perturbation

## 1 Motivations

On a vu, dans la partie précédente, l'existence de deux régimes très distincts des systèmes incommensurables, suivant que le couplage est grand ou petit.

Quand le couplage est assez grand, le système ressemble à un système cristallin, où l'on décrit les excitations en terme de phonons étendus de très faible masse, qui se propagent. Par contre, quand le couplage est plus petit, les défauts sont accrochés, localisés : on décrit le système grâce à des défauts élémentaires en interaction, et on se rapproche fortement d'un système aléatoire, avec une variable discrète.

En particulier, quand le couplage est infini, le système est purement cristallin, et quand il est nul, le système est complètement chaotique.

Il est donc naturel, pour essayer de bien caractériser ces deux régimes différents, de rapprocher les systèmes à petit couplage des systèmes à couplage nul, et les systèmes à grand couplage du système à couplage infini.

Plus précisément, on va perturber les états correspondant aux cas limites, pour obtenir des états correspondant au petit (ou grand) couplage. On décrit les états comme des perturbations d'états connus, et on démontre ainsi rigoureusement leurs propriétés (analytiques pour les grands couplages, ou chaotiques pour les petits).

C'est la seule preuve exacte de l'existence de ces deux régimes.

En ce qui concerne le régime non-analytique, on englobe, par cette approche, les états métastables, ou même stationnaires, qui seuls permettent de définir un caractère aléatoire à petit couplage.

Ces systèmes demeurent très difficiles à résoudre, et en particulier, on devra imposer des contraintes supplémentaires : bien que l'espace des états soit réduit, on montrera qu'une grande partie des états métastables s'obtiennent bien par prolongements des états à couplage infini (ou nul). L'intelligence de cette approche consiste justement à s'affranchir des autres états, pour comprendre les traits généraux de ces régimes.

## 2 Développement autour du couplage infini

On va d'abord s'intéresser au développement à grand couplage. Je reprends les travaux déjà existants, et qui ont été déjà utilisés par Serge Aubry.

Pour l'étude des régimes analytiques, on utilise le théorème de K.A.M. . Ce théorème ne s'applique en fait qu'au modèle de Frenkel & Kontorowa original.

Il est nécessaire d'écrire les équations en fonction du paramètre  $g$  dans les deux sections suivantes, à cause de la continuité par rapport à  $g$  en zéro des solutions.

## a Théorème de K.A.M.

On transforme le système statique  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  en un problème dynamique, où  $n$  joue le rôle d'un temps, et en introduisant une application  $T : U_{n+1} = T(U_n)$  à partir des équations de stationnarité. On considère le modèle original pour lequel  $W(x) = \frac{1}{2}x^2$  et  $V(x) = g(1 - \cos(x))$ . On montre facilement que le modèle de Frenkel & Kontorowa est équivalent au problème de l'application standard  $T : (U_i, p_i) \rightarrow (U_{i+1}, p_{i+1})$  avec :

$$\begin{cases} U_{i+1} = & U_i + p_{i+1} \\ p_{i+1} = & p_i + g \sin(U_i) \end{cases}$$

avec  $p_i = U_i - U_{i-1}$ .

Le théorème de K.A.M.<sup>[28]</sup>, dans le cadre de cette application standard, établit que les solutions à paramètre nul sont prolongeables analytiquement quand  $g$  n'est pas trop grand. La démonstration du théorème est très technique. Le point essentiel est que le résultat ne se démontre que pour les  $\zeta$  irrationnels et n'étant pas des nombres de Liouville. Les  $\zeta$  rationnels sont exclus comme on s'y attendait, puisque, comme je l'ai signalé auparavant, ils sont toujours dans le régime non-analytique. Cependant, l'ensemble des  $\zeta$ , sur  $[0, 1]$ , pour lesquels on démontre le théorème est de mesure 1.

## b Cas du modèle de Holstein-Peierls

Les électrons et les phonons sont couplés par l'équation (2) :

$$U_n = -g \sum_{\mu \text{ occ}} |\psi_n^\mu|^2$$

On suppose que tous les états d'énergie inférieure à l'énergie de Fermi sont occupés. Cependant, si l'on admet que, physiquement, les atomes sont toujours plus près de l'équilibre que les électrons, et en particulier, que la configuration électronique peut être momentanément excitée sans que les atomes aient le temps de bouger, on peut définir, dans le système, des états stationnaires instables, en adoptant un autre choix des états électroniques occupés : on comprend certains états électroniques excités dans la somme  $\sum_{\mu \text{ occ}}$ , mais ils sont fortement instables et ils doivent se désexciter immédiatement. Cela correspond expérimentalement au phénomène d'absorption infra-rouge.

Par ailleurs, on peut remarquer qu'une répartition électronique uniforme est toujours une solution stationnaire du modèle. On a alors :

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad U_n = -g\zeta$$

et les solutions de l'équation de Schrödinger

$$-\psi_{n+1}^\mu - \psi_{n-1}^\mu + g\zeta\psi_n^\mu = E^\mu\psi_n^\mu$$

sont :

$$\psi_n = \frac{e^{ikn}}{\sqrt{S}}$$

où  $S$  est le nombre d'atomes du système. On cherche les solutions de ce type qui sont stationnaires.

Il y a  $S$  niveaux de quantité de mouvement  $k = \frac{2\pi\mu}{aS}$  remplis et la limite, quand  $S$  devient infini, de  $\frac{1}{S} \sum_{\mu}$  est  $\frac{1}{2\pi} \int_{-k_k}^{k_f} dk$ , ou plutôt, en profitant d'une double dégénérescence en  $k$ , on redéfinit la quantité de mouvement et on parcourt un espace des phases réduit, et on trouve :  $\frac{2}{\pi} \int_0^{k_f} dk$ .

D'où, l'équation de stationnarité en  $U_n$  s'écrit :

$$U_n = -g \sum_k \left| \frac{e^{ikn}}{\sqrt{S}} \right|^2 = -g \frac{2}{\pi} \int_0^{k_f} dk = -\frac{2g}{\pi} k_f$$

Mais :

$$\sum_n \left| \frac{e^{ikn}}{\sqrt{S}} \right|^2 = 1 \text{ et } \sum_k \sum_n \left| \frac{e^{ikn}}{\sqrt{S}} \right|^2 = \zeta N \text{ donc } \frac{2}{\pi} \int_0^{k_f} dk = \zeta$$

donc, on retrouve  $U_n = -g\zeta$ , donc cette équation est bien vérifiée. Donc l'état uniforme est bien solution.

Quand le couplage est nul, ceci est trivialement une bonne solution, puisqu'alors les phonons et les électrons sont découplés. Dès que le couplage est non nul, apparaît une instabilité de Peierls, et cet état est modulé périodiquement. On retrouve exactement le schéma de Peierls, que nous allons redémontrer explicitement dans ce cas.

En dérivant formellement, ou par la théorie des perturbations, on obtient :

$$\begin{aligned} \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial U_n} &= U_n + \sum_{\mu \text{ occ}} \frac{\partial E^\mu}{\partial U_n} \\ &= U_n + g \sum_{\mu \text{ occ}} |\psi_n^\mu|^2 \end{aligned}$$

et l'opérateur dynamique  $D$  vaut

$$\begin{aligned} D_{n,m} &= \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial U_n \partial U_m} \\ &= \delta_{n,m} + \frac{\partial^2 E^\mu}{\partial U_n \partial U_m} \\ &= \delta_{n,m} - 2g^2 \sum_{\substack{\mu \text{ occ} \\ \mu'}} \Re \left( \frac{\psi_n^{\mu'} \bar{\psi}_m^{\mu'} \psi_m^\mu \bar{\psi}_n^\mu}{E^\mu - E^{\mu'}} \right) \end{aligned}$$

et, par symétrie

$$= \delta_{n,m} - 2g^2 \sum_{\substack{\mu \text{ occ} \\ \mu' \text{ vide}}} \Re \left( \frac{\psi_n^{\mu'} \bar{\psi}_m^{\mu'} \psi_m^\mu \bar{\psi}_n^\mu}{E^\mu - E^{\mu'}} \right)$$

donc, dans l'état défini au dessus, on trouve un opérateur :

$$= \delta_{n,m} + \frac{g^2}{S^2} \sum_{k,k'} \frac{e^{ik'n} e^{-ik'm} e^{ikm} e^{-ikn}}{\cos(2k') - \cos(2k)}$$

qui devient quand  $S \rightarrow +\infty$

$$= \delta_{n,m} + \frac{4g^2}{\pi^2} \int_0^{k_f} dk \int_{k_f}^{\frac{\pi}{2}} dk' \frac{e^{ik'n} e^{-ik'm} e^{ikm} e^{-ikn}}{\cos(2k') - \cos(2k)}$$

Pour savoir si cet opérateur est positif ou non, on va faire agir la forme quadratique correspondante sur un état tel qu'on sache en calculer exactement l'expression. On va

faire agir cet opérateur  $D$  sur  $\phi_o = \frac{1}{\sqrt{S}} e^{ik_o n}$ , avec  $0 \leq k_o \leq k_f$ . (J'ai remis ici un terme contenant la taille  $S$  du système. Pour être rigoureux, il suffirait de prendre l'expression initiale avec  $S$  fini, et de prendre la limite seulement après). On a :

$$\begin{aligned}
\langle \phi_o | D | \phi_o \rangle &= 1 + \frac{4g^2}{\pi^2} \int_0^{k_f} dk \int_{k_f}^{\frac{\pi}{2}} dk' \frac{1}{S} \sum_{n,m} \frac{e^{i(k'-k-k_o)(n-m)}}{2 \sin(k+k') \sin(k-k')} \\
&\text{comme ici } \frac{1}{S} \sum_n e^{ikn} = \frac{\pi}{2} \delta(k), \text{ on trouve :} \\
&= 1 + \frac{g^2}{\pi} \int_0^{k_f} dk \int_{k_f}^{\frac{\pi}{2}} dk' \frac{\delta' k' - k - k_o}{\sin(k+k') \sin(k-k')} \\
&= 1 + \frac{g^2}{\pi \sin(k_o)} \int_{2k_f-k_o}^{2k_f+k_o} dq \frac{1}{\sin(q)} \\
&= 1 + \frac{g^2}{\pi \sin(k_o)} \left[ \log(\operatorname{tg}(\frac{x}{2})) \right]_{2k_f-k_o}^{2k_f+k_o}
\end{aligned}$$

Or, pour tout  $k_f \in [0, \frac{\pi}{2}]$ , donc tout  $\zeta \in [0, 1]$ , il existe  $p \in \mathbb{Z}$  tel que  $k_o = \pm(2k_f + p\pi)$ . Pour cette valeur, l'argument du logarithme tend vers  $-\infty$ , donc, on a trouvé explicitement une solution telle qu'elle réduise l'énergie au second ordre. Bien sûr, la divergence n'est que mathématique, de même qu'une onde rigoureusement plane n'est qu'un outil de calcul<sup>14</sup>.

La valeur de  $k_o$  correspond à une modulation du réseau, qui est, comme on s'y attendait d'après le calcul de distorsion de Peierls, liée au niveau de Fermi.

Il apparaît une modulation spontanée du réseau dès que le couplage est non nul. On ne sait pas résoudre exactement les états, ni même montrer que les solutions sont

---

14. Dans les calculs précédents,  $\int \frac{dq}{\sin(q)}$  est supposé convergent, sauf si la divergence se produit aux bords.  $\frac{1}{\sin(q)}$  est donc en réalité la partie principale, au sens des distributions. Si l'on refait les calculs précédents avec une perturbation physique quelconque  $\phi_o(n) = \int f_{k_o}(k) e^{-ikn} dk$  où j'ai indiqué la fonction par  $k_o$  pour indiquer que l'on prendra de préférence une fonction qui prend ses valeurs essentiellement autour de  $k_o$  (mais, elle peut être en fait complètement générale et alors, on oubliera l'indice), on trouve :

$$\begin{aligned}
\langle \psi_o | D | \psi_o \rangle &= 1 + \frac{4g^2}{\pi^2} \sum_{n,m} \int dk \bar{f}_{k_o}(k) e^{ikm} \\
&\int dq dq' \frac{e^{iqn} e^{-iqm} e^{iq'm} e^{-iq'n}}{\cos(q') - \cos(q)} \int dk' f_{k_o}(k') e^{-ik'n} \\
&= 1 + g^2 \int dk \int dk' f_{k_o}(k') \bar{f}_{k_o}(k) \int dq dq' \frac{\delta(k-k') \delta(k-q+q')}{\sin(k) \sin(q+q')} \\
&= 1 + g^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} dk \int_{2k_f-k}^{2k_f+k} d\tilde{q} \frac{1}{\sin(k) \sin(\tilde{q})} |f_{k_o}(k)|^2 \\
&\quad \text{où } \tilde{q} = q + q' \\
&= 1 + g^2 \int_0^{\frac{\pi}{2}} dk \frac{1}{\sin(k)} |f_{k_o}(k)|^2 \log \left( \frac{\operatorname{tg}(k_f + k/2)}{\operatorname{tg}(k_f - k/2)} \right)
\end{aligned}$$

Cette dernière intégrale est bien finalement convergente, mais on peut la rendre aussi négative que possible en prenant  $f_{k_o}$  suffisamment pointue en une valeur de  $k_o$  reliée à  $k_f$  comme je l'ai fait dans le calcul précédent. Donc, l'inf des valeurs prises par la forme quadratique  $D$  est bien  $-\infty$ .

continues en  $g$ . Il est impossible de relier analytiquement ces états aux ondes planes qui peuvent exister à couplage nul. Par contre, lorsque l'on prend la limite d'un état quand  $g$  tend vers zéro, on obtient (c'est une conjecture) un état modulé qui est solution (brisure spontanée de symétrie à  $g = 0$ ).

### 3 Développement autour du couplage nul

Nous allons donc maintenant montrer des résultats analogues sur les prolongements des solutions à couplage nul (on exprime à nouveau toutes les équations en fonction de  $\ell$ , qui est maintenant nécessaire car les solutions sont continues par rapport à  $\ell$  en zéro).

Certaines approches, comme l'approximation de l'espace discret à un continuum, escamotent complètement le problème et ne peuvent prédire l'existence du régime non-analytique. Pourtant, l'étude de ce régime, que nous allons entreprendre est relativement moins délicate que celle du régime analytique, à grand couplage, et les résultats seront beaucoup plus généraux, par exemple, ils seront valables pour tout rapport  $\zeta$ , pour divers modèles, et à toute dimension, tant que la variable, pour laquelle les résultats s'appliquent, reste scalaire, (ou vectorielle si l'on impose des contraintes supplémentaires), en supposant que les fonctions du problèmes soient assez régulières.

#### a Principe de base

Le principe de base est d'extraire explicitement des solutions qui sont des prolongements d'une solution à couplage nul, puis de remarquer que l'on a ainsi obtenu, parmi des états aléatoires, presque tous les états fondamentaux ou faiblement excités<sup>15</sup>.

Bien sûr, ce qu'on espère est d'obtenir la continuité des solutions en fonction de  $\ell$ .

#### b Développement en série entière

La première méthode, la plus immédiate, est de démontrer que ces développements sont analytiques. On cherche à priori une solution développable en série entière en fonction de  $\ell$ , puis on montre que le rayon de convergence n'est pas nul, ce qui nous fournit ainsi un couplage en deçà duquel le résultat est vrai.

Je présente en annexe VII une démonstration valable pour le modèle de Frenkel & Kontorowa original. Cependant, on ne sait pas donner une forme simple, donc calculable, du rayon de convergence.

#### c Application du théorème du point fixe

Aussi, je vais essayer par la suite de montrer un résultat moins fort, mais plus général. On récrit l'équation de stationnarité du problème vérifiée par les  $U_n$ , qui sont les variables qui nous intéressent, pour chaque système, en une équation de point fixe :

$$F_n(U_m) = U_n$$

---

15. On montre, en fait, pour le modèle de Frenkel & Kontorowa, que l'on obtient ainsi tous les états fondamentaux ; et pour le modèle de Holstein-Peierls, on en a de fortes présomptions.



où j'ai écrit chaque composante d'un opérateur  $F$ , qui sera choisi en fonction du problème.

On va utiliser alors le théorème du point fixe dans les espaces de Banach<sup>[29]</sup> : Si l'on définit une suite  $(U_n^k)_{n \in \mathbb{Z}}$  dans un tel espace par :

$$U_n^{k+1} = F_n(U_m^k)$$

et si l'on vérifie les conditions usuelles des théorèmes du point fixe, alors, elle converge vers une limite  $(U_n^\infty)_{n \in \mathbb{Z}}$ , qui est un point fixe de  $F$ , donc un état stationnaire. De plus, si la fonction dépend continûment du couplage  $\ell$ , alors, le théorème assure également la continuité de la solution par rapport à ce paramètre.

Ceci est bien sûr un schéma général de la méthode, et je vais préciser par la suite le détail de cette approche. On aura ainsi montré que l'on peut prolonger les solutions à  $\ell$  nul en solution à  $\ell$  non nul.

## d Théorème dual de K.A.M.

On va se consacrer, dans cette section, au modèle de Frenkel & Kontorowa.

On va montrer que l'on peut prolonger de façon analytique l'ensemble des solutions à  $\ell = 0$  pour un  $\ell$  non nul. Cette démarche est très analogue à celle du théorème de K.A.M., qui, bien que transposé au problème de l'application standard, montre que l'on peut prolonger les solutions à  $g = 0$  de façon analytique. C'est pourquoi ce résultat peut être appelé dual de K.A.M. (on a cependant besoin d'une condition sur  $\zeta$  pour démontrer le théorème de K.A.M., ce qui n'est pas nécessaire ici).

On trouvera le détail des calculs qui suivent dans l'annexe VIII correspondante tandis que je présente ici la trame principale. Par ailleurs, ces résultats vont être également publiés dans un article de revue scientifique<sup>[30]</sup>.

On revient au modèle discret, ainsi on aura accès à un espace d'états métastables beaucoup plus vaste, ce qui permet de caractériser de façon beaucoup plus nette le caractère aléatoire des solutions obtenues. On se restreint par simplicité à un potentiel élastique ordinaire  $W(x) = \frac{1}{2}x^2$ .

### $\alpha$ Étude à couplage nul

On va d'abord étudier l'ensemble des solutions à couplage nul,  $\ell = 0$ , et montrer qu'elles forment un espace totalement aléatoire. Les équations de stationnarité du modèle discret original s'écrivent

$$V'(U_n) = 0$$

Les  $U_n$  prennent n'importe quelle valeur des extrema du potentiel : les atomes peuvent se placer sur n'importe quel extremum du potentiel. Les configurations avec un atome à un sommet du potentiel correspondent à des états stationnaires instables. Les états fondamentaux sont les configurations où tous les atomes "tombent" dans un minimum du potentiel (figure 14). Ils forment un ensemble totalement dégénéré. La dégénérescence des états fondamentaux, qui est capitale, disparaîtra dès qu'on suivra ces états par continuité.

Si les puits sont simples, avec la convention de la section 1.2, partie II, selon laquelle leur position est alors  $aM_n$  où  $M_n \in \mathbb{Z}$  est le numéro du puits, les états fondamentaux

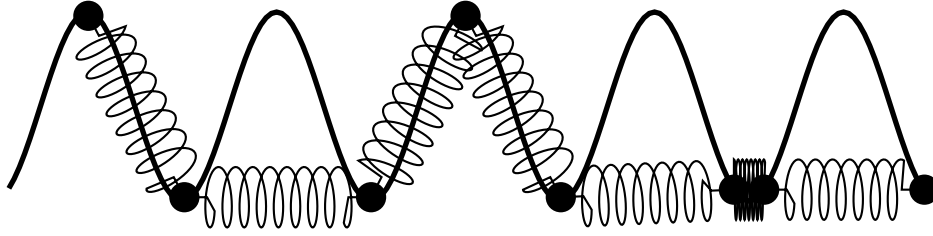


FIGURE 14 – Pour un inverse suffisamment faible, les atomes se placent tous aux fonds ou aux sommets des puits.

vérifient  $U_n = aM_n$ . Si on autorise les nombres  $M_n$  demi-entier, on décrit un état instable, et l'ensemble des états stationnaires vérifient donc une telle relation. En particulier, ces nombres sont quasiment aléatoires à deux contraintes près : d'une part, ils doivent vérifier la condition (1), qui définit le remplissage global des atomes ; et d'autre part, la fonction  $n \mapsto M_n$  doit toujours être croissante. Pour un système de longueur finie, la première condition est assurée dès que l'on fixe le nombre d'atomes ; et la deuxième condition est réalisée simplement en prenant un système sans contrainte et en faisant le quotient de l'espace des états par tous les groupes discrets de permutations sur les numéros de puits. Ainsi, le choix des puits est totalement aléatoire pour un système fini, et possède une contrainte très faible quand on fait tendre la taille vers l'infini<sup>16</sup>.

### $\beta$ Étude à couplage non nul

Quand on introduit un couplage, donc un  $\ell$  non nul, on va montrer qu'il existe des prolongements continus des solutions à  $\ell = 0$ , qui sont des solutions métastables (ou stationnaires).

Pour utiliser le théorème du point fixe, il faut définir un opérateur  $F$  précis, qui permette d'exprimer les équations de stationnarité.

On va d'abord définir implicitement l'opérateur, de la façon suivante : soit  $U_n^k$  des variables, telles que :

$$U_n^{k+1} = F_n(U_{m \in \mathbb{Z}}^k)$$

alors, on a :

$$\ell(U_{n+1}^k + U_{n-1}^k - 2U_n^k) + V'(U_n^{k+1}) = 0$$

Si la suite ainsi définie pour les  $k \in \mathbb{Z}$  converge, sa limite sera un point fixe de  $F$ , et elle vérifiera bien les équations de stationnarité.

Il est logique d'associer les termes initiaux de chaque récurrence au petit paramètre  $\ell$ , afin d'éviter toute divergence<sup>17</sup>.

16. Les états fondamentaux (et les états stationnaires) forment un espace aléatoire, que l'on n'a pas obtenu en prolongeant les états fondamentaux à petit couplage, dans la partie précédente. Les solutions décrites par la fonction enveloppe à couplage nul définissent un espace beaucoup moins aléatoire : on a, en effet,  $C_S^v$  choix, où  $S$  est le nombre de particules, et  $v$  le nombre de valeurs prises par la fonction (donc inférieur ou égal au nombre des minima du potentiel, qui est souvent un), parmi  $2^S$  états possibles. L'entropie tend vers zéro. Par contre, l'ensemble des états fondamentaux couvrent presque tout l'espace des phases possibles : on a  $2^S$  choix, et l'entropie tend vers  $\ln(2)$ .

17. Notons au passage, que, dans la démonstration du théorème de K.A.M., on fait également intervenir le théorème du point fixe avec une fonction définie implicitement par :

$$U_{n+1}^{k+1} + U_{n-1}^{k+1} - 2U_n^{k+1} + gV'(U_n^k) = 0$$

Pour passer de la définition implicite à une expression connue de  $F$ , on montre (dans l'annexe VIII), quand  $\ell$  est suffisamment petit, que les atomes ne peuvent pas quitter la partie convexe (ou concave) du minimum (ou maximum) du potentiel dans laquelle ils sont. Or, lorsque l'on impose l'extremum dans lequel est chaque atome, on définit une détermination explicite de  $V'^{-1}$  localement, (ce n'est pas la même suivant les atomes), ce qui permet de connaître exactement  $F$ .

Pour démontrer cela, on doit imposer une condition sur les positions des extrema correspondant à une configuration donnée, que l'on notera  $P_n$ . S'il n'y a qu'un puits par période, quand  $P_n$  correspond à un minimum, on a  $P_n = aM_n$ ,  $M_n \in \mathbb{Z}$  et quand  $P_n$  correspond à un maximum, on a  $P_n = aM_n \pm \frac{a}{2}$ . La condition sera :

$$|P_{n+1} + P_{n-1} - 2P_n| \leq m \quad (15)$$

où  $m$  est une longueur donnée.

On notera  $\mathcal{A}$  le sous-espace des états  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  tels que leurs extrema  $(P_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  soient fixés et vérifient la condition (15) et on se placera sur  $\mathcal{A}$  pour appliquer le théorème du point fixe. Cette condition se répercute sur les  $U_n$ . En effet, le fait que les atomes ne quittent pas la partie convexe (ou concave) du potentiel où ils se trouvent s'exprime encore par

$$-\frac{a}{2} + b \leq U_n - P_n \leq \frac{a}{2} + b$$

où  $b$  est la position du milieu de cet extremum, donc dépendant de  $U_n$ , et on a majoré la largeur de la partie convexe par  $a$ . D'où

$$-a + 2b - a - 2b \leq U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n - (P_{n+1} + P_{n-1} - 2P_n) \leq a + 2b + a - 2b$$

d'où finalement la relation

$$|U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n| \leq m + 2a$$

Cette relation exprime le niveau de désordre que l'on tolère. Il faut noter qu'elle est assez peu contraignante, en tout cas beaucoup moins contraignante qu'une condition  $|U_{n+1} - U_n|$  borné, ou pire,  $|U_n - nl|$  borné, comme pour les états fondamentaux à densité donnée.

A chaque itération, les atomes ne changent plus d'extremum et on reste toujours dans le sous-espace  $\mathcal{A}$  dans lequel la fonction est définie. Pour appliquer le théorème du point fixe, on doit noter que  $\mathcal{A}$  est complet, parce que fermé, au sens de la topologie sur les Banach sur les  $U_n$ .

On remarque finalement (dans l'annexe VIII) que la fonction est bien contractante sur  $\mathcal{A}$ , et donc, la suite  $((U_n^k)_{n \in \mathbb{Z}})_{k \in \mathbb{N}}$  définie plus haut est bien convergente, au sens de la topologie du Banach, donc uniformément par rapport à  $n$  et le théorème s'applique bien.

On prendra comme condition initiale de la suite :

$$U_n^0 = P_n$$

---

Donc le raisonnement est analogue, mais on fait intervenir l'inverse de l'opérateur  $\nabla$  défini par

$$\nabla_{n,m} = \delta_{n,m+1} + \delta_{n,m-1} - 2\delta_{n,m}$$

ce qui conduit au problème des petits dénominateurs, etc.

Les  $P_n$  sont également les positions des extrema de la solution limite, puisque les atomes ne “bougent” pas trop lors du processus, et donc par le théorème du point fixe, il y a unicité de la solution en fonction des  $U_n^0$ , donc des  $P_n$ , donc des extrema dans lequel se trouve chaque atome : **les  $U_n$  dépendent uniquement des  $P_n$ .**

Comme la dépendance de  $F$  en  $\ell$  est continue, les solutions sont également continues en le paramètre  $\ell$ , et définies jusqu’à un paramètre  $\ell(m)$  limite qui est le plus grand  $\ell$  autorisé pour que les conditions du théorème du point fixe soient vérifiées.

A tout état stationnaire correspond une borne  $m$  : on a en effet

$$\begin{aligned} |U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n| &= \frac{1}{\ell} |V'(U_n)| \\ &\leq \frac{1}{\ell} \sup_x |V'(x)| = \frac{K}{\ell} \end{aligned}$$

où  $K = \sup |V'|$ ; donc, il suffit de prendre  $m = \left[\frac{K}{\ell}\right]^- + 1$ . Cependant, on ne peut obtenir, a priori, tous les états stationnaires, ni même métastables, du système : Pour un  $\ell$  donné, il existe toujours des états qui vérifient :

$$|P_{n+1} + P_{n-1} - 2P_n| > m(\ell)$$

où  $\ell \mapsto m(\ell)$  est la fonction inverse de  $m \mapsto \ell(m)$ .

Toutefois, on obtient une très large classe d’états. En particulier, les états qui vérifient cette condition ne définissent pas nécessairement une densité  $\zeta$  homogène : on peut facilement construire des états auxquels correspond une densité  $\zeta$  asymptotique à  $-\infty$ , différente d’une densité  $\zeta'$  asymptotique à  $+\infty$ . On peut même extraire des suites qui ne définissent aucune densité : ce sont des trajectoires balistiques ; par exemple,  $P_n = \frac{n(n+1)}{2}$ .

### $\gamma$ “Gap” de phonon

Nous allons nous intéresser au spectre des phonons. Si l’on néglige les termes anharmoniques, les phonons sont simplement régis par l’équation des petits mouvements : soit  $\delta = (\delta_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  une variable de phonon et  $D$  la matrice dynamique<sup>18</sup>, on écrit (cf annexe IV)

$$D\delta + \frac{\partial^2 \delta}{\partial t^2} = 0$$

Or,  $F$  étant contractante, les valeurs propres de  $D$  sont, en valeur absolue, d’une part minorées par  $d > 0$ , et d’autre part majorées. Cela est démontré dans l’annexe VIII. On en déduit qu’il existe un “gap” de phonon.

On peut alors, dans le cadre du modèle de Frenkel & Kontorowa, caractériser et distinguer les états métastables et les états seulement stationnaires.

### $\delta$ Caractérisation simple états métastables-états stationnaires

Bien que l’étude des états stationnaires soit intéressante pour la dynamique (voir la partie sur le chaos), on cherche davantage à connaître les états métastables et on voudrait donc les caractériser simplement. Il suffirait de vérifier que la matrice des

---

18.  $D_{n,m} = \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial U_n \partial U_m}$

dérivées seconde  $D$  calculée sur un état stationnaire ( $U_n^o$ ) est positive pour démontrer qu'il s'agit alors d'un état métastable<sup>19</sup>.

Lorsque l'on perturbe un état à partir du couplage nul, si on place tous les atomes dans des minima, on est sûr alors d'obtenir un état métastable. En effet, si l'on prend un système fini (périodique) de taille  $S$ , la matrice des dérivées secondes s'écrit :

$$\begin{pmatrix} a_1 + a_2 + c_1 & a_2 & & & & \\ & a_2 & a_2 + a_3 + c_2 & & & \\ & & \dots & & & \\ & & & \dots & & \\ & & & & \dots & \\ & & & & & a_S \\ & & & & a_S & a_S + a_{S+1} + c_S \end{pmatrix}$$

où on pose :  $a_i = \ell W''(U_i - U_{i-1})$  et  $c_i = V''(U_i)$  qui sont positifs ici puisque l'on est dans les parties convexes des puits, et  $a_{S+1} = a_1$ .

La forme quadratique correspondante s'écrit alors :

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^S (a_i + a_{i+1} + c_i)x_i^2 + 2 \sum_{i=2}^S a_i x_{i-1} x_i &= \sum_{i=2}^S a_i (x_i - x_{i-1})^2 + \sum_{i=1}^S c_i x_i^2 \\ &> 0 \end{aligned}$$

Donc, lorsque l'on passe à la limite d'un système de taille infinie, la forme est encore positive, et tous les états situés dans les fonds des puits de potentiel sont métastables.

Inversement, dès que l'on obtient un état stationnaire dont un atome est situé à un sommet de potentiel, il est instable : en effet, soit un système fini ayant un atome à un sommet, fixons les extrema et laissons varier le paramètre  $\ell$  ; pour  $\ell = 0$ , la matrice des dérivées secondes étant alors diagonale et ses termes diagonaux donnés par  $V''(U_i)$ , elle est trivialement non positive. Si l'on suit une valeur propre  $\lambda$  négative continûment en faisant varier le paramètre  $\ell$ , elle restera négative, puisque l'on ne peut pas franchir zéro, qui n'appartient pas au spectre. Mais, comme elle vérifie  $\lambda < -d$  d'après la section précédente, on peut faire tendre la taille du système vers l'infini. Donc, il suffit qu'un seul atome soit sur un maximum du potentiel pour que l'état soit instable.

---

19. L'espace de Banach dans lequel on se place est muni de la norme uniforme. Si l'on perturbe cet état  $U_n^o$  par  $\delta U_n$  normé, tel que  $U_n^o + \delta U_n$  soit croissant avec  $n$ , on écrit le développement de Taylor-Young de l'énergie sous la forme

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(U_n^o + \delta U_{n \in \mathbb{Z}}) &= \mathcal{E}(U_{n \in \mathbb{Z}}^o) + \sum_m \delta U_m \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial U_m}(U_{n \in \mathbb{Z}}^o) \\ &\quad + \sum_{m,p} \delta U_m \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial U_m \partial U_p}(U_n^o + \theta \delta U_{n \in \mathbb{Z}}) \delta U_p \end{aligned}$$

où  $\theta \in [0, 1]$  et on utilise le fait que  $\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial U_n \partial U_m}$  existe, est continu et borné en tant qu'opérateur sur le Banach  $\{(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}\}$ . Comme  $\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial U_m}(U_{n \in \mathbb{Z}}^o) = 0$  car  $U_n^o$  est un état stationnaire, la différence d'énergie vaut

$$\sum_{m,p} \delta U_m D_{m,p} \delta U_p$$

elle sera donc positive dès que  $D$  sera positive. L'inégalité sera alors même stricte dans ce cas, ce qui évite toute ambiguïté, car on a montré que  $D$  n'admet pas de valeur propre nulle.

Je vais interpréter physiquement, dans la section suivante, le fait que, pour un couplage donné et un  $m$  donné, l'espace des états que l'on obtient par prolongement soit entièrement décrit par les variables correspondant aux extrema du potentiel des numéros de puits des atomes.

Ces numéros décrivent l'espace  $\{(P_n) \text{ tel que } \forall n \in \mathbb{Z}, P_{n+1} > P_n \text{ et } |P_{n+1} + P_{n-1} - 2P_n| \leq m\}$  et peuvent donc, comme à couplage nul, être choisis de manière quasiment aléatoire. Ainsi, le système est décrit par des variables discrètes, qui peuvent être prises de façon aléatoire.

### $\epsilon$ Modèle exact de pseudo-spin

Lorsque l'on impose une structure  $P_n$  arbitraire au système, il relaxe vers un état métastable qui possède la même structure. Donc, on a bien démontré que le système est défectible. On peut décrire les états stationnaires comme une distribution arbitraire de défauts localisés, qui sont en fait des défauts de phase.

On va se restreindre, dans cette section, aux états métastables pour le potentiel ayant un seul puits par période. Les atomes sont alors tous dans les minima des puits, donc, on peut de nouveau décrire le système par les numéros  $M_n$  des puits. La condition (15)  $|P_{n+1} + P_{n-1} - 2P_n| < m$  s'écrit maintenant  $|M_{n+1} + M_{n-1} - 2M_n| \leq h$  avec  $h$  entier.

A couplage nul, on peut écrire n'importe quel état sous la forme (14)

$$U_n = K + \sum_{p \in \mathbb{Z}} \sigma_p (d_{n-p} - d_{-p})$$

où l'on pose  $\sigma_n = M_{n+1} - M_n$ ,  $K$  est une constante et  $d_n = \mathbb{Y}^+(n)$  est un saut de marche localisé à l'origine ( $\mathbb{Y}(x) = 1$  si  $x \geq 0$  et nul ailleurs).

On décrit bien toutes les structures comme une distribution d'un objet "localisé" (la marche d'escalier), et cela généralise entièrement la description des états fondamentaux.

Si l'on fait varier légèrement le couplage, on peut suivre chaque défaut continûment. Cependant, alors que l'on peut décrire les états fondamentaux comme une superposition d'une même discommensuration, les défauts d'une structure excitée vont évoluer différemment en chacun des sites où ils sont situés. Aussi, bien que la décomposition en défauts localisés soit formellement valable, elle sera arbitraire, et il n'y a plus aucun sens à parler d'une discommensuration permettant de décrire les états métastables. Plus précisément, lorsque l'on essaye numériquement de caractériser un défaut élémentaire, on extrait une structure engendrée par une discommensuration fondamentale (c'est-à-dire celle obtenue pour les états fondamentaux) et une structure apparemment amorphe (c'est-à-dire que l'on ne sait absolument pas déconvoluer en un défaut élémentaire). Lorsque l'état n'est pas trop excité, les discommensurations sont prépondérantes, et on décrira donc, en première approximation, les premiers niveaux excités par la formule (14), à petit couplage, où  $d_n$  sera la discommensuration fondamentale. Dans ce cas, la variable  $\sigma_n$  sera essentiellement bornée (puisque lorsque  $\sigma_n$  prend de grande valeur, l'état correspondant est très désordonné, et donc très excité) et joue le rôle d'une variable de spin ordinaire (il faut noter cependant que cette décomposition est exacte pour le potentiel de paraboles raccordées, pour lequel on décrit tous les états métastables par une discommensuration unique).

Si l'on se restreint à ces états faiblement excités, en imposant par exemple que  $\sigma_n$  décrit exactement l'espace  $-J, \dots, J$ ,  $J$  fixé, on peut finalement calculer l'énergie d'interaction entre défauts, en substituant cette formule (14) dans l'hamiltonien initial (discret) On trouve :

$$\mathcal{H} = \sum_n \left[ \frac{1}{2} \left( \sum_p \sigma_p (d_{n+1-p} - d_{n-p}) \right)^2 + V \left( \sum_p \sigma_p (d_{n-p} - d_{-p}) \right) \right]$$

Pour un potentiel de paraboles raccordées, l'énergie d'interaction décroît exponentiellement avec l'“ordre” du défaut (voir annexe IIbis) :

$$\mathcal{E}_{\text{int}} \sim \frac{1 - \eta}{1 + \eta} g \eta^{s_n}$$

où  $r_n/s_n$  est la  $n^\circ$  approximation de  $\zeta$ , et l'on a posé :

$$\eta = 1 + \frac{1}{2\ell} - \frac{\sqrt{\ell + \frac{1}{4}}}{\ell} < 1$$

On peut également interpréter la limitation des états accessibles par prolongement de façon physique : les états que l'on obtient sont décrits en terme de défauts. Lors de l'étude des états fondamentaux, cette distribution de défauts était assurée d'être peu dense, et donc facile à interpréter ; cependant, puisque cette description se généralise aux états excités, la distribution de défauts de structure doit être encore bien définie, donc pas trop dense ; les états auxquels on n'a pas accès sont en fait ceux qui correspondent à une densité telle qu'il n'y aurait de toute façon plus aucun sens à parler de défauts de structure.

Il faut noter que toutes les démonstrations, concernant le prolongement analytique, etc, ainsi que la description du fondamental, sont valables à n'importe quelle dimension. (La généralisation des résultats pour le fondamental, comme la quasi-périodicité, reste toutefois problématique).

On va maintenant procéder à une étude analogue pour le système de Holstein-Peierls, qui est particulièrement intéressant d'un point de vue physique (je me place toujours dans l'approximation adiabatique, et je m'intéresse plus particulièrement aux variables des phonons).

## e Cas du modèle de Holstein-Peierls

### $\alpha$ Cas du couplage nul

Je vais d'abord examiner les solutions à couplage nul, pour mieux comprendre le système. Ce modèle est entièrement résolu en annexe V. On trouve finalement que les solutions sont formées par des configurations où les atomes sont, soit totalement occupés, soit totalement vides. Donc, la concentration électronique  $\rho_n \in 0, 1$ . Et, on distribue les atomes occupés comme on le veut, donc de façon totalement libre, avec toutefois la condition (3) :

$$\frac{1}{S} \sum_n \rho_n = \zeta$$

Tous ces états sont métastables et parfaitement dégénérés, la dégénérescence étant levée dès que  $\ell \neq 0$ . (Il n’y a pas d’état instable, contrairement au modèle de Frenkel & Kontorowa). Cependant, on profitera de la proximité entre les énergies de ces états.

On peut essayer d’interpréter cette répartition comme celle d’électrons totalement localisés et indépendants. Mais, cela est en toute rigueur faux, car la perturbation en  $\ell$ , même avec une valeur infinitésimale, peut induire une symétrie spontanée : les limites quand  $\ell$  tend vers zéro des solutions à  $\ell$  non nul sont les bons états physiques. Les analyses numériques donnent, pour les différents états propres du hamiltonien, quand le couplage devient petit, des états partiellement délocalisés : pour une configuration de 55 atomes avec 21 électrons, et un couplage  $\ell = 0.25$ , ce qui est très faible, pour ce modèle, on obtient grossièrement la figure 15.

Dans cette figure, les fonctions d’ondes des premiers états électroniques respectent deux symétries, une centro-symétrie dans l’espace réel, et une symétrie de l’énergie autour de la valeur centrale ; de ce fait, il sont tous (sauf un) répartis sur au moins quatre sites, certains sur huit sites.

En plus de cette évidence numérique, on peut citer un cas, bien que non générique, pour lequel on sait calculer explicitement les fonctions d’ondes et montrer qu’elles sont délocalisées : si l’on considère une concentration entièrement périodique (ce qui impose alors  $\zeta$  rationnel à une dimension), on trouve des fonctions d’ondes électroniques également périodiques, pour tout couplage, qui admettent une limite à  $\ell = 0$ .

### $\beta$ Cas général

L’ensemble des démonstrations sont détaillées dans l’annexe VI. Elles seront également reprises dans des articles actuellement en préparation<sup>[31]</sup>.

On se contentera donc de travailler avec les variables des phonons  $(U_n)$ , en “factorisant” et supprimant la contribution des électrons : on évite ainsi tous les problèmes de localisation d’une fonction d’onde électronique particulière, bien qu’on calcule la concentration totale électronique  $\rho_n$ , qui est celle mesurée expérimentalement (rappel :  $\rho_n = -U_n$ ). On supposera que les électrons remplissent les premiers niveaux en énergie jusqu’au niveau de Fermi, et pour chaque configuration  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ , on résoudrait ensuite l’équation de Schrödinger des électrons, avec ces  $U_n$ .

Je vais définir l’opérateur  $F$ , qui sera utilisé pour l’application du théorème du point fixe.

Soit un  $\ell$  donné une fois pour toute, petit. Soit  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  une répartition quelconque, également fixée. On considère l’équation de Schrödinger (qui est l’équation de stationnarité pour les électrons), avec ces  $U_n$  :

$$-\ell\psi_{n+1}^\mu - \ell\psi_{n-1}^\mu + U_n\psi_n^\mu = E^\mu\psi_n^\mu$$

On résout formellement cette équation ; c’est-à-dire que l’on garde les premiers niveaux jusqu’au niveau de Fermi. On définit alors

$$\begin{aligned} U'_n &= F_n(U_{m \in \mathbb{Z}}) \\ &= - \sum_{\mu \text{ occ}} |\psi_n^\mu|^2 \end{aligned}$$

Si l’on montre qu’une suite  $(U_n^k)_{n \in \mathbb{Z}})_{k \in \mathbb{N}}$  définie par :

$$U_n^{k+1} = F_n(U_{m \in \mathbb{Z}}^k)$$



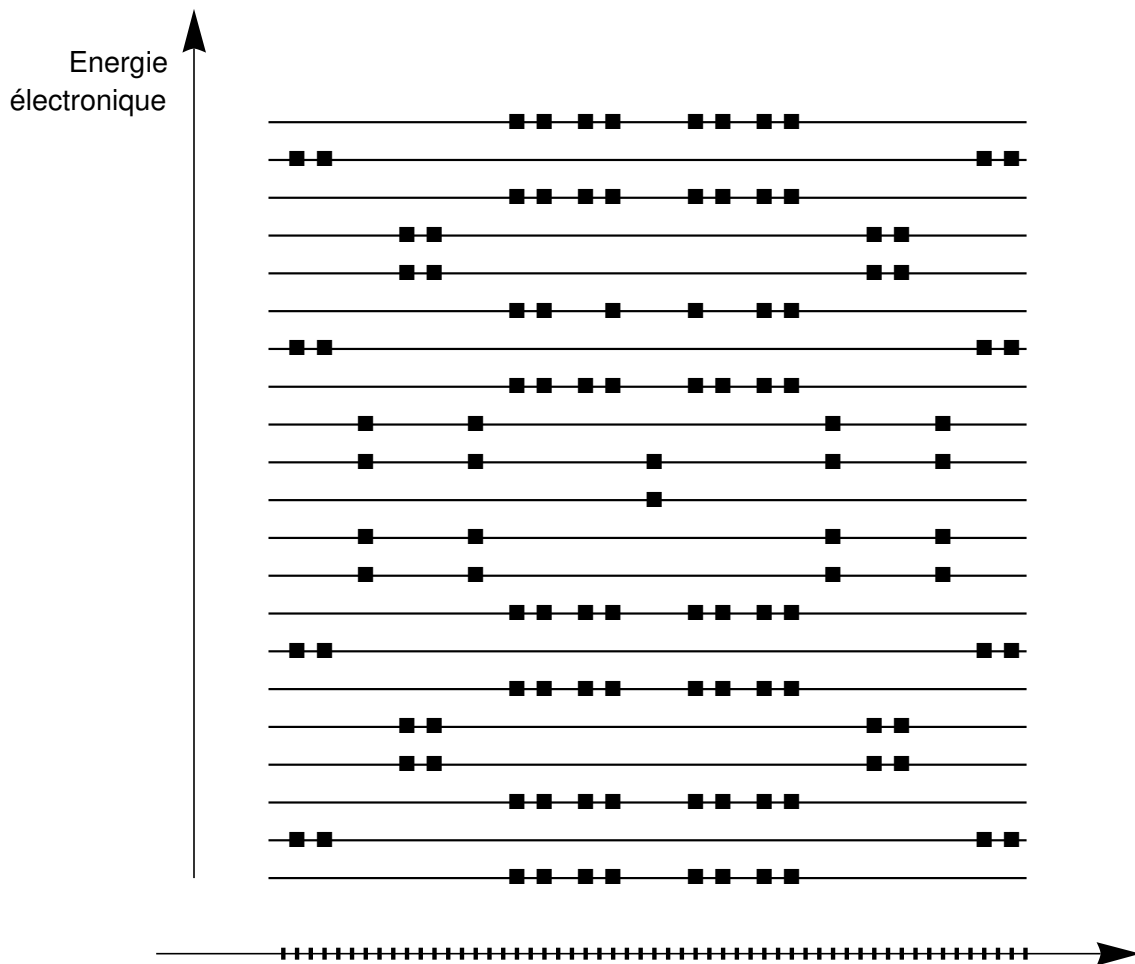


FIGURE 15 – On représente les 21 premiers niveaux électroniques du système  $\frac{R}{S} = \frac{21}{55}$  et  $\ell = 0.25$ , par les traits horizontaux, correspondant aux 21 états occupés. L'axe des abscisses représente les sites atomiques. Lorsque un état électronique est localisé sur un site, on trace un carré noir, sinon rien. Le couplage est très petit, donc on est proche de la solution décrite par le texte. Les solutions ont été trouvées numériquement, et ne sont pas entièrement localisées sur un site (sauf le 11<sup>e</sup> niveau) mais sur quatre, voire huit sites différents. On a mis en évidence, par ce dessin, deux symétries, une spatiale, et une symétrie en énergie, qui n'est pas expliquée. Le système a été résolu avec des conditions périodiques des sites atomiques (le 56<sup>e</sup> est le premier).

converge, alors, sa limite vérifiera bien les équations de stationnarité, et, de plus, par continuité avec le système à  $\ell = 0$ , on établira plus loin qu'il s'agit d'une solution métastable.

Pour appliquer le théorème, on va devoir se restreindre aux états dont on sait à priori qu'ils sont proches d'une solution avec des atomes vides ou occupés. Plus précisément, on suppose qu'il existe  $\tau$ ,  $0 \leq \tau < \frac{1}{2}$  tel que les  $U_n$  vérifient :

$$\begin{aligned} \text{soit} \quad & -1 \leq U_n \leq -1 + \tau \\ \text{soit} \quad & -\tau \leq U_n \leq 0 \end{aligned}$$

et on notera  $\mathcal{A}_\tau$  l'espace ainsi défini.

On se place sur cet espace  $\mathcal{A}_\tau$  et, de même que pour le modèle de Frenkel & Kontorowa, on trouve un  $\ell$  maximum pour chaque  $\tau$  donné, tel que le résultat soit vrai pour tous les  $\ell$  en deçà de cette valeur, que l'on note  $\ell(\tau)$ .

Dans ces conditions, on montre bien (dans l'annexe VI) que l'espace  $\mathcal{A}_\tau = \{U_n \in [-1, -1 + \tau] \cup [-\tau, 0]\}$  reste stable par l'application  $F$ .

Pour prouver que  $F$  est contractante, on considère l'opérateur  $\nabla F$  défini par

$$\nabla F_{n,m} = \frac{\partial F_n}{\partial U_m}(U_{p \in \mathbb{Z}})$$

En effet, dans ce cas,  $F$  est contractante (strictement) si et seulement si la norme d'opérateur de  $\nabla F$  est inférieure (strictement) à 1.

On démontre bien (cf annexe VI) que  $F$  est contractante et on peut appliquer le théorème du point fixe. Par ailleurs,  $F$  est continue en  $\ell$ , donc, on a trouvé des solutions  $U_n(\ell)$  continues en  $\ell$ , telles que  $U_n(0)$  soit une solution quelconque à  $\ell = 0$ . Donc, à posteriori, les atomes sont bien, soit presque occupés, soit presque vides.

Dans l'espace  $\mathcal{A}_\tau$  ainsi accessible, l'unicité de la solution démontre que ce choix des atomes vides ou occupés caractérise entièrement les états. On peut décrire le système à l'aide d'une variable discrète. Notons par exemple

$$\begin{aligned} M_n = 0 \quad & \text{si } U_n > -\frac{1}{2} \quad \text{et} \\ M_n = 1 \quad & \text{si } U_n < -\frac{1}{2} \end{aligned}$$

Bien sûr, les  $U_n$  ne prennent pas exactement les valeurs 0 et 1 : on pourra les écrire comme une convolution des  $M_n$  faisant intervenir un objet  $d_n$  très localisé en un site, presque nul ailleurs, et qui représente l'extension de l'atome :

$$U_n = \sum_p M_p d_{n-p}^p$$

où  $d_{n-p}^p$  dépend du site où il est localisé. Comme pour le modèle de Frenkel & Kontorowa, leur détermination reste entièrement arbitraire, et on ne peut pas définir un défaut élémentaire qui permette d'engendrer chaque état métastable. On a néanmoins démontré que le système est entièrement défectible.

On trace la courbe de  $\tau \mapsto \ell(\tau)$  où l'on remplace  $\ell(\tau)$  par une minoration exacte que nous avons établie (figure 16).  $\ell(\tau)$  est nécessairement nul pour  $\tau = \frac{1}{2}$  et  $\tau = 0$ .

Le maximum de la courbe, noté  $\ell_{\max}$ , est atteint pour un  $\tau \leq 0,02$ , donc une densité électronique très localisée, et  $\ell_{\max} \sim 0,12$ .

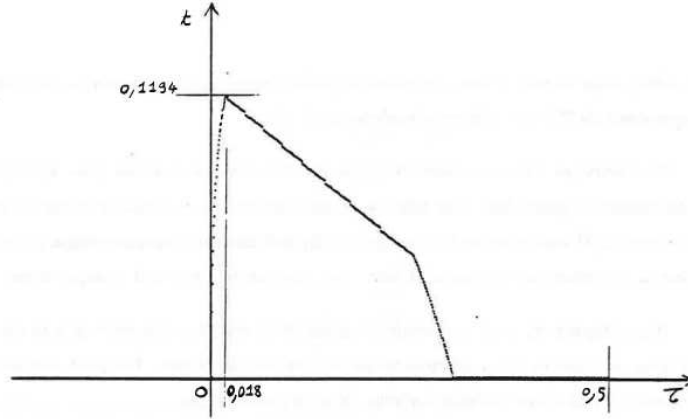


FIGURE 16 – Courbe de  $\tau \mapsto \ell(\tau)$  obtenue en utilisant les majorations tirées de l’annexe VI ainsi que de l’article correspondant<sup>[31]</sup>. Le maximum est atteint pour une valeur de  $\tau$  très petite, ce qui confirme bien l’hypothèse de localisation de la concentration électronique, qui a été faite.

### $\gamma$ “Gap” de phonon

On montre de nouveau que les valeurs propres de la matrice dynamique  $D$ , en valeur absolue, sont toutes plus grandes qu’une valeur  $d$  strictement positive, et on en déduit qu’il existe un “gap” dans le spectre de phonon, à petit couplage. Contrairement au modèle de Frenkel & Kontorowa, on montre en même temps que  $D$  est strictement positive, ce qui implique que tous les états qu’on prolonge par continuité sont métastables. (La démonstration est développée dans le chapitre localisation).

### $\delta$ Métastabilité des solutions obtenues pour le modèle de Holstein-Peierls

On va poser, pour tout  $\ell \leq \ell_{\max}$

$$\mathcal{A}_\ell = \bigcup_{\tau \leq \tau(\ell)} \mathcal{A}_\tau$$

Soit un état dans une configuration de  $\mathcal{A}_\ell$ , pour un  $\ell$  inférieur à  $\ell_{\max}$ . Les électrons sont, par hypothèse, supposés être dans leur état fondamental. De plus, toute variation infinitésimale des  $U_n$  entraînera une augmentation d’énergie strictement positive. En effet, la métastabilité en les variables classiques  $U_n$  est régie par l’équation des petits mouvements, donc par la matrice dynamique  $D$  (voir la note sous-section 3.4.d). Or, on a établi que  $D$  est strictement positive pour toute valeur de  $\ell \leq \ell_{\max}$ . Donc, finalement, on a bien montré que tous les états que l’on obtient par prolongement continu, sont des états métastables et qu’ils n’engendrent pas d’excitations de masse nulle.

Il découle de la métastabilité des états obtenus en prenant une configuration quelconque de  $M_n$ , que le système est défectible, et que les états sont accrochés au réseau. Encore une fois, précisons que la portée finie des défauts est une propriété beaucoup plus générale que la longueur finie de cohérence des excitations infinitésimales, qui découle de l’existence d’un “gap” non nul. On a ainsi établi rigoureusement un phénomène d’accrochage incommensurable, intrinsèque, qui n’est pas dû aux impuretés.

Ces états sont décrits par une variable discrète  $M_n \in 0, 1$ , dont les valeurs peuvent être choisies de façon totalement aléatoire. De même que pour le modèle de Frenkel et Kontorowa, les états fondamentaux correspondent à des séquences particulières de  $M_n$  et les états excités sont décrits par une distribution de défauts à partir de ces structures fondamentales. Je ne m'y attarderai pas davantage, car on ne sait pas résoudre les états fondamentaux pour le modèle de Holstein-Peierls.

On ne connaît pas le nombre d'état qui n'appartiennent pas à  $\mathcal{A}_t$ . Au fur et à mesure que l'on augmente  $\ell$ , il apparaît de tels états par bifurcation. La fonction de partition atomique réduite à  $\mathcal{A}_\tau$

$$\sum_{\text{état } i \in \mathcal{A}_t} e^{-\beta E^i} / \sum_{\text{tous les état } i} e^{-\beta E^i}$$

mesure justement la fraction de particules appartenant à  $\mathcal{A}_t$ . On peut la développer en fonction de  $\ell$ , les écarts entre les énergies des états excités et des états fondamentaux étant linéaires en fonction de  $\ell$ ; et la proportion d'états appartenant à  $\mathcal{A}_t$  va décroître continûment en partant de 1, quand  $t$  augmente en partant de 0.

### **$\epsilon$ Introduction d'un spin physique**

J'ai ignoré entièrement le spin des électrons dans cette étude. Ceci est totalement justifié pour l'étude des états fondamentaux puisque, le modèle choisi ignorant les interactions spin-orbite, les électrons se regroupent par paires et les variables de spin se factorisent entièrement. Par contre, dès lors que l'on considère également les états faiblement excités, il faudrait en toute rigueur discuter de l'importance des termes d'interaction spin-orbite ou avec le moment des atomes. On doit alors aussi tenir compte des termes entropiques et le problème devient beaucoup plus délicat...

### **$\zeta$ Dispersion de phonon**

On peut enfin introduire une dispersion dans le spectre des phonons sans modifier les résultats. Cette remarque est importante d'un point de vue expérimental, car les systèmes réels autorisent toujours une certaine dispersion.

On trouvera une étude exacte du modèle avec dispersion à couplage nul dans l'annexe V, ainsi que les principaux traits de la généralisation de la méthode, dans l'annexe VI.

Les parties suivantes s'attacheront plus particulièrement au caractère localisé et aléatoire des états obtenus par prolongement analytique.



# D Localisation. Structure chaotique

Nous avons justifié, dans la partie précédente, l'existence d'une zone de couplage, pour lequel le système est non-analytique. Nous avons d'abord introduit le nom, d'après la propriété de la fonction enveloppe, pour les modèles de Frenkel & Kontorowa, mais nous allons le relier à des propriétés plus générales, et montrer, dans cette partie, que le système se comporte, dans ces régimes, de façon à la fois fortement localisée et aléatoire, ce qui est mis en évidence par l'existence d'une reparamétrisation par une variable de spin (variable discrète) régie par une interaction très faible et à courte distance.

Pour cela, on prolonge continûment en faisant varier  $\ell$  les solutions d'énergie minimale obtenues à  $\ell = 0$  dans l'ensemble des états métastables. On décrit ainsi tous les états métastables, sauf les plus excités; plus on cherche à obtenir des états fortement excités, plus le prolongement sera limité à des petites valeurs de  $\ell$ . Les états prolongeables par continuité sont surtout des états faiblement excités, et la modélisation du système à l'aide d'une variable discrète sera d'autant plus valable que l'on se place à basse température.

Pour le modèle de Frenkel & Kontorowa, la continuité en  $\ell$  des développements en perturbation du système à couplage nul nous autorise, de façon rigoureuse, à toutes les approximations, sur le potentiel périodique, ou sur le potentiel d'interaction  $W$ , que l'on prend. En particulier, est valable, dorénavant, toute analogie avec un potentiel de paraboles raccordées, puisque l'on pourra continûment faire évoluer le système de cette structure vers la vraie structure. Or, on sait résoudre exactement les solutions métastables de ce système, et on écrit alors explicitement l'énergie en fonction de la variable discrète  $M_n$ , qui permet de décrire le système. On s'efforcera dans le chapitre suivant de montrer le caractère localisé et aléatoire de manière très générale et je n'indiquerai les formules obtenues pour le potentiel de paraboles raccordées qu'à titre d'exemple.

## 1 Localisation

Ces systèmes présentent un caractère fortement localisé dans le sens où toute perturbation infinitésimale localisée entraîne une modification localisée de la structure fondamentale, quand le système relaxe<sup>20</sup>, autrement dit, que la longueur de cohérence est finie. Mais surtout, que toute perturbation réelle finie localisée entraîne également une modification localisée.

---

20. C'est-à-dire que la différence entre l'état initial et l'état métastable obtenu après perturbation tend exponentiellement vers zéro quand  $n$  (le numéro des atomes) tend vers l'infini.

## a Cohérence finie. Défauts

Etudions d'abord la propagation d'une déformation infinitésimale.

### α Longueur de cohérence

Pour étudier les phonons, on se ramène à l'étude de la matrice  $D = (\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial U_i \partial U_j})_{i,j}$  des dérivées secondes du hamiltonien par rapports aux variables (classiques) du problème, car on se place alors dans une approximation quadratique. Les équations de Lagrange pour un phonon s'écrivent en effet<sup>[32]</sup> :

$$\frac{\partial \delta_n^2}{\partial t^2} + \sum_m D_{n,m} \delta_m = 0$$

(voir en annexe IV une dérivation plus directe de ces équations de propagation).

On va montrer qu'il y a un "gap" de phonon, c'est à dire qu'il n'y a pas de phonon de fréquence nulle (boson de Golstone). Cela consiste donc à montrer que cette matrice  $D$  n'a pas de valeur propre nulle - on sait par ailleurs que, pour les états métastables, elle est positive -. Il s'agit surtout d'étudier l'ouverture du "gap" autour de  $k \sim 2k_f$ , qui correspond à la longueur d'onde de la distorsion de Peierls : on a pu constater que le modèle décrit très bien cette distorsion. Par contre, les effets accoustiques ne sont absolument pas pris en compte.

Expérimentalement, sur les systèmes ondes-densité-de-charge, on observe deux ondes, non indépendantes, un phason, qui correspond à une modulation de la phase de l'onde de densité de charge (donc des  $U_n$ ), et un ampliton, qui correspond à la modulation de l'amplitude. Ces deux modes présentent un tel "gap", à petit couplage.

Or, je vais montrer que ce problème est, d'une façon très générale, lié à la contraction de l'application  $F$  qui nous a permis d'étudier les états stationnaires.

$F$  contractante signifie encore que  $\nabla F$  est contractante (voir section 3.5.b). Or, on a génériquement :

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial U_n} = U_n - F_n(U_{kk \in \mathbb{Z}})$$

donc

$$\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial U_i \partial U_j} = \delta_{i,j} - \frac{\partial F_i}{\partial U_j}$$

soit finalement

$$D = \mathbb{I} - \nabla F$$

donc, soit  $|\lambda|$  la plus grande valeur propre de  $\nabla F$  en norme, on a  $|\lambda| < 1$  puisque  $\nabla F$  est contractante. Donc,  $D$  est borné, en norme, par  $1 + \lambda$ , et  $1 - |\lambda|$  est la plus petite valeur propre, strictement positive, de  $D$ . Donc, on en déduit l'existence d'un "gap" de phonon.

Le calcul précédent est effectivement valable pour le modèle de Holstein-Peierls. Il prédit également, comme annoncé, que  $D$  est strictement positive, pour tous les états (il n'y a pas d'état instable). Pour le modèle de Frenkel & Kontorowa, le calcul exact se trouve dans l'annexe VIII, mais il n'apporte aucune modification majeure ( $D$  n'est plus alors nécessairement positive).

En terme de théorie des champs, cela se traduit également par le fait que la masse  $m$  des phonons est non nulle (voir l'annexe IV) : les phonons ont une longueur de propagation finie et égale à  $\frac{\hbar}{mc}$ . Autrement dit, leur fonction d'onde décroît exponentiellement avec  $|n|$ .

En particulier, il n'existe pas de boson de Goldstone (cf également annexe IV) et la phase n'est pas libre. Cela indique à priori que le système est accroché au réseau. Nous allons maintenant vérifier ce dernier point, en généralisant la notion de cohérence finie aux perturbations réelles (non infinitésimales).

### $\beta$ Défauts. Ancrage au réseau

La métastabilité des états engendrés en introduisant une distribution quelconque de défauts de structure démontre que le système est défectible, et en particulier, que l'insertion d'un défaut localisé entraîne une modification localisée de la structure. Ceci est un résultat à priori plus fort que la longueur de cohérence finie des excitations infinitésimales, puisqu'alors les déformations que l'on a imposées au système sont finies. On démontre<sup>[30]</sup> que la discommensuration fondamentale, qui décrit bien les défauts dans les états faiblement excités, tend exponentiellement vers zéro en  $-\infty$  et  $a$  en  $+\infty$ , ce qui complète la généralisation de la notion de longueur de cohérence finie.

On peut réinterpréter le phénomène d'ancrage (ou accrochage) au réseau, qui est toujours une conséquence de l'unicité, pour une distribution de  $M_n$  donnée, dans l'application du théorème du point fixe.

Les excitations sont décrites par une distribution quelconque de défauts. Mais, ces défauts sont tous fixes, accrochés : **ce sont les défauts (de structure) qui ancrent le système au réseau.**

Ce phénomène est primordial, car, le système n'a maintenant plus aucune rigidité, et ceci empêche un glissement entièrement libre, et donc supraconducteur de se produire - dans le régime analytique, c'est justement la rigidité qui interdit la supraconductivité -.

On peut également étudier les corrélations pour mettre en évidence le caractère localisé du système.

## b Corrélations

Quand on décompose  $U_n$ , comme à la section 1.8, partie II, en une variable périodique et une variable discrète  $(\bar{U}_n, M_n)$ , (cette formule, qui n'est établie que pour le modèle de Frenkel & Kontorowa avec un potentiel à un seul minimum par période, peut être évidemment généralisée), les deux variables  $(\bar{U}_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  et  $(M_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  sont entièrement décorrélées. On peut donc indifféremment définir les corrélations globalement ou sur chacune de ces variables, ce que nous allons faire.

### $\alpha$ Structure fine

J'appelle ainsi structure fine l'analyse des corrélations des  $\bar{U}_n$ , qui concerne donc les variations continues de  $U_n$ . Au premier ordre, la matrice des corrélations sera donnée par

$$C_{n,m} = \frac{\partial U_n}{\partial U_m}$$



On vérifie que ses valeurs non diagonales décroissent exponentiellement avec  $|n - m|$ . La démonstration fait partie d'un article en cours de préparation<sup>[31]</sup>. Ceci permet de définir une longueur de corrélation finie.

On peut également interpréter ces corrélations comme celles entre les  $h_n$ , où  $h_n$  est la hauteur de l'atome  $n$  par rapport au fond du puits (cf annexe II). Il y a une bijection entre les  $\bar{U}_n$  et les  $h_n$  et donc la longueur de cohérence reste inchangée.

### $\beta$ Structure grossière

On définit ici les corrélations entre les variables de spin<sup>21</sup> qui permettent de décrire les états métastables dans le régime non-analytique, comme cela a été démontré. Comme il s'agit ici d'une variable discrète, on adopte le formalisme probabiliste. La matrice des corrélations est donnée par

$$C_{n,m} = \langle \sigma_n \sigma_{n+m} \rangle - \langle \sigma_n \rangle^2$$

On extrait les coefficients à partir d'une fonction génératrice

$$\left| \sum_n e^{iq\sigma_n} \right|^2$$

qui est directement reliée au facteur de structure, donc à une quantité physiquement mesurable.

On sait résoudre ce problème exactement pour le modèle des paraboles raccordées : à une température  $T$  donnée, le système est équivalent à un système de spin, où les spin sont les blocs  $A_n$  introduits à la section 1.9, partie II, soumis à une interaction plus-proches-voisins.  $n$  est choisi de sorte que l'énergie d'un défaut  $d_n$  soit du même ordre de grandeur que  $k_B T$ . Le système est dans ce cas fortement décorréolé, de telle sorte que la longueur de corrélation est approximativement<sup>[33]</sup> la taille du bloc  $A_n$ .

On en déduit, entre autres, le comportement de la chaleur massique en fonction de la température<sup>[33]</sup>.

## 2 Chaos

### a Introduction

On a démontré que les structures que l'on a trouvées sont fortement aléatoires. A température non nulle, les premiers états excités seront fréquemment occupés, et on ne pourra pas déterminer la position dans laquelle se trouve le système. Toutefois, les systèmes étudiés ne comportent pas de dynamique, et on peut seulement conclure qu'on a obtenu une structure chaotique à température nulle.

Cependant, lorsque l'indice  $n$  de la variable  $U_n$  décrit  $\mathbb{Z}$  (et non  $\mathbb{Z}^2$  ou d'autres, qui sont des généralisations autorisées), on peut transformer le système en un système dynamique, de la manière que j'ai indiquée à propos du théorème de K.A.M., dans la troisième partie. La variable  $n$  devient alors un temps discret, et l'énergie devient une action. Or, nos résultats démontrent, dans ce cadre, l'existence d'un chaos dynamique.

---

21.  $\sigma_n$  pour le modèle de Frenkel & Kontorowa, et  $M_n$  pour le modèle de Holstein-Peirls, mais on garde ici une notation  $\sigma_n$  quelle que soit la variable choisie.

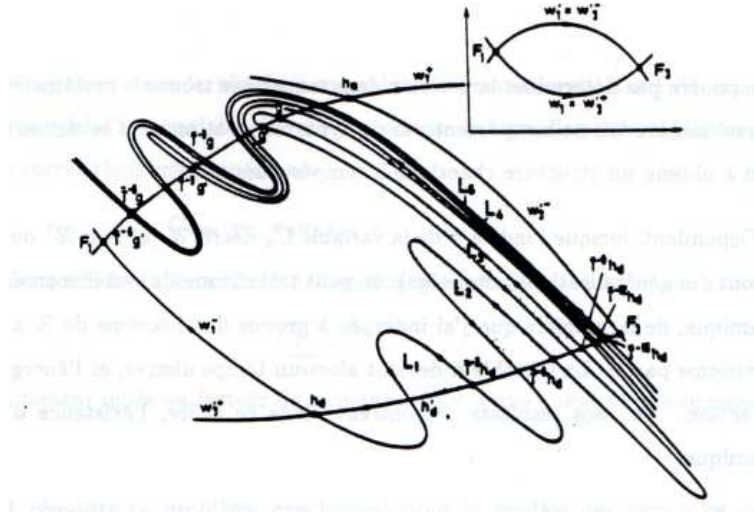


FIGURE 17 – Diagramme de phase en fer-à-cheval : On représente les points  $F_1$  et  $F_3$  fixes par l’application standard, qui a été rapidement introduite à la section 2.1, partie III. Ils correspondent aux états stationnaires du système de Frenkel & Kontorowa. Les courbes représentent les variétés contractantes et dilatantes sous cette application ; ainsi les points fixes sont aux croisements des courbes. L’existence de nombreuses intersections rend le système défectible et non déterministe. Le diagramme en encart représente un système déterministe : la barrière de Peirls-Nabarro est nulle dans ce cas.

## b Chaos dynamique

La notion de chaos dynamique a été d’abord introduite par Poincaré<sup>[34]</sup> au siècle dernier. Poincaré a d’abord montré que l’on peut décrire n’importe quel problème dynamique à l’aide d’un temps discret. Il a donc représenté l’évolution d’un système par les images itérées, à partir d’une configuration donnée, par un opérateur. On obtient des représentations comme celle de la figure 17, dite en fer-à-cheval. Les points se déplacent suivant des variétés dilatantes et contractantes, et lorsque l’on trouve des points singuliers, comme sur la figure 17, Poincaré a montré que l’on obtient un système non déterministe.

### $\alpha$ Codage aléatoire

Nous avons explicitement démontré l’existence de chaos en exhibant des solutions qui varient aléatoirement avec  $n$ , donc maintenant, avec le temps. L’existence du chaos, lorsqu’un système est décrit au cours de ses itérations par un codage aléatoire, n’est pas rigoureusement démontrée, mais elle est admise par tous les mathématiciens spécialistes du chaos.

### $\beta$ Non-intégrabilité

Quand on prolonge le système analytique, on considère les solutions du système à couplage  $g$  nul, et on montre qu’on peut les prolonger continûment et obtenir ainsi tous les états fondamentaux. On dit que le système est intégrable. Il est alors indéfectible,

autrement dit, ce sont les seuls états métastables. On a ainsi obtenus tous les états physiques du système. Notre démarche est analogue, ici : on considère les solutions d'un système, quand le paramètre  $\ell$  est nul (les états fondamentaux sont entièrement chaotiques), et on les prolonge continûment. On se place, non plus dans l'espace des états fondamentaux, mais dans l'espace des états métastables, qui est maintenant très différent de l'espace des états fondamentaux, car le système est défectible. Le système est dit alors anti-intégrable.

# E Dualité

Je voudrais introduire le concept de dualité sur un exemple particulier, le modèle de Harper, pour lequel on sait démontrer certaines propriétés par la dualité<sup>[35]</sup>. Cela soulignera son importance.

## 1 Modèle de Harper

Il s'agit d'un système d'électrons régis par une interaction plus-proches-voisins plus un champ de potentiel sinusoïdal : la fonction d'onde  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  vérifie une équation de Schrödinger à une dimension :

$$\ell\psi_{n+1} + \ell\psi_{n-1} + 2 \cos(2\pi(\zeta n + \alpha))\psi_n = E\psi_n \quad (16)$$

où  $\zeta$  est irrationnel, et  $\alpha \in \mathbb{R}$ .

### a Équation duale

Dans cette équation (16), le rapport irrationnel est explicite. On peut chercher les solutions sous la forme de fonctions de Bloch généralisées à deux périodes, 1 et  $\zeta$ , soit une somme d'ondes planes  $e^{2\pi i(n+\zeta m)}$ . Dinaburg et Sinai<sup>[36]</sup> ont proposé une forme de la fonction de Bloch particulière :

$$e^{2\pi i k n} \chi_k(\zeta n + \alpha)$$

où  $\chi$  est une fonction 1-périodique.

Comme  $\zeta$  est irrationnel, et donc<sup>22</sup> que  $\bar{n}\zeta$ ,  $n \in \mathbb{Z}$  est dense dans  $\mathbb{R}$ , on développe, non pas  $\chi_k(\zeta n + \alpha)$  par une somme de Poisson, mais  $\chi_k(x)$  par une série de Fourier.

On cherche donc des solutions de la forme

$$\psi_n = \int e^{2\pi i k n} \sum_m e^{2\pi m(\zeta n + \alpha)} \chi_{k,m}$$

Alors,  $\chi_{k,m}$  vérifie une équation, dite équation duale (où j'ometts l'indice  $k$ , fixe, pour plus de clarté)

$$\ell' \chi_{m+1} + \ell' \chi_{m-1} + 2 \cos(\zeta m + \alpha') \chi_m = E' \chi_m$$

avec  $\ell' = \frac{1}{\ell}$ ,  $E' = \ell E$  et  $\alpha' = k$ .

L'équation duale des  $(\chi_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  est formellement identique à la première. On pourra notamment définir la phase  $\alpha$  comme la quantité de mouvement correspondant à la variable  $\chi_n$ . On dit que le système est auto-dual.

---

22. Je reprends la notation  $\bar{x} = x$  modulo  $a$  dans toute cette partie.

## b Détermination d'une transition

Notons alors une chose : si les solutions  $(\chi_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  sont exponentiellement localisées, c'est-à-dire si  $\sum_n |\chi_n|^2$  converge exponentiellement, alors une onde plane  $e^{2\pi i k n} \chi_k(\zeta n + \alpha)$ , où  $k$  est fixé, est une bonne solution du premier système. Mais, réciproquement, si par contre les solutions  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  sont exponentiellement localisées, les ondes planes seront des bonnes solutions du second système.

On ne résoudra pas le système (cf S.Aubry et G.André<sup>[35]</sup>), mais d'après ces premières indications, on admet facilement que, soit le système  $(\psi_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  est localisé et le système dual délocalisé, soit l'inverse.

En particulier, il existe nécessairement au moins une zone de couplage selon  $\ell$  où le système est localisé, et une où il est délocalisé -Considérez que, quand on change  $\ell$  en  $\frac{1}{\ell}$ , cela revient à prendre le système dual, donc à passer de solutions localisées à des solutions en ondes planes, ou vice-versa-.

Si l'on admet qu'il n'existe que deux régimes différents suivant le couplage (ce qu'on démontre encore), il existe une transition d'un régime à l'autre et le couplage critique vaut tout simplement  $\ell_c = 1$ .

## 2 Dualité par Fourier

La dualité apparaît donc dès que le système est incommensurable. Bien que apparemment axée sur la forme de la fonction de Bloch généralisée, proposée par Dinaburg et Sinai<sup>[36]</sup>, l'équation duale est essentiellement une transformée de Fourier de l'équation initiale. La forme particulière de la fonction de Bloch employée permet ici de retrouver une équation rigoureusement identique, donc de définir un système auto-dual, qui est en partie soluble. L'équation de Fourier associée est elle-même une forme analogue au système initial, et elle impose aussi le changement de variable  $\ell' = \frac{1}{\ell}$  qui est le moteur essentiel de la dualité ici<sup>23</sup>.

On va essayer de généraliser le résultat précédent à d'autres modèles, en particulier celui de Frenkel & Kontorowa, en appliquant la transformation de Fourier (à peu de choses près). On ne va pas retrouver une identité entre l'équation initiale et l'équation duale, mais on va essayer de montrer qu'une classe entière de systèmes<sup>24</sup> est invariante par transformation de Fourier. Si, par ailleurs, on sait démontrer que les propriétés des solutions s'inversent bien quand on transforme une équation en son dual (par exemple analytique  $\rightarrow$  non-analytique, ondes localisées solutions  $\rightarrow$  ondes planes solutions, etc), on en conclura de même qu'il existe deux zones de couplages, une zone analytique, et une zone non-analytique, séparées par une transition critique.

### a Équations de Fourier

Je me restreins à l'étude de la dualité sur le modèle de Frenkel & Kontorowa, avec  $W(x) = \frac{1}{2}x^2$ , qui est plus facile à traiter.

---

23.  $g' = \frac{1}{g^2}$  comme dans Holstein-Peierls serait aussi convenable.

24. Par exemple, les modèles de Frenkel & Kontorowa généralisés, etc.

### $\alpha$ Calcul à partir de l'équation de stationnarité en $f$

Pour mettre en valeur l'aspect incommensurable du système, on prendra l'équation de la fonction enveloppe, qui est l'équation de stationnarité de ces systèmes. On a, d'après l'équation (11) :

$$\ell f(x+l) + \ell f(x-l) - 2\ell f(x) + V'(f(x)) = 0$$

On pose, en profitant de la périodicité de  $f - Id$  :

$$X_n = \int_0^a f(x) e^{\frac{2\pi}{a}inx} dx$$

où il existe une constante arbitraire connue.

On trouve l'équation duale associée<sup>25</sup> :

$$4\ell \sin^2(\pi\zeta)X_n + V''(O)X_n + \sum_{p=2}^{\infty} V^{(p+1)}(0) \left( \underbrace{X * \dots * X}_{p \text{ fois}} \right)(n) = 0$$

d'où encore

$$\left(4 \sin^2(\pi\zeta) + \frac{1}{\ell}\right)X_n + \frac{1}{\ell} \sum_{p=2}^{\infty} V^{(p+1)} \left( \underbrace{X * \dots * X}_{p \text{ fois}} \right)(n) = 0.$$

On a bien montré qu'à une équation avec un couplage  $\ell$  de la variable  $U_n$  correspond une équation analogue avec un couplage  $\ell' = \frac{1}{\ell}$  de la variable  $X_n$ , à condition de pouvoir diviser par  $\sin^2(\pi\zeta) + \frac{1}{\ell}$  quand  $\ell \rightarrow \infty$ . En effet, l'application autour de laquelle on espère "pivoter"<sup>26</sup> pour appliquer la méthode du point fixe à l'équation duale est :

$$x \mapsto \left(\sin(\pi\zeta q) + \frac{1}{\ell}\right)x$$

Ceci est lié au problème des petits dénominateurs, que l'on a déjà mentionné, et on retrouve ainsi les conditions de validité restreinte en  $\zeta$  des résultats à petit couplage. Une fois passée cette difficulté<sup>[28]</sup>, on pourra poser une récurrence

$$X_n^{k+1} = -g \frac{1}{4 \sin^2(\pi\zeta) + g} \sum_{p=2}^{\infty} V^{(p+1)} \left( \underbrace{X^k * \dots * X^k}_{p \text{ fois}} \right)(n)$$

où l'on note  $g = 1/\ell$  et on appliquera finalement le théorème du point fixe pour trouver des solutions prolongeables autour de  $g = 0$ . L'équation duale conduit bien à des solutions similaires à celle de l'équation initiale, mais  $g$  joue ici le rôle de  $\ell = \frac{1}{g}$ .

---

25. \* désigne la convolution

26. c'est-à-dire le terme  $a(u)$  tel que l'on puisse récrire l'équation de stationnarité

$$a(u) + b(u) = 0$$

sous la forme d'une équation de récurrence

$$u^{k+1} = a^{-1}(b(u^k))$$

La solution  $(X_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  est discrète. Si on avait travaillé avec des distributions et des vraies transformées de Fourier, on aurait trouvé une fonction multipliée par un peigne de Dirac de période  $\frac{2\pi}{a}$  et les valeurs de la fonction en chaque abscisse  $\frac{2\pi}{a}n$  où l'on trouve un Dirac seraient  $X_n$  (voir le calcul en section 2.2.b, qui est de ce genre). Finalement, la transformée de Fourier d'une telle fonction est une fonction de Bloch. On retrouve ainsi le théorème de K.A.M., avec les conditions de validité en  $\zeta$ .

## b Développement en Fourier

On a mis en évidence l'analogie entre les deux régimes à petit et grand couplage, grâce à la dualité par Fourier.

Les équations duales restent cependant très complexes, et on évitera, à priori, d'appliquer la méthode du point fixe et d'effectuer les calculs.

Or, pour établir l'existence d'une transition, on doit connaître les propriétés (analytique, non-analytique) de leurs solutions et la manière dont elles se transforment par dualité. Sans pouvoir trop approfondir l'étude de ces équations, on sait toutefois calculer explicitement les coefficients de Fourier qui les vérifient : Lorsqu'on se place à priori dans le régime non-analytique, on dispose d'une décomposition de la fonction enveloppe, qui nous permet d'accéder directement aux coefficients de Fourier de  $f$  (ou de  $f'$ ).

### α Calcul direct

Nous allons d'abord calculer ces coefficients de façon pédestre à partir de la formule (13) :

$$f(x) = f(x_o^+) + \sum_{n \in \mathbb{Z}} b_p \left[ \frac{x - pl}{a} - \left[ \frac{x_o - pl}{a} \right]^+ \right]^+$$

On définit :

$$C_n = \int_0^a h(q) e^{-\frac{2\pi}{a}iqn} dq$$

avec  $h = f - Id$ , qui est  $a$ -périodique.  $C_n$  est le coefficient de la série de Fourier associée à  $h$ . On oublie les constantes éventuelles de  $h$ , dont la transformée serait un Dirac. On trouve

$$C_n = \sum_{p \in \mathbb{Z}} -b_p \left( e^{-\frac{2\pi}{a}in(\bar{p}l)} - 1 \right) / \left( -\frac{2\pi}{a}in \right)$$

On en déduit également le coefficient  $C'_n$  de  $f'$ , puisque l'on a <sup>27</sup> :  $\tilde{f}' = \left(\frac{2\pi}{a}in\right)\tilde{f}$  :

$$C'_n = \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p e^{-\frac{2\pi}{a}in(\bar{p}l)} - a$$

On peut encore écrire cette dernière formule de manière à faire apparaître un résultat remarquable, et en omettant la constante :

$$\begin{aligned} C'_n &= \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p e^{-\frac{2\pi}{a}npl} \\ &= \tilde{b}(n\zeta) \end{aligned}$$

---

27.  $\tilde{\cdot}$  désigne la transformée de Fourier d'une fonction.

où  $\tilde{b}$  est la somme de Fourier de  $(b_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ , au sens<sup>28</sup>

$$\tilde{b}(x) = \sum_{n \in \mathbb{Z}} e^{-2\pi i x n} b_n$$

Le  $n^{\circ}$  coefficient de Fourier de  $f'$  est égal à la somme de Fourier de  $(b_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  prise en  $n\zeta$ . Ce résultat est essentiel et va nous permettre d'établir les propriétés suivantes.

### $\beta$ Calcul par les distributions

Je voudrais refaire rapidement ce calcul par la théorie des distributions. Le résultat sera inchangé, mais cela nous fournit un exemple de calcul par des vraies sommes de Fourier, afin de montrer les correspondances avec les séries.

On calcule directement la transformée de Fourier de  $f'$ . On a l'équation (13) :

$$f(x) = f(x_o^+) + \sum_{n \in \mathbb{Z}} b_p \left[ \frac{x - pl}{a} - \left[ \frac{x_o - pl}{a} \right]^+ \right]^+$$

donc

$$f' = \sum_{n \in \mathbb{Z}} b_p \sum_{k \in \mathbb{Z}} \delta_{pl+ka}$$

donc, soit  $\text{III}_a$  le peigne de Dirac<sup>29</sup> de période  $a$ ,

$$f' = \text{III}_a * \left( \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p \delta_{pl} \right)$$

d'où :

$$\tilde{f}' = \text{III} \times \left( \sum_{p \in \mathbb{Z}} b_p e^{-\frac{2\pi}{a} i n p l} \right)$$

donc  $\tilde{f}'$  prend ses valeurs sur  $\mathbb{Z}$  et le coefficient associé au Dirac au point  $n$  vaut alors :

$$\tilde{b}(n\zeta)$$

On retrouve les mêmes résultats par ce calcul que par le précédent, mais les coefficients d'une série de Fourier ont été remplacé par des Dirac multipliés par ces mêmes coefficients.

Il sera finalement plus élégant de définir la transformation duale par l'application qui associe, aux  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  initiaux, les  $(C'_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ , qui sont aussi les coefficients des Dirac de  $\tilde{f}'$  en les différents points  $n$ .

28. Je change de convention pour la définition de Fourier, car  $b$  n'a aucune raison d'être définie en relation avec la période  $a$ .

29. Un peigne de Dirac est :

$$\text{III}_b = \sum_{k \in \mathbb{Z}} \delta_{kb}$$

et sa transformée de Fourier usuelle ( $\tilde{f}(q) = \int e^{-2\pi i q x} f(x) dx$ ) est  $\text{III}_{1/b}$ . Cependant, avec la convention que je vais prendre par la suite, on va trouver :

$$\begin{aligned} \widehat{\text{III}}_a &= \text{III}_1 \\ &\text{que l'on note usuellement} \\ &= \text{III} \end{aligned}$$



### $\gamma$ Transition analytique-non-analytique

Quand la fonction  $f$  est non-analytique, on sait, de plus, que les  $b_n$  décroissent exponentiellement<sup>(30)</sup>.

Or, il est alors immédiat que  $\tilde{b}$  est analytique. Si l'on définissait maintenant une fonction enveloppe  $h$  pour les  $C_n$  par

$$h(n\zeta) = C_n$$

et  $h$  1-périodique :

$$\forall x \in \mathbb{R}, h(x+1) = h(x)$$

de façon analogue à celle des  $U_n$ <sup>30</sup>, on trouverait alors  $h = \tilde{b}$ .

Donc, la non-analyticité correspond rigoureusement à l'analyticité pour les variables duales obtenues telles que je les ai définies.

La réciproque est également vraie. Si  $f'$  est analytique, on peut définir les  $b_n$  par

$$b_n = f'(nl)$$

puisque, d'après la correspondance entre les coefficients de Fourier et ceux des Dirac dans le formalisme des distributions, que j'ai établie à la section précédente, cela généralise la première définition. Alors  $f'$  est une somme d'ondes planes :

$$f'(x) = \sum_{\mu} f_{\mu} e^{\frac{2\pi}{a} i \mu x}$$

et donc

$$\begin{aligned} \tilde{b}(q) &= \sum_{n \in \mathbb{Z}} b_n e^{-2\pi i q n} \\ &= \sum_{n, \mu} f_{\mu} e^{\frac{2\pi}{a} i (\mu l - q a) n} \\ &= \text{III} * \left( \sum_{\mu} f_{\mu} \delta_{\mu \zeta}(q) \right) \end{aligned}$$

On a retrouvé exactement une forme identique à celle de  $f'$  à petit couplage.

## 3 Résolution par dualité

Mis à part un problème de petit dénominateur, qui explique que le résultat ne soit pas valable pour tous les rapports  $\zeta$ , on a établi une correspondance entre les régimes analytiques et non-analytiques, grâce à la dualité.

Cela permet de retrouver l'analyticité des solutions à petit régime à partir des résultats que nous avons démontrés à grand couplage (à condition de savoir résoudre ce problème des petits dénominateurs).

Mais surtout, cela démontre directement l'existence d'une transition analytique-non-analytique, puisque la famille des systèmes de Frenkel & Kontorowa est stable par dualité. Par contre, il est exclu d'en déduire la valeur exacte du couplage critique, contrairement au cas du modèle auto-dual de Harper.

---

30. J'ai définis  $h$  par  $h(n\zeta) = C_n$  plutôt que  $h(nl) = C_n$  pour obtenir exactement la fonction  $\tilde{b}$ .

# F Conclusion

Cette étude complète les résultats déjà connus pour les systèmes d'interaction électron-phonon. Il a donc été rigoureusement établi que les états à grand couplage forment un système aléatoire, avec des concentrations électroniques localisées sur certains sites choisis au hasard.

Cette étude se poursuit en prenant en compte les effets quantiques des atomes, tandis que l'on s'est restreint, ici, à un réseau d'atomes adiabatique. Dans le modèle complet, qui a déjà été présenté en introduction, existe en particulier un paramètre supplémentaire  $\gamma$  qui mesure l'intensité des couplages quantiques par rapport aux autres termes du hamiltonien atomique.

Des études numériques sont actuellement en cours afin d'avancer dans ce problème ; notamment, la thèse de J.L.Raimbault, qui présente des simulations numériques à deux dimensions de ce modèle<sup>[37]</sup>.

On conjecture souvent l'apparition de supraconductivité dans ces modèles. On ne sait pas actuellement trouver de fondements rigoureux à ces idées. On peut cependant espérer exhiber un régime particulier, qui serait supraconducteur. En effet, dans le régime analytique, les ondes de densité de charge deviennent instables, quand on introduit des effets quantiques, laissant plausiblement se développer des ondes supraconductrices<sup>[38]</sup>. S.Aubry a conçu, à partir des premiers développements connus en fonction de divers paramètres, un diagramme de phase (figure 18) empirique, avec une phase supraconductrice.

Enfin, la démonstration d'un chaos dynamique, dans un système non trivial constitue un progrès important dans l'étude des systèmes dynamiques, qui est un sujet d'étude très développé parmi les mathématiciens.

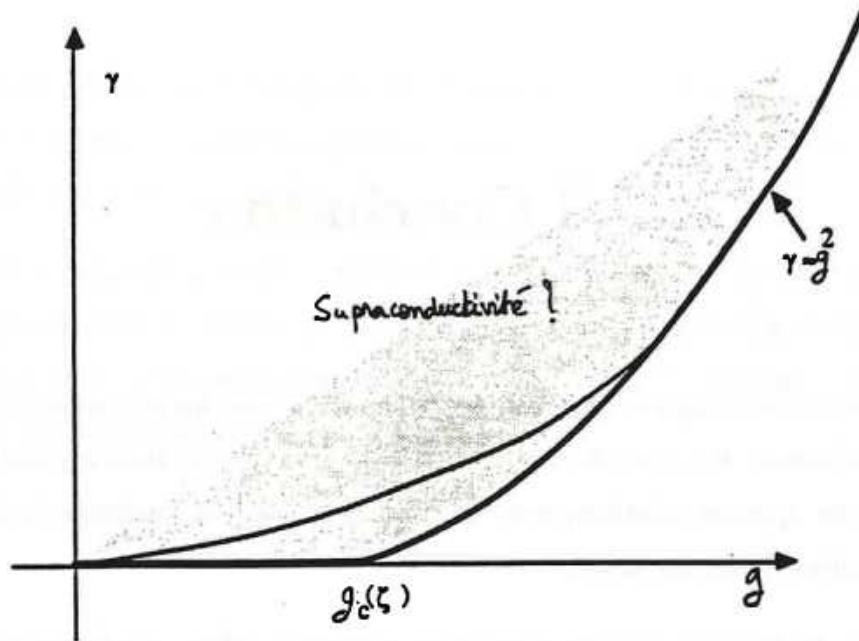


FIGURE 18 – Diagramme de phase du modèle quantique d’Holstein-Peierls. En abscisse, on a mis le couplage électron-phonon (donc  $g$  et non  $\ell$ ). Le paramètre  $\gamma$  en ordonnée mesure le caractère quantique des atomes. L’étude ci-présente correspond à  $\gamma = 0$ . On a tracé la courbe du couplage critique  $g_c$  en prolongeant celui connu dans le cas adiabatique, et d’après des développements connus de Born-Openheimer, bien qu’il n’existe pas encore de preuve de l’existence d’une transition. On espère trouver un phénomène de supraconductivité au niveau de cette transition.

# Annexes

## I Principaux résultats de base sur les systèmes incommensurables uni-dimensionnels

Ce chapitre est destiné à un bref rappel des théorèmes généraux sur les états fondamentaux des systèmes de Frenkel & Kontorowa généralisés, c'est-à-dire une chaîne uni-dimensionnelle d'atomes régie par l'hamiltonien

$$\mathcal{H} = \sum_n L(U_n, U_{n+1})$$

où  $L(x + a, y + a) = L(x, y)$  et  $\frac{\partial^2 L}{\partial x \partial y} < 0$ .

Il ne s'agit pas d'un travail original, mais d'un résumé des principales définitions et démonstrations telles qu'elles ont été développées par Serge Aubry, par exemple dans Physica D<sup>[21]</sup>.

### a Schéma général

Nous allons d'abord introduire une définition des états fondamentaux : comme les énergies d'un système infini sont généralement divergentes, on définit ces états par les différences d'énergies : un état sera dit fondamental, lorsqu'il n'existe pas de configuration ayant un nombre **fini** de termes différents avec lui, telle que son énergie soit inférieure à celle du fondamental, c'est-à-dire que la différence des énergies soit négative.

On n'a précisé en aucun cas que ces états sont des états d'énergie minimum vis-à-vis de l'ensemble des états stationnaires. Pour définir cette dernière notion, il faut prendre la limite, quand la taille des systèmes devient de plus en plus grande, de toutes les différences d'énergies, qui ne sont pas nécessairement assurées de converger. Cependant, les états fondamentaux que l'on va construire sont effectivement dégénérés en énergie; et on admettra alors que les autres états métastables sont excités par rapport à ces états-là. On appellera donc ces états-ci métastables sans préjuger qu'ils soient des minima locaux de l'énergie.

A l'aide de cette définition, on construit les états métastables en plusieurs étapes :

\* On montre d'abord que les systèmes finis, définis par des conditions aux bords périodiques qui imposent une commensurabilité  $\zeta = \frac{r}{s}$ , admettent une limite (de même commensurabilité) quand la taille atteint l'infini. Les solutions à l'infini se révèlent  $r.a$ -périodiques.

\*\* On construit alors les incommensurables comme une limite de systèmes commensurables finis, de commensurabilités  $\zeta_i$  différentes, telles que  $\zeta_i$  tende vers une limite  $\zeta$  irrationnelle, quand  $i$  tend vers l'infini.

\*\*\* Puis finalement, on montre que l'ensemble des états métastables est atteint par densité à partir de ces états, dont on admet qu'ils sont d'énergie inférieure. On obtient notamment des discommensurations élémentaires, qui permettront de décrire tous les défauts qui engendrent les états métastables (quand le système est défectible, bien que la décomposition soit toujours formellement valable).

Au cours de la construction, que je vais maintenant préciser, on obtiendra les différentes propriétés de ces systèmes.

## b Lemmes fondamentaux

Deux lemmes sont nécessaires pour les différents calculs.

*Lemme 1* : En premier lieu, on montre que les limites des états de plus basses énergies, quand la taille du système devient infinie, sont toujours des états fondamentaux, au sens que je viens de définir.

*Lemme 2* : D'autre part, on démontre un lemme très puissant : Deux états fondamentaux ne peuvent se croiser, dans la représentation  $(n, U_n)$ . Ceci est vrai indifféremment selon que le système est fini ou infini, et notamment pour les croisements à l'infini (états asymptotiques). Ce lemme nous permettra de mettre en application l'invariance du système sous les opérateurs  $G_1$  et  $G_2$  (définis dans le texte principal).

## c Construction des états commensurables

Pour construire les états de rapport commensurable  $\frac{l}{a} = \frac{r}{s}$ , dans la première étape, on fixe  $k \in \mathbb{Z}$  et on considère un système fini  $U_n$ ,  $n \in -ksa, \dots, ksa$  avec la condition :

$$U_{ksa} = U_{-ksa} + 2kra$$

En utilisant la condition périodique

$$\forall p \in \mathbb{Z}, U_{n+pk s} = U_n + pkra$$

qui est compatible avec la suite  $U_n$ , on peut définir et comparer n'importe quelle suite  $U'_n = U_{n+ps} - qra$  sur le même espace fini  $-ksa, \dots, ksa$ . Comparons donc  $U_n$  et  $V_n = U_{n+s} - ra$ .

Si, pour une certaine valeur de  $m$ ,  $V_m < U_m$ , alors  $V_{m+ks} < U_{m+ks}$  d'après les conditions périodiques, et comme les suites  $U_n$  et  $V_n$  sont trivialement des minima d'énergie, on peut appliquer le lemme 2 qui implique que  $\forall n \in -kps, \dots, kps$   $V_n < U_n$  car sinon il y aurait nécessairement deux croisements (autrement dit, il n'y a pas de tore de Möbius à une dimension). On a finalement :

$$\begin{aligned} U_n &< V_n = U_{n+s} && -ra \\ &< V_{n+s} && -ra = U_{n+2s} - 2ra \\ &&& \dots \\ &< V_{n+(k-1)s} - (k-1)ra && = U_{n+ks} - kra \\ &&& = U_n \end{aligned}$$

absurde ; et comme  $U_m > V_m$  est de même impossible, on en conclut que  $\forall m \in \mathbb{Z}, U_m = V_m$  donc que :

$$\forall n \in \mathbb{Z}, U_{n+s} = U_n + ra \quad (I,1)$$

Les solutions ainsi définies sont dites  $r.a$ -périodiques.

Comme cela est vrai pour tout  $k$ , et que, pour tout  $k$ , le minimum de l'énergie est obtenu en minimisant un système fini  $U_0, \dots, U_s$  avec  $U_s = U_0 + ra$ , les solutions sont indépendantes de  $k$ , et on peut alors faire tendre  $k$  vers l'infini : D'après le lemme 1 que j'ai cité, on obtient des états fondamentaux qui sont des états  $r.a$ -périodiques des systèmes commensurables. De plus, on admettra qu'ils sont les seuls états fondamentaux correspondant à un rapport de commensurabilité donné (il faut faire des considérations générales sur le peu d'influence des conditions aux bords). On appellera  $\mathcal{F}$  l'espace formé par ces états.

Définissons une fonction  $f$  sur  $nl + ma, (n, m) \in \mathbb{Z}^2$  par

$$f(nl + ma) = U_n + ma$$

où  $U_n$  est un des états que l'on vient de construire. On montre que  $f$  est bien définie : soient  $(n, m)$  et  $(n', m')$  tels que

$$nl + ma = n'l + m'a$$

On a

$$(n - n')r = (m - m')s$$

donc

$$n' = n + ks \quad \text{et} \quad m' = m - kr$$

d'où

$$\begin{aligned} (U_{n'} + m'a) - (U_n + ma) &= U_{n+ks} - U_n - kr \\ &= kr - kr \\ &= 0 \end{aligned}$$

d'après la condition de périodicité.  $f$  est bien définie et de plus

$$\forall n \in \mathbb{Z}, U_n = f(nl) \quad (I,2)$$

## d Propriétés des états commensurables

On montre maintenant que :

$$\text{si } nr + ms \geq n'r + m's, \text{ alors } U_n + ma \geq U_{n'} + m'a \quad (I,3)$$

En effet, si on pose  $n' = n + k$ , on montrera de la même façon que précédemment que  $U_{n+k} + (p' - p)a - U_n$  a le même signe que  $U_{n+sk} + s(p' - p)a - U_n = kra + (p' - p)sa$ , d'où le résultat. Autrement dit,  $f$  est une "fonction" croissante (sur l'ensemble des points où elle est définie).

On démontre une dernière propriété sur les suites  $U_n$ . Soient  $n, p$  quelconques :

$$\left| \frac{U_{n+p} - U_n}{a} - p \frac{l}{a} \right| \leq 1 \quad (I,4)$$

En effet, soit la suite  $V_n = \frac{U_{n+p} - U_n - pl}{a}$ ,  $[V_n]^+$  et  $[V_n]^-$  sont des entiers indépendants de  $n$  -cela se démontre de façon toujours analogue aux précédentes-. Or, on a :

$$\begin{aligned} \sum_{k=0}^{s-1} V_{n+k} &= \frac{1}{a} \sum_{k=0}^{s-1} U_{n+p+k} - U_{n+k} - pl \\ &= \frac{1}{a} (U_{n+s} + \dots + U_{n+s+p-1} - U_n - \dots - U_{n+p-1} - spl) \\ &= \frac{1}{a} (pra - ps \frac{ra}{s}) \\ &= 0 \end{aligned}$$

donc,  $\forall n \in \mathbb{Z}$ ,  $|V_n| < 1$  puisque sinon, soit  $\forall n \in \mathbb{Z}$ ,  $V_n \geq 1$ , soit  $\forall n \in \mathbb{Z}$ ,  $V_n \leq -1$  et alors la somme ne serait pas nulle.

## e Construction des états incommensurables

On en arrive maintenant à la construction des états incommensurables. Pour créer un état incommensurable, on extrait d'une suite, sur  $i$ , de systèmes finis  $(U_n^i)_{n \in \mathbb{Z}}$  de commensurabilité  $\zeta_i$ , les  $\zeta_i$  étant choisis de telle sorte qu'ils convergent vers un  $\zeta$  incommensurable fixé à l'avance quand  $i \rightarrow \infty$ , une sous-suite  $\sigma(i)$  telle que tous les  $U_n^{\sigma(i)}$  convergent pour  $i \rightarrow \infty$ . L'état obtenu est alors incommensurable, d'après le lemme 1. On procède de la façon suivante :

On choisit d'abord  $\sigma_0$  tel que  $U_0^{\sigma_0(i)}$  converge, et de plus, soit  $U_0$  sa limite, on impose que

$$|U_0^{\sigma_0(i)} - U_0| < \epsilon^i \quad (I,5a)$$

où  $\epsilon^i$  est une fonction qui tend vers zéro, fixée, quelconque.

Puis on choisit  $\sigma_1$  tel que  $U_1^{\sigma_0 \circ \sigma_1(i)}$  et  $U_{-1}^{\sigma_0 \circ \sigma_1(i)}$  convergent, et de plus, soient  $U_1$  et  $U_{-1}$  leurs limites, on impose que

$$|U_1^{\sigma_0 \circ \sigma_1(i)} - U_1| < \epsilon^i \quad (I,5b)$$

et

$$|U_{-1}^{\sigma_0 \circ \sigma_1(i)} - U_{-1}| < \epsilon^i \quad (I,5c)$$

On procède ainsi par récurrence, et on constate finalement que la suite

$$\tilde{U}_n^i = U_n^{\sigma_0 \circ \dots \circ \sigma_n(i)}$$

converge vers un état fondamental,  $U_n$ , de rapport  $\zeta = \lim_{\infty} \zeta_i$  incommensurable, et vérifie la relation (I,5) pour tout  $n$  :

$$|\tilde{U}_n^i - U_n| < \epsilon^i \quad (I,5d)$$

De plus, si on définit une fonction  $f$  sur  $\mathcal{B} = nl + ma$ ,  $(n, m) \in \mathbb{Z}^2$  par

$$f(nl + ma) = U_n + ma$$

$f$  est bien définie, car,  $l$  et  $a$  étant de rapport irrationnel, la décomposition  $nl + ma$  est unique, et on retrouve la relation (I,2) :

$$\forall n \in \mathbb{Z}, U_n = f(nl)$$

## f Propriétés des états incommensurables

Si l'on note  $f_i$  les "fonctions" qui ont été déjà définies pour les solutions commensurables de rapport  $\zeta_i = r_i/s_i$  et  $l_i = a\zeta_i$ , si on prolonge les  $f_i$  sur  $\mathbb{R}$  par :

$$\text{Soit } x \in \mathbb{R}, f_i(x) \equiv f_i\left(\frac{[xs_i]^+}{s_i}\right)$$

cette façon de les prolonger est compatible avec celle présentée dans le texte, et on constate que la relation (I,5) s'écrit encore

$$|f_i(nl_i) - f(nl)| < \epsilon^i$$

soit finalement

$$|f_i(nl) - f(nl)| < \epsilon^i \quad (I,6)$$

Autrement dit, les fonctions enveloppe  $f_i$  des états commensurables convergent uniformément vers la fonction enveloppe  $f$ . En particulier, la relation (I,3) qui reste vraie par passage à la limite indique que la fonction  $f$  est croissante sur  $\mathcal{B}$ . Or,  $l$  et  $a$  étant de rapport irrationnel,  $\mathcal{B}$  est dense dans  $\mathbb{R}$ , et on peut définir les prolongements continus à droite  $f^+$  ou continus à gauche  $f^-$  de cette fonction.

$U_n^+ = f^+(nl)$  et  $U_n^- = f^-(nl)$  sont encore des états fondamentaux, et on les adjoint à  $\mathcal{F}$ . Ils formeront les états incommensurables de  $\mathcal{F}$ .

La formule (I,4) est également vraie par passage à la limite, et signifie, entre autres, que  $[\frac{U_n}{a}]^+$  se comporte comme une fonction  $[\frac{nl+\alpha}{a}]^+$ . Elle signifie également que, pour tous les états fondamentaux, le rapport  $\zeta$  est défini localement.

## g Construction des états métastables

Quand on regarde la fermeture de l'espace  $\mathcal{F}$  des états fondamentaux que l'on a construit ainsi, on trouve de nouveaux états "fondamentaux", qui sont métastables, c'est-à-dire excités par rapport aux premiers. La relation (I,4) assure que la commensurabilité de tout état adhérent est encore bien définie.

Par ailleurs, on montre que la fonction enveloppe est définie de façon unique, et finalement, on obtient que les états adhérents (obtenus par densité) sont :

-soit, s'ils sont commensurables, asymptotiques à un des états fondamentaux commensurables de  $\mathcal{F}$  en  $+\infty$ , et de même en  $-\infty$ .

-soit, s'ils sont incommensurables, asymptotiques à un des états fondamentaux incommensurables de  $\mathcal{F}$  en  $+\infty$ , et de même en  $-\infty$ .



## II Caractérisation des états fondamentaux par les numéros de puits

On va démontrer, dans cette partie, pour le modèle de Frenkel & Kontorowa, de façon directe et élémentaire que, lorsque le couplage  $\ell$  est suffisamment petit, les atomes correspondant aux états métastables tombent aux fonds des puits et sont totalement caractérisés par les numéros des puits. Ce résultat est par ailleurs implicitement établi, lors de l'étude du développement des états à partir de ceux à couplage nul. Cependant, il est ici restreint aux seuls états fondamentaux et permet donc de justifier la décomposition de la fonction enveloppe sans passer par l'étude du régime non-analytique en perturbation.

### a Bandes interdites

On va d'abord montrer qu'il existe deux bandes spatiales interdites pour les états stationnaires, l'une centrale, l'autre supérieure ; si l'on choisit alors convenablement le paramètre de couplage, elles se recouvrent et on est assuré d'avoir tous les atomes aux fonds des puits.

Montrons d'abord l'existence d'une bande centrale. On se contentera de faire les calculs dans le cadre du modèle original de Frenkel & Kontorowa, mais ils restent valables lorsqu'on les généralise à n'importe quel potentiel.

On peut numéroter les puits de potentiel des atomes par :

$$\left[\frac{U_n}{a}\right]^+ = \left[n\zeta + \frac{\alpha}{a}\right]^+$$

ce qui implique que (voir annexe VIII)

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \quad 0 \leq U_{n+1} - U_n \leq 2a = 4\pi \text{ et par suite} \\ |U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n| \leq 4\pi$$

Comme

$$\ell|U_{n+1} + U_{n-1} - 2U_n| = |\sin(U_n)|$$

pour  $\ell < \frac{1}{4\pi}$ , il apparaît une bande centrale interdite (figure 19). On a :

$$|h_n| > \sqrt{1 - 4\pi\ell^2}$$

où  $h_n$  est la "hauteur" de l'atome  $n$ , vis-à-vis du potentiel (figure 19).

Mais, de plus, toujours pour le fondamental, la matrice  $(\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial U_i \partial U_j})_{i,j}$  est positive donc, en particulier, ses termes diagonaux, soit

$$2\ell + \cos(U_n) > 0 \text{ soit encore}$$

$$h_n < 2\ell$$

ce qui implique une bande interdite dans la partie supérieure (figure 19).

Si les bandes se recouvrent, cela forcera les atomes à rester au fond des puits. Pour raccorder les deux conditions afin d'obliger tous les atomes à être dans la partie inférieure du potentiel, on doit prendre  $\ell < 1/(2\sqrt{1 + \pi^2})$  (il est bien évident que, lorsque  $\ell$  diminue, rendant les puits de potentiel de plus en plus profonds, il devient énergétiquement rentable de mettre tous les atomes au fond des puits).

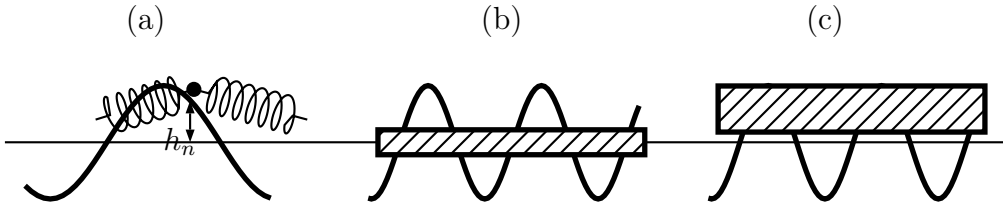


FIGURE 19 – Hauteur  $h_n$  d'un atome (a). Bande centrale interdite (b). Bande supérieure interdite (c).

## b Unicité : utilisation de la convexité

On va maintenant démontrer l'unicité de la caractérisation par les numéros de puits, en utilisant la convexité :

Je reprends les notations du cas général qui sont aussi simples à utiliser.

Soient  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  et  $(V_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  deux états fondamentaux possédant les mêmes numéros de puits. Admettons que  $(V_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  soit d'énergie inférieure (notez bien que dans la définition des états fondamentaux, on n'a pas imposé qu'ils aient une énergie "minimale", bien que l'on a admis que tous les états fondamentaux que l'on a construit étaient dégénérés en énergie). On va alors construire  $(U'_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  n'ayant qu'un nombre fini de termes différents avec  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ . On choisit  $n$  tel que

$$\ell W(U_{n+1} - U_n) + \ell W(U_n - U_{n-1}) + V(U_n) \geq \ell W(V_{n+1} - V_n) + \ell W(V_n - V_{n-1}) + V(V_n)$$

où l'on reconnaît une somme partielle de l'énergie. Cela est toujours possible, car on peut, quitte à faire agir  $k$  fois l'opérateur  $G_1$  sur  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ , remplacer  $U_n$  par  $U_{n+k}$  et alors on est assuré de trouver une telle somme partielle de l'énergie de  $(V_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  inférieure à celle de  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  puisque la somme totale (l'énergie totale) est inférieure. On pose

$$U'_p = U_p \quad \forall p \neq n \quad \text{et} \quad U'_n = \alpha V_n + (1 - \alpha)U_n, \quad \alpha \in ]0, 1[$$

On a les différences d'énergie :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}(U') - \mathcal{E}(U) &= \ell W(U'_{n+1} - U'_n) + \ell W(U'_n - U'_{n-1}) \\ &\quad - \ell W(U_{n+1} - U_n) + \ell W(U_n - U_{n-1}) + (V(U'_n) - V(U_n)) \\ &= \ell W(\alpha(V_{n+1} - V_n) + (1 - \alpha)(U_{n+1} - U_n)) \\ &\quad + \ell W(\alpha(V_n - V_{n-1}) + (1 - \alpha)(U_n - U_{n-1})) \\ &\quad - \ell W(U_{n+1} - U_n) - \ell W(U_n - U_{n-1}) \\ &\quad + (V(\alpha V_n + (1 - \alpha)U_n) - V(U_n)) \end{aligned}$$

et comme  $W$  est convexe et que l'on est par hypothèse dans la partie convexe de  $V$

$$\begin{aligned} &< \alpha \left( \ell W(V_{n+1} - V_n) + \ell W(V_n - V_{n-1}) + V(V_n) \right. \\ &\quad \left. - \ell W(U_{n+1} - U_n) - \ell W(U_n - U_{n-1}) - V(U_n) \right) \\ &< 0 \quad \text{d'après les hypothèses.} \end{aligned}$$

Donc  $(U'_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  est d'énergie inférieure à  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ , ce qui est interdit puisque  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  est un état fondamental et qu'ils n'ont qu'un nombre fini de différences (cf annexe I). Donc, finalement, on a bien démontré l'unicité.

## II bis Formules exactes dans le cas de fonds de puits paraboliques

Si l'on prend un couplage suffisamment petit, de façon à ce que les atomes soient tous dans les parties convexes des puits, on sait alors résoudre exactement le modèle quand il n'y a qu'un puits par période, décrit comme une parabole convexe. On trouve :

Soient  $M_i$  les numéros des puits dans lesquels se trouvent les atomes, et  $U_i$  leurs positions, et  $\ell$  le couplage du potentiel,

$$U_i = \frac{1-\eta}{1+\eta} \sum_{n=-\infty}^{\infty} \eta^{|n|} M_{n-i}$$

avec  $\eta = 1 + 1/2\ell - \sqrt{t + \frac{1}{4}/\ell} < 1$  (on peut faire ces calculs grâce à une analyse de Fourier) ; d'où une énergie totale

$$\mathcal{E} = \sum_{n>0} \frac{1-\eta}{1+\eta} \times \frac{1}{2t} \eta^{|n|} \sum_i (M_{n+i} - M_i)^2$$

Si l'on pose  $\theta_i = M_i - M_i^o$  on peut encore écrire

$$\mathcal{E} = \sum_i \eta_i \sum_n \frac{1-\eta}{1+\eta} \eta^{|n|} (M_i^o - M_{i+n}^o) + \frac{1}{4} \sum_{i,j} \frac{1-\eta}{1+\eta} \eta^{|n|} (\theta_i - \theta_j)^2 + \text{cte.}$$

d'où l'énergie minimale dans un système de commensurabilité  $\frac{r}{s}$  pour déplacer un atome d'un puits à l'autre vaut

$$\frac{1}{\ell} \times \frac{1-\eta}{1+\eta} \times \frac{\eta^s}{1-\eta^s}$$

et de façon plus générale, l'énergie d'un défaut de phase est  $e^+$  ou  $e^-$ , selon qu'il s'agit d'un défaut avance ou retard, avec

$$\begin{aligned} e^+ + e^- &= \frac{1}{s} \times \frac{1-\eta}{1+\eta} \sum_{n>0} n \eta^{ns} \\ &= \frac{1-\eta}{1+\eta} \times \frac{1}{\ell} \times \frac{\eta^s}{(1-\eta^s)^2} \end{aligned}$$

l'énergie d'interaction entre chaque défaut est alors

$$-\frac{1-\eta}{1+\eta} \times \frac{1}{\ell} \times \frac{\eta^{2s}}{(1-\eta^s)^2}$$

négligeable devant la somme des énergies des défauts, comme cela se retrouve pour les bosons de Goldstone en annexe IV.

## III Théorème sur la partie continue d'une fonction croissante

*Théorème* : La partie continue d'une fonction croissante est croissante.

## a Démonstration directe

Soit une fonction croissante  $h$  définie sur un intervalle borné, disons  $[0, 1]$ .

Ses discontinuités sont positives et dénombrables. En effet, pour le premier point, soit une discontinuité  $d$  négative, en  $x_o$ , on a par définition

$$\lim_{\substack{x \rightarrow x_o \\ y \rightarrow x_o}} \begin{matrix} x > x_o \\ y < x_o \end{matrix} h(x) - h(y) = d < 0$$

donc, il existe  $x_1$  et  $y_1$  tels que  $x_1 > x_o$ ,  $y_1 < x_o$  et  $h(x_1) - h(y_1) < \frac{d}{2} < 0$ ; ce qui est absurde. Et pour le second point, soit  $D_n =$  discontinuités  $d > \frac{1}{n}$ , le cardinal de  $D_n$  est fini et, soit  $D$  l'ensemble des discontinuités,

$$D = \bigcup_n \geq 1 D_n$$

est un ensemble dénombrable.

On définit alors une suite de fonction  $h_n$  de la manière suivante : on retire à  $h$  les discontinuités appartenant à  $D_n$ , en posant  $h_n(0) = h(0)$ . Comme elles sont en nombre fini,  $h_n$  est trivialement croissante, et comme on a  $D_{n+1} \supset D_n$ , la suite  $(h_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  est décroissante. On peut définir une limite  $h_\infty$  en chaque point, puisque les suites  $h_n(x)$  sont décroissantes et minorées (par  $h(0)$ ). Mais la limite  $h_\infty$  est clairement croissante et continue, elle ne diffère de  $h$  que par une somme de discontinuités, c'est la partie continue de  $h$  et on a bien démontré le résultat.

## b Cas général : décomposition d'une mesure positive

Ce résultat peut cependant être compris comme une application d'un théorème fondamental en théorie de la mesure.

Soit une mesure positive,  $\mu$ , le théorème de Radon-Nikodym affirme qu'on peut la décomposer en une mesure dite absolument continue (par rapport à la mesure de Lebesgue), du type  $d\mu = h(x)dx$  où  $h$  est une fonction (Lebesgue)-mesurable, et une mesure singulière  $\mu_{\text{sing}}$  (qui n'agit que sur un espace  $S$  de mesure nulle<sup>31</sup>). On peut de plus décomposer la mesure singulière en une partie continue  $\mu_{\text{sing cont}}$  et une partie discrète  $\mu_{\text{disc}}$  qui n'agit que sur des points isolés  $I$ <sup>32</sup>. Il est alors facile de vérifier que le support  $I$  de la mesure discrète est dénombrable.

Or, pour toute fonction croissante  $f$ , l'application  $\mu$

$$] - \infty, x] \mapsto \mu(] - \infty, x]) = f(x)$$

est une mesure sur  $\mathbb{R}$ ; et quand on la décompose suivant le théorème principal, on obtient :

$$\begin{aligned} \mu &= \mu_{\text{cont}} + \mu_{\text{disc}} + \mu_{\text{sing cont}} \\ \text{donc } f(x) &= f_{\text{cont}} + f_{\text{disc}} + f_{\text{sing cont}} \end{aligned}$$

et on a bien défini la décomposition de la fonction  $f$  en trois fonctions croissantes, une absolument continue, une singulière continue (comme les escaliers du diable), et une somme de discontinuités (c'est la généralisation d'une fonction en escalier).

31. c'est-à-dire que  $\mu_{\text{sing}}(\mathbb{R} \setminus S) = 0$  et  $\mu_{\text{Lebesgue}}(S) = 0$

32. c'est-à-dire que  $\mu_{\text{disc}}(\mathbb{R} \setminus I) = 0$  et  $\forall x \in I, \mu_{\text{disc}}(x) \neq 0$

## IV Boson de Goldstone

Les théoriciens se querellent à propos de l'application du théorème de Goldstone, pour les phases incommensurables. Il existe une phase libre qui prend ses valeurs sur un espace dense dans  $\mathbb{R}$  et, dans le régime analytique, on montre rigoureusement qu'il s'agit en fait d'une phase continue. Donc, à priori, on espère qu'existent des phases libres, tels qu'ils découlent du théorème de Goldstone. Cependant, ces systèmes ne se placent pas dans le même cadre, et il est préférable d'exhiber explicitement ces phases de masse nulle, comme le fait, par exemple Serge Aubry<sup>[38]</sup>.

Je vais développer un modèle continu, obtenu de façon exacte à partir du modèle de Frenkel & Kontorowa, pour lequel on pourra appliquer exactement le théorème (tout ceci est valable uniquement pour un état incommensurable); on comprend en particulier pourquoi ce théorème n'est valable que dans le régime analytique, et nous mettrons bien en valeur le changement de symétrie qui s'opère à la transition, d'un groupe continu au groupe discret correspondant. Ce travail montre bien que l'existence d'une phase continue et d'une transition par changement de symétrie s'inscrit dans le cadre des théories générales; cependant, pour résoudre les équations obtenues, on se sert des résultats déjà connus pour ces systèmes incommensurables, bien qu'on puisse espérer démontrer les propriétés directement.

### a Hamiltonien dépendant d'une fonctionnelle

Nous allons en premier lieu récrire l'hamiltonien à l'aide d'une fonctionnelle.

#### $\alpha$ Variable conjuguée

Tout d'abord, on peut toujours ajouter un terme correspondant aux quantités de mouvement dans l'énergie, à l'aide d'une variable conjuguée des  $U_n$ ,  $p_n = m \frac{\partial U_n}{\partial t}$ ,  $m$  étant ici une masse. L'énergie devient :

$$\mathcal{H} = \sum_n L(U_n, U_{n+1}) + \frac{1}{2m} p_n^2$$

avec  $L(U_n, U_{n+1}) = \ell W(U_{n+1} - U_n) + V(U_n)$ . Pour un système de commensurabilité  $\zeta = \frac{r}{s}$ , la variable  $p_n$  du fondamental vérifie des relations de périodicité analogues à  $U_n$ , à savoir :

$$p_{n+s} = p_n$$

Le terme supplémentaire  $\frac{1}{2} p_n^2$  n'a aucune influence pour les calculs qui vont suivre, et on peut travailler tout aussi bien sans. Mais il permet d'introduire une dynamique dans le système et sert dans l'étude des bosons qui suivra.

#### $\beta$ Hamiltonien

On va maintenant établir une nouvelle représentation de l'énergie valable uniquement pour les états de rapport irrationnel, basée sur une analogie avec la fonction enveloppe. Nous allons provisoirement écrire  $\mathcal{H}$  comme une somme finie, correspondant

à un système commensurable de rapport  $\frac{r}{s}$  et prendre la limite ultérieurement :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_{n=-Ns}^{Ns-1} L(U_n, U_{n+1}) + \frac{1}{2}p_n^2 \\
&= \sum_{n=-Ns}^{Ns-1} L(U_n + ka, U_{n+1} + ka) + \frac{1}{2}p_n^2 \text{ pour tout } k \in \mathbb{Z} \\
&\text{donc, on peut moyenner } 2Nr \text{ termes en } k : \\
&= \frac{1}{2Nr} \sum_{k=-Nr}^{Nr-1} \sum_{n=-Ns}^{Ns-1} L(U_n + ka, U_{n+1} + ka) + \frac{1}{2}p_n^2
\end{aligned}$$

On peut toujours poser  $U_n = f(nl)$  par analogie avec l'étude du fondamental : ici, la fonction  $f$  est une fonction quelconque.  $\frac{l}{a} = \zeta = \frac{r}{s}$  étant rationnel, elle n'est définie que sur les éléments de la forme  $\frac{nr}{s}a$ . Donc, elle n'est pas définie pour les éléments de la forme  $\frac{nr}{s}a + ma$ , sauf pour  $m = kr$ . Posons donc que  $f(x + a) = f(x) + a$ , et  $f$  sera alors définie de façon univoque pour tous les éléments de la forme  $\frac{nr+ms}{s}a$ . En effet, soit  $x = \frac{nr+ms}{s}a = \frac{n'r+m's}{s}a$ , on a :

$$\begin{aligned}
f\left(\frac{nr + ms}{s}a\right) &= U_n + ma \text{ d'une part, et} \\
f\left(\frac{n'r + m's}{s}a\right) &= U_{n'} + m'a \text{ d'autre part}
\end{aligned}$$

Or, on impose à tous les états des conditions périodiques, donc

$$\forall k \in \mathbb{Z}, \quad U_n + kra = U_{n+ks}$$

En appliquant cette relation avec  $k = m - m'$ , on trouve les mêmes quantités et  $f$  est bien définie.

De même, on posera  $p(nl) = p_n$  et  $p(x + a) = p(x)$ ; et on trouve enfin :

$$\mathcal{H} = \frac{1}{2Nr} \sum_{k=-Nr}^{Nr-1} \sum_{n=-Ns}^{Ns-1} L\left(f\left(\frac{nr + ks}{s}a\right), f\left(\frac{nr + ks}{s}a + \frac{ra}{s}\right)\right) + \frac{1}{2}p\left(\frac{nr + ks}{s}a\right)^2$$

Tous les termes  $nr + ks$  de la somme seront compris entre  $-2Nrs$  et  $2Nrs - 1$ . De plus, à chaque entier  $m$  correspond un couple unique  $(n, k)$  tel que  $m = nr + ks$  et tous les entiers  $m$  compris entre  $-(2N - 1)rs$  et  $(2N - 1)rs - 1$  seront atteints dans la somme<sup>33</sup>.

---

33. Soit  $m$  tel que  $-(2N - 1)rs \leq m \leq 0$ , soient  $n, k \in \mathbb{Z}$  tels que :  $nr + ks = m$  puisque  $r$  et  $s$  sont premiers entre eux. On peut de plus imposer que :  $-Ns \leq n < -(N - 1)s$  (il suffit de translater simultanément  $n$  et  $k$ ). On a alors :

$$\begin{aligned}
m &\geq -(2N - 1)rs \text{ donc} \\
nr + ks &\geq -(2N - 1)rs \text{ donc} \\
ks &> -(2N - 1)rs + (N - 1)rs \\
&= -Nrs \text{ soit finalement} \\
k &> -Nr \text{ et, d'autre part} \\
m &< 0 \text{ donc}
\end{aligned}$$

Si on remplace la somme par une somme  $\sum_{m=-2Nrs}^{2Nrs-1}$ , on ne négligera dans la première que des termes correspondants aux entiers  $m$  tels que :  $-2Nrs \leq m < -(2N-1)rs$ , ou  $(2N-1)rs \leq m < 2Nrs-1$ ; soit une erreur majorée par :

$$\frac{2rs}{2Nrs} \sup_n L(U_n, U_{n+1}) + \frac{1}{2}p_n^2$$

On va se restreindre à des états tels que  $f$  (et  $p$ ) admette une limite intégrable, et alors  $|U_{n+1} - U_n| \sim |f(x + \zeta) - f(x)|$  sera borné, donc  $L(U_n, U_{n+1})$  sera borné. On suppose que  $L$  est suffisamment régulière.

On peut prendre la limite, pour  $N \rightarrow \infty, s \rightarrow \infty$ , en remplaçant la somme par  $\sum_{m=-2Nrs}^{2Nrs-1}$ . On trouve exactement :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \lim_{\substack{s \rightarrow \infty \\ N \rightarrow \infty}} \frac{1}{2N} \frac{s}{r} \frac{1}{s} \sum_{m=-2Nrs}^{2Nrs-1} L(f(\frac{ma}{s}), f(\frac{ma}{s} + \frac{r}{s}a)) + \frac{1}{2}p(\frac{ma}{s})^2 \\ &= \lim_{s \rightarrow \infty} \frac{s}{r} \frac{1}{s} \sum_{m=-rs}^{rs} L(f(\frac{ma}{s}), f(\frac{ma}{s} + \frac{r}{s}a)) + \frac{1}{2}p(\frac{ma}{s})^2 \\ &= \frac{1}{l} \int_{-\infty}^{\infty} L(f(x), f(x+l)) + \frac{1}{2}p(x)^2 dx \end{aligned}$$

où j'ai utilisé le fait que  $r \rightarrow \infty$  car  $\zeta \neq 0$ , ainsi que les formules  $f(x+a) = f(x) + a$ ,  $p(x+a) = p(x)$  et  $L(x+a, y+a) = L(x, y)$  pour obtenir  $N$  fois le même terme, et donc simplifier par  $N$ . Cependant, l'introduction de  $N$  était nécessaire pour montrer rigoureusement que les termes de bords deviennent négligeables.

Le fait que l'on trouve une intégrale divergente ne doit pas surprendre puisqu'on l'a construite à partir d'une somme qui est divergente. Comme je l'ai dit, on ne doit considérer que les différences d'énergies entre les états. Cependant, de même que l'on se ramène à des énergies finies pour les systèmes commensurables, grâce à la condition de périodicité, en ne considérant plus qu'une période, la nouvelle écriture que l'on a obtenue pour les systèmes incommensurables respecte-t-elle la période du potentiel. On va donc restreindre cette nouvelle énergie sur une période, grâce aux conditions de périodicité.

---


$$\begin{aligned} ks &< Nrs \text{ soit finalement} \\ k &\leq Nr - 1 \end{aligned}$$

Ainsi, le couple  $(n, k)$  qui correspond à  $m$  est bien pris dans la somme.

Si  $0 \leq m < (2n-1)rs$ , on procède pareillement : on choisit  $n$  tel que :  $(N-1)s \leq n < Ns$ . On a alors

$$\begin{aligned} m &< (2N-1)rs \text{ donc} \\ nr + ks &< (2N-1)rs \text{ donc} \\ ks &< (2N-1)rs - (N-1)rs \\ &= Nrs \text{ soit finalement} \\ k &\leq Nr - 1 \text{ et, d'autre part} \\ m &\geq 0 \text{ donc} \\ ks &> -Nrs \text{ soit finalement} \\ k &> -Nr \end{aligned}$$

donc le couple  $(n, k)$  qui correspond à  $m$  est bien pris dans la somme.

## $\gamma$ Fonction de partition

On peut donc introduire une théorie des champs classique à une dimension avec contrainte, comme on le trouve chez Mather<sup>[39]</sup>, régie par la fonction de partition :

$$\int_{\substack{f \text{ croissante} \\ f(x+a)=f(x)+a}} [df] \exp \left( - \int_0^a L(f(x), f(x+l)) + p(x)^2 dx \right)$$

Le champ  $p = m \frac{\partial f}{\partial t}$  est le champ conjugué de  $f$ , au sens classique. Si l'on fait les calculs sans introduire la variable conjuguée de  $U_n$ , on trouve les mêmes quantités sans le terme en  $p$ .

On décrit ainsi exactement tous les états obtenus comme limites de suites aux conditions périodiques  $U_{n+s} = U_n + ra$ , quand  $\frac{r}{s} \rightarrow \zeta$  irrationnel.

Avant d'aborder les bosons de Goldstone, on va d'abord dériver les équations de stationnarité directement pour les états incommensurables. Nous allons d'abord dériver les équations de stationnarité des états incommensurables, puis nous montrerons que l'espace des états fondamentaux est dégénéré par rapport à la phase  $\varphi$ . Ensuite, nous aborderons l'étude des bosons de Goldstone, en rappelant les équations générales qui permettent de démontrer leur existence, puis en précisant la structure particulière de ce problème.

## $\delta$ Résolution des équations de stationnarité du modèle continu

On va se restreindre au cas  $L(U_n, U_{n+1}) = \ell W(U_{n+1} - U_n) + V(U_n)$ .

On trouve une équation de stationnarité :

$$-\ell W'(f(x+l) - f(x)) + \ell W'(f(x) - f(x-l)) + V'(f(x)) = 0$$

Notons que la solution de cette équation est exactement la fonction enveloppe.

L'analyse de cette équation permet de démontrer l'existence des deux régimes, l'un analytique, pour les forts couplages, l'autre non-analytique, pour les faibles couplages.

## $\epsilon$ Invariance des états par translation

Dans ce modèle, les symétries des états fondamentaux  $G_1$  et  $G_2$  du texte correspondent exactement à une invariance de l'énergie des états fondamentaux quand on introduit un déphasage quelconque dans l'argument de la fonction enveloppe (cette question n'est évidemment pas dénuée de sens puisque les états fondamentaux ne sont définis que comme des minima locaux de l'énergie, et n'ont pas, à priori, la même énergie). On ne saurait d'ailleurs pas le vérifier directement car, un déphasage, même infinitésimal, peut entraîner une variation finie de la fonction enveloppe (qui peut être discontinue). Ce résultat découle de ce que les états incommensurables sont construits comme une limite d'états commensurables. En effet, si on prouve le résultat pour n'importe quel état commensurable, comme une fonction enveloppe incommensurable est limite uniforme (cf annexe I) de fonctions enveloppe commensurables, et que l'énergie est continue par rapport aux fonctions enveloppes, il sera démontré pour les états incommensurables. D'ailleurs, il n'est pas évident, à priori, que le résultat soit vrai pour les états fondamentaux commensurables : si l'on admet, comme je l'ai fait dans



l'annexe I, que les états *r.a*-périodiques sont bien les seuls états fondamentaux de commensurabilité  $\frac{r}{s}$ , cela découle de l'invariance sous l'action des opérateurs de symétrie  $G_1$  et  $G_2$ .

Avant d'étudier les conséquences de cette symétrie sur les systèmes étudiés, je rappelle les équations correspondant à une symétrie générale.

## b Invariance sous une symétrie quelconque

Nous allons redériver les équations correspondant à une invariance d'une action

$$\mathcal{S} = \int H(\phi(x, t)) dx dt$$

où  $H(\phi) = \frac{1}{2}(\partial\phi)^2 + V(\phi)$ <sup>34</sup> et l'énergie  $\mathcal{E}$  est la somme d'une énergie cinétique  $\frac{1}{2} \int (\frac{\partial\phi}{\partial x})^2 dx$  et de  $\mathcal{V} = \int V dx$ , sous l'action d'une symétrie continue, du type général :

$$\begin{aligned} \phi &\rightarrow \phi + \delta\phi \\ x &\rightarrow x + \delta x \\ t &\rightarrow t + \delta t \end{aligned}$$

On suppose que  $\delta\phi, \frac{\partial\phi}{\partial x}\delta x, \frac{\partial\phi}{\partial t}\delta t \ll 1$   
 $\mathcal{S}$  restera invariante :  $\mathcal{S} \rightarrow \mathcal{S}' = \mathcal{S}$ , donc

$$\begin{aligned} 0 &= \mathcal{S}' - \mathcal{S} \\ &= \int H(\phi(x + \delta x, t + \delta t) + \delta\phi(x + \delta x, t + \delta t)) - H(\phi(x, t)) dx dt \\ &= \int \frac{\partial H}{\partial\phi(y, t')} \left( \delta\phi(y) + \frac{\partial\phi}{\partial x}(y)\delta x + \frac{\partial\phi}{\partial t}(y)\delta t \right) dx dy dt dt' \\ &\quad + \int \frac{1}{2} \frac{\partial^2 H}{\partial\phi(y, t')\partial\phi(z, t'')} \left( \delta\phi(y)\delta\phi(z) + 2\delta\phi(y) \left( \frac{\partial\phi}{\partial x}(z)\delta x + \frac{\partial\phi}{\partial t}(z)\delta t \right) \right. \\ &\quad \left. + \left( \frac{\partial\phi}{\partial x}(y)\frac{\partial\phi}{\partial x}(z)(\delta x)^2 + 2\frac{\partial\phi}{\partial x}(y)\frac{\partial\phi}{\partial t}(z)\delta x\delta t + \frac{\partial\phi}{\partial t}(y)\frac{\partial\phi}{\partial t}(z)(\delta t)^2 \right) \right) dx dy dz dt dt' dt'' \\ &\quad + \int \frac{\partial H}{\partial\phi(y, t')} \left( \delta \left( \frac{\partial\phi}{\partial x} \right) \delta x + \delta \left( \frac{\partial\phi}{\partial t} \right) \delta t \right) dx dy dt dt' \end{aligned} \tag{IV,1a}$$

D'une part, l'équation générale du mouvement s'obtient par la stationnarité de l'action, et elle s'écrit :

$$\forall f, \int \frac{\partial H}{\partial\phi(y)}(x) f(y) dx dy dt = 0$$

ce qui élimine une partie des termes dans la somme.

D'autre part, on notera :

$$D(x, y) = \int \frac{\partial^2 H}{\partial\phi(x)\partial\phi(y)} dz dt$$

---

34.  $(\partial\phi)^2 = \frac{\partial\phi}{\partial t}^2 - \frac{\partial\phi}{\partial x}^2$

la forme dynamique de l'action.

Enfin, on notera  $\widetilde{\delta\phi}$  la variation totale de  $\phi$ , à savoir  $\widetilde{\delta\phi}(x) = \delta\phi(x) + \frac{\partial\phi}{\partial x}\delta x + \frac{\partial\phi}{\partial t}\delta t$ .

Si la transformation est infinitésimale, on peut éliminer les termes du troisième ordre et au delà, et l'équation (IV,1a) s'écrit rigoureusement :

$$\int \widetilde{\delta\phi}(x)D(x,y)\widetilde{\delta\phi}(y)dxdy \equiv \langle \widetilde{\delta\phi} | D | \widetilde{\delta\phi} \rangle = 0 \quad (IV,1b)$$

On a  $D = \delta(\partial_{tt} - \partial_{xx}) + V_2$  où  $V_2$  est le coefficient de l'approximation quadratique de l'énergie  $\mathcal{V}$ , qui est de la forme  $mV_2$ , et  $m$  joue ici le rôle de la masse. Comme cela est vrai pour tous les  $\widetilde{\delta\phi}$ , qui appartiennent au groupe de symétrie, on peut dériver fonctionnellement par rapport à  $\widetilde{\delta\phi}$ <sup>35</sup> :

$$(\partial_{tt} - \partial_{xx} + m)\widetilde{\delta\phi} = 0 \quad (IV,1c)$$

Il s'agit de l'équation d'une onde de propagation, avec un terme de masse : c'est une vibration à courte distance.

### c Boson de Goldstone

On a placé le système dans sa situation la plus générale, et montré qu'il développait une onde à courte distance (non spontanée). Mais, si on place le système dans un état fondamental statique, on trouvera, comme un cas particulier de ce premier résultat, que la masse  $m$  est nulle, et, on obtient bien un boson de Goldstone :

Soit un état fondamental statique  $\phi_o$ . Il minimise  $\mathcal{V}$ , donc on développe  $V$  :

$$V(\phi_o + \delta\phi) = V(\phi_o) + V_1\delta\phi + \int \frac{1}{2}\delta\phi V_2\delta\phi dxdy + \dots$$

On a donc ici :

$$V_1(\phi_o) = 0$$

et, l'énergie étant invariante sous l'action de la symétrie,  $\mathcal{V} \rightarrow \mathcal{V}' = \mathcal{V}$ , on obtient, de façon analogue :

$$0 = \mathcal{V}' - \mathcal{V} = \int V_1\widetilde{\delta\phi} dx + \int \frac{1}{2}\widetilde{\delta\phi}V_2\widetilde{\delta\phi} dxdydt + \dots$$

Comme  $V_1$  donne zéro, on trouve :

$$\int \widetilde{\delta\phi}V_2\widetilde{\delta\phi} dxdydt = 0$$

Autrement dit, autour d'un état fondamental statique, la masse correspondant aux ondes de propagation est nulle, et, en effet, en soustrayant à l'équation (IV,1b), on trouve :

$$\partial^2(\widetilde{\delta\phi}) = 0$$

qui est bien une équation de propagation libre d'une particule de masse nulle. (D'après<sup>[40]</sup>).

---

35. Car  $\widetilde{\delta\phi}$  parcourt un espace continu. Si l'on ne veut pas utiliser la dérivée fonctionnelle, on peut également partir de l'équation de stationnarité de l'action, écrite sous la forme

$$\frac{\partial H}{\partial\phi(x)}(x) = 0$$

en l'appliquant aux états  $\phi + \widetilde{\delta\phi}$  -ce sont des états fondamentaux, qui conservent également la symétrie.

## d Cas particulier où l'action n'a pas de vrai terme fonction de la quantité de mouvement

Dans le cas qui nous intéresse, l'action n'a pas tout à fait la même forme. On a  $H = \frac{1}{2} \frac{\partial \phi^2}{\partial t} + V$ , le terme cinétique du potentiel est d'une forme particulière et on l'inclut dans le second terme. On a donc maintenant  $\mathcal{E} = \mathcal{V}$ . Sous cette forme, les calculs seront exactement les mêmes, mais, cette fois-ci,  $\delta \mathcal{S} = 0$  donne :

$$\frac{\partial^2}{\partial t^2}(\widetilde{\delta\phi}) = 0$$

et, surtout, à l'ordre des calculs considéré, puisque  $V_2 = 0$  et donc  $\delta \mathcal{V} = 0$ , on a  $\delta \mathcal{E} = 0$ , soit :

$$\delta \mathcal{E} = O(\delta^3)$$

donc, la création d'une excitation ne nécessite pas d'énergie. Ceci n'est pas le cas général. On a vu que, usuellement, la particule créée est de masse nulle, mais, elle n'est pas de fréquence nulle : elle est du type  $e^{i(\vec{k}\vec{x} - \omega t)}$ . Ici, la particule est simplement du type  $e^{ikx}$ , il s'agit d'une modulation statique, et on trouvera les valeurs de  $k$  par une simple analyse de Fourier.

Il n'est pas inutile de vérifier comment la théorie s'applique dans le cadre particulier de Frenkel & Kontorowa. On prendra pour simplifier :

$$H(\phi) = \partial_t \phi + (\ell(\phi(x + \zeta) - \phi(x)))^2 + V(\phi(x))$$

La symétrie du problème est :

$$\delta \phi = 0, \quad \delta t = 0, \quad \delta x = \delta$$

On trouve alors :

$$\begin{aligned} 0 &= \delta \mathcal{S} \\ &= \int dx dt \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + 2\ell\phi(x) - \ell\phi(x + \zeta) - \ell\phi(x - \zeta) + V'(\phi) \right) \left( \frac{\partial \phi}{\partial x} \delta + \frac{\partial^2 \phi}{\partial x^2} \delta^2 \right) \\ &\quad + \left( \frac{\partial^3 \phi}{\partial t^2 \partial x} + 2\ell \frac{\partial \phi}{\partial x}(x) - \ell \frac{\partial \phi}{\partial x}(x + \zeta) - \ell \frac{\partial \phi}{\partial x}(x - \zeta) + \frac{\partial \phi}{\partial x}(x) V''(\phi) \right) \frac{\partial \phi}{\partial x} \delta^2 (IV, 2) \end{aligned}$$

qui sont les premiers termes du développement de :

$$\begin{aligned} &\int dx dt \left( \frac{\partial^2 \phi}{\partial t^2} + 2\ell\phi(x) - \ell\phi(x + \zeta) - \ell\phi(x - \zeta) + V'(\phi) \right) \widetilde{\delta\phi} \\ &+ \int dx dy dt \left( \delta_{tt}^2(x-y) + 2\ell\delta(x-y) - \ell\delta(x+\zeta-y) - \ell\delta(x-\zeta-y) + \delta(x-y) V''(\phi) \right) \widetilde{\delta\phi}(x) \widetilde{\delta\phi}(y) \end{aligned}$$

Et par ailleurs, les équations du mouvement  $\frac{\delta \mathcal{S}}{\delta \phi} = 0$  s'écrivent :

$$\ddot{\phi}(x) + 2\ell\phi(x) - \ell\phi(x + \zeta) - \ell\phi(x - \zeta) + V'(\phi) = 0$$

et la forme dynamique sera :

$$D = \delta_{tt}(x-y) + 2\ell\delta(x-y) - \ell\delta(x+\zeta-y) - \ell\delta(x-\zeta-y) + \delta(x-y) V''(\phi)$$

donc  $\delta\mathcal{S}$  s'écrit finalement :

$$\int \frac{\partial\phi}{\partial x}(x)D(x,y)\frac{\partial\phi}{\partial x}(y) dx dy$$

36

Pour un état fondamental statique, on a l'équation de stationnarité :

$$2\ell\phi(x) - \ell\phi(x + \zeta) - \ell\phi(x - \zeta) + V'(\phi) = 0$$

Il suffit de dériver cette équation pour trouver que :

$$2\ell\frac{d\phi}{dx}(x) - \ell\frac{d\phi}{dx}(x + \zeta) - \ell\frac{d\phi}{dx}(x - \zeta) + \frac{d\phi}{dx}(x)V''(\phi) = 0 \quad (IV,3)$$

ce que l'on aurait également trouvé en écrivant que l'énergie  $\mathcal{V}$  est invariante sous l'action de la symétrie de translation. Donc, comme prévu, pour les états proches des états fondamentaux, l'équation (IV,2) s'écrit :

$$\partial_{tt}(x-y)\frac{d\phi}{dx}(y) = 0$$

Remarque :  $\phi$  est dans ce dernier cas la fonction enveloppe  $f$ . Et le mode de phason de fréquence nulle est donné par sa dérivée. Quand on revient au modèle discret, on prend donc un phason proportionnel à  $\dot{f}(nl + \delta)$ ; et on vérifie que ceci est bien solution de l'équation de propagation discrète d'une particule  $(d_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  de masse nulle correspondante :

$$\forall n \in \mathbb{Z}, \sum_{m,n} D_{m,n}d_n = 0$$

avec

$$D_{m,n} = 2\ell\delta_{m,n} - \ell\delta_{m,n+1} - \ell\delta_{m,n-1} + \delta_{m,n}V''(U_n)$$

## e Absence de boson de Goldstone à petit couplage : discrétisation de la symétrie

Bien sûr, comme on l'aura remarqué, toutes les démonstrations ne sont valables que dans le cas où  $\widetilde{\delta\phi} \ll 1$ , donc, en particulier ici, quand  $\frac{f(x+\epsilon)-f(x)}{\epsilon}$  est borné et admet une limite; ceci est vérifié dans le régime analytique, car alors,  $f$  est dérivable. Par contre,

---

36. Remarque : on a  $\frac{\delta\dot{\phi}(x)}{\delta\phi(y)} = -\delta_t(x-y)$  et  $\frac{\delta\ddot{\phi}(x)}{\delta\phi(y)} = \delta_{tt}(x-y)$ . Pour le voir, on calcule par exemple :

$$\begin{aligned} \forall f, \frac{\delta}{\delta\phi(y)} \int \dot{\phi}(x)f(x)dx &= \int \frac{\delta\dot{\phi}(x)}{\delta\phi(y)}f(x)dx \text{ mais, également} \\ &= \frac{\delta}{\delta\phi(y)} \left( [\phi(x)f(x)]_{\text{bords}} - \int \phi(x)\dot{f}(x)dx \right) \\ &\quad \text{si on néglige les effets de bords} \\ &= - \int \frac{\delta\phi(x)}{\delta\phi(y)}\dot{f}(x)dx = -\dot{f}(y) \end{aligned}$$

d'où le résultat.

dans le régime non-analytique,  $f'$  contient des Dirac, à cause des discontinuités de  $f$ , et  $\widetilde{\delta\phi}$  n'est pas une quantité infinitésimale : la symétrie, bien qu'elle soit définie par rapport à une phase continue, agit dans ce cas de façon discrète sur les états fondamentaux. Le théorème de Goldstone ne s'appliquant que pour des symétries continues, il y a disparition des modes de Goldstone à petit couplage.

## f Forme des bosons de Goldstone

On a ainsi mis en évidence la véritable nature de la transition par brisure d'analyticit  : elle correspond   un changement de la sym trie de l'espace des  tats fondamentaux, et plus pr cisement, du passage d'une sym trie continue   une sym trie discr te.

Nous revenons maintenant   l' tude des bosons de Goldstone, dans le r gime analytique.

Pour conna tre plus pr cisement la forme de ces excitations, on cherche la valeur de leur moment, donc on analyse l' quation (IV,3) en transform e de Fourier. On utilise ici la p riodicit  pour d finir des composantes de Fourier discr tis es. On pose  $b_k$  les composantes de  $\frac{df}{dx}$  et  $\tilde{V}$  la transform e de  $V$  et on obtient :

$$\ell(e^{2\pi ik\zeta} + e^{-2\pi ik\zeta} - 2)b_k + \tilde{V} * b = 0$$

Si l'on d veloppe  $V$  en polynome, disons  $V = a_0 + a_1x + \dots + a_n + \dots$ , on trouve :

$$\begin{aligned} 4\sqrt{\ell} \sin(\pi k\zeta) &= a_0\delta + a_1\left(\frac{2i\pi}{k}(-1)^{k+1}\right) + a_2\left(\frac{4\pi}{k^2}(-1)^k + \frac{\delta}{3}\right) \\ &+ a_3\left(\frac{2i\pi^3}{k}(-1)^{k+1} + \frac{12\pi}{k^3}(-1)^k\right) \\ &+ a_4\left(\frac{8\pi^3}{k^2}(-1)^k + \frac{48\pi}{k^4}(-1)^{k+1} + \frac{\delta}{5}\right) + \dots \end{aligned} \quad (IV,4)$$

donc, en premi re approximation, on trouve bien que  $\frac{df}{dx}$  est une fonction  $e^{ikx}$  et  $k$  sera donn  par l' quation :

$$|\sin(\pi k\zeta)| = \frac{1}{2\sqrt{\ell}} \sqrt{a_0 + \frac{a_2}{3} + \dots + \frac{a_{2p}}{2p+1} + \dots}$$

Il n'existe pas de solutions exactes   l' quation (IV,4), mais, comme  $\zeta$  est irrationnel, il existe des valeurs de  $k$  pour lesquelles la diff rence entre les deux termes est aussi petite que l'on veut. Donc, comme ceci n'est qu'une approximation, on prendra les valeurs de  $k$  correspondant aux solutions approch es.

## g Dynamique des phonons

Je voudrais, pour clore ce chapitre,  tudier l' nergie d'interaction entre deux phonons de Goldstone.

On a d j  vu, que,   cause de la disparition du terme de gradient habituel dans l'action, **et ceci n'est pas une pathologie, mais une trace du caract re discret du mod le de base**, l'augmentation d' nergie due   une excitation est nulle au second

ordre. On va voir qu'il en est de même pour les excitations à plusieurs particules : l'énergie d'interaction à plusieurs particules est en fait nulle au second ordre.

On va noter  $f_1$  et  $f_2$  les excitations autour d'un état fondamental décrit par  $f$ . On a l'énergie du système en présence de ces deux excitations qui devient :

$$\begin{aligned}
& \mathcal{H}(f + f_1 + f_2) - \mathcal{H}(f) \\
&= \int dx \frac{\ell}{2} (f(x + \zeta) + f_1(x + \zeta) + f_2(x + \zeta) - f(x) - f_1(x) - f_2(x))^2 \\
&\quad + V(f(x) + f_1(x) + f_2(x)) - \frac{\ell}{2} (f(x + \zeta) - f(x))^2 - V(f(x)) \\
&= \int dx \frac{f_1(x) + f_2(x)}{2} (2\ell f(x) - \ell f(x + \zeta) - \ell f(x - \zeta) + V'(f)) \\
&\quad + \frac{f_1(x)}{2} (2\ell f_1(x) - \ell f_1(x + \zeta) - \ell f_1(x - \zeta) + f_1(x) V''(f)) \\
&\quad + \frac{f_2(x)}{2} (2\ell f_2(x) - \ell f_2(x + \zeta) - \ell f_2(x - \zeta) + f_2(x) V''(f)) \\
&\quad + f_1(x) (2\ell f_2(x) - \ell f_2(x + \zeta) - \ell f_2(x - \zeta) + f_2(x) V''(f)) = 0
\end{aligned}$$

Le premier terme de la somme, du premier ordre, est naturellement nul puisqu'il exprime la stationnarité de l'énergie (en négligeant les effets de bords). Les deux termes suivants sont identiques au développement de l'énergie d'une excitation au second ordre, et sont nuls à cause de la structure particulière de l'action. Par contre, le dernier terme de la somme est l'énergie d'interaction proprement dite entre les deux excitations, donc, on ne s'attend pas a priori qu'il soit nul ; ce qui est pourtant le cas, puisque l'on retrouve juste le terme qui intervient dans l'équation (IV,3). Et d'ailleurs, le calcul peut être facilement généralisé pour les interactions à trois particules et plus.

Par contre, les termes d'ordre trois et au delà n'ont aucune raison de s'annuler, et de fait, ils seront nécessairement non nuls afin d'induire une dynamique non triviale dans le système.

## V Dispersion à couplage nul

On va trouver de façon exacte les états fondamentaux, pour le modèle de Holstein-Peierls, quand le couplage est nul. En particulier, on peut généraliser l'action et introduire une dispersion. Il se trouve que, à couplage nul, on peut se ramener facilement au cas sans dispersion. Je vais donc d'abord étudier le système sans dispersion à couplage nul.

### a Résolution exacte, sans dispersion, à couplage nul

Les équations s'écrivent (d'après les formules générales, voir annexe suivante) :

$$E^\mu \psi_n^\mu = U_n \psi_n^\mu \text{ et } U_n = - \sum_{\mu \text{ occ}} |\psi_n^\mu|^2 = -\rho_n$$

On fait une partition de  $\mathbb{Z}$  en domaines  $I_i$  pour regrouper des  $\rho_n$  identiques entre eux. Il n'est pas obligatoire de supposer que les  $\rho_n$  sont différents entre domaines

différents, mais pour deux domaines ayant des  $\rho_n$  distincts, un état propre  $\psi_n^\mu$  ne peut avoir de valeurs non nulles que sur l'un d'entre eux. On peut donc supposer, quitte à regrouper des domaines ayant même  $\rho_n$ , que chaque état propre ne prend ses valeurs que sur un seul domaine.

Dans un domaine, on a, grâce à la première équation :

$$S_i = \text{card}(I_i) = \text{nombre d'atomes}$$

$$R_i = \text{nombre d'électrons}$$

$$\forall n \in I_i, \rho_n = \rho_i \leq 1 \text{ et } \forall \mu, E^\mu = -\rho_i$$

et grâce à la seconde :

$$Un = -\rho_i \text{ et } \sum_{i \in I_i} \sum_{\mu \text{ occ}} |\psi_n^\mu|^2 = \sum_{\mu \text{ occ}} \sum_{i \in I_i} |\psi_n^\mu|^2$$

$$\text{soit } \sum_{i \in I_i} \rho_i = \sum_{\mu \text{ occ}} 1 \text{ d'où}$$

$$S_i \rho_i = R_i \text{ donc } R_i \leq S_i$$

On a caractérisé les états autant qu'on pouvait le faire, dans le sens où l'ensemble des fonctions d'ondes définissant une densité uniforme donnée est infiniment dégénéré. On peut calculer exactement la contribution  $\mathcal{E}_i$  du domaine à l'énergie totale  $\mathcal{E}$ , à savoir les énergies des électrons localisés dans  $I_i$  et celles des atomes de  $I_i$  :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_i &= \sum_{\mu \text{ de } I_i} E^\mu(U_{p \in \mathbb{Z}}) + \sum_{n \in I_i} \frac{U_n^2}{2} \\ &= \sum_{\mu \text{ de } I_i} -\rho_i + \sum_{n \in I_i} \frac{(-\rho_i)^2}{2} \\ &= -R_i \rho_i + S_i \frac{\rho_i^2}{2} \\ &= -\frac{R_i^2}{2S_i} \end{aligned}$$

et on a finalement :

$$\mathcal{E} = \sum \mathcal{E}_i = -\sum \frac{R_i^2}{2S_i}$$

On remarque que, si l'on rassemble deux domaines de même  $\rho_i$ , on ne change pas la somme totale puisque, soient  $R_1 = k_1 R$ ,  $S_1 = k_2 S$ ,  $R_2 = k_1 R$ ,  $S_2 = k_2 S$ , on a

$$\frac{(R_1 + R_2)^2}{S_1 + S_2} = (k_1 + k_2) \frac{R_2}{S} = k_1 \frac{R_2}{S} + k_2 \frac{R_2}{S} = \frac{R_1^2}{S_1} + \frac{R_2^2}{S_2}$$

Pour trouver le fondamental, il suffit de minimiser cette dernière expression. Je rajoute des multiplicateurs de Lagrange pour tenir compte des différentes contraintes.

On cherche les extrema de :

$$\sum_i -\frac{1}{2} \frac{R_i^2}{S_i} + \mu (\zeta \sum_i R_i - \sum_i S_i) + \nu (\sum_i S_i - S) + \sum_i \vartheta_i (|R_i - S_i| + (R_i - S_i))$$

D'où des équations, lorsque  $R_i \neq S_i$  :

$$-\frac{R_i}{S_i} + \mu = 0 \quad \frac{R_i^2}{S_i^2} + \nu - \zeta\mu = 0 \text{ etc}$$

Donc, en fait, pour les configurations extremalisant l'énergie,  $\rho_i$  ne peut prendre que deux valeurs, celle donnée par ces équations et 1 (pour une fonction discontinue, il n'est pas nécessaire d'annuler les dérivées à droite et à gauche à la fois pour obtenir un minimum). En regroupant en deux domaines, on peut écrire :

$$R_1 = \mu S_1, \quad R_2 = S_2, \quad R_1 + R_2 = \zeta(S_1 + S_2)$$

soit encore

$$R_1 = \frac{(1-\zeta)\mu}{1-\mu}S, \quad S_1 = \frac{(1-\zeta)}{1-\mu}S, \quad R_2 = S_2 = \frac{(\zeta-\mu)}{1-\mu}S$$

d'où

$$\mu \leq \zeta$$

On cherche donc les extrema de :

$$-\frac{R_1^2}{2S_1} - \frac{R_2^2}{2S_2} = \frac{S}{2}(-1 + (1-\zeta)(\mu+1))$$

Pour  $\mu \in [0, \zeta]$ , cette fonction de  $\mu$ , monotone, est minimale en 0, et l'énergie  $\mathcal{E}$  vaut alors  $\mathcal{E} = -\zeta\frac{S}{2}$ , et maximale en  $\zeta$ , et l'énergie  $\mathcal{E}$  vaut alors  $\mathcal{E} = -\zeta^2\frac{S}{2}$ .

Les configurations minimisant l'énergie sont tout simplement celles pour lesquelles chaque atome est, soit totalement occupé, soit totalement vide. Une façon de le réaliser est d'avoir des électrons totalement localisés en un site. Mais, ce n'est pas la seule, car l'énergie est totalement dégénérée, et toutes les configurations électroniques correspondant à une telle densité sont fondamentales ; il suffit de minimiser  $\mathcal{E}$  par rapport aux  $U_n$ , sans ajouter de contraintes sur ces fonctions d'ondes électroniques.

Par ailleurs, on a montré, au passage, que l'état le moins distordu est celui de plus haute énergie, ce qui est une confirmation éclatante du principe de distorsion de Peierls. On peut facilement le redémontrer par une méthode élémentaire : si l'on regroupe en un domaine homogène deux domaines de  $\rho_i$  différents, on augmente l'énergie totale.

Soient en effet  $\frac{R_1}{S_1} \neq \frac{R_2}{S_2}$ , on a une différence d'énergie :

$$\begin{aligned} -\frac{(R_1 + R_2)^2}{2(S_1 + S_2)} + \frac{R_2^2}{2S_2} + \frac{R_1^2}{2S_1} &= \frac{-S_1S_2(R_1 + R_2)^2 + (S_1 + S_2)S_1R_2^2 + (S_1 + S_2)S_2R_1^2}{S_1S_2(S_1 + S_2)} \\ &= \frac{(S_1R_2 - S_2R_1)^2}{S_1S_2(S_1 + S_2)} \\ &> 0 \end{aligned}$$

## b Résolution exacte, avec dispersion, à couplage nul

J'introduis maintenant une dispersion pour les phonons. On remplace, dans l'énergie, le terme  $\sum_{n \in \mathbb{Z}} \frac{U_n^2}{2}$  par

$$\frac{1}{2} {}^t UCU$$



où  $U$  représente  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  et  $C$  l'interaction phonon-phonon est un opérateur avec des termes non diagonaux qui imposent une dispersion. Et on va faire l'étude à couplage infini.

On a l'équation

$$\sum_{m \in \mathbb{Z}} C_{n,m} U_m = -\rho_n.$$

où  $\rho_n$  est toujours la densité électronique.

Lorsqu'on se restreint à une zone  $I_i$  maximale où les  $U_n$  ont tous la même valeur, on trouve simplement  $\sum_{n \in I_i} \rho_n$  états électroniques, qui ont tous l'énergie  $U_n$ .

Finalement, la contribution totale des énergies électroniques est

$$-\sum_i \sum_{n \in I_i} U_n \sum_{m \in \mathbb{Z}} C_{n,m} U_m = -{}^t U C U$$

et l'énergie totale  $\mathcal{E} = -\frac{1}{2} {}^t U C U$  avec les conditions

$$\vec{e} \cdot \vec{\rho} = \zeta$$

$$\text{et } 0 \leq \vec{\rho} \cdot \vec{i} \leq 1 \text{ pour tout } i$$

où les  $\vec{i}$  représentent les vecteurs de la base canonique :  $\vec{i}_n = \delta_{i,n}$ ,  $\vec{e} = \frac{1}{S} \sum \vec{i}$  ( $S$  est la taille du système) et  $\vec{\rho}$  est le vecteur densité.

Pour trouver les états propres, il suffit de diagonaliser la matrice racine de  $C$ , qui existe dès que  $C$  est symétrique. En effet, soit la matrice  $R$  telle que

$${}^t \bar{R} R = C$$

si on fait le changement de base

$$\vec{i} \rightarrow \vec{i}' = R \vec{i}$$

le système précédent d'équations devient

$$\mathcal{E} = -\frac{1}{2} \vec{\rho}' \cdot \vec{\rho}'$$

avec les conditions

$$\vec{e}' \cdot \vec{\rho}' = \zeta$$

$$\text{et } 0 \leq \vec{\rho}' \cdot \vec{i}' \leq 1 \text{ pour tout } i$$

On est revenu au problème sans dispersion, qui a déjà été résolu. Aussi, les états propres  $\vec{\rho}'$  exprimés dans cette base ont-ils pour coefficients des 0 et des 1, correspondant à vide ou occupé.

Si la matrice de dispersion est inversible, ce qui est normalement le cas, par un changement de variable

$$\vec{i} \rightarrow \vec{i}' = R^{-1} \vec{i}$$

on passe de ces vecteurs propres aux vrais  $(\rho_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  ou aux  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ . Sinon, on pourra toujours exprimer les solutions implicitement comme les configurations  $U$  telles que  $R U$  s'exprime à l'aide de 0 et de 1.

## VI Résolution en perturbation du modèle de Holstein-Peierls à petit couplage

On étudie dans cette partie les états à petit couplage vus comme des perturbations des états à couplage nul.

### a Définition d'un opérateur exprimant les équations de stationnarité

On s'intéresse dans cette partie dorénavant uniquement aux  $U_n$ , donc aux  $\rho_n$ . Nous allons utiliser le théorème du point fixe pour montrer que l'on peut prolonger les  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  solutions d'énergie minimale à  $\ell = 0$  en ceux d'états métastables à  $\ell \neq 0$ .

A  $\ell = 0$ , le fondamental est très fortement dégénéré. On peut caractériser les états fondamentaux en disant que les  $\rho_n$  sont des fonctions à valeurs dans  $0, 1$ . Si on prolonge continûment ces états, on trouve des solutions, à petit  $\ell$ , dont les concentrations  $\rho_n$  sont proches de 0 ou de 1. On va donc se restreindre a priori dans l'espace des états qui vérifient une telle condition, et montrer qu'ils sont bien obtenus par prolongement. Soit la classe

$$\mathcal{A}_\tau = \rho_{n \in \mathbb{Z}} \text{ tel que } \rho_n \in [0, \tau] \cup [1 - \tau, 1] \quad \tau \in [0, \frac{1}{2}[$$

on supposera que les états appartiennent à cette classe.

On va exhiber un opérateur  $F$ , agissant sur les  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ , qui laisse  $\mathcal{A}_\tau$  invariante, et qui est contractant sur cette classe.  $F$  est choisi de telle façon que ses points fixes vérifient les équations de stationnarité du modèle. Le théorème fixe nous permet alors d'affirmer que les suites d'éléments définies par la récurrence

$$U^{k+1} \equiv (U_n^{k+1})_{n \in \mathbb{Z}} = F(U^k)$$

convergent vers un point fixe unique, qui est donc un état stationnaire.  $F$  étant continu en  $\ell$ , on en déduit également que ces états sont continus en  $\ell$ , et sont donc des prolongements analytiques des solutions à  $\ell = 0$ . Toutes les solutions à  $\ell = 0$  sont ainsi prolongeables, et on aura finalement bien montré le résultat annoncé.

Choisissons tout d'abord un opérateur  $F$ . On va le définir implicitement par la relation de récurrence. Supposons  $(U_n^k)_{n \in \mathbb{Z}}$  connu, on va fixer alors  $U_n = U_n^k$  dans l'hamiltonien  $H$ , puis calculer les états propres  $(\psi_n^\mu)_{n \in \mathbb{Z}}$  de  $H$  (avec ces  $U_n$ !). Puis, on pose

$$U_n^{k+1} = - \sum_{\mu \text{ occ}} |\psi_n^\mu|^2$$

où on a fait la somme sur les états électroniques jusqu'au niveau de Fermi.

En effet, si on fait converger le processus, la relation

$$U_n = -\rho_n$$

sera bien vérifiée, et les  $(\psi_n^\mu)_{n \in \mathbb{Z}}$  seront bien états propres de  $H$ . L'état qu'on aura ainsi obtenu sera en fait un état métastable.

Cependant, le simple calcul des  $(\psi_n^\mu)_{n \in \mathbb{Z}}$  s'avère trop compliqué et l'on devra les faire disparaître dans des majorations.

L'opérateur :

$$\begin{aligned} F: \mathcal{A}_\tau &\rightarrow \mathcal{A}_\tau \\ U_{nn \in \mathbb{Z}} &\mapsto U'_{nn \in \mathbb{Z}} \text{ défini par} \\ &U'_n = - \sum_{\mu \text{ occ}} |\psi_n^\mu|^2 \end{aligned}$$

avec

$$E^\mu \psi_n^\mu = -\ell \psi_{n+1}^\mu - \ell \psi_{n-1}^\mu + U_n \psi_n^\mu$$

est bien défini, mais, trop difficile à calculer explicitement. En particulier, je ne sais pas montrer qu'il est analytique, contrairement au cas du modèle de Frenkel & Kontorowa.

## b Stabilité de $\mathcal{A}_\tau$ sous l'action de $F$

Notons tout d'abord que les solutions à couplage  $\ell$  nul, que je noterai  $(U_n^\infty)_{n \in \mathbb{Z}}$ , appartiennent bien à la classe  $\mathcal{A}_\tau$  quel que soit  $\tau$ , puisque même  $\tau = 0$  conviendrait.

Montrons que  $F(\mathcal{A}_\tau) \subset \mathcal{A}_\tau$ .

Fixons donc  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ , et  $\ell$ . Soit  $E^\mu$  l'ensemble des énergies propres de  $H$  (avec ces  $U_n$ ), et en particulier,  $E_\infty^\mu$  celles correspondant à un couplage nul, on a :

$$|E^\mu - E_\infty^\mu| < \ell \cdot \sup(|\frac{\partial E^\mu}{\partial \ell}|)$$

où, et à  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  fixé, la dérivation de  $E^\mu$  par rapport à  $\ell$  est obtenue, soit formellement, soit par un calcul en perturbation, de façon analogue à la dérivation par rapport à  $U_n$ , qu'on effectue pour trouver les équations de stationnarité. Donc on trouve :

$$\begin{aligned} \frac{\partial E^\mu}{\partial \ell} &= - \sum_{n \in \mathbb{Z}} 2\Re(\bar{\psi}_{n+1}^\mu \psi_n^\mu) \\ &< 2\|\psi^\mu\|^2 \\ &< 2 \end{aligned}$$

donc

$$|E^\mu - E_\infty^\mu| < 2\ell$$

Comme  $E_\infty^\mu = U_n \in \mathcal{A}_\tau$ , on a finalement <sup>37</sup> :

$$E^\mu \in [-\tau - 2\ell, 2\ell] \cup [-1 + \tau + 2\ell, -1 - 2\ell]$$

---

37. Remarque : le calcul ci-dessus n'est entièrement justifié que pour un système fini. Cependant, pour un système infini, on peut développer l'argument suivant. Raisonnons par l'absurde et supposons qu'il existe une solution dans l'espace de Hilbert des états physiques de l'équation de Schrödinger avec  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  et  $E > 2\ell$  ou  $E < -1 - 2\ell$  ou enfin  $-1 + 2\ell + \tau < E < -2\ell - \tau$ . On a l'équation pour tout  $n$  :

$$-t\psi_{n+1} - t\psi_{n-1} + U_n\psi_n = E\psi_n$$

que l'on récrit

$$\psi_{n+1} = \frac{U_n - E}{\ell} \psi_n - \psi_{n-1}$$

Posons le coefficient  $\alpha_n \equiv (U_n - E)/\ell$ . Quand  $E > 2t$ , on a  $\forall n \in \mathbb{Z}$ ,  $\alpha_n < -2$ . On posera alors :

En particulier, pour  $\ell > \frac{1-2\tau}{4}$ , les bandes d'énergie des états occupés et celles des états vides restent séparées, donc la somme sur  $\mu$  signifiera automatiquement somme sur les états jusqu'au niveau de Fermi.

Posons maintenant

$$\begin{aligned} E_o^\mu &= 0 \text{ pour un état vide, et} \\ &= -1 \text{ pour un état occupé.} \end{aligned}$$

On a :

$$\begin{aligned} |E^\mu - E_o^\mu| &< |E^\mu - E_\infty^\mu| + |E_o^\mu - E_\infty^\mu| \\ &< 2\ell + \tau \end{aligned}$$

car  $E_\infty^\mu \in \mathcal{A}_\tau$

Et, finalement, on va en déduire un encadrement du même type pour les  $U'_n$ .

### $\alpha$ Premier encadrement des $U'_n$

On a :

$$E^\mu \bar{\psi}_n^\mu \psi_n^\mu = -\ell \bar{\psi}_n^\mu \psi_{n+1}^\mu - \ell \bar{\psi}_n^\mu \psi_{n-1}^\mu + U_n \bar{\psi}_n^\mu \psi_n^\mu$$

$\alpha_n < -2 - d$ . Quand  $E < -1 - 2t$ , on posera de même  $\forall n \in \mathbb{Z}$ ,  $\alpha_n > 2 + d$ . Et enfin quand  $-1 + 2t + \tau < E < -2t - \tau$ , soit  $n$  est tel que  $U_n > -\tau$  et on pose  $\alpha_n > 2 + d$ , soit  $n$  est tel que  $U_n < -1 + \tau$  et on pose  $\alpha_n < -2 - d$ .

Supposons d'abord  $\alpha_n > 2 + d$ , on va traiter différents cas. 1) Soit  $\psi_1 > \psi_0 \geq 0$ , par récurrence, on prouve que :

$$\forall n \in \mathbb{N}, \psi_n > \psi_{n-1} \text{ et } \psi_n > (1+d)^{n-1} \psi_1$$

En effet, supposons la propriété démontrée jusqu'à l'ordre  $n$ , comme par hypothèse  $\psi_n > 0$ , on peut écrire :

$$\begin{aligned} \psi_{n+1} &= \alpha_n \psi_n - \psi_{n-1} \\ &> (2+d) \psi_n - \psi_{n-1} \\ &= (1+d) \psi_n + (\psi_n - \psi_{n-1}) \end{aligned}$$

et en appliquant l'hypothèse de récurrence, on en déduit exactement  $\psi_{n+1} > \psi_n$  et  $\psi_{n+1} > (1+d)^n \psi_1$ , soit la propriété à l'ordre  $n+1$ .

- 2) Soit  $\psi_0 > \psi_1 \geq 0$ , on pose  $\phi_n = \psi_{-n}$  et  $\phi_n$  vérifie exactement les conditions du premier cas.
- 3) Soit  $\psi_1 > 0$  et  $\psi_0 \leq 0$ , on a alors  $\psi_2 \geq (2+d)\psi_1 > 0$ , donc on pose  $\phi_n = \psi_{n+1}$  qui vérifie exactement les conditions du premier cas.
- 4) Soit  $\psi_0 > 0$  et  $\psi_1 \leq 0$ , on pose  $\phi_n = \psi_{-n}$  qui vérifie exactement les conditions du troisième cas.
- 5) Soit  $\psi_0 < 0$  et  $\psi_1 \geq 0$ , on pose  $\phi_n = -\psi_n$  qui vérifie exactement les conditions du quatrième cas.
- 6) Soit  $\psi_1 < 0$  et  $\psi_0 \geq 0$ , on pose  $\phi_n = -\psi_n$  qui vérifie exactement les conditions du troisième cas.
- 7) Soit  $0 \geq \psi_0 > \psi_1$ , on pose  $\phi_n = -\psi_n$  qui vérifie exactement les conditions du premier cas.
- 8) Soit  $0 \geq \psi_1 > \psi_2$ , on pose  $\phi_n = -\psi_n$  qui vérifie exactement les conditions du second cas.
- 9) Le dernier cas qui reste est  $\psi_0 = \psi_1 = 0$ , donc interdit.

Si on suppose maintenant que  $\alpha_n < -2 - d$ , on pose alors  $\phi_n = (-1)^n \psi_n$  et on se retrouve toujours dans un des cas étudiés.

Si enfin on considère le cas  $-1 + 2t + \tau < E < -2t - \tau$ , on pose  $\phi_n = -\psi_n$  quand  $\alpha_n < -2$  et  $\phi_n = \psi_n$  sinon. On se retrouve avec une équation de récurrence  $\phi_{n+1} = \alpha_n \phi_n \pm \phi_{n-1}$ , qui est plus dure à résoudre techniquement, mais analogue. Donc, on a prouvé que dans tous les cas  $\psi_n$  diverge de façon géométrique, avec une raison  $1+d$ , en  $+\infty$  ou  $-\infty$ . Donc l'état correspondant n'appartient pas à l'espace des états, et on a démontré la relation  $|E^\mu - E_\infty^\mu| < 2t$ .

Cette fois, on va sommer sur tous les indices  $\mu$ , y compris les états vides. D'où

$$\begin{aligned}\sum_{\mu} E^{\mu} \bar{\psi}_n^{\mu} \psi_n^{\mu} &= -\ell \sum_{\mu} \bar{\psi}_n^{\mu} \psi_{n+1}^{\mu} - \ell \sum_{\mu} \bar{\psi}_n^{\mu} \psi_{n-1}^{\mu} + U_n \sum_{\mu} \bar{\psi}_n^{\mu} \psi_n^{\mu} \\ &= -t \langle n | n+1 \rangle - t \langle n | n-1 \rangle + U_n \langle n | n \rangle \\ &= U_n\end{aligned}$$

Or :

$$\begin{aligned}U'_n &= - \sum_{\mu \text{ occ}} |\psi_n^{\mu}|^2 \\ &= - \sum_{\mu} \chi(\mu \in \text{occ}) |\psi_n^{\mu}|^2 \\ &= \sum_{\mu} E_o^{\mu} |\psi_n^{\mu}|^2\end{aligned}$$

d'où :

$$\begin{aligned}|U'_n - U_n| &< \sum_{\mu} |E^{\mu} - E_o^{\mu}| \bar{\psi}_n^{\mu} \psi_n^{\mu} \\ &< 2\ell + \tau\end{aligned}$$

et

$$\begin{aligned}|U'_n - U_n^{\infty}| &< |U_n - U_n^{\mu}| + |U'_n - U_n| \\ &< |U_n - U_n^{\infty}| + 2\ell + \tau\end{aligned}$$

mais cela sera insuffisant pour conclure.

### $\beta$ Deuxième encadrement des $U'_n$

On va faire intervenir  $H^2$  afin de mieux prendre en compte les échanges. On a :

$$\begin{aligned}(E^{\mu})^2 \psi_n^{\mu} &= -\ell E^{\mu} \psi_{n+1}^{\mu} - \ell E^{\mu} \psi_{n-1}^{\mu} + U_n E^{\mu} \psi_n^{\mu} \\ &= \ell^2 \psi_{n-2}^{\mu} + \ell^2 \psi_{n+2}^{\mu} + 2\ell^2 \psi_n^{\mu} \\ &\quad - \ell U_{n-1} \psi_{n-1}^{\mu} - \ell U_{n+1} \psi_{n+1}^{\mu} - \ell U_n \psi_{n-1}^{\mu} - \ell U_n \psi_{n+1}^{\mu} + U_n^2 \psi_n^{\mu}\end{aligned}$$

d'où en multipliant par  $\bar{\psi}_n^{\mu}$  et en sommant sur  $\mu$ , on trouve :

$$\sum_{\mu} (E^{\mu})^2 |\psi_n^{\mu}|^2 = 2\ell^2 + U_n^2$$

En utilisant cette relation et  $\sum_{\mu} E^{\mu} |\psi_n^{\mu}|^2 = U_n$ , on a :

$$\sum_{\mu} (E^{\mu} - U_n^{\infty})^2 |\psi_n^{\mu}|^2 = 2\ell^2 + (U_n - U_n^{\infty})^2$$

mais on peut écrire aussi :

$$\begin{aligned}\sum_{\mu} (E^{\mu} - E_o^{\mu})^2 |\psi_n^{\mu}|^2 &= \sum_{\mu} (E^{\mu} - U_n^{\infty})^2 |\psi_n^{\mu}|^2 - 2 \sum_{\mu \text{ occ}} (E^{\mu} - E_o^{\mu}) |\psi_n^{\mu}|^2 - \sum_{\mu \text{ occ}} |\psi_n^{\mu}|^2 \\ &\quad + 2U_n^{\infty} \sum_{\mu} (E^{\mu} - E_o^{\mu}) |\psi_n^{\mu}|^2 - 2U_n^{\infty} \sum_{\mu \text{ occ}} |\psi_n^{\mu}|^2 + U_n^{\infty} \sum_{\mu} |\psi_n^{\mu}|^2 \\ &= 2\ell^2 + (U_n - U_n^{\infty})^2 + (U'_n - U_n^{\infty})(1 + 2U_n^{\infty} + (E^{\mu} - E_o^{\mu})) \\ &> 0\end{aligned}$$

D'où, pour un état vide,  $U_n^\infty = 0$ , on trouve :

$$U'_n > -\frac{2\ell^2 + \tau^2}{1 - 2\tau - 4\ell}$$

et, pour un état occupé,  $U_n^\infty = -1$ , on trouve :

$$U'_n < -1 + \frac{2\ell^2 + \tau^2}{1 - 2\tau - 4\ell}$$

Il est facile de trouver  $\ell$ , à  $\tau$  fixé, tel que

$$\frac{2\ell^2 + \tau^2}{1 - 2\tau - 4\ell} < \tau$$

De plus, on peut légèrement améliorer la borne<sup>[31]</sup>, en utilisant essentiellement le fait que

$$|U_n - U_n^\infty + \frac{\tau}{2}| < \frac{\tau}{2}$$

tandis que l'on a seulement utilisé

$$|U_n - U_n^\infty| < \tau$$

Comme par ailleurs,

$$U_n = -\rho_n \in [-1, 0]$$

on a bien prouvé que

$$U'_n n_{n \in \mathbb{Z}} \in \mathcal{A}_\tau, \text{ donc que } F(\mathcal{A}_\tau) \subset \mathcal{A}_\tau$$

### c Contraction de $F$

On va établir maintenant que  $F$  est contractante pour des valeurs de  $\ell$  pas trop grandes.

On va montrer que la matrice de terme général  $(\frac{\partial U'_n}{\partial U_m})_{n,m} = (\frac{\partial F_n}{\partial U_m}(U_{k \in \mathbb{Z}}))_{n,m}$  est contractante.

Par un calcul en perturbation, on a :

$$\frac{\partial \psi_n^\mu}{\partial U_m} = \sum_{\mu'} \psi_n^{\mu'} \frac{\bar{\psi}_m^{\mu'} \psi_m^\mu}{E^{\mu'} - E^\mu}$$

d'où

$$\frac{\partial F_n}{\partial U_m}(U_{k \in \mathbb{Z}}) = \sum_{\mu \text{ occ}, \mu'} \frac{\bar{\psi}_n^\mu \psi_n^{\mu'} \bar{\psi}_m^{\mu'} \psi_m^\mu}{E^{\mu'} - E^\mu} + \text{c.c.}$$

On le notera  $\nabla F_{n,m}$ .

$$\nabla F_{n,m} = \sum_{\mu \text{ occ}, \mu' \text{ vide}} \frac{\bar{\psi}_n^\mu \psi_n^{\mu'} \bar{\psi}_m^{\mu'} \psi_m^\mu}{E^{\mu'} - E^\mu} + \text{c.c.}$$

On va majorer

$$\|\nabla F X\|^2 = \sum_{n,m} X_n \nabla F_{n,m} X_m$$

On a, pour tout  $(\mu, \mu')$  :

$$E^\mu \bar{\psi}_n^\mu \psi_n^{\mu'} = -\ell \bar{\psi}_n^\mu \psi_{n+1}^{\mu'} - \ell \bar{\psi}_n^\mu \psi_{n-1}^{\mu'} + U_n \bar{\psi}_n^\mu \psi_n^{\mu'}$$

donc, en prenant la partie conjuguée, en intervertissant  $\mu$  et  $\mu'$ , et en faisant la différence, on trouve :

$$(E^{\mu'} - E^\mu) \bar{\psi}_n^\mu \psi_n^{\mu'} = \ell \bar{\psi}_n^\mu (\psi_{n+1}^{\mu'} + \psi_{n-1}^{\mu'}) - \ell (\bar{\psi}_{n+1}^\mu + \bar{\psi}_{n-1}^\mu) \psi_n^{\mu'}$$

donc

$$\begin{aligned} |\nabla F X|^2 &= \sum_{\mu \text{ occ}, \mu' \text{ vide}} \sum_{n,m} \frac{(E^{\mu'} - E^\mu) \bar{\psi}_n^\mu \psi_n^{\mu'} (E^{\mu'} - E^\mu) \bar{\psi}_m^{\mu'} \psi_m^\mu}{(E^{\mu'} - E^\mu)^3} X_n X_m + \text{c.c.} \\ &= 2 \sum_{\mu \text{ occ}, \mu' \text{ vide}} \frac{|\sum_n (E^{\mu'} - E^\mu) \bar{\psi}_n^\mu \psi_n^{\mu'} X_n|^2}{(E^{\mu'} - E^\mu)^3} \\ \text{et,} \quad &\text{en profitant du "gap" en énergie entre états vides ou occupés} \\ &< \frac{2}{(1 - 2\tau - 4\ell)^3} \sum_{\mu\mu'} \left| \sum_n (E^{\mu'} - E^\mu) \bar{\psi}_n^\mu \psi_n^{\mu'} X_n \right|^2 \\ &= \frac{2}{(1 - 2\tau - 4\ell)^3} \sum_{\mu\mu'} \sum_{n,m} (E^{\mu'} - E^\mu) \bar{\psi}_n^\mu \psi_n^{\mu'} (E^{\mu'} - E^\mu) \bar{\psi}_m^{\mu'} \psi_m^\mu X_n X_m \\ &= \frac{2\ell^2}{(1 - 2\tau - 4\ell)^3} \sum_{n,m} X_n X_m \sum_{\mu\mu'} (\bar{\psi}_n^\mu (\psi_{n+1}^{\mu'} + \psi_{n-1}^{\mu'}) - (\bar{\psi}_{n+1}^\mu + \bar{\psi}_{n-1}^\mu) \psi_n^{\mu'}) \\ &\quad \times (\bar{\psi}_m^\mu (\psi_{m+1}^{\mu'} + \psi_{m-1}^{\mu'}) - (\bar{\psi}_{m+1}^\mu + \bar{\psi}_{m-1}^\mu) \psi_m^{\mu'}) \\ &= \frac{2\ell^2}{(1 - 2\tau - 4\ell)^3} \sum_{n,m} X_n X_m (4\delta_{n,m} - 2\delta_{n,m-1} - 2\delta_{n,m+1}) \\ &< \frac{8\ell^2}{(1 - 2\tau - 4\ell)^3} \|X\|^2 \end{aligned}$$

On peut facilement choisir  $\ell$  suffisamment petit pour que le facteur soit inférieur à 1, donc alors l'application est bien contractante.

## d Optimisation de $\tau$

La courbe  $\tau \mapsto \ell(\tau)$ , où  $\ell(\tau)$  est la valeur de  $\ell$  maximale telle que  $\mathcal{A}_\tau$  soit stable par  $F$  et que l'application  $F$  soit bien contractante (alors le théorème du point fixe peut s'appliquer), admet un maximum pour une valeur de  $\ell$  correspondant au couplage électron-phonon  $g = \frac{1}{\sqrt{\ell}} \sim 2,894$  et  $\tau \leq 0,02$  (la courbe est présentée dans le texte principal).

On a bien montré que l'on peut prolonger les états à couplage nul en des états à petit couplage. Comme l'application  $F$  est bien continue (on peut le voir sur les expressions de  $\nabla F$ ), et par application des théorèmes généraux du point fixe, (voir annexe VIII), les solutions ainsi obtenues sont continues en le paramètre  $\ell$ . Il est moins certain qu'il s'agisse d'un prolongement analytique.

On a vu dans la partie principale du texte que le spectre des phonons admet un "gap", et on en a déduit, par continuité, que tous les états obtenus sont métastables. On n'obtient pas tous les états, on n'est même pas sûr que toutes les configurations de plus basse énergie sont prolongeables à partir d'un état à couplage nul.

## e Modèle avec une dispersion

On va voir, pour conclure cette annexe, que, lorsque l'on rajoute une dispersion pour les phonons, donc, un couplage phonon-phonon, les propriétés se généralisent sans peine. Ce résultat, sans difficulté, est cependant crucial d'un point de vue physique, car, comme il existe toujours dans la nature une certaine dispersion, la théorie doit prendre en compte ces effets pour garder une grande validité.

On va d'abord montrer que l'on peut toujours prendre des configurations telles que la densité électronique soit dans un espace noté  $\tilde{\mathcal{A}}_\tau$ , ou du moins, à cause de la méthode utilisée, on le montrera à couplage nul. Puis, on verra qu'il existe une nouvelle application  $\tilde{F}$  qui laisse  $\tilde{\mathcal{A}}_\tau$  stable et est contractante.

En s'inspirant de l'annexe V, où le système à couplage nul est exactement résolu pour une dispersion quelconque  $C$ , on va faire le changement de variable

$$\vec{x} \mapsto R\vec{x}$$

La définition de l'espace  $\tilde{\mathcal{A}}_\tau$  qui reste stable sous l'application  $\tilde{F}$  est moins facile à interpréter physiquement, puisque ce sont les configurations telles que  $RU|_n = \sum_m R_{n,m}U_m$  appartiennent à l'intervalle  $[-1, -1 + \tau] \cup [-\tau, 0]$ . La concentration électronique n'est plus localisée sur des sites aléatoirement choisis. Toutefois, lorsque la dispersion est faible, on retrouve une répartition électronique avec des atomes (presque) vides et des atomes presque occupés. En particulier, si on mesure l'écart entre la matrice  $C$  et l'identité par un paramètre linéaire  $\eta$ , on vérifie facilement que pour  $\eta \sim \tau^2$ , les conditions sans dispersion sont encore suffisantes<sup>38</sup>.

Puis, on va définir  $\tilde{F}$ , qui laisse  $\tilde{\mathcal{A}}_\tau$  stable, par le même changement de variable :  $\tilde{F} = R^{-1}FR$  où  $F$  est l'ancienne application. D'où

$$\nabla\tilde{F} = R^{-1}\nabla FR$$

est de norme matricielle strictement inférieure à 1 ; autrement dit,  $\tilde{F}$  est bien contractante.

---

38. Lorsque la dispersion est suffisamment petite, il existera un  $\ell$  tel que la densité (ou les  $U_n$ ) appartiennent à un espace  $\mathcal{A}_\tau$  tel qu'il a été défini sans dispersion. On essaye typiquement de prouver alors :

$$\tau < \ell^2 + \tau^2 + \eta$$

Donc, on voit que, en fait,  $\eta < \tau$  serait une condition insuffisante. Par contre,  $\eta < \tau^2$  conviendrait très bien (toute puissance supérieure à 1 a des chances de convenir, mais, il faudrait tenir compte de la valeur de  $\ell$  et cela rendrait le problème de l'optimisation très délicat).



## VII Développement en série entière du modèle original de Frenkel & Kontorowa

### a Notations

Soit

$$\mathcal{H}(U_{i \in \mathbb{Z}}) = \sum_{i \in \mathbb{Z}} \frac{\ell}{2} (U_{i+1} - U_i)^2 + 1 - \cos(U_i)$$

l'hamiltonien.

On cherche une solution de

$$\left\{ \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial U_i}(U_{p \in \mathbb{Z}}) = 0, \text{ pour tout } i \in \mathbb{Z} \right.$$

sous la forme d'une série entière en  $\epsilon$  qui soit compatible avec les grands couplages :

$$U_i = \tilde{U}_i^0 + \epsilon \tilde{U}_i^1 + \dots + \epsilon^n \tilde{U}_i^n$$

On posera

$$U_i^k = \epsilon^k \tilde{U}_i^k$$

et l'on supposera d'emblée que

$$\forall i \in \mathbb{Z}, U_i^0 \in 2\pi\mathbb{Z} \text{ soit } U_i^0 = 2\pi M_i \text{ et } M_i \in \mathbb{Z}$$

puisque les atomes sont aux fonds des puits pour les grands couplages, comme on le voit, par exemple, dans l'annexe II.

On démontrera le résultat pour les configurations qui vérifient la condition

$$|M_{i+1} + M_{i-1} - 2M_i| \leq h \quad \forall i \in \mathbb{Z}$$

où  $h$  est un entier.

### b Calcul formel des termes du développement

Le cas des états fondamentaux correspond à

$$M_i = \left[ i\zeta + \frac{\alpha}{2\pi} \right]^+$$

donc à  $m = 1$  (voir l'annexe suivante).

On va chercher à priori le développement, puis montrer que les solutions de ce type sont bien convergentes. On fixe un  $i$  quelconque pour toute la suite des calculs, qui seront implicitement "pour tout  $i$ ". D'après les équations de stationnarité, on a :

$$\ell(2U_i - U_{i+1} - U_{i-1}) + \sin(U_i) = 0$$

soit

$$\sum_{k=0}^{\infty} \ell \epsilon^k (2\tilde{U}_i^k - \tilde{U}_{i+1}^k - \tilde{U}_{i-1}^k) + \sin\left(\sum_{k=0}^{\infty} \epsilon^k \tilde{U}_i^k\right)$$

On peut développer la fonction sinus puisque l'on est assuré à priori de rester dans un intervalle où elle est développable; et en utilisant les théorèmes de composition des séries entières.

$$\begin{aligned}
& \sin\left(\sum_{k=0}^{\infty} \epsilon^k \tilde{U}_i^k\right) \\
&= \sin\left(2\pi M_i + \sum_{k=1}^{\infty} \epsilon^k \tilde{U}_i^k\right) \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \left(\sum_{k=1}^{\infty} \epsilon^k \tilde{U}_i^k\right)^{2n+1} \\
&= \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{(2n+1)!} \sum_{\substack{M_1, \dots, M_k, \dots \in \mathbb{N} \\ \sum_{j=1}^{\infty} M_j = 2n+1}} \underbrace{\frac{2n+1!}{M_1! \times \dots \times M_k! \times \dots}}_{\substack{\text{Remarque: } k \text{ est quelconque, mais il y a un} \\ \text{nombre fini, à } n \text{ fixé, de } M_k \text{ non nuls, donc,} \\ \text{ce produit est parfaitement bien défini}}} \prod_{k=1}^{\infty} (\epsilon^k \tilde{U}_i^k)^{M_k}
\end{aligned}$$

Comme on suppose à priori la convergence en série, et que le sinus est aussi convergent suivant sa série, on peut inverser à priori l'ordre des sommations

$$\begin{aligned}
&= \sum_{h=1}^{\infty} \epsilon^h \sum_{\substack{M_1, \dots, M_k, \dots \\ \sum_{j=1}^{\infty} j M_j = h \\ \sum_{j=1}^{\infty} M_j \text{ impair noté } 2n+1}} (-1)^n \prod_{k=1}^{\infty} \frac{(\tilde{U}_i^k)^{M_k}}{M_k!} \\
&\text{dans la somme, on a en fait } j \leq h \text{ et } k \leq h \\
&= \sum_{h=1}^{\infty} \epsilon^h \sum_{\substack{M_1, \dots, M_h \\ \sum_{j=1}^h j M_j = h \\ \sum_{j=1}^h M_j \text{ impair noté } 2n+1}} (-1)^n \prod_{k=1}^h \frac{(\tilde{U}_i^k)^{M_k}}{M_k!}
\end{aligned}$$

On note  $\tilde{\delta}_{i,h}$  la seconde somme dans la formule précédente. On obtient une équation finale :

$$\sum_{k=0}^{\infty} \ell \epsilon^k (2\tilde{U}_I^k - \tilde{U}_{i+1}^k - \tilde{U}_{i-1}^k) + \sum_{k=1}^{\infty} \epsilon^k \tilde{\delta}_{i,k} = 0$$

### $\alpha$ Choix d'un paramètre de développement

On peut en déduire la nullité des termes de même ordre. Les termes de plus petit ordre sont :

$$\begin{aligned}
\forall i \in \mathbb{Z}, \quad \ell(2M_i - M_{i+1} - M_{i-1}) &= O(\ell) \\
\ell \epsilon (2\tilde{U}_i^1 - \tilde{U}_{i+1}^1 - \tilde{U}_{i-1}^1) &= O(\ell \epsilon) \\
\text{et } \epsilon \tilde{\delta}_{i,1} &= O(\epsilon)
\end{aligned}$$

La nullité à l'ordre zéro impose que

$$O(\ell) = O(\epsilon)$$

et, de ce fait :

$$\epsilon \sim \ell$$

On adoptera donc la convention  $\epsilon = \ell$ , mais, comme on le verra à la fin, d'autres choix peuvent se révéler plus judicieux. Comme les démonstrations suivantes ne dépendent pas de ce choix, et que les résultats s'exprimeront de façon très formelle, cela est sans importance.

### $\beta$ Équations de récurrence en $k$ sur les $U_i^k$

D'après sa définition, on a :

$$\begin{aligned} \tilde{\delta}_{i,k} &= \sum_{\substack{M_1, \dots, M_k \\ \sum_{j=1}^k j M_j = k \\ \sum_{j=1}^k M_j \text{ impair noté } 2n+1}} (-1)^n \prod_{r=1}^k \frac{(\tilde{U}_i^r)^{M_r}}{M_r!} \\ &= \tilde{U}_i^k + \sum_{\substack{M_1, \dots, M_{k-1} \\ \sum_{j=1}^{k-1} j M_j = k \\ \sum_{j=1}^{k-1} M_j \text{ impair noté } 2n+1}} (-1)^n \prod_{r=1}^{k-1} \frac{(\tilde{U}_i^r)^{M_r}}{M_r!} \end{aligned}$$

d'où

$$\tilde{U}_i^1 = 2\pi(M_{i+1} + M_{i-1} - 2M_i) \quad (\text{VII,1a})$$

et, pour  $k \geq 2$

$$\tilde{U}_i^k = (\tilde{U}_{i+1}^{k-1} + \tilde{U}_{i-1}^{k-1} - 2\tilde{U}_i^{k-1}) - \sum_{\substack{M_1, \dots, M_{k-1} \\ \sum_{j=1}^{k-1} j M_j = k \\ \sum_{j=1}^{k-1} M_j \text{ impair noté } 2n+1}} (-1)^n \prod_{r=1}^{k-1} \frac{(\tilde{U}_i^r)^{M_r}}{M_r!} \quad (\text{VII,2a})$$

Je récris tout en fonction des  $U_i^k = \ell^k \tilde{U}_i^k$ . On trouve :

$$U_i^1 = 2\pi\ell(M_{i+1} + M_{i-1} - 2M_i) \quad (\text{VII,1b})$$

et, pour  $k \geq 2$

$$U_i^k = \ell(U_{i+1}^{k-1} + U_{i-1}^{k-1} - 2U_i^{k-1}) - \sum_{\substack{M_1, \dots, M_{k-1} \\ \sum_{j=1}^{k-1} j M_j = k \\ \sum_{j=1}^{k-1} M_j \text{ impair noté } 2n+1}} (-1)^n \prod_{r=1}^{k-1} \frac{(U_i^r)^{M_r}}{M_r!} \quad (\text{VII,2b})$$

On va généraliser les termes  $\tilde{\delta}_{i,k}$ . On reconnaît encore bien la structure du sinus dans sa définition. Il est donc assez naturel de poser :

$$\delta_{i,k}^p = \sum_{\substack{M_1, \dots, M_{p-1} \\ \sum_{j=1}^{p-1} j M_j = k \\ \sum_{j=1}^{p-1} M_j \text{ impair noté } 2n+1}} (-1)^n \prod_{i=r}^{p-1} \frac{(U_i^r)^{M_r}}{M_r!} \quad \text{et} \quad \rho_{i,k}^p = \sum_{\substack{M_1, \dots, M_{p-1} \\ \sum_{j=1}^{p-1} j M_j = k \\ \sum_{j=1}^{p-1} M_j \text{ pair noté } 2n+1}} (-1)^n \prod_{i=r}^{p-1} \frac{(U_i^r)^{M_r}}{M_r!}$$

La formule (VII,2) s'exprime finalement :

$$\forall k \geq 2, U_i^k = \ell(U_{i+1}^{k-1} + U_{i-1}^{k-1} - 2U_i^{k-1}) - \delta_{i,k}^k \quad (\text{VII,2c})$$

### $\gamma$ Équations de récurrence pour les $\delta$ et les $\rho$

On va développer  $\delta$  et  $\rho$  par rapport aux  $U_i^{r_{\max}}$ ,  $r_{\max}$  étant le  $r$  maximum dans chaque somme.

$$\delta_{i,k}^p = \sum_{r_{\max}=1}^{p-1} \sum_{M_{r_{\max}}=1}^{p-1} \frac{(U_i^{r_{\max}})^{M_{r_{\max}}}}{M_{r_{\max}}!} \sum_{\substack{M_1, \dots, M_{r_{\max}-1} \\ \sum_{j=1}^{r_{\max}-1} j M_j = k - M_{r_{\max}} \\ \sum_{j=1}^{r_{\max}-1} M_j = 2n+1 - M_{r_{\max}}}} (-1)^n \prod_{s=1}^{r_{\max}-1} \frac{(U_i^s)^{M_s}}{M_s!}$$

Remarque : on a  $M_{r_{\max}} \ell_{\max} \leq k$ .

On notera  $r_{\max}$  par  $r$  et  $M_{r_{\max}}$  par  $M$ .

On va partager la somme en deux parts, l'une correspondant aux  $M$  pairs et l'autre aux  $M$  impairs.

$$\begin{aligned} \delta_{i,k}^p &= \sum_{r=1}^{p-1} \left( \sum_{\substack{0 \leq M \leq [k/r]^+ \\ M \text{ impair} = 2q+1}} \frac{(U_i^r)^M}{M!} (-1)^q \sum_{\substack{M_1, \dots, M_{r-1} \\ \sum_{j=1}^{r-1} j M_j = k - Mr \\ \sum_{j=1}^{r-1} M_j = 2(n-q)}} (-1)^{(n-q)} \prod_{s=1}^{r-1} \frac{U_i^s)^{M_s}}{M_s!} \right. \\ &\quad \left. \text{on reconnaît } \rho_{i,k-Mr}^r \right) \\ &+ \sum_{\substack{0 \leq M \leq [k/r]^+ \\ M \text{ pair} = 2q}} \frac{(U_i^r)^M}{M!} (-1)^q \sum_{\substack{M_1, \dots, M_{r-1} \\ \sum_{j=1}^{r-1} j M_j = k - Mr \\ \sum_{j=1}^{r-1} M_j = 2(n-q)+1}} (-1)^{(n-q)} \prod_{s=1}^{r-1} \frac{U_i^s)^{M_s}}{M_s!} \\ &\quad \left. \text{on reconnaît } \delta_{i,k-Mr}^r \right) \end{aligned}$$

donc on obtient finalement :

$$\delta_{i,k}^p = \sum_{j=1}^{p-1} \left( \sum_{\substack{1 \leq M \leq [k/j]^+ \\ M=2q+1}} (-1)^q \frac{(U_i^j)^M}{M!} \rho_{i,k-Mj}^j + \sum_{\substack{1 \leq M \leq [k/j]^+ \\ M=2q}} (-1)^q \frac{(U_i^j)^M}{M!} \delta_{i,k-Mj}^j \right) \quad (VII,3a)$$

De même, il vient facilement :

$$\rho_{i,k}^p = \sum_{j=1}^{p-1} \left( \sum_{\substack{1 \leq M \leq [k/j]^+ \\ M=2q+1}} (-1)^{q+1} \frac{(U_i^j)^M}{M!} \delta_{i,k-Mj}^j + \sum_{\substack{1 \leq M \leq [k/j]^+ \\ M=2q}} (-1)^q \frac{(U_i^j)^M}{M!} \rho_{i,k-Mj}^j \right) \quad (VII,3b)$$

Les expressions précédentes sont définies essentiellement pour  $1 \leq p \leq k+1$ ; pour les cas où  $p > k+1$ , on voit alors facilement qu'en fait :

$$\delta_{i,k}^p = \delta_{i,k}^{k+1} \text{ et } \rho_{i,k}^p = \rho_{i,k}^{k+1} = \rho_{i,k}^k$$

De plus, d'après les formules initiales, on trouve :

$$\rho_{i,0}^1 = 1 \quad \delta_{i,0}^1 = 0$$

et

$$\forall k \geq 1, \quad \rho_{i,k}^1 = \delta_{i,k}^1 = 0$$

Toutes ces remarques, et les deux formules précédentes permettent de caractériser complètement les  $\delta_{i,k}^p$  et les  $\rho_{i,k}^p$ . La distinction pair-impair, qui est fondamentale dans ce problème et liée aux structures respectives du cosinus et du sinus, n'interviendra pas cependant dans les majorations que nous allons effectuer.

### c Majorations indépendantes de $i$

Nous allons chercher des termes  $\lambda_k^p$  tels que :

$$\forall i \in \mathbb{Z}, |\delta_{i,k}^p| < \lambda_k^p \text{ et } |\rho_{i,k}^p| < \lambda_k^p$$

Pour démontrer une telle majoration, on va procéder par récurrence sur  $k$ .

Supposons que le résultat soit démontré jusqu'à l'ordre  $k - 1$ . En utilisant les formules de récurrence (VII,3), on aura alors à chaque étape démontré que :

$$\begin{aligned} |\delta_{i,k}^p| &\leq \sum_{j=1}^{p-1} \sum_{m=1}^{[k/j]^+} \frac{|U_i^j|^M}{M!} \lambda_{k-Mj}^j \text{ et} \\ |\rho_{i,k}^p| &\leq \sum_{j=1}^{p-1} \sum_{m=1}^{[k/j]^+} \frac{|U_i^j|^M}{M!} \lambda_{k-Mj}^j \end{aligned}$$

donc, il suffira de prouver

$$\sum_{j=1}^{p-1} \sum_{m=1}^{[k/j]^+} \frac{|U_i^j|^M}{M!} \lambda_{k-Mj}^j \leq \lambda_k^p \quad (\text{VII,4a})$$

pour avoir les majorations

$$|\delta_{i,k}^p| < \lambda_k^p \text{ et } |\rho_{i,k}^p| < \lambda_k^p$$

Comme, il reste un indice  $i$  dans l'inégalité (VII,4), je vais supposer de plus que

$$\forall i \in \mathbb{Z}, |U_i^k| \leq \alpha \lambda_k^k \quad (\text{VII,5})$$

hypothèse qu'il faudra assumer par la suite ;  $\alpha$  est pour l'instant indéterminé, et vérifie

$$\alpha > 1$$

L'inégalité (VII,4) devient maintenant :

$$\sum_{j=1}^{p-1} \sum_{m=1}^{[k/j]^+} \frac{(\alpha \lambda_j^j)^M}{M!} \lambda_{k-Mj}^j \leq \lambda_k^p \quad (\text{VII,4b})$$

Il faut vérifier les majorations aux premiers ordres.

$\lambda_0^1 = 1$  convient bien.

$\lambda_k^1$  est complètement libre pour tout  $k \geq 1$

Et bien sûr, on posera :

$$\lambda_k^p = \lambda_k^{k+1} \quad \forall k, p \text{ tels que } p \geq k + 1$$

## d Choix d'une majoration

On va tenter de montrer que pour  $p \leq k$  :

$$\lambda_k^p = \frac{1}{[k/p]^+! p^2} \quad (\text{VII,6a})$$

et pour  $p \geq k + 1$  :

$$\lambda_k^p = \frac{C}{\underbrace{[k/p]^+!}_{=1} (k+1)^{2-\theta}} \quad (\text{VII,6b})$$

où  $\theta$  et  $C$  seront déterminés par la suite, et vérifient

$$0 < \theta \leq 1 \text{ et } C > 0$$

convient bien.

On a, pour  $M < [k/j]^+$  :

$$k - Mj \geq j$$

et pour  $M = [k/j]^+$

$$k - Mj \leq j - 1$$

et la relation de récurrence que l'on cherche finalement à obtenir est :

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{p-1} \left( \sum_{M=1}^{[k/j]^+-1} \left( \frac{\alpha}{\underbrace{[j/j]^+!}_{=1} + j^2} \right)^M \frac{1}{M!} \frac{1}{[(k - Mj)/j]^+! j^2} \right. \\ & \quad \left. + \left( \frac{\alpha}{\underbrace{[j/j]^+}_{=1} j^2} \right)^{[k/j]^+} \frac{1}{[k/j]^+!} \frac{C}{\underbrace{[(k - [k/j]^+ j)/j]^+!}_{=1}} \frac{1}{(k - [k/j]^+ j + 1)^{2-\theta}} \right) \\ & = \begin{cases} \frac{C}{\underbrace{[k/p]^+!}_{=1} (k+1)^{2-\theta}} & \text{si } p \geq k + 1 \\ \frac{1}{[k/p]^+! p^2} & \text{si } p \leq k \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{VII,7a})$$

(VII,7a)

(VII,7b)

Le cas  $p \geq k + 1$  peut se ramener au cas  $p = k + 1$ , car, quand on considère un  $p \geq k + 2$ , les contributions différentes du cas  $p = k + 1$  vont provenir des termes  $j \geq k + 1$  dans la somme, qui sont tous nuls, et on se ramène finalement au même cas.

On sait calculer explicitement la sommation sur  $M$ , de l'inégalité précédente (la forme des majorants a d'ailleurs été choisie pour cela). Le terme de gauche s'écrit encore :

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^{p-1} \left( \sum_{M=1}^{[k/j]^+} \left( \frac{\alpha}{j^2} \right)^M \frac{1}{M!} \frac{1}{[(k - Mj)/j]^+! j^2} \frac{1}{j^2} + \left( \frac{\alpha}{j^2} \right)^{[k/j]^+} \frac{1}{[k/j]^+!} \left( \frac{C}{(k - [k/j]^+ j + 1)^{2-\theta}} - \frac{1}{j^2} \right) \right) \\ & \quad \quad \quad = \binom{M}{[k/j]^+} \frac{1}{[k/j]^+} \\ & = \sum_{j=1}^{p-1} \frac{1}{[k/j]^+!} \left( \frac{1}{j^2} \left( \left( 1 + \frac{\alpha}{j^2} \right)^{[k/j]^+} - 1 \right) + \left( \frac{C}{(k - [k/j]^+ j + 1)^{2-\theta}} - \frac{1}{j^2} \right) \left( \frac{\alpha}{j^2} \right)^{[k/j]^+} \right) \end{aligned}$$

Pour  $p \leq k$ , VII,7a devient :

$$\sum_{j=1}^{p-1} \frac{1}{[k/j]^+!} \left( \frac{1}{j^2} \left( (1 + \frac{\alpha}{j^2})^{[k/j]^+} - 1 \right) + \left( \frac{C}{(k - [k/j]^+ j + 1)^{2-\theta}} - \frac{1}{j^2} \right) \left( \frac{\alpha}{j^2} \right)^{[k/j]^+} \right) \leq \frac{1}{[k/p]^+! p^2}$$

On multiplie l'inégalité par  $[k/p]^+ p^2$  et on décompose encore le terme de gauche en deux. On a :

$$\sum_{j=1}^{p-1} \left( \underbrace{\frac{[k/p]^+! p^2}{[k/j]^+! j^2} \left( (1 + \frac{\alpha}{j^2})^{[k/j]^+} - 1 \right)}_{\equiv A_{j,k}^p} + \underbrace{\frac{[k/p]^+! p^2}{[k/j]^+!} \left( \frac{C}{(k - [k/j]^+ j + 1)^{2-\theta}} - \frac{1}{j^2} \right) \left( \frac{\alpha}{j^2} \right)^{[k/j]^+}}_{\equiv B_{j,k}^p} \right) \leq 1$$

Pour  $p = k + 1$ , on démontre de même que VII,7b devient

$$\sum_{j=1}^k \left( \underbrace{\frac{(k+1)^{2-\theta}}{[k/j]^+! C j^2} \left( (1 + \frac{\alpha}{j^2})^{[k/j]^+} - 1 \right)}_{A_{j,k}^{k+1}/C(k+1)^\theta} + \underbrace{\left( \frac{(k+1)^{2-\theta}}{(k - [k/j]^+ j + 1)^{2-\theta}} - \frac{(k+1)^{2-\theta}}{C j^2} \right) \left( \frac{\alpha}{j^2} \right)^{[k/j]^+}}_{B_{j,k}^{k+1}/C(k+1)^\theta} \right) \leq 1$$

## e Résolution de (VII,7)

Dans le terme de gauche de (VII,7a), on va montrer, d'une part, que la première contribution  $A_{j,k}^p$  tend vers zéro quand  $k \rightarrow \infty$ . D'autre part, dans la seconde,  $B_{j,k}^p$ , on va supprimer le terme en  $-\frac{1}{j^2}$  puisqu'il est négatif, et, le facteur  $C$  mis à part, on va montrer que cette contribution est bornée quand  $k \rightarrow \infty$ . Et finalement, en ajustant correctement le facteur  $C$ , l'inégalité de récurrence (VII,7a) sera démontrée à partir d'un rang élevé.

Quant à la relation (VII,7b), le premier terme est égal à  $\frac{1}{C(k+1)^\theta}$  fois la première contribution  $A_{j,k}^p$  de l'inégalité (VII,7a), quand on prend  $p = k + 1$ . Comme le fait que cette contribution tende vers zéro sera valable pour  $p = k + 1$ , il en découle que ce terme-ci tend vers zéro quand  $k \rightarrow \infty$ . Et on va de nouveau négliger la contribution négative dans le second terme. On trouve  $\frac{1}{C(k+1)^\theta}$  fois la contribution fini  $B_{j,k}^p$  que l'on aurait trouvé dans (VII,7a) en prenant  $p = k + 1$ , ce que l'on est autorisé à faire. Donc, ce terme-ci tendra vers zéro, puisque  $\frac{1}{C(k+1)^\theta}$  tend vers zéro. Et finalement, la relation de récurrence (VII,7b) sera établie à partir d'un certain rang élevé.

Ayant vérifié la première inégalité (VII,7a) à partir d'un rang suffisamment élevé, en faisant varier  $p$  jusqu'à  $k + 1$ , l'inégalité (VII,7b) sera alors également établie à partir d'un certain rang, et les inégalités (VII,6a) et (VII,6b) seront démontrées en commençant la récurrence à partir de ce rang.

On cherche donc à prouver que la somme sur  $j$  de  $A_{j,k}^p$  tend vers 0 et que celle de  $B_{j,k}^p$  est bornée. Pour cette dernière quantité, on a éliminé le terme négatif, et mis  $C$  en facteur. On ne portera donc plus ce facteur dans  $B_{j,k}^p$ . On devra scinder ces sommes sur  $j$  en plusieurs morceaux, afin de pouvoir traiter par des cas différents selon les valeurs de  $j$ .

$\alpha$  Cas où  $j < [k^{5/12}]^+$

On étudie d'abord le cas  $j < [k^{5/12}]^+$ , et on va majorer tous les  $A_{j,k}^p$  et  $B_{j,k}^p$  de la même façon.

On fait les majorations suivantes :

$$p^2 \text{ par } (k+1)^2 \frac{1}{j^2} \text{ et}$$

$$\frac{1}{(k - [k/j]^+ j + 1)^2} \text{ par } 1$$

$$(1 + \frac{\alpha}{j^2})^{[k/j]^+} - 1 \text{ et } (\frac{\alpha}{j^2})^{[k/j]^+} \text{ par } (1 + \frac{\alpha}{j^2})^{[k/j]^+} \text{ puis par } e^{\frac{\alpha k}{j^3}}$$

Dans la somme, on a  $j \leq k - 1$  d'où :

$$[k/j]^+ - [k/p]^+ \geq [k/j]^+ - [k/(j+1)]^+$$

Mais, on sait que :

$$\forall k, j, [k/j]^+ - [k/(j+1)]^+ \geq [[k/j]^+ / (j+1)]^+$$

comme nous allons le démontrer maintenant.

En effet, on aurait sinon :

$$[k/(j+1)]^+ \geq [k/j]^+ - [[k/j]^+ / (j+1)]^+ + 1$$

$$\geq [k/j]^+ - \frac{[k/j]^+}{j+1} + 1$$

d'où

$$\frac{k}{j+1} \geq [k/j]^+ - \frac{[k/j]^+}{j+1} + 1$$

d'où

$$k \geq [k/j]^+ j + j + 1$$

$$> ([k/j]^+ + 1)j$$

d'où

$$\frac{k}{j} > [k/j]^+ + 1$$

absurde.

Donc, ici, on a :

$$[k/j]^+ - [k/p]^+ \geq [[k/j]^+ / (j+1)]^+$$

$$\geq \frac{k}{j(j+1)} + \frac{1}{j+1} + 1$$

Or, par ailleurs, on a :

$$\forall n \in \mathbb{N}, (1 + \frac{1}{12n})n^n e^{-n\sqrt{2\pi n}} \leq n! \leq (1 + (\frac{e}{\sqrt{2\pi}} - 1)\frac{1}{n})n^n e^{-n\sqrt{2\pi n}}$$



Donc, on trouve finalement une majoration de  $A_{j,k}^p$  et  $B_{j,k}^p$  par :

$$\frac{(k+1)^2 e^{\frac{\alpha k}{j^3}}}{\left(\frac{k}{j}-1\right)^{\frac{k}{j(j+1)}+\frac{1}{j+1}}} \left( \frac{\frac{k}{j}-\frac{k}{j(j+1)}-\frac{1}{j+1}-1}{\frac{k}{j}-1} \right)^{\frac{k}{j}-\frac{k}{j(j+1)}-\frac{1}{j+1}-\frac{1}{2}}$$

$$\times \exp\left(\frac{k}{j(j+1)}+\frac{1}{j+1}\right) \left(1+\left(\frac{e}{\sqrt{2\pi}}-1\right)\frac{1}{\frac{k}{j}-\frac{k}{j(j+1)}-\frac{1}{j+1}-1}\right) / \left(1+\frac{1}{12}\frac{1}{\frac{k}{j}-1}\right)$$

Il vient en particulier en terme  $k^{-\frac{k}{j^2}}$  qui est beaucoup plus puissant que tous les autres : on vérifie (difficilement) qu'il impose sa convergence, et de plus, comme  $j < k^{5/12}$ , on a également  $\frac{k}{j^2} > k^{\frac{1}{6}}$ , et finalement les sommes partielles de  $A_{j,k}^p$  ou de  $B_{j,k}^p$  vont tendre vers zéro quand  $k \rightarrow \infty$ .

Par la suite, on ne traitera plus que des cas où  $j \geq [k^{5/12}]^+$ , et alors, le terme  $\left(1+\frac{\alpha}{j^2}\right)^{[k/j]^+}-1$  se comporte comme  $\frac{\alpha}{j^2}[k/j]^+$ , il existe donc une majoration canonique du premier par le second. Cependant, comme les calculs sont déjà épouvantablement compliqués, on substituera directement le second au premier, afin de simplifier la présentation des calculs.

### $\beta$ Majoration de $A_{j,k}^p$ quand $j \geq [k^{4/5}]^+$

On va maintenant faire les majorations sur  $A_{j,k}^p$  dans le cas où  $j \geq [k^{4/5}]^+$ .

On peut majorer  $[k/p]^+/[k/j]^+$  par 1 ;  
 puis ceci étant fait, on majore  $p^2$  par  $(k+1)^2$ .

On se retrouve avec une somme du type

$$\sum_{j \geq [k^{4/5}]^+} \alpha \frac{k^3}{j^5}$$

qui vaut donc à peu près :

$$\sim \alpha k^3 (k^{4/5})^{-4} = \frac{\alpha}{k^{1/5}}$$

$\rightarrow 0$  quand  $k \rightarrow \infty$

### $\gamma$ Majoration de $A_{j,k}^p$ quand $[k^{5/12}]^+ \leq j \leq [k^{4/5}]^+$

Il reste maintenant à majorer  $A_{j,k}^p$  dans le cas  $[k^{5/12}]^+ \leq j \leq [k^{4/5}]^+$ . On va subdiviser ce cas en deux suivant que  $p$  sera inférieur ou supérieur à  $[k^{5/6}]^+$

Dans le cas où  $p \geq [k^{5/6}]^+$ , en utilisant les majorations et minoration de Stirling, que j'ai énoncées, dans terme  $[k/p]^+/[k/j]^+$ , et en remplaçant  $p^2$  par  $(k+1)^2$ , on trouve approximativement :

$$A_{j,k}^p \sim \alpha \frac{k^3}{j^5} \frac{k^{\frac{1}{6}}}{k^{\frac{1}{5}}} e^{k^{\frac{1}{5}}-k^{\frac{1}{6}}}$$

et la somme converge vers zéro quand  $k \rightarrow \infty$

On suppose maintenant que  $p < [k^{5/6}]^+$

On va montrer d'abord le résultat annexe suivant : Soit  $l$  un entier et  $j < l$ . On suppose également  $k$  fixé.

$$\begin{aligned} \text{si } [k/l]^+ = [k/j]^+ \text{ alors } j &\geq l - \left[ \frac{l}{[k/l]^+ + 1} \right]^+ \\ &\text{et donc } \geq l - \frac{l^2}{k} \end{aligned}$$

On le démontre par l'absurde ; on aurait sinon :

$$\begin{aligned} \left[ \frac{k}{l - \left[ \frac{l}{[k/l]^+ + 1} \right]^+ - 1} \right]^+ &= [k/l]^+ \text{ donc} \\ \frac{k}{l - \left[ \frac{l}{[k/l]^+ + 1} \right]^+ - 1} &< [k/l]^+ + 1 \end{aligned}$$

soit

$$\begin{aligned} k &< [k/l]^+ l - ([k/l]^+ + 1 - 1) \left( \left[ \frac{l}{[k/l]^+ + 1} \right]^+ + 1 \right) + l - \left[ \frac{l}{[k/l]^+ + 1} \right]^+ \text{ d'où} \\ k &< [k/l]^+ l - ([k/l]^+ + 1) \left( \left[ \frac{l}{[k/l]^+ + 1} \right]^+ + 1 \right) + l + 1 \end{aligned}$$

Or, on a l'inégalité :

$$\forall a, b \in \mathbb{Z}, a([b/a]^+ + 1) \geq b + 1$$

En effet, on a clairement  $\geq b$  ; mais l'inégalité peut être prise au sens strict, car, en cas d'égalité, on obtient  $= b + 1$ . Donc, on a  $> b$ , et comme la quantité de gauche de l'inégalité est un entier, on a finalement  $\geq b + 1$ .

On a donc :

$$k < [k/l]^+ l - l - 1 + l + 1$$

soit

$$\frac{k}{l} < [k/l]^+$$

absurde.

On va alors noter

$$j_0 = p$$

et  $j_n$  chaque entier au passage duquel  $[k/j]^+$  varie, lorsque  $j$  décroît à partir de  $p$ . On a donc :

$$\begin{aligned} [k/p]^+ &= [k/j_0]^+ = \dots = [k/(j_1 + 1)]^+ \\ &\neq [k/j_1]^+ = \dots = [k/(j_2 + 1)]^+ \neq [k/j_2]^+ = \dots \end{aligned}$$

On peut récrire la somme que l'on cherche à majorer par :

$$\sum_{n=1}^N \frac{\alpha k p^2}{j^3 j^2} \frac{[k/p]^+!}{[k/j_{n-1}]^+!}$$

où  $N$  est tel que

$$j_{N-1} \geq [k^{5/12}]^+ \text{ et } j_N < [k^{5/12}]^+$$

Pour  $n \geq 8$  on a

$$\frac{p^2 [k/p]^+!}{j^2 [k/j_{n-1}]^+!} = \frac{1}{\underbrace{[k/j_0 + 1]^+ \dots [k/j_{n-1}]^+}_{\text{plus de 7 termes}}}$$

où chaque terme du dénominateur est  $> [k/l]^+ \sim k^{1/6}$ .

On majore par ailleurs le terme  $p^2$  comme  $(k^{5/6})^2$ , donc on peut finalement majorer chaque terme  $p^2([k/p]^+!)/([k/j_{n-1}]^+!)$  de la somme par un terme du type

$$k^{\frac{10}{6} - \frac{7}{6}} = k^{1/2}$$

et la somme  $\sum_{n \geq 8}$  sera finalement bornée comme

$$\begin{aligned} &\leq \alpha k^{3/2} \sum_{j \geq [k^{5/12}]^+} \frac{1}{j^5} \\ &\sim \alpha k^{3/2} \frac{1}{([k^{5/12}]^+)^4} \\ &\sim \alpha k^{\frac{3}{2} - \frac{5}{3}} \\ &= \alpha k^{-1/6} \\ &\rightarrow 0 \text{ quand } k \rightarrow \infty \end{aligned}$$

Il ne reste plus alors que la somme

$$\sum_{n=1}^7 \frac{\alpha k p^2 [k/p]^+!}{j^3 j^2 [k/j_{n-1}]^+!}$$

On a alors  $j > j_8$  donc

$$\begin{aligned} \frac{p^2}{j^2} = \frac{j_0^2}{j^2} &< \frac{j_0^2}{j_8^2} \\ &= \frac{j_0^2 j_1^2}{j_1^2 j_2^2} \dots \frac{j_7^2}{j_8^2} \end{aligned}$$

Or, je n'ai pas encore utilisé le résultat annexe qui a été démontré en premier lieu. Appliqué au  $j_i$ , ce résultat s'exprime comme :

$$\forall i \in \mathbb{N}, j_{i+1} \geq j_i - \frac{j_i^2}{k}$$

donc

$$\begin{aligned} \left(\frac{j_i}{j_{i+1}}\right)^2 &\leq \frac{1}{\left(1 - \frac{j_i}{k}\right)^2} \\ &\leq \frac{1}{\left(1 - \frac{p}{k}\right)^2} \end{aligned}$$

comme  $p < [k^{5/6}]^+$ , on a une majoration finie  $M$   
 $\leq M$

et donc on va majorer

$$\frac{p^2}{j^2} \text{ par } M^8 \text{ et}$$

$$j^{-3} \text{ par } j_8^{-3} \text{ et}$$

$$\frac{[k/p]^+!}{[k/j_{n-1}]^+!} \text{ par } 1$$

et finalement

$$\begin{aligned} \sum_{n=1}^7 \frac{\alpha k p^2}{j^3 j^2} \frac{[k/p]^+!}{[k/j_{n-1}]^+!} &\leq 7M^8 \frac{k}{j_8^3} \\ &\text{et comme } j_8 \geq [k^{5/12}]^+ \\ &\sim k^{-1/4} \\ &\rightarrow 0 \text{ quand } k \rightarrow \infty \end{aligned}$$

Nous avons finalement établi que toutes les sommes partielles de  $A_{j,k}^p$  tendent vers zéro quand  $k$  tend vers l'infini, donc cela est vrai de la somme totale des  $A_{j,k}^p$ .

Il reste à établir que les sommes partielles sur  $B_{j,k}^p$  autres que celle pour  $j < [k^{5/12}]^+$  qui a déjà été traitée, restent bornées.

**$\delta$  Majoration de  $B_{j,k}^p$  quand  $[k^{5/12}]^+ \leq j \leq [k/3]^+$**

On va d'abord considérer le cas  $[k^{5/12}]^+ \leq j \leq [k/3]^+$ .

On va alors majorer

$$p^2 \text{ par } (k+1)^2$$

$$\frac{[k/p]^+!}{[k/j]^+!} \text{ par}$$

$$\frac{1}{(k - [k/j]^+ + j + 1)^{2-\theta}} \text{ par } 1$$

et quand  $\frac{\alpha}{j^2} < 1$ , soit quand  $\alpha/[k^{5/12}]^+ < 1$ , soit finalement pour  $k$  assez grand, on peut majorer  $(\frac{\alpha}{j^2})^{[k/j]^+}$  par  $(\frac{\alpha}{j^2})^3$

Alors, la somme s'écrit typiquement :

$$\begin{aligned} C\alpha^3(k+1)^2 \sum_{[k^{5/12}]^+ < j \leq [k/3]^+} \frac{1}{j^6} &\sim C\alpha^3 \frac{k^2}{[k^{5/12}]^+5} \\ &\sim C\alpha^3 k^{2-\frac{5.5}{12}} \\ &= \frac{C\alpha^3}{k^{1/12}} \\ &\rightarrow 0 \text{ quand } k \rightarrow \infty \end{aligned}$$

ε **Majoration de  $B_{j,k}^p$  quand  $[k/3]^+ < j \leq [k/2]^+$**

On considère maintenant le cas  $[k/3]^+ < j \leq [k/2]^+$

On va majorer

$$p^2 \text{ par } (k+1)^2$$

$$\frac{[k/p]^+!}{[k/j]^+!} \text{ par } 1$$

$$\frac{1}{(k-2j+1)^{2-\theta}} \text{ par } 1$$

où on a utilisé

$$[k/j]^+ = 2$$

On peut borner la somme par

$$\sum_{[k/3]^+ < j \leq [k/2]^+} (k+1)^2 C \alpha^2 \frac{1}{j^4} \sim \frac{C \alpha^2}{k}$$

qui tendra donc vers zéro quand  $k$  tend vers l'infini.

ζ **Majoration de  $B_{j,k}^p$  quand  $j > [k/2]^+$**

Enfin, quand  $j > [k/2]^+$ , on va majorer

$$p^2 \text{ par } (k+1)^2$$

$$\frac{[k/p]^+!}{[k/j]^+!} \text{ par } 1$$

$$\frac{1}{j^2} \text{ par } \frac{4}{k^2}$$

On obtient alors

$$B_{j,k}^p \leq \frac{C \alpha}{(k-j+1)^{2-\theta}} \frac{(k+1)^2}{k^2}$$

où j'ai utilisé  $[k/j]^+ = 1$

Le facteur  $(k+1)^2/k^2$  étant borné (par 4), on le néglige, et on trouve que

$$\frac{1}{(k-j+1)^{2-\theta}} < 1 + \frac{1}{2-\theta} < 2$$

donc, la somme est majorée par

$$32\alpha^2 C$$

Si l'on prend  $C = \frac{1}{32\alpha^2}$ , cette somme est toujours inférieure à 1, (et même à  $\frac{1}{4}$  quand  $k$  tend vers l'infini). On remarque que c'est le seul terme qui ne tend pas vers zéro, et qu'il a ainsi nécessité l'introduction d'un paramètre ajustable afin de vérifier les inégalités de récurrences.

Finalement, on démontre bien l'inégalité (VII,7a), et par suite l'inégalité (VII,7b), à partir d'un certain rang  $\tilde{k} + 1$ .

## $\eta$ Majorations des premiers ordres : restriction du domaine de validité

On a

$$|U_i^1| \leq 2\pi h \ell \quad \forall i \in \mathbb{Z}$$

Les  $|U_i^1|$  sont majorés par une fonction holomorphe de  $\ell$ , qui s'annule à l'origine.

Par suite, tous les  $\rho_{i,k}^p, \delta_{i,k}^p$  pour  $k \leq \tilde{k}$  sont majorés par des fonctions holomorphes en  $\ell$  s'annulant à l'origine, et indépendantes de  $i$ . Autrement dit, le tenseur

$$(\rho_{i,k}^p, \delta_{i,k}^p)_{\substack{k \leq \tilde{k} \\ p \leq \tilde{k}+1}}$$

$i$  étant fixé, est majoré par une fonction tensorielle, s'annulant à l'origine et indépendante de  $i$ .

Il existe  $\epsilon$  tel que pour  $\ell < \epsilon$ , cette fonction soit majorée par

$$(\lambda_k^p, \lambda_k^p)_{\substack{k \leq \tilde{k} \\ p \leq \tilde{k}+1}}$$

où les  $\lambda_k^p$  sont ceux donnés par les formules (VII,6a) et (VII,6b).

Pour  $\ell < \epsilon$ , les  $\tilde{k}$  premiers ordres de la récurrence sont bien établis; et, comme on peut utiliser les relations de récurrence (VII,4) à partir du rang  $\tilde{k} + 1$ , on obtient finalement :

Pour  $\ell < \epsilon$ , pour tous  $i, k, p$ ,  $|\rho_{i,k}^p|$  et  $|\delta_{i,k}^p|$  sont majorés par  $\lambda_k^p$ .

En particulier,

$$|\delta_{i,k}^k| \leq \frac{1}{k^2} = \lambda_k^k$$

## f Vérification de l'hypothèse supplémentaire de majoration des $|U_i^k|$ : autre restriction du domaine

Il reste à assurer la condition (VII,5)

$$|U_i^k| < \alpha \lambda_k^k = \frac{\alpha}{k^2}$$

On va l'établir de la même façon, en trouvant une relation de récurrence qui sera valable à partir d'un ordre  $\tilde{k}' + 1$ , et on prendra  $\ell < \epsilon'$  tel que la relation (VII,5) soit vérifiée jusqu'à l'ordre  $\tilde{k}'$

On va utiliser la formule (VII,1)

$$U_i^1 = 2\pi \ell (M_{i+1} + M_{i-1} - 2M_i)$$

et la formule (VII,2)

$$\forall k \geq 2, U_i^k = \ell (U_{i+1}^{k-1} + U_{i-1}^{k-1} - 2U_i^{k-1}) - \delta_{i,k}^k$$

qui donnent, pour la première :

$$|U_i^1| < \alpha \lambda_1^1 = \alpha$$

qui est vérifiée dès que

$$2\pi h \ell < \alpha \tag{VII,8}$$

et pour la seconde, aux ordres supérieurs

$$|U_i^k| \leq 4\ell\alpha\lambda_{k-1}^{k-1} + \lambda_k^k$$

Si le résultat est vrai jusqu'à l'ordre  $k$ , il suffit alors de prouver

$$\frac{4\ell\alpha}{(k-1)^2} + \frac{1}{k^2} < \frac{\alpha}{k^2}$$

qui donne

$$\begin{aligned} \ell &< \frac{1}{4} \left( \frac{k-1}{k} \right)^2 \\ &< \frac{1}{4} \left( \frac{\tilde{k}'}{\tilde{k}'+1} \right)^2 \end{aligned}$$

et

$$\alpha > \frac{1}{1 - \left( \frac{k}{k-1} \right)^2 4\ell}$$

soit finalement

$$\ell < \frac{1}{4} \left( \frac{\tilde{k}'}{\tilde{k}'+1} \right)^2 \frac{\alpha - 1}{\alpha} \quad (\text{VII,9})$$

et, quand les relations (VII,8) et (VII,9) sont bien vérifiées, l'hypothèse sur les  $|U_i^k|$  est bien assumée, et on aura alors démontré, en particulier, que

$$\forall i, |U_i^k| < \frac{\alpha}{k^2}$$

donc les  $U_i^k$  sont les coefficients d'une série normalement convergente : donc, il existe bien un développement en série entière en  $\ell$  qui est solution des équations de stationnarité du système de Frenkel & Kontorowa, puisque, en remontant tous les calculs qui précèdent, on pourra justifier les interversions des sommes entre la série du sinus, et celle des  $U_i$ , et alors

$$\sum_k U_i^k$$

vérifie bien les équations fondamentales.

## g Expression du minorant du rayon de convergence

Le rayon de convergence de la série peut s'écrire

$$\ell(\alpha, \theta, h)$$

la dépendance en  $h$  est en fait très simple, puisqu'il n'intervient que dans l'inégalité (VII,8) :

$$\ell < \frac{\alpha}{2\pi h}$$

donc, on peut écrire :

$$\ell(\alpha, \theta, h) \geq \inf\left(\frac{\alpha}{2\pi h}, \ell(\alpha, \theta)\right)$$

où l'on pose

$$\ell(\alpha, \theta) = \inf\left(\epsilon(\alpha, \theta), \epsilon'(\alpha), 4\left(\frac{\tilde{k}'+A}{\tilde{k}'}\right)^2 \frac{\alpha}{\alpha-1}\right)$$

## h Paramètre d'échelle supplémentaire

De plus, soit  $a \leq 1$ , on vérifie trivialement que le choix de

$$\lambda'_k{}^p = \lambda_k^p \cdot a^k$$

conviendra encore, grâce à l'homogénéité des relations de récurrence, dès que la relation (VII,8), qui est la seule non-homogène, sera vérifiée, soit

$$\ell < \frac{a\alpha}{2\pi h}$$

Le rayon de convergence peut alors se récrire :

$$\ell(\alpha, \theta, h) \leq \inf \left( \frac{a\alpha}{2\pi h}, \ell(\alpha, \theta, a) \right)$$

ou encore, en posant  $y = a\alpha$

$$\ell(\alpha, \theta, y) \leq \inf \left( \frac{y}{2\pi h}, \ell(\alpha, \theta, y) \right)$$

et alors

$$\ell(\alpha, \theta, y) = \inf \left( \epsilon(\alpha, \theta, y), \epsilon'(\alpha, y), 4y \left( \frac{\tilde{k}' + A}{\tilde{k}'} \right)^2 \frac{\alpha}{\alpha - 1} \right)$$

ce qui nous permettra d'optimiser  $\alpha$  et  $\theta$  à  $y$  fixé, pour obtenir le rayon de convergence.

L'introduction du paramètre  $a$  nous a permis d'améliorer, à priori, fortement le rayon de convergence; cependant, il faut noter que le cas  $a = 1$  est nécessaire pour la démonstration, et il exprime donc la réalité des contraintes mathématiques sur la convergence éventuelle en série entière des solutions du système.

## i Autre choix du paramètre de développement

Nous allons voir dans le paragraphe qui suit, qu'un développement en  $\frac{\ell}{2\ell+1}$ , qui est à priori équivalent, vu les valeurs autorisées pour  $\ell$ , permet néanmoins de démontrer une meilleure majoration du rayon de convergence.

Je reprends les expressions tildées. Le développement formel des équations de stationnarité peut encore s'écrire :

$$\begin{aligned} 2\pi(2M_i - M_{i+1} - M_{i-1}) + \tilde{\delta}_1 - \frac{2\ell}{2\ell+1}\tilde{\delta}_1 + \frac{\ell}{2\ell+1}(2\tilde{U}_i - \tilde{U}_{i+1} - \tilde{U}_{i-1}) \\ + \frac{\ell}{2\ell+1}\tilde{\delta}_2 - \frac{2\ell^2}{(2\ell+1)^2}\tilde{\delta}_2 + \dots = 0 \end{aligned}$$

et les équations (VII,1) et (VII,2) deviennent :

$$\begin{aligned} \tilde{U}_i^1 &= 2\pi(M_{i+1} + M_{i-1} - 2M_i) \text{ et, pour } k \geq 2, \\ \tilde{U}_i^k &= \tilde{U}_{i+1}^{k-1} + \tilde{U}_{i-1}^{k-1} - \tilde{\delta}_k + 2\tilde{\delta}_{k-1} \end{aligned}$$



On récrit tout en fonction des  $U_i^k$

$$\begin{aligned} U_i^1 &= \frac{2\pi\ell}{2\ell+1}(M_{i+1} + M_{i-1} - 2M_i) \text{ et, pour } k \geq 2, \\ U_i^k &= \frac{\ell}{2\ell+1}(U_{i+1}^{k-1} + U_{i-1}^{k-1}) - \delta_{i,k}^k + \frac{2\ell}{2\ell+1}\delta_{i,k-1}^{k-1} \end{aligned}$$

On reprend rigoureusement le même formalisme, avec les mêmes notations : les calculs seront exactement les mêmes, jusqu'à la formule de majoration (VII,5)

$$|U_i^k| < \alpha \lambda_k^k$$

qui impose alors

$$\forall k \geq \tilde{k}' + 1, \quad \frac{2\ell(\alpha+1)}{2\ell+1} \times \frac{1}{(k-1)^2} < \frac{\alpha-1}{k^2}$$

d'où

$$\ell < \frac{(\alpha-1)(\tilde{k}+1)^2}{2(\tilde{k}^2(\alpha+1) - (\tilde{k}+1)^2(\alpha-1))}$$

On obtient un rayon de convergence

$$\ell(\alpha, \theta, h) \leq \inf\left(\frac{\alpha}{2\pi h - 2\alpha}, \ell(\alpha, \theta)\right)$$

avec

$$\ell(\alpha, \theta) = \inf\left(\epsilon(\alpha, \theta), \epsilon'(\alpha), \frac{(\alpha-1)(\tilde{k}+1)^2}{2(\tilde{k}^2(\alpha+1) - (\tilde{k}+1)^2(\alpha-1))}\right)$$

On peut également introduire la variable  $a$ . On obtient, en exprimant les résultats à l'aide de  $y$

$$\ell(\alpha, \theta, y) \leq \inf\left(\frac{y}{2\pi h - 2y}, \ell(\alpha, \theta, y)\right)$$

avec

$$\ell(\alpha, \theta, y) = \inf\left(\epsilon(\alpha, \theta, y), \epsilon'(\alpha, y), \frac{(\alpha-1)(\tilde{k}+1)^2}{2(y\tilde{k}^2(\alpha+1) - (\tilde{k}+1)^2(\alpha-1))}\right)$$

Il ne resterait plus qu'à optimiser ces expressions selon  $\alpha$  et  $\theta$ , à  $y$  donné, ce qu'il est difficile de faire analytiquement.

## j Généralisation du majorant

Pour finir, on peut chercher les  $\lambda_k^p$  sous la forme généralisée

$$\frac{1}{[k/p]^+! p^\beta}$$

et la démonstration sera identique, pour tout  $\beta > 1$ . (Pour  $\beta \leq 1$ , on trouverait une majoration par  $\frac{1}{p^\beta}$  qui ne serait pas suffisante puisque la série correspondante n'est pas convergente).

## k Résumé des expressions de récurrence

Ayant démontré la convergence du développement, il peut être intéressant de donner les formules de récurrence qui permettent de calculer chaque ordre, ainsi que les premiers ordres, dans le cas de Frenkel & Kontotowa proprement dit.

On pose

$$U_n = M_n + \sum_{i=0}^{\infty} \ell^i a_n^i$$

On trouve :

$$\begin{aligned} M_n &\in 2\pi\mathbb{Z} \\ a_n^1 &= M_{n+1} + M_{n-1} - 2M_n \\ a_n^2 &= a_{n+1}^1 + a_{n-1}^1 - 2a_n^1 \\ a_n^3 &= a_{n+1}^2 + a_{n-1}^2 - 2a_n^2 + (a_n^1)^3 \\ a_n^4 &= a_{n+1}^3 + a_{n-1}^3 - 2a_n^3 + (a_n^1)^2 a_n^2 \\ a_n^{i+1} &= a_{n+1}^i + a_{n-1}^i - 2a_n^i - \sum_{\substack{M_1, \dots, M_i \\ \sum_{k=1}^i k M_k = i+1 \\ \sum_{k=1}^i M_k \text{ impair noté } 2p+1}} (-1)^p \prod_{j=1}^i \frac{1}{M_j!} (a_n^j)^{M_j} \end{aligned}$$

## VIII Développement en perturbation pour le modèle de Frenkel & Kontorowa

### a Notations

Je prends le modèle discret avec  $L$  de la forme  $L(U_n, U_{n+1}) = \ell W(U_{n+1} - U_n) + V(U_n)$ , où  $W$  est connexe et  $V$  est  $a$ -périodique. On va de plus supposer que  $V$  est strictement convexe en ses minima locaux et strictement concave en ses maxima locaux. Plus précisément, que  $V''$  existe et ne s'annule pas en ces points. On admettra que le nombre de zéros de  $V'$  sur un intervalle de longueur  $a$  est fini. Le cas d'un nombre infini serait fastidieux et celui où  $V'$  s'annule sur tout un segment peu intéressant. On notera  $\mathcal{Z}_a = z_i, i = 1 \dots v$  l'ensemble des zéros de  $V'$  sur  $[0, a]$  et de façon générale  $\mathcal{Z} = z_i, i \in \mathbb{Z}$  l'ensemble des zéros de  $V'$ . On a donc :

$$\mathcal{Z} = \bigcup_{n \in \mathbb{Z}} \mathcal{Z}_{a+na},$$

et

$$\forall i \in \mathbb{Z}, z_i \text{ modulo } a \in \mathcal{Z}_a$$

Je vais supposer que les positions des extrema des puits  $(P_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  vérifie la condition

$$|P_{n+1} - 2P_n + P_{n-1}| \leq m$$

qui impose une certaine régularité physique à la solution que l'on prolonge. Bien sûr,  $m$  est quelconque, mais le domaine en  $\ell$  sur lequel sera démontré le prolongement sera d'autant meilleur que l'on peut choisir  $m$  petit. En particulier, pour le fondamental,

on a  $m = 2a$  et même  $m = a$  dès qu'il n'y a qu'un minimum par période. En effet, soit  $M_n$  les numéros des puits, on a par définition  $P_n = aM_n$ , et ici

$$M_n = [n\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+ \text{ donc}$$

$$\begin{aligned} M_{n+1} - 2M_n + M_{n-1} &= [n\zeta + \frac{\alpha}{a} - [n\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+ + \zeta]^+ + [n\zeta + \frac{\alpha}{a} - [n\zeta + \frac{\alpha}{a}]^+ - \zeta]^+ \\ &\in 0, 1 \qquad \qquad \in 0, -1 \end{aligned}$$

donc  $|M_{n+1} - 2M_n + M_{n-1}| \leq 1$  donc  $m = a$  convient bien.

On va montrer, par le théorème du point fixe, qu'il existe une solution  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  limite de la suite  $((U_n^k)_{n \in \mathbb{Z}})_{k \in \mathbb{Z}}$  définie par la récurrence :

$$-\ell W'(U_{n+1}^k - U_n^k) + \ell W'(U_n^k - U_{n-1}^k) + V'(U_n^{k+1}) = 0$$

et par  $U_n^0 = P_n$ .

## b Définition d'un opérateur exprimant les équations de stationnarité

Grâce aux hypothèses initiales, on sait que les fonctions  $x \mapsto V'(x + z_i)$  sont localement inversibles et mêmes localement lipchitziennes en 0. Donc, il existe une fonction  $V_i'^{-1}$  localement définie et lipchitzienne en 0 telle que  $V_i'^{-1}(0) = z_i$ ; je noterai  $V_i'^{-1}$  cet inverse tel que  $V_i'^{-1}(0) = z_i$ .

Soit un intervalle  $[-\delta_i, \delta_i]$  et  $b_i < 1$  tel que  $V_i'^{-1}$  soit définie univoquement dans cet intervalle et que pour tout  $(x, y)$  dans cet intervalle, on ait

$$|V_i'^{-1}(x) - V_i'^{-1}(y)| < b_i |x - y|$$

Soit  $A = \bigcup_{i \in 1, \dots, N} [z_i - b_i \delta_i, z_i + b_i \delta_i]$ , on a :

$$A \subset [0, a]$$

soit  $\mathcal{A} = \bigcup_{i \in \mathbb{Z}} [z_i - b_i \delta_i, z_i + b_i \delta_i]$ , on a :

$$\mathcal{A} = \bigcup_{n \in \mathbb{Z}} \mathbb{Z}A + na$$

$\mathcal{A}$  est bien un sous-espace fermé du Banach dans lequel évoluent les  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ , donc un Banach lui-même. Soit

$$F: \mathcal{A} \rightarrow F(\mathcal{A}); U_{nn \in \mathbb{Z}} \mapsto U'_{nn \in \mathbb{Z}}$$

défini par :

$$U'_n = V_i'^{-1}(-\ell W'(U_{n+1} - U_n) + \ell W'(U_n - U_{n-1}))$$

où  $i$  est l'indice tel que  $P_n = z_i$ ; je noterai par la suite cet indice  $i_n$ .

### c Stabilité de $\mathcal{A}$ sous l'action de $F$

Montrons que  $F(\mathcal{A}) \subset \mathcal{A}$  pour  $\ell$  suffisamment petit.

Je vais montrer par récurrence que l'on peut choisir  $\ell$  tel que :

$$\forall k \in \mathbb{N}, n \in \mathbb{Z}, -\ell W'(U_{n+1}^k - U_n^k) + \ell W'(U_n^k - U_{n-1}^k) \in [Pn - \delta_{i_n}, Pn + \delta_{i_n}]$$

Cela prouvera que

$$\forall k \in \mathbb{N}, n \in \mathbb{Z}, U_n^k \in [Pn - b_{i_n} \delta_{i_n}, Pn + b_{i_n} \delta_{i_n}] \subset [Pn - \delta_{i_n}, Pn + \delta_{i_n}]$$

$$\text{Soient } b = \sup_{i \in 1, \dots, N} b_i, \quad \delta = \inf_{i \in 1, \dots, N} \delta_i, \quad \text{et } w = \sup_{[0, \delta]} W''$$

Je vais noter  $\rho^k$  un coefficient tel que

$$\forall n \in \mathbb{Z}, |U_n^k - Pn| < \rho^k$$

A l'ordre 0, on peut prendre  $\rho^0 = 0$ .

On a alors

$$\begin{aligned} |-\ell W'(U_{n+1}^0 - U_n^0) + \ell W'(U_n^0 - U_{n-1}^0)| &\leq w\ell |P_{n+1} - 2P_n + P_{n-1}| \\ &\leq w m \ell \end{aligned}$$

donc il suffit de prendre  $\ell < \frac{\delta}{mw}$  pour que la propriété soit vérifiée à l'ordre 0.

Supposons-la vraie jusque l'ordre  $k$ . A l'ordre  $k+1$ , on a :

$$\begin{aligned} |-\ell W'(U_{n+1}^{k+1} - U_n^{k+1}) + \ell W'(U_n^{k+1} - U_{n-1}^{k+1})| &= \ell |W'(U_{n+1}^{k+1} - U_n^{k+1}) - W'(P_{n+1} - P_n) \\ &\quad - W'(U_n^{k+1} - U_{n-1}^{k+1}) + W'(P_n - P_{n-1}) \\ &\quad + W'(P_{n+1} - P_n) - W'(P_n - P_{n-1})| \\ &< w\ell (|U_{n+1}^{k+1} - U_n^{k+1} - P_{n+1} + P_n| \\ &\quad + |U_n^{k+1} - U_{n-1}^{k+1} - P_n + P_{n-1}| \\ &\quad + |P_{n+1} - 2P_n + P_{n-1}|) \\ &< \ell(4\rho^{k+1} + m) \end{aligned}$$

en utilisant les hypothèses de récurrence et l'inégalité des accroissements finis.

Mais, d'autre part, on trouve :

$$\begin{aligned} |U_n^{k+1} - Pn| &= |V_i'^{-1} - \ell W'(U_{n+1}^k - U_n^k) + \ell W'(U_n^k - U_{n-1}^k)) - V_i'^{-1}(0)| \\ &< b_{i_n} \ell |W'(U_{n+1}^k - U_n^k) + W'(U_n^k - U_{n-1}^k)| \\ &\quad \text{donc en refaisant le calcul précédent à l'ordre } k \\ &< b w \ell (4\rho^k + m) \end{aligned}$$

Donc, on a  $\rho^{k+1} < b w \ell (4\rho^k + m)$  et on veut que  $w \ell (4\rho^{k+1} + m) < \delta$ .

Or, la suite  $\rho^0, \rho^{n+1} = b w \ell (4\rho^n + m)$  est croissante et converge vers  $r = \frac{b w \ell}{1 - 4 b w \ell}$ . Elle majore la suite  $(\rho^n)_{n \in \mathbb{Z}}$ . Donc, il suffit que  $r < b \delta$ , soit  $\frac{w m \ell}{1 - 4 b w \ell} < \delta$  et alors, à tous les ordres :

$$\rho^k < b \delta$$

donc aussi

$$bwt(4\rho^k + m) < b\delta$$

Finalement, pour  $\ell < \frac{\delta}{w(4b\delta+m)}$ , on a

$$|U_n^k - P_n| < \delta$$

Donc :

$$\forall k \in \mathbb{N}, (U_n^k)_{n \in \mathbb{Z}} \in \mathcal{A}, \text{ soit} \\ F(\mathcal{A}) \subset \mathcal{A}$$

## d Contraction de $F$

Montrons maintenant que  $F$  est contractante. Soit :

$$(U'_n)_{n \in \mathbb{Z}} = F((U_n)_{n \in \mathbb{Z}}), \\ (V'_n)_{n \in \mathbb{Z}} = F((V_n)_{n \in \mathbb{Z}})$$

avec  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  et  $(V_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  suffisamment proches, c'est-à-dire que, pour tout  $n$ ,  $U_n$  et  $V_n$  appartiennent au même intervalle  $[P_n - \delta_{i_n}, P_n + \delta_{i_n}]$ , alors

$$\forall n \in \mathbb{Z}, |V'_n - U'_n| < 4bw\ell|U_n - V_n|$$

où le coefficient est strictement inférieur à 1 pour  $\ell < \frac{1}{4bw}$ . Donc, en prenant n'importe quelle norme usuelle adaptée à un Banach ( $\mathcal{A}$  est un Banach), on trouve directement que  $f$  est contractante sur un sous-espace qui est justement celui que l'on considère pour démontrer le théorème du point fixe.

On peut appliquer le théorème du point fixe sur les Banach. Soit  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  la limite de  $(U_n^k)_{n \in \mathbb{Z}}$  quand  $\ell \rightarrow 0$ , elle vérifie bien l'équation de stationnarité. On a unicité de la solution : donc, une suite  $(P_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  des positions des minima du potentiel et vérifiant bien la condition  $|P_{n+1} - 2P_n + P_{n-1}| < m$  caractérise un état unique, à savoir la limite d'un grand nombre d'itérations de l'application  $F$  lorsque l'on commence les itérations avec ce  $(P_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ . On a ainsi une description simple des états à grand couplage. De plus, d'après cette même unicité, et la continuité de  $F$  par rapport à  $\ell$ , on montre que  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  est continue en le paramètre  $\ell$ . Je vais cependant le redémontrer directement.

## e Continuité en $\ell$ de la solution

Je note ici  $F$  par  $F_\ell$  pour lever toute ambiguïté quant à la valeur de  $\ell$  pour laquelle elle est définie. On a pour tout  $n$  :

$$U_n(\ell) \in [P_n - b_{i_n} \delta_{i_n}, P_n + b_{i_n} \delta_{i_n}]$$

et donc, soit  $d\ell \in \mathbb{R}$ ,

$$\begin{aligned} |U_n(\ell + d\ell) - U_n(\ell)| &= |F_\ell(U_n(\ell + d\ell)) - F_\ell(U_n(\ell))| \\ &< bw\ell|(\ell + d\ell)U_{n+1}(\ell + d\ell) - \ell U_{n+1}(\ell) + (\ell + d\ell)U_{n-1}(\ell + d\ell) \\ &\quad - \ell U_{n-1}(\ell) - 2(\ell + d\ell)U_n(\ell + d\ell) + 2\ell U_n(\ell)| \\ &< bw\ell(\ell(|U_{n+1}(\ell + d\ell) - U_{n+1}(\ell)| + |U_{n-1}(\ell + d\ell) - U_{n-1}(\ell)| \\ &\quad + 2|U_n(\ell + d\ell) - U_n(\ell)|) + d\ell(m + 4b\delta)) \end{aligned}$$

où j'ai utilisé les majorations  $|U_n - P_n| < b\delta$  et  $|P_{n+1} - 2P_n + P_{n-1}| < m$

Si on pose  $U(\ell) = \sup_n |U_n(\ell + d\ell) - U_n(\ell)|$ , on obtient finalement :

$$\begin{aligned} U(\ell) &< 4bw\ell(U(\ell) + d\ell(\frac{P}{4} + b\delta)) \text{ donc} \\ U(\ell) &< \frac{m/4 + b\delta}{1 - 4bw\ell} d\ell \text{ c.q.f.d} \end{aligned}$$

On a bien montré que des solutions à grand couplage s'obtiennent comme les modulations continues des solutions à couplage infini. En fait, dans le cas où les inverses locales  $V'^{-1}$  sont analytiques, les  $U_n$  obtenus précédemment sont analytiques en  $\ell$ . Je l'ai du moins démontré pour le modèle initial de Frenkel & Kontorowa (annexe VII).

## f “Gap” de phonon

On va maintenant calculer l'opérateur dynamique qui régit les équations de propagation des ondes dans le système. Je vais me référer à la démonstration générique faite dans le chapitre localisation à titre de comparaison. Lorsque l'on écrit les choses très proprement, on a :

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial U_n} = \ell W'(U_{n+1} - U_n) - \ell W'(U_n - U_{n-1}) + V'(U_n)$$

donc

$$\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial U_i \partial U_j} = \ell \frac{\partial(W'(U_{i+1} - U_i) - W'(U_i - U_{i-1}))}{\partial U_j} + V''(U_i) \delta_{i,j}$$

où l'on prend  $U_i$  tel que :

$$\frac{\partial \mathcal{H}}{\partial U_n}(U_{i \in \mathbb{Z}}) = 0$$

soit

$$\begin{aligned} U_i &= V_i'^{-1}(-\ell W'(U_{i+1} - U_i) + \ell W'(U_i - U_{i-1})) \\ &= F_i(U_{k \in \mathbb{Z}}) \end{aligned}$$

Or :

$$\begin{aligned} \frac{\partial F_i}{\partial U_j} &= -\ell \frac{\partial(W'(U_{i+1} - U_i) - W'(U_i - U_{i-1}))}{\partial U_j} \\ &\quad \times V_i''^{-1}(-\ell W'(U_{i+1} - U_i) + \ell W'(U_i - U_{i-1})) \end{aligned}$$

d'où

$$\frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial U_i \partial U_j} = V''(U_i)(\delta_{i,j} - \frac{\partial F_i}{\partial U_j})$$

Le facteur supplémentaire ne s'annulant pas, car on reste toujours dans les parties strictement convexes ou concaves du potentiel, on conclut de la même façon que pour le modèle de Holstein-Peierls, mais on n'obtient pas la positivité de l'opérateur dynamique (il existe des états instables à  $\ell = 0$ , et on sait les prolonger continûment).

## IX Résultats numériques

Je voudrait présenter rapidement les calculs numériques qui ont été effectués au début de la thèse pour caractériser les objets localisés (discommensurations effectives) qui permettent de décrire le système de Frenkel & Kontorowa à grand couplage. Je vais refaire certains calculs que j'ai déjà écrits, pour le cas commensurable, puisqu'on approche numériquement les états incommensurables par des solutions commensurables. J'admets dans cette partie tous les résultats concernant les états fondamentaux, tels qu'ils sont démontrés dans les autres annexes.

### a Formules pour les cas commensurables

On construit un état de rapport commensurable  $\frac{R}{S}$  en mettant  $S$  atomes dans  $R$  puits, donc en imposant la condition :

$$U_{n+kS} = U_n + kRa, \quad \forall k \in \mathbb{Z} \quad (\text{IX},1)$$

Les discommensurations sont les  $d_n$ , liés aux  $b_n$  qui apparaissent dans la décomposition de la fonction enveloppe  $f$ , lorsqu'elle est totalement discontinue.

On a déjà montré qu'on peut définir la fonction enveloppe dans le cas commensurable ; on écrit :

$$U_n = U_0 + \sum_{pl+qa \leq nl} b_p$$

Il est inutile ici de définir une phase.

$$= U_0 + \sum_{p=0}^{S-1} b_p \left[ \frac{(n-p)R}{S} - \left[ \frac{-pR}{S} \right]^+ \right]^+$$

Soit l'application :

$$\begin{aligned} \sigma: 0, \dots, S-1 &\rightarrow 0, \dots, S-1 \\ p &\mapsto R \times p \text{ modulo } S \end{aligned}$$

Elle est bijective, d'inverse :

$$\sigma^{-1}: p \mapsto R^{-1} \times p$$

où  $R^{-1}$  est l'inverse de  $R$  :

$$R^{-1} \times R = 1 \text{ modulo } S$$

On écrit alors :

$$nR = \tilde{n}S + \sigma(n)$$

et on fait le changement de variable

$$p' = \sigma(p)$$

d'où, comme  $\sum_{p=0}^{S-1} b_p = a$  :

$$\begin{aligned} U_n &= U_0 + \tilde{n}a + \sum_{p'=0}^{S-1} b_{\sigma^{-1}(p')} \left[ \frac{\sigma(n) - p'}{S} - \left[ \frac{-p'}{S} \right]^+ \right] \\ &= U_0 + \tilde{n}a + \sum_{p=0}^{\sigma(n)} b_{\sigma^{-1}(p)} \end{aligned}$$

Soit  $n$ , on cherche l'antécédent de  $U_n$  sur la "courbe" :

$$U_n \text{ modulo } a = f(nl \text{ modulo } a)$$

D'après la formule précédente, son indice est donc :

$$\sigma^{-1}(\sigma(n) - 1) = n - R^{-1}$$

ce que l'on aurait trouvé directement en cherchant  $R'$  tel que le déphasage entre  $U_n$  et  $U_{n+R'}$ , (soit  $R'$  fois le déphasage entre  $U_n$  et  $U_{n+1}$ ), égale le déphasage élémentaire quand on suit les états classés, d'après ce que j'ai écrit dans la partie II, par la phase unique qui correspond à  $\varphi$ . D'où :

$$R' \times \frac{R}{S} = -\frac{1}{S}$$

le signe moins provenant de ce que l'on cherchait un antécédant. On a finalement

$$b_n = U_n - U_{n-R^{-1}}$$

On peut utiliser directement cette formule, afin d'obtenir la discommensuration. Il est intéressant de noter que, pour le nombre d'or,  $\zeta = \frac{\sqrt{5}-1}{2}$  (que l'on translate dans  $]0, 1[$ ), on trouve :

$$r_n^{-1} = (-1)^{n+1} s_{n-1}$$

où  $r_n/s_n$  est la  $n^\circ$  approximation diophantine.

L'idée est d'obtenir, numériquement, à  $\zeta$  et  $\ell$  fixés, les courbes des  $(b_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  (ou des  $(d_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ ) correspondant à des approximations successives  $r_n/s_n$  de  $\zeta$ . En observant leurs modifications, lorsque  $r_n/s_n \rightarrow \zeta$ , d'après les hypothèses de continuité, on vérifie que les effets commensurables sont devenus négligeables, et qu'on obtient bien l'allure de la courbe incommensurable.

Ensuite, on peut faire évoluer  $\ell$ , pour étudier la discommensuration en fonction du couplage.

Ces courbes sont toutefois assez fines, et l'unique difficulté était d'obtenir les états fondamentaux avec beaucoup de précision, et pour de grands nombres d'atomes (mille ou au delà).

## b Réalisation numérique

On s'est restreint au potentiel sinusoïdal. Les équations sont :

$$-\ell U_{n+1} - \ell U_{n-1} + 2\ell U_n + \sin(U_n) = 0$$



avec la condition de périodicité (IX,1)

$$U_{n+kS} = U_n + kRa \quad \forall k \in \mathbb{Z}$$

ce qui revient exactement à un système fini à  $S$  inconnues.

On a utilisé deux méthodes usuelles, qui sont toutes les deux des méthodes de relaxation :

\*Une méthode d'approximation linéaire :

Soit  $(U_n^o)_{n \in \mathbb{Z}}$  une position de départ, on suppose que l'erreur est petite : on cherche  $(U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  sous la forme

$$(U_n^o + \delta_n)_{n \in \mathbb{Z}} \text{ avec } \delta_n \ll 1$$

d'où, en linéarisant l'hamiltonien,

$$\mathcal{H}(U_{n \in \mathbb{Z}}) \simeq \mathcal{H}(U_{n \in \mathbb{Z}}^o) + \sum_n \delta_n \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial U_n}(U_{p \in \mathbb{Z}}^o)$$

doit être rendu minimum. Donc, on prend :

$$\delta_n = -\alpha \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial U_n}(U_{p \in \mathbb{Z}}^o)$$

puis, on optimise  $\alpha$ .

On réitère ainsi le processus, dont la convergence est toujours sûre mais très lente.

\*\*Une méthode d'approximation quadratique :

On développe cette fois-ci l'hamiltonien au second ordre :

$$\mathcal{H}(U_{n \in \mathbb{Z}}) \simeq \mathcal{H}(U_{n \in \mathbb{Z}}^o) + \sum_n \delta_n \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial U_n}(U_{p \in \mathbb{Z}}^o) + \sum_{n,m} \delta_n \delta_m \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial U_n \partial U_m}(U_{p \in \mathbb{Z}}^o)$$

Soient :

$\vec{\delta}$  le vecteur  $(\delta_n)_{1 \leq n \leq S}$ ,  $\vec{h}$  le vecteur  $\left( \frac{\partial \mathcal{H}}{\partial U_n}(U_{p \in \mathbb{Z}}^o) \right)_{1 \leq n \leq S}$  et

$D$  la matrice  $\left( \frac{\partial^2 \mathcal{H}}{\partial U_n \partial U_m}(U_{p \in \mathbb{Z}}^o) \right)_{\substack{1 \leq n \leq S \\ 1 \leq m \leq S}}$

on a ici

$$D = \begin{pmatrix} 2\ell + \cos(U_1) & -\ell & 0 & \dots & 0 & -\ell \\ -\ell & & -\ell & & \dots & 0 \\ 0 & & & & & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & & \vdots \\ \cdot & & & & & 0 \\ 0 & \dots & & -\ell & & -\ell \\ -\ell & 0 & \dots & 0 & -\ell & 2\ell + \cos(U_S) \end{pmatrix}$$

et on cherche à minimiser :

$$\mathcal{H}(U_{n \in \mathbb{Z}}^o) + \vec{\delta} \vec{h} + \frac{1}{2} \vec{\delta} D \vec{\delta}$$

En admettant, ce qui, de toute façon, sera nécessaire, que  $D$  est inversible, comme elle est symétrique, elle est diagonalisable, et, dans une base convenable, on cherche donc à minimiser :

$$\sum_{i=1}^S \delta_i h_i + \frac{1}{2} m_i \delta_i^2 = \sum_{i=1}^S \frac{m_i}{2} \left( \delta_i + \frac{h_i}{m_i} \right)^2 - \frac{1}{2} \frac{h_i^2}{m_i}$$

D'où :

$$\delta_i = -\frac{h_i}{m_i} \text{ lorsque } m_i > 0$$

Lorsque la matrice est positive, le problème est solvable et l'on prend

$$\vec{\delta} = -D^{-1} \vec{h}$$

Lorsque les  $U_n$  sont tous dans la partie convexe des puits de potentiel, les  $\cos(U_n)$  sont positifs et la matrice est bien positive. Cependant, à grand couplage  $\ell$ , le fondamental ne vérifie pas lui-même cette condition et il y a de graves risques d'ennuis. Bien sûr, pour le fondamental, la positivité de la matrice est assurée physiquement, mais, elle peut être perdue dès que l'on s'en écarte un peu. Par contre, les atomes du fondamental à petit couplage sont toujours situés au fond des puits et donc, à condition de ne pas démarrer le processus avec un atome placé dans la partie concave du potentiel, on est assuré de sa convergence.

Bien entendu, il ne s'agit pas d'inverser la matrice, mais de résoudre le système

$$D\vec{\delta} = -\vec{h}$$

soit, pour  $1 \leq n \leq S$  :

$$\delta_n (2\ell + \cos(U_n^k)) - \ell \delta_{n+1} - \ell \delta_{n-1} = \ell U_{n+1}^k + \ell U_{n-1}^k - 2\ell U_n^k - \sin(U_n^k)$$

avec les conventions :

$$\begin{aligned} U_0^k &= U_S^k - 2\pi S \\ U_{S+1}^k &= U_1^k + 2\pi S \end{aligned}$$

et de plus

$$\begin{aligned} \delta_0 &= \delta_S \\ \delta_1 &= \delta_{S+1} \end{aligned}$$

On incrémente l'indice  $k$  à chaque étape, en posant :

$$U_n^{k+1} = U_n^k + \delta_n, \quad \forall n \in 1, \dots, S$$

Cette méthode peut diverger très facilement. En effet, lorsque l'on regarde le comportement de la suite  $\begin{pmatrix} \delta_{n+1} \\ \delta_n \end{pmatrix}$ , on fait intervenir les matrices

$$\begin{pmatrix} 2 + \frac{1}{\ell} \cos(U_n) & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}$$

qui, étant de déterminant 1, ont toujours une valeur propre de norme supérieure à 1, et dont le produit, appliqué à un certain vecteur, peut facilement diverger. On retrouve le calcul des coefficients de Yapounov.

Pour entrer dans le détail des calculs, on cherche, à partir des équations initiales, à réduire à deux variables inconnues. Si l'on pose

$$\begin{aligned} a_n &= 2\ell + \cos(U_n) \text{ et} \\ b_n &= \ell U_{n+1} + \ell U_{n-1} - 2\ell U_n + \sin(U_n) \end{aligned}$$

on cherche le nouveau système de la forme :

$$x_n \delta_0 + y_n \delta_1 + z_n \delta_n + t_n \delta_{n+1} = e_n$$

Comme il y a un degré de liberté en trop, j'ai d'abord voulu poser

$$x_n \text{ où } y_n = 1$$

et alors les deux s'avèrent constantes. Mais le programme a toujours explosé.

Il a été plus adapté de poser  $z_n = 1$ . On trouve alors les récurrences :

$$x_{n+1} = \frac{x_n}{a_{n+1} + t_n}, \quad y_{n+1} = \frac{y_n}{a_{n+1} + t_n}, \quad t_{n+1} = \frac{-1}{a_{n+1} + t_n} \text{ et } e_{n+1} = \frac{e_n + b_{n+1}}{a_{n+1} + t_n}$$

Cette structure n'est pas explosive. Par une méthode strictement analogue, on réduit les inconnues à une seule variable, puis, on résoud enfin grâce aux équations qu'on a mémorisées. Dans la pratique, la précision était excellente. Ceci se démontre dans l'hypothèse où

$$|a_{n+1} + t_n| > 1$$

On a, par exemple :

$$\begin{aligned} \delta(t_{n+1}) &= \delta\left(-\frac{1}{x_n} + \frac{t_n}{x_n^2} + O\left(\frac{t_n^2}{x_n^3}\right)\right) \\ &\simeq \frac{\delta(x_n) + \delta(t_n)}{(t_n + a_{n+1})^2} \end{aligned}$$

Comme le dénominateur est de norme  $> 1$ , la croissance de l'erreur sera arithmétique et non géométrique, donc bien contrôlée.

## c Conclusion

On a finalement dosé de façon totalement pragmatique les deux méthodes. Le résultat consistait en une amélioration d'un facteur  $10^6$  par rapport aux précédents programmes. J'ai omis de préciser que l'on supposait que la symétrie du problème était conservée pour le fondamental, pour gagner du temps, mais le programme marche sans cela. On trouve un bipolaron de même forme que celui que j'ai déjà exposé dans le texte principal (figure 12).

# Références

- [1] W. Kohn, “*Image of the Fermi surface in the vibration spectrum of a metal*”, Physical Review Letters **2** page 393, 1959.
- [2] H. Fröhlich, “*Theory of superconductivity*”, Proceedings of the Royal Society of London A **223** page 296, 1954.
- [3] R. Peierls, “*Quantum theory of solids*”, Oxford University Press, 1955.
- [4] S. Aubry & P. Quémerais, “*Lattice pinning of a charge density wave and quantum fluctuations*”, “*Singular behaviour and non-linear dynamics*” édition T. Bountis, Sp. et St. Pnevmatilos, World Scientific page 342, 1989.
- [5] A. W. Overhauser, “*Spin density waves in electron gas*”, Physical Review **128** page 1437, 1962.
- [6] Figures tirées de : K. Carneiro, “*Properties of conducting platinum strain compounds*”, “*Electronic properties of inorganic quasi-one-dimensional compounds*” édité par P. Monceau, D. Reidel Publishing Company page 1, 1985.
- [7] S. Aubry, “*Controverse sur le pic central*”, La Recherche **8** page 574 (313 mention erronée dans l’édition originale), 1977.
- [8] J. Dumas, C. Escribe-Filippini, H. Guyot & C. Schlenker, “*Charge density wave instabilities and transport properties of the low dimensional Molybdenum bronzes and oxides*”, “*Low-dimensional electronic properties of Molybdenum bronzes and oxides*” édité par C. Schlenker, Kluwer Academic Publishers page 159, 1989.
- [9] D. Jérôme & H. J. Schulz, “*Organic conductors and superconductors*”, Advance in Physics **31** page 299, 1982.
- [10] Voir une revue élémentaire et complète par A. W. Overhauser, “*Charge density waves and isotropic metals*”, Advance in Physics **27** page 343, 1978.
- [11] A. Meerschaut, P. Monceau, N. P. Ong, A. M. Portis & J. Rouxel, “*Electric field breakdown of charge-density-wave-induced anomalies in NbSe<sub>3</sub>*”, Physical Review Letters **37** page 602, 1976.
- [12] G. Mihaly, P. Beauchêne, “*Sliding charge density waves without damping : Possible Fröhlich superconductivity in blue bronze*”, Solid State Commun. **63** page 911, 1987  
G. Mihaly, P. Beauchêne, J. Markus, “*Conduction charge density waves with extremely low differential resistance in K<sub>0,3</sub>MoO<sub>3</sub> : Current oscillations*”, Solid State Commun. **66** page 149, 1988.

- G. Mihaly, P. Beauchêne, J. Markus, J. Dumas & C. Schlenker “Coupling between single particle and collective excitations in a charge-density-wave system : Field dependance of non linear conduction in the blue bronze  $Ko_{0,3}MoO_3$ ”, Physical Review B **37** page 1047, 1988.
- [13] M. J. Rice, S. Strassler, “Theory of a quasi-one-dimensional band-conductor”, Solid State Commun. **13** page 125, 1973.  
M. J. Rice, S. Strassler, “Theory of the soft phonon mode and dielectric constant below the Peierls-transition temperature”, Solid State Commun. **13** page 1931,1973.  
P. A. Lee & T. M. Rice, “Electric field depinning of charge density waves”, Physical Review B **19** page 3970, 1979.
- [14] S. Aubry, “Defectibility and frustration in incommensurate structures. The devil’s staircase transformation”, “Fourth European Meeting on Ferroelectricity”, Ferroelectrics **24** page 53, 1980.
- [15] S. Aubry & L. De Seze, “Dynamics of a charge density wave in a lattice”, 5<sup>e</sup> conférence générale de la matière condensée, de Berlin, Mars 1985, publié dans Festkörperprobleme **25**, 1985.
- [16] J. Dumas & D. Feinberg, “Analogy between depinning of a charge density wave and onset of plastic deformation of crystals”, EPL **2** page 555, 1986.
- [17] J. Frenkel & T. Kontorowa, J. Phys. Acad. Sci. USSR **1** page 137, 1939.
- [18] F. Vallet, R. Schilling & S. Aubry, “Hierarchical low-temperature behaviour on one-dimensional incommensurate structures”, EPL **2** page 815, 1986.
- [19] F. Vallet, Thèse de doctorat de troisième cycle, 1986.
- [20] Voir l’ensemble de la littérature de S. Aubry. Une des premières application marquante fut la démonstration de l’escalier du diable : S. Aubry, “The devil’s staircase transformation in incommensurate lattices”, “The Riemann problem, complete integrability and arithmetic applications”, édition D. & G. Chudnovsky, Notes in Mathematics **925** page 221, 1982.
- [21] S. Aubry et P. Y. Le Daeron, “The discrete Frenkel-Kontorowa model and its extensions. Exact results for the ground-state”, Physica D **8** page 381, 1983.
- [22] S. Aubry, “Exact models with a complete devil’s staircase”, Journal de Physique C **16** page 2497, 1983.
- [23] Par exemple : C. D. Olds, “Continued fractions”, New Mathematical Library, éditions Random House et The L. W. Singer Company, 1963.
- [24] P. Y. Le Daeron, Thèse de doctorat de troisième cycle, 1983.
- [25] S. Aubry, “Violation of the Goldstone symmetry in incommensurate systems”, “Symmetry and broken symmetries” Paris 1980, édition N. Boccara Idset page 313, 1981.

- [26] F. Nabarro, Theory of crystal dislocations, Oxford University Press, 1967.
- [27] S. Aubry, J.-P. Gosso, G. Abramovici, P. Quémérais et J.-L. Raimbault, “Effective discommensurations in incommensurate ground states of the extended Frenkel-Kontorowa models”, Physica D **47** page 461 , 1991 (non paru à l’édition originale de la thèse).
- [28] (Théorèmes de Kolmogorov-Arnold-Möser. voir :  
V. I. Arnold, “Proof of an A. N. Kolmogorov’s theorem on the preservation of quasi periodic motions under small perturbation of the hamiltonien”, Usp. Math. Nauk. S.S.S.R. **18** N5 page 13, 1963.  
V. I. Arnold, “Small denominators and problems of stability of motion in classical ant celestial mechanics”, Usp. Math. Nauk. S.S.S.R. **18** N6 page 91, 1963.  
A. N. Kolmogorov, “On conservation of conditionally periodic motions under small perturbation of the hamiltonien”, Dokl. Akad. Nauk. **98** N°4 page 527, 1954.  
J. Moser, Stable and random motions in dynamical systems, Annals of mathematical studies **77** VIII page 199, 1973.
- [29] Par exemple : E. Zeidler, “Fixed point theorems”, Non-linear analysis and its applications I, édition Springer Théorème 1.A. page 17 et proposition 1.2 page 19, 1986.
- [30] S. Aubry et G. Abramovici, “Chaotic trajectories in the standard map. The concept of anti-integrability”, Physica D **43** page 199, 1990 (non paru à l’édition originale de la thèse).
- [31] S. Aubry, G. Abramovici & J.-L. Raimbault, ‘Chaotic polaronic and bipolaronic states in the adiabatic holstein model’, J. Stat. Phys. **67** page 675, 1992 (non paru à l’édition originale de la thèse).
- [32] A. Davidov, “Théorie du solide”, éditions Mir page 44, 1976.
- [33] F. Vallet, R. Schilling & S. Aubry “Low temperature excitations, specific heat and hierarchical melting of a one-dimensional incommensurate structure”, Journal de Physique C **21** page 67, 1988.  
R. Schilling & S. Aubry, “Static structure factor of one-dimensional non-analytic incommensurate structures”, J. Phys. C: Solid State Phys **20** page 4881, 1987.
- [34] H. Poincaré, “Les méthodes nouvelles de la mécanique céleste”, édition Vauthier-Villars Paris, 1892, 1893, 1899.
- [35] S. Aubry & G. André, “Analyticité breaking and Anderson localization in incommensurate lattices”, “Colloquium on group theoretical methods in physics” Kyriat Anavim (Israël), Annals of the Israël physics society **3** page 133, 1980.
- [36] E. I. Dinaburg et Y. G. Sinaï, “Functional analysis”, **9** page 279, 1976.
- [37] J.-L. Raimbault, Thèse de doctorat de troisième cycle, 1991.

- [38] S. Aubry, G. Abramovici, D. Feinberg, P. Quémerais et J.-L. Raimbault, “*Charge density wave and superconductivity : Localized bipolarons versus Cooper pairs*”, 6<sup>e</sup> Interdisciplinary Workshop : “*Non-linear coherent structures in physics, mechanics and biological systems*”, Notes in Physics, Springer-Verlag **353** page 103, 1990.
- [39] J. Mather, “*A criterium for the non existence of invariant circles*”, “*Ergodic theory of dynamical systems*”, Publication Mathématiques de l’Institut des Hautes Etudes Scientifiques 63 page 153, 1986.
- [40] G. Ripka, cours de D.E.A. de Physique théorique, 1987.

# Erratum

Une erreur dans l'argument mathématique, en fin de page 53, a été relevée quelques jours avant la soutenance de la thèse. Il est facile de corriger la démonstration et les résultats qui en découlent restent entièrement valables.

Je vais d'abord expliquer en quoi consiste cette erreur, puis présenter une nouvelle démonstration, en précisant, finalement, les développements où elle intervient.

## 1 Description de l'erreur

C'est la démonstration de " $F$  contractant" qui contient une erreur. Je rappelle d'abord très sommairement le contexte dans lequel cela se situe.

### a Rappel

Dans le texte, on utilise le théorème de point fixe pour connaître le comportement des atomes (représentés par  $U_n$ ) quand le couplage  $\ell$  devient suffisamment petit. Plus précisément, les états stationnaires vérifient :

$$U = F(U)$$

où  $U = (U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  est le vecteur positions des atomes. La solution de cette équation sera unique dès que le théorème du point fixe est applicable.

Pour appliquer le théorème du point fixe, on doit vérifier différentes conditions :

\* On restreint  $U$  à un domaine fermé, stable par  $F$  (c'est-à-dire  $F(\mathcal{A}) \subset \mathcal{A}$ ).

\*\*  $F$  doit être contractant (c'est-à-dire  $\|F(U) - F(V)\| < \lambda \|U - V\|$  où  $\lambda < 1$  et  $\| \cdot \|$  est la norme choisie pour le théorème).

\*\*\* De plus, on suppose que  $\mathcal{F}$  est continu avec  $\ell$ , de cette façon, les solutions  $U$  seront également continues avec  $\ell$ .

### b Espace de Banach $\neq$ espace de Hilbert

Ayant maintenant situé l'erreur, je vais l'expliquer en détail :

La démonstration de " $F$  contractant" est fautive car on a utilisé deux normes différentes. En effet, toute l'étude de notre problème est faite dans un espace de Banach, muni d'une norme  $|U| = \sup_n |U_n|$ , et en particulier l'espace dans lequel on applique le théorème du point fixe ici est bien muni de cette norme de Banach. Or, la condition que l'on a utilisée page 53 est seulement valable lorsque l'on muni l'espace  $\{U\}$  d'une norme hilbertienne  $|U| = \sqrt{\sum_n U_n^2}$ . Ces deux espaces sont physiquement différents car, dans un espace de Hilbert, on suppose que la somme  $\sum U_n^2$  est convergente, donc que  $U_n$  tend vers zéro en  $-\infty$  et  $+\infty$ . Par contre, dans l'espace de Banach, il n'existe



pas de condition semblable, une norme usuelle étant  $|U| = \sup_n |U_n|$ ; (par exemple, à moins de procédures très peu naturelles, les états périodiques sont interdits de facto par la première norme).

On a en effet : soient  $U = (U_n)_{n \in \mathbb{Z}}$ ,  $V = (V_n)_{n \in \mathbb{Z}}$  deux suites quelconques, il existe  $\theta \in ]0, 1[$  tel que

$$F(U) - F(V) = \nabla F_{((1-\theta)U + \theta V)} \cdot (U - V) . \quad (e,1)$$

Si l'on considère l'espace de Hilbert, muni de la norme  $|U| = \sqrt{\sum_n U_n^2}$ , si l'on définit  $\nabla F(U)$  l'opérateur linéaire  $X \mapsto \nabla F(U) \cdot X$ , muni de la norme d'opérateur  $\|\mathcal{O}\| = \sup_x \frac{|\mathcal{O}(X)|}{|X|}$ , on trouve, d'après (e,1), que  $F$  est strictement contractant si et seulement si la norme de  $\nabla F(U)$ , **en tant qu'opérateur linéaire**  $X \mapsto \nabla F(U) \cdot X$ , est inférieure à 1, pour tout  $U$ . Et c'est aussi le calcul correspondant qui est développé dans l'annexe VI page 98.

Par contre, si l'on considère l'espace de Banach, muni de la norme  $|U| = \sup_n |U_n|$ , l'équation (e,1) donne une condition nécessaire et suffisante

$$\forall U, \forall m, \quad \sum_k |(\nabla F)_{n,m}(U)| < 1 \quad (e,2)$$

qui est très différente de la première. Nous allons maintenant montrer, pour  $\ell$  suffisamment petit, que l'inégalité (e,2) est bien vérifiée. La démonstration correcte de “ $F$  contractant” consiste donc à démontrer (e,2) pour  $\ell$  petit.

## 2 Nouvelle démonstration de $F$ contractant

Pour démontrer l'inégalité (e,2), nous allons séparer la somme  $\sum_n |(\nabla F)_{n,m}(U)|$  en deux termes, les termes proches de la diagonales ( $|n - m| < k_o$ ) et les termes loin de la diagonale : pour montrer que la contribution des premiers est petite, il suffira de majorer chacun d'entre eux de façon uniforme, par une méthode très proche de celle présentée à la page 98, et de sommer. Par contre, pour majorer la contribution des seconds, nous allons démontrer qu'ils décroissent exponentiellement avec  $|n - m|$  puis faire la somme. Les deux sommes partielles tendront vers zéro quand  $\ell$  tend vers zéro et donc l'inégalité (e,2) sera démontrée quand  $\ell$  est suffisamment petit. Nous allons commencer par la majoration exponentielle.

### a Décroissance exponentielle de $(\nabla F)_{n,m}$ avec $|n - m|$

Nous allons démontrer que  $|(\nabla F)_{n,m}|$  décroît comme  $|n - m|^{-\frac{1}{2}} e^{-\xi|n-m|}$  quand

$|n - m| \rightarrow \infty$ . On a, d'après le texte,

$$(\nabla F)_{n,m} = \sum_{\substack{\mu \text{ occ}, \mu' \text{ vide}}} \frac{\bar{\psi}_n^\mu \psi_n^{\mu'} \bar{\psi}_m^{\mu'} \psi_m^\mu}{E^{\mu'} - E^\mu} + \text{c.c.}$$

Nous allons procéder en trois étapes.

Dans un premier temps, on va écrire explicitement la somme  $\sum_{\mu \text{ occ}, \mu' \text{ vide}}$  par  $\sum_{\mu, \mu'} \chi(\mu \text{ occ}, \mu' \text{ vide})$  où la fonction caractéristique  $\chi$  est une fonction des deux variables  $E^\mu$  et  $E^{\mu'}$  représentée à la figure 20. Puis, on constate que, pour  $\tau + 2\ell < \frac{1}{4}$ ,  $\chi$  est en fait une fonction de  $E^\mu - E^{\mu'}$ , donc d'une seule variable. On définit alors  $\Theta(x) = \chi(x)/x^3$  (avec  $\Theta(0) = 0$ ).

Dans un second temps, on va décomposer  $\Theta$  en la somme d'un polynôme  $P_k$  de degré  $2k$  et d'un reste  $R_k$  qui vérifie :

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad |R_k(x)| < e^{-\xi k}.$$

Puis, on démontrera en dernier lieu que  $P_l$  donne une contribution rigoureusement nulle pour  $q > |n - m|$  et, en rassemblant ces trois étapes, on en déduira finalement que  $|\nabla F|_{n,m}$  décroît comme une exponentielle de  $|n - m|$ .

Je vais maintenant donner le détail de chacune de ces étapes.

### $\alpha$ Introduction d'une fonction $\Theta(E^\mu - E^{\mu'})$

On démontre, à partir de l'équation de Schrödinger, que

$$(E^\mu - E^{\mu'}) \bar{\psi}_n^{\mu'} \psi_n^\mu = \ell (\bar{\psi}_{n+1}^{\mu'} \psi_n^\mu - \bar{\psi}_n^{\mu'} \psi_{n+1}^\mu + \bar{\psi}_{n-1}^{\mu'} \psi_n^\mu - \bar{\psi}_n^{\mu'} \psi_{n-1}^\mu)$$

d'où  $(\nabla F)_{n,m}$  peut se récrire encore<sup>39</sup>

$$\sum_{\mu, \mu'} \chi(E^\mu \in [-1, -1 + 2\ell + \tau]) \chi(E^{\mu'} \in [-2\ell - \tau, 0]) \ell^2 \frac{(\bar{\psi}_{n+1}^{\mu'} \psi_n^\mu - \bar{\psi}_n^{\mu'} \psi_{n+1}^\mu + \bar{\psi}_{n-1}^{\mu'} \psi_n^\mu - \bar{\psi}_n^{\mu'} \psi_{n-1}^\mu)}{(E^{\mu'} - E^\mu)^3} \\ \times (\bar{\psi}_m^\mu \psi_{m+1}^{\mu'} - \bar{\psi}_{m+1}^\mu \psi_m^{\mu'} + \bar{\psi}_m^\mu \psi_{m-1}^{\mu'} - \bar{\psi}_{m-1}^\mu \psi_m^{\mu'}) + \text{c.c.}$$

On va supposer<sup>40</sup> que  $2\ell + \tau < \frac{1}{4}$ . De cette façon, on a :

$$\chi(E^\mu \in [-1, -1 + 2\ell + \tau]) \chi(E^{\mu'} \in [-2\ell - \tau, 0]) = \chi(E^\mu - E^{\mu'} > \frac{1}{2}) \chi(E^\mu - E^{\mu'} > 0)$$

et en particulier, on a l'équivalence (voir figure 20) :

$$E^m u \in [-1, -1 + 2\ell + \tau] \text{ et } E^{\mu'} \in [-2\ell - \tau, 0] \iff E^\mu - E^{\mu'} \in [1 - 4\ell - 2\tau, 1].$$

Donc, si l'on définit

$$\Theta(x) = \frac{1}{x^3} \chi(x > \frac{1}{2})$$

39.  $\chi(x \in \mathcal{A})$  étant la fonction caractéristique d'un ensemble  $\mathcal{A}$  quelconque.

40. Tandis que la condition adoptée, pour une norme de Hilbert, est  $2\ell + \tau < \frac{1}{2}$ .

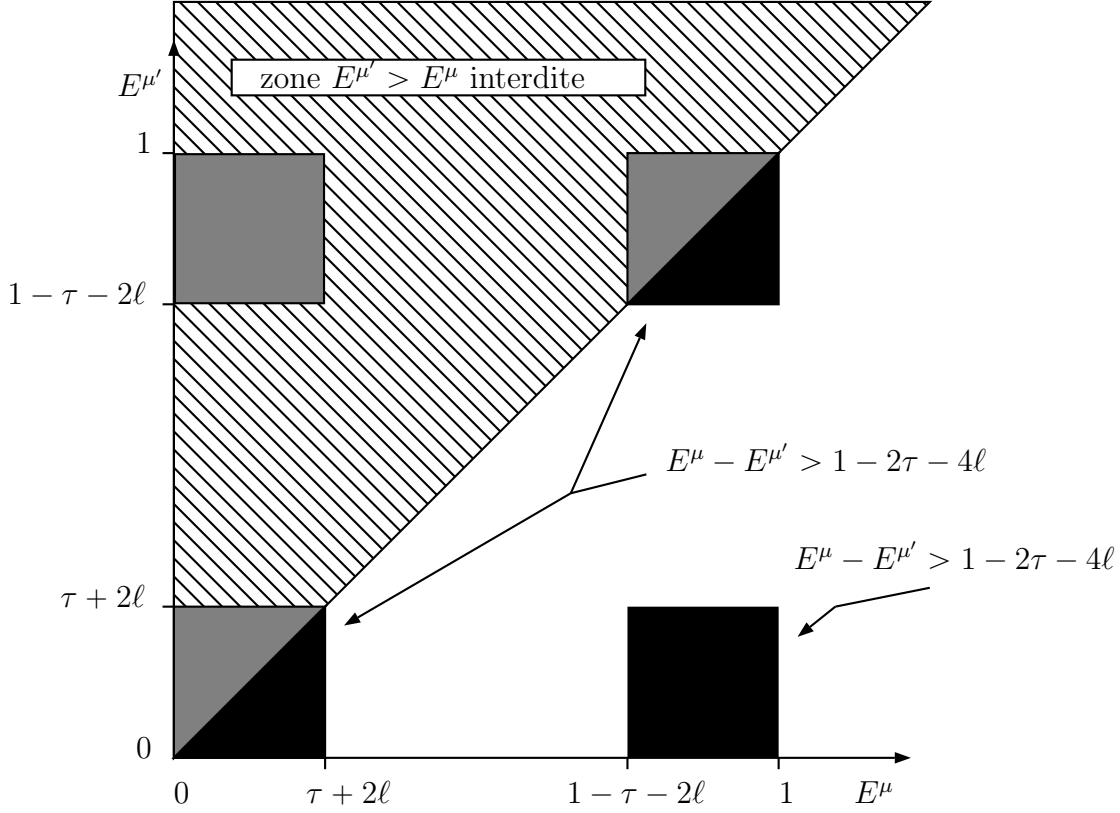


FIGURE 20 – Représentation de la fonction caractéristique  $\chi(\mu \text{ occ}, \mu' \text{ vide})$ . Les carrés pleins (gris ou noirs) représentent les zones physiquement autorisées dans l'espace  $(E^\mu, E^{\mu'})$ . La première bissectrice sépare les états suivant le signe de  $E^\mu - E^{\mu'}$  et on ne gardera que les états  $E^\mu > E^{\mu'}$  (partie non hachurée). La fonction  $\chi$  vaut donc 1 dans le carré inférieur droit (noir) et 0 dans les deux demi-carrés noirs, et n'est pas définie ailleurs. Quand l'inégalité  $\tau + 2\ell < \frac{1}{4}$  est respectée, la fonction  $\chi$  est en fait une fonction de  $E^\mu - E^{\mu'}$  car le carré inférieur droit est entièrement sélectionné par la condition  $E^\mu - E^{\mu'} \in [1 - 4\ell - 2\tau, 1]$ , tandis que les deux demi-carrés restants sont sélectionnés par la condition  $E^\mu - E^{\mu'} \in [0, 4\ell + 2\tau]$ .

pour tout  $x \in [0, 4\ell + 2\tau] \cup [1 - 4\ell - 2\tau, 1]$  et il n'est pas nécessaire de définir  $\Theta$  ailleurs, on obtient alors :

$$\begin{aligned} \nabla F_{n,m} = & \sum_{\substack{\mu, \mu' \\ E^\mu > E^{\mu'}}} \Theta(E^\mu - E^{\mu'}) \ell^2 (\bar{\psi}_{n+1}^{\mu'} \psi_n^\mu - \bar{\psi}_n^{\mu'} \psi_{n+1}^\mu + \bar{\psi}_{n-1}^{\mu'} \psi_n^\mu - \bar{\psi}_n^{\mu'} \psi_{n-1}^\mu) \\ & \times (\bar{\psi}_m^\mu \psi_{m+1}^{\mu'} - \bar{\psi}_{m+1}^\mu \psi_m^{\mu'} + \bar{\psi}_m^\mu \psi_{m-1}^{\mu'} - \bar{\psi}_{m-1}^\mu \psi_m^{\mu'}) + \text{c.c.} \end{aligned} \quad (\text{e,3})$$

$\Theta$  est représentée sur la figure 21.

La première étape est maintenant achevée, on va ensuite approximer  $\Theta$  par un polynôme  $P_k$  de degré  $2k$  tel que

$$\forall x \in \mathbb{R}, \quad |\Theta(x) - P_k(x)| < \frac{\kappa}{\sqrt{k}} e^{-\xi k} \quad (\text{e,4a})$$

où  $\kappa$  et  $\xi$  sont des constantes indéterminées.

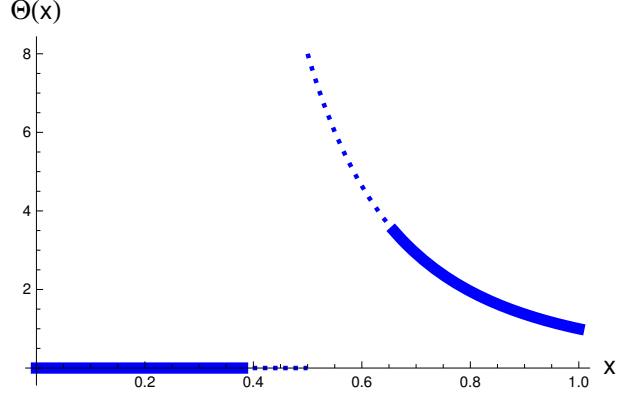


FIGURE 21 – Représentation de la fonction  $\Theta$ . Elle est dessinée en trait plein sur le domaine où elle est défini, ainsi que son prolongement en trait pointillé sur le domaine  $]4\ell + 2\tau, 1 - 4\ell - 2\tau[$  (la condition (e,4a) ci-après n'est pas vérifiée sur ce domaine).

### $\beta$ Approximation polynômiale

On va choisir une approximation de  $\Theta$ , sur son domaine de définition  $[0, 2\tau + 4\ell] \cup [1 - 2\tau - 4\ell, 1]$ , par un polynôme de degré  $2k$ ,  $k \geq 1$ , que je noterai  $P_k$  :

$$P_k(x) = \frac{\int_0^x (4t(1-t))^{k+1} dt}{x^3 \int_0^1 (4t(1-t))^{k+1} dt}.$$

On a  $\int_0^1 (4t(1-t))^k dt = \frac{(k!)^2 4^k}{(2k+1)!} \sim_{\infty} \frac{\sqrt{\pi}}{2\sqrt{k}}$ .

Soit donc  $R_k = \Theta - P_k$  le reste, montrons qu'il vérifie une inégalité du type (e,4a).

Soit  $Q_k(x) = x^3 P_k(x)$ , on a  $Q_k(1-x) = 1 - Q_k(x)$ , donc, soit  $x > \frac{1}{2}$ , on a :

$$\begin{aligned} |P_k(x) - \Theta(x)| &= |P_k(x) - \frac{1}{x^3}| = \left(\frac{1-x}{x}\right)^3 |P_k(1-x)| \\ &< |P_k(1-x)| = |P_k(1-x) - \Theta(1-x)| \end{aligned}$$

donc il suffira de démontrer l'inégalité (e,4a) pour  $0 < x < 4\ell + 2\tau$  et elle sera alors également vraie pour  $1 - 2\tau - 4\ell < x < 1$ .

Supposons donc que  $x < 2\tau + 4\ell$ . On a, de façon immédiate,

$$\forall i \in \{1, \dots, k+1\}, \quad Q_k^{(i)}(0) = 0$$

et

$$|Q_k^{(k+2)}(x)| \leq \frac{4^{k+1}(k+1)!}{\int_0^1 (4t(1-t))^{k+1} dt} (1-x)^{k+1}$$

donc, d'après la formule de Taylor-Young appliquée à  $Q_k$ ,

$$|P_k(x) - \underbrace{\Theta(x)}_{=0}| = \frac{1}{x^3} \frac{Q_k^{(k+2)}(\theta x)}{(k+2)!} x^{k+2} < \frac{(4x(1-x))^{k+1}}{(k+2)x^2 \int_0^1 (4t(1-t))^k dt} \text{ avec } 0 < \theta < 1.$$

Comme la fonction  $x \mapsto x^{k-1}(1-x)^{k+1}$  admet un maximum en  $x = \frac{k-1}{2k}$ , pour  $k > 1/(1-4\tau-8\ell)$ , on a  $2\tau+4\ell < \frac{k-1}{2k}$  et alors

$$|P_k(x) - \Theta(x)| < \frac{[4(2\tau+4\ell)(1-2\tau-4\ell)]^{k+1}}{(k+2)(2\tau+4\ell)^2 \int_0^1 (4t(1-t))^k dt} \quad (\text{e,4b})$$

Donc, pour  $k > 1/(1-4\tau-8\ell)$ , on a exactement obtenu une décomposition de  $\Theta$  en  $P_k + R_k$ , où  $P_k$  est un polynôme et le reste  $R_k$  vérifie une inégalité du type (e,4b) valable sur tout le domaine de définition de  $\Theta$  comme annoncé, avec  $\xi = \ln [4(2\tau+4\ell) \times (1-2\tau-4\ell)]$ .

La seconde étape est terminée, on va maintenant démontrer que la contribution polynômiale est nulle, quand le degré est suffisamment grand.

### $\gamma$ Annulation exacte de la partie polynômiale de $\Theta$

On va maintenant montrer que  $P_k$  donne une contribution rigoureusement nulle dans  $(\nabla F)_{n,m}$ , quand  $|n-m| \geq 2k+3$ . Pour cela, on va utiliser un lemme :

*Lemme* : Pour tout polynôme  $P(x, y)$  de degré<sup>41</sup>  $k$ , pour tout  $(p, q, p', q')$  vérifiant  $k \leq |p-q| - 1$  et  $k \leq |p'-q'| - 1$ , on a :

$$\sum_{\substack{\mu, \mu' \\ E^\mu > E^{\mu'}}} P(E^\mu, E^{\mu'}) \bar{\psi}_p^\mu \psi_{p'}^{\mu'} \bar{\psi}_{q'}^{\mu'} \psi_q^\mu + \text{c.c.} = 0$$

ce qui recouvre bien les différents facteurs du développement de (e,3).

Pour démontrer ce lemme, on va considérer le cas d'un monôme  $x^r y^s$  et montrer que

$$P_{r,s,p,q,p',q'} \equiv \sum_{\substack{\mu, \mu' \\ E^\mu > E^{\mu'}}} (E^\mu)^r (E^{\mu'})^s \bar{\psi}_p^\mu \psi_{p'}^{\mu'} \bar{\psi}_{q'}^{\mu'} \psi_q^\mu + \text{c.c.}$$

est nul, par récurrence sur  $k$  tel que  $r+s+1 \leq k$ ,  $|p-q| \geq k$  et  $|r'-q'| \geq k$ .

Si  $k=1$ , on a  $r=s=0$ , donc

$$\begin{aligned} P_{r,s,p,q,p',q'} &= \sum_{\substack{\mu, \mu' \\ E^\mu > E^{\mu'}}} \bar{\psi}_p^\mu \psi_{p'}^{\mu'} \bar{\psi}_{q'}^{\mu'} \psi_q^\mu + \text{c.c.} \\ &= \frac{1}{2} \sum_{\mu, \mu'} \bar{\psi}_p^\mu \psi_{p'}^{\mu'} \bar{\psi}_{q'}^{\mu'} \psi_q^\mu + \text{c.c.} \\ &= \delta_{p,q} \delta_{p',q'} . \end{aligned}$$

Cette somme est nulle car  $|p-q| \geq 1$  et  $|p'-q'| \geq 1$ ; le résultat est démontré pour  $k=1$ .

Supposons le démontré jusqu'à  $k \geq 1$  donné et prouvons-le pour  $k+1$ . Soit  $(r, s, p, q, p', q')$  tel que  $|p-q| \geq k+1$ ,  $|p'-q'| \geq k+1$  et  $r+s+1 \leq k+1$ .

Si, dans un premier temps, on suppose de plus que  $r+s+1 \leq k$ , comme on a également  $|p-q| \geq k$  et  $|p'-q'| \geq k$ , en appliquant le résultat à l'ordre  $k$ , on en déduit que  $P_{r,s,p,q,p',q'}$  est nul et le résultat est démontré dans ce cas à l'ordre  $k+1$ .

---

41. Le degré d'un monôme  $x^r y^s$  est simplement  $r+s$ . Si l'on considère  $P(x-y)$  comme dans notre cas, on retrouve le degré du polynôme.

On peut donc maintenant supposer que  $r + s + 1 = k + 1$ . On peut, indifféremment, admettre que  $r \neq 0$ . On écrit alors, dans  $P_{r,s,p,q,p',q'}$ , le terme  $E^\mu \bar{\psi}_p^\mu$  sous la forme  $-\ell \bar{\psi}_{p+1}^\mu - \ell \bar{\psi}_{p-1}^\mu + U_p \bar{\psi}_p^\mu$ . On a alors

$$P_{r,s,p,q,p',q'} = -\ell P_{r-1,s,p+1,q,p',q'} - \ell P_{r-1,s,p-1,q,p',q'} + U_p P_{r-1,s,p,q,p',q'}.$$

Dans les deux premiers termes de droite, les hypothèses à l'ordre  $k$  sont maintenant vérifiées : on a  $(r-1) + s + 1 \leq k$  et  $|(p \pm 1) - q| \geq |p - q| - 1 \geq k$ . Le troisième terme vérifie ces conditions à fortiori (on retrouve le cas  $r + s + 1 \geq k$ ). Donc, ils sont tous nuls et la propriété est démontrée à l'ordre  $k + 1$ .

Donc, la récurrence est établie et le lemme est bien démontré.

Pour l'appliquer ici, il suffit de remarquer que le polynôme  $P_k$  est de degré  $2k$  et on a  $|p - q|$  et  $|p' - q'| \geq |n - m| - 2$ , donc, pour  $|n - m| \geq 2k + 3$ , on a  $|p - q|$  et  $|p' - q'| \geq 2k + 1$  et d'après le lemme,

$$\sum_{\substack{\mu, \mu' \\ E^\mu > E^{\mu'}}} P_k(E^\mu, E^{\mu'}) \bar{\psi}_p^\mu \psi_{p'}^{\mu'} \bar{\psi}_{q'}^{\mu'} \psi_q^\mu + \text{c.c.} = 0$$

donc la substitution de  $P_k$  à  $\Theta$  donne exactement zéro. La troisième étape a bien été achevée ; on peut donc, pour tout  $k \geq 1$  et  $|n - m| \geq 2k + 3$ , remplacer  $\Theta$  par le reste  $R_k$  et on va en déduire exactement la majoration exponentielle de  $(\nabla F)_{n,m}$  annoncée.

### $\delta$ Majoration finale de $(\nabla F)_{n,m}$

On va maintenant établir une majoration exponentielle de  $(\nabla F)_{n,m}$  quand  $|n - m|$  est suffisamment grand, en utilisant les différents résultats intermédiaires qui précèdent.

Soit  $k > 1/(1 - 4\tau - 8\ell)$ , soit  $(n, m)$  tels que  $|n - m| \geq 2k + 3$ . On a l'égalité (e,3) :

$$\begin{aligned} \nabla F_{n,m} &= \sum_{\substack{\mu, \mu' \\ E^\mu > E^{\mu'}}} \Theta(E^\mu - E^{\mu'}) \ell^2 (\bar{\psi}_{n+1}^{\mu'} \psi_n^\mu - \bar{\psi}_n^{\mu'} \psi_{n+1}^\mu + \bar{\psi}_{n-1}^{\mu'} \psi_n^\mu - \bar{\psi}_n^{\mu'} \psi_{n-1}^\mu) \\ &\quad \times (\bar{\psi}_m^\mu \psi_{m+1}^{\mu'} - \bar{\psi}_{m+1}^\mu \psi_m^{\mu'} + \bar{\psi}_m^\mu \psi_{m-1}^{\mu'} - \bar{\psi}_{m-1}^\mu \psi_m^{\mu'}) + \text{c.c.} \end{aligned}$$

D'après la seconde étape, on a  $\Theta = P_k + R_k$ . Comme  $(n, m)$  vérifie les conditions de la troisième étape, on peut éliminer le terme polynômial. Comme on a choisi  $k > 1/(1 - 4\tau - 8\ell)$ , l'inégalité (e,4b) est vérifiée et on écrit finalement

$$\begin{aligned} |\nabla F|_{n,m} &= \left| \sum_{\substack{\mu, \mu' \\ E^\mu > E^{\mu'}}} R_k(E^\mu - E^{\mu'}) \ell^2 (\bar{\psi}_{n+1}^{\mu'} \cdots \psi_m^{\mu'}) + \text{c.c.} \right| \\ &\leq \frac{(4(2\tau + 4\ell)(1 - 2\tau - 4\ell))^{k+1}}{(k+2)(2\tau + 4\ell)^2 \int_0^1 (4t(1-t))^k dt} \ell^2 \left| (\bar{\psi}_{n+1}^{\mu'} \cdots \psi_m^{\mu'}) + \text{c.c.} \right| \\ &\leq 64 \ell^2 \frac{(4(2\tau + 4\ell)(1 - 2\tau - 4\ell))^{k+1}}{\sqrt{k+2}(2\tau + 4\ell)^2} \end{aligned} \tag{e,5}$$

où j'ai appliqué l'inégalité de Cauchy-Schwartz et l'égalité  $\sum_\mu |\psi_n^\mu|^2 = 1$  pour majorer la dernière somme, et j'ai utilisé  $(k+2) \int_0^1 (4t(1-t))^k dt > \frac{1}{2} \sqrt{k+2}$ .

L'inégalité (e,5) est exactement du type annoncé. De cette façon, on pourra convenablement majorer les termes  $|n - m| \geq 2k + 3$  dans (e,2). Il ne manque plus que d'obtenir une majoration uniforme pour la somme partielle  $|n - m| < 2k + 3$  de (e,2).

## 2 Majoration uniforme de $(\nabla F)_{n,m}$

Pour les termes proches de la diagonale, on va utiliser une majoration uniforme de  $(\nabla F)_{n,m}$ , qui est plus simple à établir. Pour un couple  $(n, m)$  ne vérifiant pas l'inégalité  $|n - m| > 2k + 3$ , on va écrire  $(\nabla F)_{n,m}$  sous la forme

$$\begin{aligned} (\nabla F)_{n,m} &= \sum_{\mu \text{ occ}, \mu' \text{ vide}} \frac{\ell^2}{(E^\mu - E^{\mu'})^3} (\bar{\psi}_{n+1}^{\mu'} \psi_n^\mu - \bar{\psi}_n^{\mu'} \psi_{n+1}^\mu + \bar{\psi}_{n-1}^{\mu'} \psi_n^\mu - \bar{\psi}_n^{\mu'} \psi_{n-1}^\mu) \\ &\quad \times (\bar{\psi}_m^\mu \psi_{m+1}^{\mu'} - \bar{\psi}_{m+1}^\mu \psi_m^{\mu'} + \bar{\psi}_m^\mu \psi_{m-1}^{\mu'} - \bar{\psi}_{m-1}^\mu \psi_m^{\mu'}) + \text{c.c.} \end{aligned}$$

et on majore directement  $1/(E^\mu - E^{\mu'})$  par  $1/(1 - 2\tau - 4\ell)$ . Alors

$$(\nabla F)_{n,m} < \frac{32\ell^2}{(1 - 2\tau - 4\ell)^3} \quad (\text{e,6})$$

et on utilisera cette inégalité pour majorer les termes  $|n - m| < 2k + 3$  dans (e,2).

## c Démonstration de l'inégalité (e,2)

Grâce aux deux majorations établies précédemment, on va pouvoir démontrer l'inégalité (e,2) et, ce faisant, que l'opérateur  $F$  est bien contractant, quand  $\ell$  est suffisamment petit.

Fixons  $m \in \mathbb{Z}$ . Notons  $k_o = [1/(1 - 4\tau - 8\ell)]^-$ . On a, d'après (e,5), en remplaçant dans le dénominateur  $\sqrt{k+2}$  par 2,

$$\begin{aligned} \sum_{n=m+2k_o+3}^{\infty} (\nabla F)_{n,m} &\leq 2 \sum_{k=k_o}^{\infty} 32\ell^2 \frac{\eta^{k+1}}{(2\tau + 4\ell)^2} \\ &\quad \text{où j'ai posé } \eta = (4(2\tau + 4\ell)(1 - 2\tau - 4\ell)) \\ &= \frac{64\ell^2 \eta^{k_o+1}}{(2\tau + 4\ell)^2 (1 - \eta)} \\ &= \frac{64\ell^2 \eta^{k_o+1}}{(2\tau + 4\ell)^2 (1 - 4\tau - 8\ell)^2} \end{aligned}$$

et de même pour  $\sum_{-\infty}^{m-2k_o-3} (\nabla F)_{n,m}$ . Et, enfin, on écrit, d'après (e,6),

$$\begin{aligned} \sum_{n=m-2k_o-2}^{m+2k_o+2} (\nabla F)_{n,m} &\leq (4k_o + 5) \frac{32\ell^2}{(1 - 2\tau - 4\ell)^3} \\ \text{et par définition de } k_o &\leq \left( \frac{4}{1 - 4\tau - 8\ell} + 9 \right) \frac{32\ell^2}{(1 - 2\tau - 4\ell)^3} \end{aligned}$$

D'où, en rassemblant les sommes partielles, on trouve

$$\begin{aligned} \sum_{n=-\infty}^{\infty} (\nabla F)_{n,m} &< \frac{32\ell^2}{(1 - 4\tau - 8\ell)^2 (1 - 2\tau - 4\ell)^3} \times \\ &\left( 4(4\tau + 8\ell)^{k_o-1} (1 - 4\tau - 8\ell)^{k_o+1} (1 - 2\tau - 4\ell)^3 + 4(1 - 4\tau - 8\ell) + 9(1 - 4\tau - 8\ell)^2 \right) \end{aligned}$$

42.  $[x]^-$  est le plus petit entier supérieur à  $x$ , d'après les notations du texte.

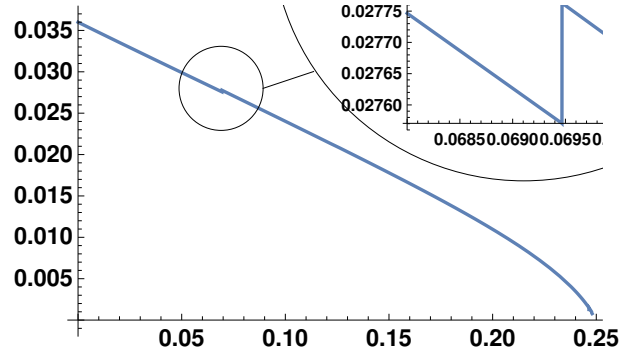


FIGURE 22 – Représentation de la courbe  $\tau \mapsto \ell(\tau)$  exacte obtenue par calcul numérique. Le maximum vaut ~~0,44~~ **0,036**, et il est atteint pour  $\tau \sim 1,5 \cdot 10^{-3}$ . Il est remarquable que la courbe s’annule exactement pour  $\tau = 1/4$ , ce qui est le maximum théorique par cette méthode, tandis que la courbe obtenue dans le texte s’annule pour  $\tau \simeq 0,3$ , qui est certes plus grand, mais bien inférieur au maximum théorique autorisé pour la “méthode hilbertienne” (qui vaut  $1/2$ ).

où tous les facteurs en puissance sont inférieurs à 1.

Il est possible de trouver  $\ell$  suffisamment petit, tel que ce facteur soit inférieur à 1. Si l’on définit de nouveau la fonction  $\tau \mapsto \ell(\tau)$ , qui est le plus grand  $\ell$  autorisé pour un  $\tau$  donné, en prenant également en compte les conditions de stabilité de  $\mathcal{A}_\tau$ , on trouve une valeur maximale  $\ell \simeq$  ~~0,44~~ **0,036**, pour une valeur de  $\tau \sim 1,5 \cdot 10^{-3}$ , ce qui correspond à des configurations extrêmement proches de la configuration où tous les sites sont, soit vides, soit occupés (voir la courbe 22).

### 3 Conséquences et applications

On a maintenant bien établi toutes les conditions nécessaires pour l’application du théorème du point fixe. En découlent toutes les propriétés sur le chaos structurel (variable aléatoire) et la défectibilité du système (existence de défauts localisés et fixes à température nulle) qui ont été développées dans le mémoire ; en particulier, les propriétés de localisation, qui sont plus faciles à établir par la méthode que j’ai développée. On pourrait démontrer que les corrélations à deux particules atomiques ou plus, ou entre les défauts, décroissent exponentiellement, en généralisant la formule  $(\nabla F)_{n,m} \sim e^{-\xi|n-m|}$  aux différentes matrices de corrélation.  $\xi$  est donc bien une longueur de corrélation.

Il est aussi possible de remplacer la variable  $\ell$  par un champ  $\ell_n$  et, par un calcul toujours analogue, on montrerait que :

$$\frac{\partial \ell_n}{\partial U_m} \sim e^{-\xi|n-m|}.$$

Ceci a des conséquences remarquables : si l’on annule deux éléments  $\ell_{n_1}$  et  $\ell_{n_2}$ , on ne perturbe pas le système à l’extérieur de  $\{n_1, \dots, n_2\}$  et ce segment est entièrement isolé (par les équations de stationnarité). On peut par exemple changer entièrement la densité électronique ou le couplage électron-phonon dans ce segment. Et ceci se généralise sans difficulté à toute dimension pour une partie quelconque finie du système.



Enfin, pour compléter cette correction, il faut remarquer que la contraction de l'opérateur  $\nabla F$  a été démontrée pour deux normes différentes, l'une correspondant à une structure hilbertienne, et l'autre à un espace de Banach, qui est sa complétude. La norme de Banach doit être utilisée pour tous les résultats qui concernent des variations finies, comme typiquement la défectibilité. Par contre, il faut bien travailler avec une norme de Hilbert pour tous les résultats concernant des variations infinitésimales, essentiellement l'existence d'une bande interdite dans le spectre de phonon. En effet, on étudie alors le spectre hilbertien de l'opérateur dynamique  $D$ . Pour le cas de Frenkel & Kontorowa, il est indifférent de travailler avec une norme ou l'autre car on majore le coefficient de contraction de l'opérateur  $F$  de la même façon pour les deux ; (je n'ai fait le calcul qu'avec une norme de Banach mais on trouvera un calcul exact utilisant la norme hilbertienne à la référence [27]).

Mots clés :

incommensurabilité ; dégénérescence de phase ; structure aléatoire et discrète ; chaos, limite anti-intégrable ; frustration ; couplage électron-phonon ; défautibilité.

Résumé :

Les phases incommensurables sont des systèmes soumis à une compétition entre deux interactions incompatibles, dont les longueurs caractéristiques respectives sont de rapport irrationnel. L'espace des états fondamentaux de tels systèmes est dégénéré selon une phase continue. Le système est indéfectible à petit couplage et défautible à grand couplage : dans ce cas, on entre dans un régime anti-intégrable. Nous nous sommes plus particulièrement attaché à démontrer, de façon exacte et analytique, que les états à grand couplage sont entièrement caractérisés par une variable discrète et aléatoire, pour deux modèles simples, le modèle de Frenkel & Kontorowa, qui décrit une chaîne d'atomes classiques soumis à une interaction élastique et un potentiel périodique, et le modèle d'Holstein-Peierls, qui décrit des électrons quantiques placés sur un réseau classique d'atomes et soumis à une interaction plus-proche-voisin et à un couplage électron-phonon. Ce travail se présente sous deux axes : une analyse approfondie des états fondamentaux et une méthode par perturbation à grand couplage qui utilise le théorème du point fixe. Cette méthode originale est extensible à de nombreux autres modèles. Cette étude constitue un travail préparatoire à l'analyse des systèmes d'Holstein-Peierls avec des atomes quantiques, pour lesquels on espère mettre en évidence un état supraconducteur qui remplace l'état indéfectible.