

# Chapitre 1

## Peierls et l'ordre cristallin en basse dimension

### Sommaire

---

<b>1</b>	<b>L'argument de Peierls à une dimension</b> . . . . .	<b>2</b>
1-1	Un argument simple : l'empilement de défauts . . . . .	2
1-2	Le cristal harmonique classique . . . . .	3
1-3	Corrélation des écarts $u_j$ à l'équilibre thermique . . . . .	4
1-4	Le cas quantique . . . . .	6
<b>2</b>	<b>Cristaux à deux ou à trois dimensions</b> . . . . .	<b>6</b>
2-1	Écarts à l'équilibre dans le cas bidimensionnel . . . . .	7
2-2	Un paramètre d'ordre : les pics de Bragg . . . . .	8
2-3	Le cristal tri-dimensionnel . . . . .	9
2-4	Le théorème de Mermin–Wagner–Hohenberg . . . . .	10
<b>3</b>	<b>Les cristaux bi-dimensionnels au laboratoire</b> . . . . .	<b>11</b>
3-1	Scénario pour la fusion d'un cristal 2D . . . . .	11
3-2	Mise en évidence sur des systèmes colloïdaux . . . . .	12
3-3	Et le graphène? . . . . .	14

---

L'essentiel du cours de cette année va être consacré à l'étude de gaz quantiques en dimension réduite, essentiellement en dimension deux. Du fait de cette dimension réduite, le phénomène de condensation lié à la statistique de Bose–Einstein sera absent, au moins à la limite thermodynamique, c'est-à-dire pour un système infini. En d'autres termes, l'ordre à longue portée qui caractérise un condensat de Bose–Einstein, c'est-à-dire la corrélation en phase de la fonction d'onde qui décrit le gaz, disparaît à deux ou à une dimensions. Les fluctuations thermiques jouent en effet un rôle plus important qu'à trois dimensions, et elles viennent détruire l'ordre que la statistique ou les interactions auraient tendance à créer.

C'est le physicien Rudolf Peierls, d'origine allemande, mais travaillant en Angleterre à partir de 1933, qui a le premier formalisé cette perte possible de l'ordre à longue portée dans les systèmes de dimensions réduites (PEIERLS 1934; PEIERLS 1935). Il ne s'intéressait pas aux condensats de Bose–Einstein, mais à l'ordre d'un solide et il a montré qu'un cristal ne pourrait pas exister dans un monde uni ou bidimensionnel.

Dans ce chapitre, nous allons commencer par examiner les arguments de Peierls à une, puis à deux dimensions. Nous décrirons ensuite quelques expériences récentes menées sur des colloïdes et qui ont permis de tester la prédiction de Peierls. Mais nous verrons aussi que l'absence d'ordre cristallin ne signifie pas un désordre complet : ces assemblées colloïdales peuvent être "presque" cristallines à basse température, avant de devenir complètement liquides à température plus élevée. Ce sera notre première rencontre avec une transition de phase induite par des défauts topologiques, concept

formalisé par KOSTERLITZ & THOULESS (1973).

## 1 L'argument de Peierls à une dimension

Nous allons commencer notre étude avec un système unidimensionnel, c'est-à-dire une chaîne d'atomes. Nous allons nous limiter au cas d'interactions entre proches voisins pour arriver simplement au résultat de Peierls : un tel système ne peut pas présenter d'ordre cristallin. Même si on connaît précisément la position d'un atome donné de la chaîne, la position d'un autre atome est complètement indéfinie à l'échelle de la maille cristalline pourvu que cet autre atome soit choisi assez loin du premier.

### 1-1 Un argument simple : l'empilement de défauts

Considérons une chaîne d'atomes avec une interaction entre proches voisins décrite par le potentiel  $U(x)$ . Si on numérote les atomes avec un indice  $j$  en supposant  $\dots < x_{j-1} < x_j < x_{j+1} < \dots$ , l'énergie d'interaction du système vaut donc

$$V_{\text{inter.}}(\{x_j\}) = \sum_j U(x_{j+1} - x_j). \quad (1)$$

Pour favoriser l'apparition d'un éventuel ordre cristallin, supposons que ce potentiel possède un minimum local en  $x = a$ , de sorte qu'à température nulle et en absence de toute fluctuation d'origine quantique, la chaîne d'atomes est régulière, avec un espacement entre atomes adjacents égal à  $a$  (figure 1).

Supposons maintenant que le système soit à température  $T$  non nulle. En prenant la position  $x_0$  de l'atome 0 comme référence, la position  $x_1$  de son voisin de droite fluctuera autour de sa position d'équilibre avec un écart quadratique moyen  $\delta_1$  qui se déduit du théorème d'équipartition de l'énergie :

$$x_1 = x_0 + a + \delta_1 \quad \text{avec} \quad \langle \delta_1 \rangle = 0, \quad \langle \delta_1^2 \rangle \sim \frac{k_B T}{\kappa}, \quad \kappa = \left. \frac{d^2 U}{dx^2} \right|_{x=a}. \quad (2)$$

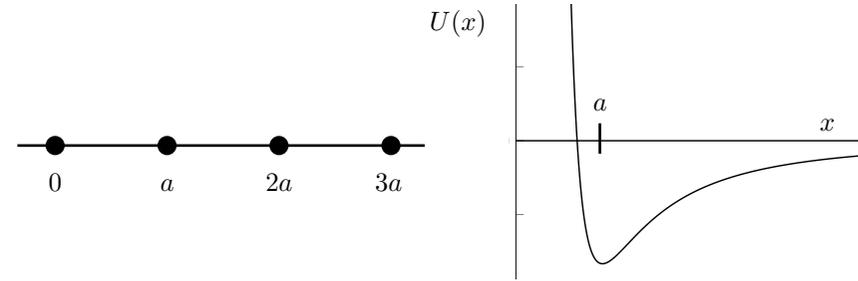


FIGURE 1. Chaîne uni-dimensionnelle d'atomes avec des interactions entre proches voisins décrites par le potentiel  $U(x)$ . Ce potentiel a un minimum en  $x = a$ , ce qui a pour effet de former un cristal, au moins pour un gaz de particules à température nulle décrites par la physique classique (pas de fluctuations thermiques, ni quantiques).

Nous nous sommes limités ici au cas où  $|\delta| \ll a$ , de sorte qu'on peut utiliser une approximation quadratique pour estimer les variations du potentiel  $U(x)$  au voisinage de son minimum  $x = a$ . Par ailleurs, nous avons mis un signe  $\sim$  et pas un signe  $=$  car le traitement fait ici ne peut donner qu'un ordre de grandeur de  $\langle \delta_1^2 \rangle$ . En effet, la position de l'atome 1 ne doit pas se repérer seulement par rapport à son voisin de gauche, c'est-à-dire l'atome 0, mais aussi par rapport à son voisin de droite, c'est-à-dire l'atome 2. La prise en compte correcte de l'ensemble des interactions conduit à un ensemble d'équations couplées que nous examinerons un peu plus loin (§ 1-2).

Le même argument permet d'évaluer les fluctuations de la position de l'atome  $j$  par rapport à son voisin  $j - 1$  :

$$x_j = x_{j-1} + a + \delta_j \quad \text{avec} \quad \langle \delta_j^2 \rangle \sim \frac{k_B T}{\kappa} \quad (3)$$

Par rapport à l'atome initial 0, la position de l'atome  $j$  est donc donnée par

$$x_j = x_0 + ja + \Delta_j \quad (4)$$

où la quantité  $\Delta_j$  est la somme des  $j$  variables aléatoires indépendantes :

$$\Delta_j = \delta_1 + \dots + \delta_j. \quad (5)$$

Cette quantité est également de valeur moyenne nulle et elle a pour variance :

$$\langle \Delta_j^2 \rangle \sim \frac{k_B T}{\kappa} j. \quad (6)$$

On voit donc que l'incertitude sur la position de l'atome  $j$  croît comme  $\sqrt{j}$  au fur et à mesure où l'on s'éloigne de l'atome de référence. Pour  $j$  assez grand, typiquement

$$\langle \Delta_j^2 \rangle \gtrsim a^2 \quad \longrightarrow \quad j \gtrsim \frac{\kappa a^2}{k_B T}, \quad (7)$$

l'incertitude  $\Delta_j$  devient supérieure à la maille  $a$  du réseau et l'ordre cristallin est perdu : même si on sait exactement où se trouve l'atome de référence 0, on n'a aucune information sur la position de l'atome  $j$  à l'échelle de la maille cristalline.

Cet argument très simple permet de conclure dans le cas unidimensionnel, mais il est difficile à généraliser en dimension supérieure. Nous allons donc passer par un traitement un peu plus élaboré, où l'on considère les vibrations (phonons) du réseau, traitement qui sera transposable en dimension 2 et 3. Ce traitement est par ailleurs voisin de ce que l'on sera amené à faire plus tard pour étudier la superfluidité.

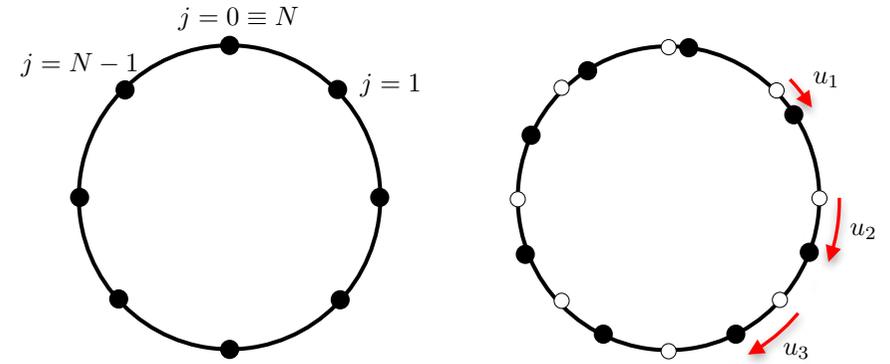
## 1-2 Le cristal harmonique classique

Nous reprenons la chaîne d'atomes précédente, en choisissant des conditions aux limites périodiques pour simplifier les calculs. En notant  $N$  le nombre total d'atomes, nous identifions l'atome  $N$  et l'atome 0, ce qui revient à positionner les atomes sur un cercle (figure 2). Nous nous limitons à des petites variations des distance  $x_{j+1} - x_j$  autour de leur valeur d'équilibre  $a$  de sorte que l'énergie totale (cinétique + interactions) du système s'écrit dans l'approximation harmonique

$$E = \sum_{j=1}^N \frac{1}{2} m \dot{u}_j^2 + \frac{\kappa}{2} (u_{j+1} - u_j)^2 \quad (8)$$

où  $u_j$  désigne l'écart de l'atome  $j$  par rapport à sa position d'équilibre  $X_j$  :

$$u_j = x_j - X_j \quad \text{avec} \quad X_j = ja \quad (9)$$



**FIGURE 2.** Gauche : chaîne ordonnée de  $N$  atomes avec des conditions aux limites périodiques, conduisant à identifier l'atome  $j = 0$  et l'atome  $j = N$ . Droite : définition des déplacements  $u_j$  par rapport aux positions d'équilibre. On suppose que  $|u_{j+1} - u_j| \ll a$  mais pas nécessairement que  $|u_j| \ll a$ .

(avec la convention  $u_{N+1} \equiv u_1$ ). Notons que l'hypothèse de petite variation de la distance entre proches voisins :

$$|u_{j+1} - u_j| \ll a \quad (10)$$

n'implique pas que  $u_j$  et  $u_{j+1}$  soient séparément petits devant  $a$ . Les atomes  $j$  et  $j + 1$  peuvent être chacun fortement écartés de leurs positions d'équilibre  $X_j$  et  $X_{j+1}$ , mais nous faisons l'hypothèse que leurs écarts  $u_j$  et  $u_{j+1}$  sont voisins ; en d'autres termes, il peut y avoir un ordre local sans avoir d'ordre à longue portée.

Les équations du mouvement conduisent à un système de  $N$  équations linéaires couplées :

$$m \ddot{u}_j = \kappa (u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1}), \quad (11)$$

dont les solutions sont les modes propres du système, c'est-à-dire les phonons. La résolution de ce système d'équations est un classique des ouvrages de physique des solides [voir par exemple ZIMAN (1960) et ASHCROFT & MERMIN (1976)]. Une méthode rapide consiste à considérer les

coefficients  $\hat{u}_q$  (prenons  $N$  pair pour fixer les idées)

$$\hat{u}_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{-iqX_j} u_j, \quad q = -\frac{\pi}{a}, \dots, -\frac{2\pi}{Na}, 0, \frac{2\pi}{Na}, \dots, +\frac{\pi}{a} \quad (12)$$

où les deux valeurs extrêmes  $q = \pm\pi/a$  conduisent au même coefficient  $\hat{u}_q$ .

La transformation  $u_j \rightarrow \hat{u}_q$  n'est autre qu'une transformée de Fourier discrète qui associe les écarts  $u_j$  aux amplitudes  $\hat{u}_q$  des moments  $q$ . Cette transformation s'inverse pour donner

$$u_j = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iqX_j} \hat{u}_q. \quad (13)$$

Comme les  $N$  positions  $u_j$  sont réelles, les amplitudes complexes  $\hat{u}_q$  vérifient

$$\hat{u}_q^* = \hat{u}_{-q}, \quad \hat{u}_0, \hat{u}_{\pm\pi/a} \in \mathbb{R}. \quad (14)$$

On a donc  $N$  variables réelles indépendantes, aussi bien dans l'espace des positions que dans l'espace de Fourier.

L'écriture de l'énergie totale (8) en fonction des modes phononiques  $\hat{u}_q$  s'obtient après un calcul simple :

$$E = \sum_q \frac{1}{2} m \dot{\hat{u}}_q \dot{\hat{u}}_{-q} + \frac{1}{2} m \omega_q^2 \hat{u}_q \hat{u}_{-q} \quad (15)$$

où l'on a posé

$$\omega_q = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \left| \sin \frac{qa}{2} \right|. \quad (16)$$

On a donc décomposé le problème en  $N$  modes de phonons indépendants, régis par l'équation du mouvement :

$$\ddot{\hat{u}}_q + \omega_q^2 \hat{u}_q = 0; \quad (17)$$

— le mode  $\hat{u}_0$ , avec l'équation du mouvement  $\ddot{\hat{u}}_0 = 0$ , correspond au mouvement du centre de masse de l'ensemble de la chaîne. Rien ne vient contraindre la position de ce centre de masse puisque l'énergie totale est invariante par translation globale des  $N$  atomes.

— les  $N - 1$  modes  $\hat{u}_q$  avec  $q \neq 0$  forment des oscillateurs harmoniques découplés de pulsation  $\omega_q$ .

Les modes (12-16) correspondent à une version discrétisée d'ondes progressives en  $e^{iqx}$ , avec la position  $x = X_j \equiv ja$ . Pour les petits nombres d'onde ( $q \ll \pi/a$ ), on trouve une relation de dispersion linéaire

$$\omega_q = c |q| \quad \text{avec} \quad c = a\sqrt{\frac{\kappa}{m}}, \quad (18)$$

correspondant à des ondes « sonores » de vitesse  $c$ .

### 1-3 Corrélation des écarts $u_j$ à l'équilibre thermique

À l'équilibre thermodynamique, on déduit de l'expression de l'énergie (15) que chaque mode  $\hat{u}_q$  pour  $q \neq 0$  a une valeur moyenne nulle et une variance donnée par le théorème d'équipartition :

$$\frac{1}{2} m \omega_q^2 \langle |\hat{u}_q|^2 \rangle = \frac{1}{2} k_B T \quad \langle \hat{u}_q \hat{u}_{q'}^* \rangle = 0 \text{ si } q \neq q'. \quad (19)$$

Pour établir cette relation (avec les facteurs 2 corrects!), il faut rappeler que l'on travaille avec des oscillateur complexes [cf. (14)]. En cas de doute, il est conseillé de se ramener à des oscillateurs réels indépendants, par exemple en considérant les parties réelles et imaginaires des  $\hat{u}_q$  et en reprenant la somme (15) pour la restreindre aux variables indépendantes correspondant à  $q \geq 0$ .

Il est alors simple de calculer la corrélation entre le déplacement de l'atome  $j$  et celui de l'atome 0 ( $\equiv N$ ). Partons de

$$u_j - u_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q (e^{iqX_j} - 1) \hat{u}_q, \quad (20)$$

ce qui donne, en prenant le carré, puis la valeur moyenne thermique

$$\langle (u_j - u_0)^2 \rangle = \frac{4}{N} \sum_q \sin^2(qX_j/2) \langle |\hat{u}_q|^2 \rangle \quad (21)$$

$$= \frac{k_B T}{m} \frac{4}{N} \sum_q \frac{\sin^2(qX_j/2)}{\omega_q^2}. \quad (22)$$

À ce stade, il est utile de remplacer la somme sur le moment discrétisé  $q$  par une intégrale en utilisant la relation déduite de (12) :

$$\sum_q \rightarrow \frac{Na}{2\pi} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} dq, \quad (23)$$

ce qui donne

$$\begin{aligned} \langle (u_j - u_0)^2 \rangle &= \frac{2}{\pi} \frac{k_B T a}{m} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \frac{\sin^2(qX_j/2)}{\omega_q^2} dq \\ &= \frac{4}{\pi} \frac{k_B T a}{m} \int_0^{\pi/a} \frac{\sin^2(qX_j/2)}{\omega_q^2} dq \\ &\approx \frac{4}{\pi} \frac{k_B T}{\kappa a} \int_0^{\pi/a} \frac{\sin^2(qX_j/2)}{q^2} dq \end{aligned} \quad (24)$$

où nous avons remplacé dans la dernière ligne la pulsation  $\omega_q$  par son expression linéarisée  $\omega_q = cq$ , et utilisé l'expression (18) pour la vitesse du son  $c$ . Cette approximation sera justifiée *a posteriori* quand nous connaîtrons les modes  $q$  qui contribuent majoritairement à cette intégrale.

Nous allons nous placer dans le cas où l'atome  $j$  est éloigné de l'atome 0 puisque nous nous intéressons à l'ordre à longue portée. Pour évaluer cette intégrale, nous allons tout d'abord utiliser une méthode approchée. Elle consiste à découper l'intervalle d'intégration, puis à évaluer chaque morceau. Cette méthode nous donnera simplement la loi d'échelle reliant  $\langle (u_j - u_0)^2 \rangle$  et sera directement transposable au cas bi-dimensionnel. Nous examinerons ensuite une deuxième méthode, spécifique du cas 1D, permettant de faire un calcul (presque) exact de cette intégrale.

**Découpage et approximations.** La structure de l'intégrande suggère de découper l'intervalle d'intégration en deux parties (figure 3) :

— Les valeurs telles que  $q \gtrsim \pi/X_j$ , pour lesquelles on peut remplacer le  $\sin^2$  par sa moyenne 1/2, soit

$$\approx \frac{2}{\pi} \frac{k_B T}{\kappa a} \int_{\pi/X_j}^{\pi/a} \frac{1}{q^2} dq \approx \frac{2}{\pi^2} \frac{k_B T}{\kappa a} X_j \quad (25)$$

où l'on a utilisé le fait que  $X_j \gg a$ .

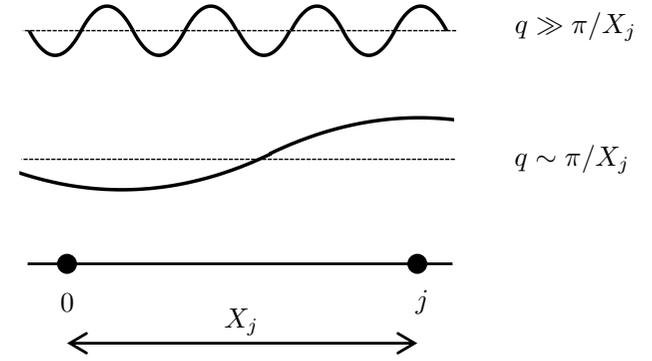


FIGURE 3. Les deux types de modes susceptibles de contribuer à l'intégrale (24), pour une distance  $X_j$  donnée entre les deux sites considérés.

— Les valeurs telles que  $q \lesssim \pi/X_j$  pour lesquelles on peut remplacer le sinus par son argument :

$$\approx \frac{1}{\pi} \frac{k_B T}{\kappa a} X_j^2 \int_0^{\pi/X_j} dq = \frac{k_B T}{\kappa a} X_j \quad (26)$$

Sous cette forme, on voit que les deux contributions sont sensiblement du même ordre, leur valeur relative précise dépendant de la position de la frontière entre les deux domaines (ici  $\pi/X_j$ ). Elles conduisent chacune à la divergence linéaire de  $\langle (u_j - u_0)^2 \rangle$  avec  $j$ . On voit également que les valeurs de  $q$  qui contribuent le plus à ces deux intégrales sont les valeurs autour de  $q \sim 1/X_j \ll 1/a$ , c'est-à-dire les modes dont la longueur d'onde est de l'ordre de la distance entre les deux sites 0 et  $j$  considérés ici. Cette constatation justifie *a posteriori* la linéarisation de la fréquence  $\omega_q \propto \sin(qa/2)$  faite à l'équation (24).

**Calcul (presque) exact de l'intégrale (24).** Un changement de variable permet de se ramener à :

$$\langle (u_j - u_0)^2 \rangle = \frac{2}{\pi} \frac{k_B T}{\kappa a} X_j \int_0^{\pi X_j/a} \frac{\sin^2 z}{z^2} dz. \quad (27)$$

Dans la limite  $j \gg 1$ , la borne supérieure de l'intégrale peut être étendue à  $+\infty$  et l'intégrale vaut  $\pi/2$ , ce qui redonne le résultat trouvé dans le premier paragraphe [cf. (6)] :

$$\langle (u_j - u_0)^2 \rangle = \frac{k_B T}{\kappa a} X_j = \frac{k_B T}{\kappa} j. \quad (28)$$

Ce résultat coïncide également (à 20% près) avec la somme des deux contributions (25) et (26).

Ce calcul confirme donc la conclusion de l'analyse simplifiée du paragraphe § 1-1 : à température non nulle, il n'y a pas d'ordre à longue portée et la « mémoire » de la position de l'atome  $j = 0$  est effacée au bout d'une distance qui varie comme  $1/T$ . En revanche, à température nulle, on trouve un ordre à longue portée dans ce modèle classique, chaque atome occupant alors exactement sa position d'équilibre.

## 1-4 Le cas quantique

Avant de passer au cas multi-dimensionnel, il est intéressant de regarder comment les résultats précédents sont modifiés quand on prend en compte l'influence des fluctuations quantiques. Plaçons-nous à température nulle pour simplifier l'analyse. Pour commencer, remarquons que l'énergie (8) est une fonction quadratique des positions et des vitesses, de sorte que le traitement quantique peut être calqué sur le traitement classique. En particulier, l'identification des modes phononiques est inchangé et on trouve pour l'énergie potentielle de chaque oscillateur  $\hat{u}_q$  :

$$\frac{1}{2} m \omega_q^2 \langle |\hat{u}_q|^2 \rangle = \frac{1}{4} \hbar \omega_q, \quad (29)$$

cette expression venant remplacer l'équipartition classique de l'énergie donnée en (19).

Injectons ce résultat dans l'expression (21) donnant la variance de l'écart  $u_j - u_0$  :

$$\langle (u_j - u_0)^2 \rangle = \frac{2\hbar}{mN} \sum_q \frac{\sin^2(qX_j/2)}{\omega_q} \quad (30)$$

$$\approx \frac{2}{\pi} \frac{\hbar}{\sqrt{\kappa m}} \int_0^{\pi/a} \frac{\sin^2(qX_j/2)}{q} dq \quad (31)$$

où l'on a remplacé  $\omega_q$  par  $cq$ . Comme nous l'avons fait en (25-26), nous pouvons séparer cette intégrale en deux parties, selon la valeur relative de  $q$  et  $1/X_j$  :

— Pour  $q \gtrsim \pi/X_j$ , on a pour  $X_j \gg a$

$$\approx \frac{1}{\pi} \frac{\hbar}{\sqrt{\kappa m}} \int_{\pi/X_j}^{\pi/a} \frac{1}{q} dq = \frac{1}{\pi} \frac{\hbar}{\sqrt{\kappa m}} \ln(X_j/a) \quad (32)$$

— Pour  $q \lesssim \pi/X_j$ , on trouve :

$$\approx \frac{1}{2\pi} \frac{\hbar}{\sqrt{\kappa m}} X_j^2 \int_0^{\pi/X_j} q dq = \frac{\pi}{4} \frac{\hbar}{\sqrt{\kappa m}}. \quad (33)$$

Pour  $X_j \gg a$ , la première contribution est dominante puisqu'elle diverge comme  $\ln(X_j)$ . On trouve donc, à une constante additive près

$$\langle (u_j - u_0)^2 \rangle \sim \frac{a_{\text{oh}}^2}{\pi} \ln(X_j/a), \quad (34)$$

où on a introduit  $a_{\text{oh}} = (\hbar^2/m\kappa)^{1/4}$ , qui est la taille caractéristique de l'état fondamental d'un oscillateur harmonique quantique de masse  $m$  et de raideur  $\kappa$ .

Cette divergence indique que même à température nulle, un cristal unidimensionnel quantique ne pourrait pas exister, au moins si on se limite à des interactions entre proches voisins. Cette divergence est faible puisque logarithmique, mais elle suffit à empêcher l'ordre cristallin.

Nous allons retrouver dans le paragraphe qui suit une divergence logarithmique pour un cristal classique 2D à température non nulle, avec un traitement mathématique qui sera directement inspiré de celui que nous venons d'utiliser. Notons que cette relation entre un système quantique de dimension  $d$  à température nulle et son équivalent classique en dimension  $d+1$  à température finie n'est pas fortuite. Elle peut être complètement formalisée pour certains problèmes, comme discuté par exemple dans l'article de revue de SONDHI, GIRVIN et al. (1997).

## 2 Cristaux à deux ou à trois dimensions

L'analyse que nous venons de faire peut être transposée au cas multi-dimensionnel (MERMIN 1968; MERMIN 1979; MERMIN 2006). La recherche

des modes propres du système se fait de la même façon, en linéarisant le potentiel d'interaction entre atomes au voisinage de leur position d'équilibre dans le cristal. L'invariance par translation du système permet là aussi de rechercher les modes propres du système sous forme d'ondes planes caractérisées par leur vecteur d'onde  $\mathbf{q}$ .

Une complication supplémentaire apparaît dans un réseau de dimension supérieure à 1 : pour préciser complètement la forme d'un mode propre, il faut également se donner sa polarisation  $\epsilon$ , c'est-à-dire la direction d'oscillation des atomes par rapport au vecteur d'onde. À une dimension, le problème ne se posait pas puisque l'oscillation se faisait nécessairement de manière longitudinale, le long de l'axe du cristal. À deux (resp. trois) dimensions, il y a deux (resp. trois) polarisations indépendantes pour un vecteur  $\mathbf{q}$  donné. La situation est simplifiée dans le cas d'un cristal isotrope, pour lequel on peut toujours choisir une solution polarisée parallèlement à  $\mathbf{q}$  et l'autre (ou les deux autres à 3D) perpendiculairement à  $\mathbf{q}$  (ASHCROFT & MERMIN 1976).

Une fois cette identification des modes propres effectuées, nous pouvons reprendre le raisonnement précédent pour évaluer la variance de l'écart entre les déplacements  $\mathbf{u}_0$  et  $\mathbf{u}_R$  de deux atomes séparés de  $\mathbf{R}$ . Le traitement exact est compliqué par la nécessité de séparer les contributions des différentes polarisations des modes, mais nous pourrions heureusement nous contenter de lois d'échelle pour conclure.

### 2-1 Écarts à l'équilibre dans le cas bidimensionnel

Considérons un réseau carré de pas  $a$ , avec  $N$  sites le long de chaque direction et des conditions aux limites le long de chaque axe (figure 4). Chaque site du réseau est repéré par un couple d'entiers,  $(j_x, j_y) \equiv \mathbf{j}$ , correspondant à la position

$$\mathbf{R}_j = a(j_x \hat{\mathbf{x}} + j_y \hat{\mathbf{y}}) \quad (35)$$

où  $\hat{\mathbf{x}}$  et  $\hat{\mathbf{y}}$  sont deux vecteurs unitaires le long des axes  $x$  et  $y$ . On repère la position  $\mathbf{r}_j$  d'un atome par son écart  $\mathbf{u}_j$  par rapport à la position d'équilibre  $\mathbf{R}_j$  :

$$\mathbf{r}_j = \mathbf{R}_j + \mathbf{u}_j. \quad (36)$$

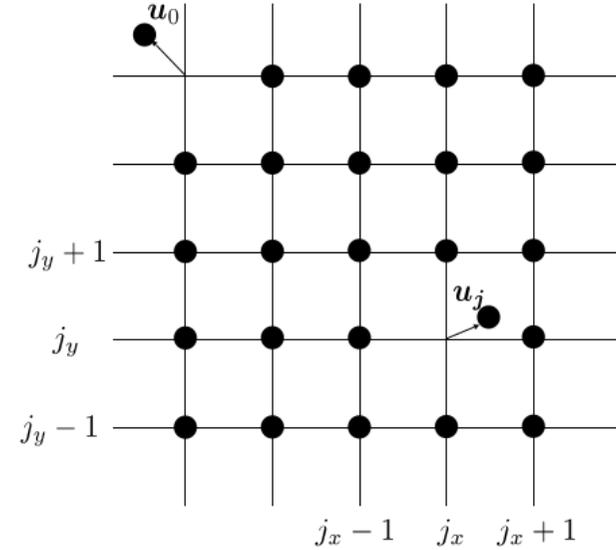


FIGURE 4. Réseau à deux dimensions, avec les positions d'équilibre  $\mathbf{R}_j$ ,  $\mathbf{j} = (j_x, j_y)$  et l'écart  $\mathbf{u}_j$ .

Dans l'hypothèse  $|\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_{j'}| \ll a$  si  $\mathbf{j}$  et  $\mathbf{j}'$  sont proches voisins, on peut ramener l'énergie d'interaction entre atomes à un hamiltonien quadratique en les  $\mathbf{u}_j$ , et les modes propres (phonons) peuvent alors être déterminés exactement, en particulier leur relation de dispersion  $\omega_{\mathbf{q}}$ .

L'équipartition de l'énergie appliquée à chaque mode conduit à un résultat qui a la même structure que le résultat uni-dimensionnel (22) :

$$\langle (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_0)^2 \rangle \sim \frac{k_B T}{m} \frac{8}{N^2} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\sin^2(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j / 2)}{\omega_{\mathbf{q}}^2}, \quad (37)$$

où l'on a introduit un facteur multiplicatif 2 pour tenir compte des deux directions d'espace.

Le passage d'une somme discrète à une intégrale sur  $\mathbf{q}$  se fait par :

$$(2D) : \quad \sum_{\mathbf{q}} \rightarrow \left( \frac{Na}{2\pi} \right)^2 \int_{\text{ZB}} d^2q, \quad (38)$$

où l'intégrale porte sur toute la zone de Brillouin (ZB) :  $-\pi/a < q_x, q_y \leq \pi/a$ . En remplaçant  $\omega_{\mathbf{q}}$  par  $c|q|$ , ce qui est possible car – comme dans le cas 1D – ce seront les petites valeurs de  $q$  ( $q \ll 1/a$ ) qui auront une contribution dominante<sup>1</sup>, on arrive à :

$$(2D) : \quad \langle (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_0)^2 \rangle \sim \frac{k_B T}{\kappa} \frac{2}{\pi^2} \int_{\text{ZB}} \frac{\sin^2(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j/2)}{q^2} d^2q. \quad (39)$$

On a posé  $mc^2 = \kappa a^2$  où  $\kappa$  est (comme à une dimension) une estimation de la raideur associée à la force de rappel d'un atome vers sa position d'équilibre.

Comme pour le cas uni-dimensionnel, nous pouvons évaluer de manière approchée cette intégrale en la coupant en deux parties :

— Pour  $q \gtrsim \pi/R_j$ , en remplaçant le  $\sin^2(\dots)$  par sa valeur moyenne 1/2, on arrive à

$$\approx \frac{1}{\pi^2} \frac{k_B T}{\kappa} \int_{\pi/R_j}^{\pi/a} \frac{1}{q^2} 2\pi q dq \approx \frac{2}{\pi} \frac{k_B T}{\kappa} \log(R_j/a). \quad (40)$$

— Pour  $q \lesssim \pi/R_j$ , en remplaçant le sinus par son argument, on trouve

$$\sim \frac{1}{2\pi^2} \frac{k_B T}{\kappa} R_j^2 \int_0^{\pi/R_j} \pi q dq \sim \frac{\pi}{4} \frac{k_B T}{\kappa}. \quad (41)$$

La contribution principale provient donc du premier terme qui diverge logarithmiquement avec la distance  $R_j$  :

$$\langle (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_0)^2 \rangle \sim \frac{2}{\pi} \frac{k_B T}{\kappa} \log \left( \frac{R_j}{a} \right). \quad (42)$$

Comme dans le cas 1D, cette divergence provient des moments  $q$  de l'ordre de  $1/R_j$ , c'est-à-dire des grandes longueurs d'onde, de l'ordre de la distance  $R_j$ .

1. En toute rigueur, il faudrait prendre en compte ici le fait que la vitesse du son n'est pas la même pour les vibrations longitudinales et les vibrations transverses. Comme nous ne nous intéressons ici qu'aux lois d'échelle, nous omettons ce raffinement.

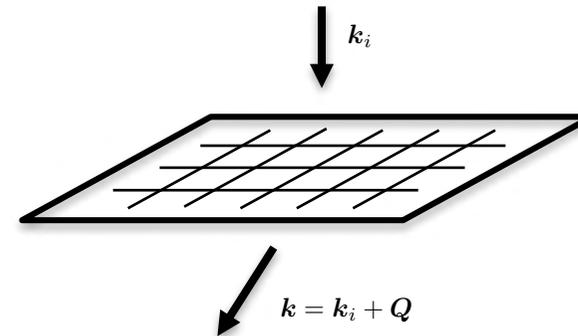


FIGURE 5. Diffraction de Bragg d'une onde incidente de vecteur d'onde  $\mathbf{k}_i$  vers un vecteur d'onde final  $\mathbf{k}$ . On a choisi ici  $\mathbf{k}_i$  orthogonal au plan des atomes. L'intensité  $I(\mathbf{k})$  révèle un possible ordre ou quasi-ordre cristallin.

## 2-2 Un paramètre d'ordre : les pics de Bragg

Pour tester expérimentalement si un ordre cristallin est présent ou non dans un échantillon, une méthode standard consiste à diffracter sur cet échantillon une onde (photons, électrons, neutrons) de vecteur d'onde incident  $\mathbf{k}_i$ . Pour un cristal caractérisé par des vecteurs de base  $\mathbf{a}_\alpha$ , avec  $\alpha = 1, 2$  à deux dimensions, on s'attend à observer des pics de Bragg dans des directions de vecteur d'onde  $\mathbf{k}$  tels que

$$\mathbf{k} = \mathbf{k}_i + \mathbf{Q}, \quad (43)$$

où  $\mathbf{Q}$  est un vecteur du réseau réciproque défini par

$$\mathbf{Q} \cdot \mathbf{a}_\alpha = 0 \quad \text{modulo } 2\pi. \quad (44)$$

La variation de l'intensité diffractée autour de  $\mathbf{Q}$  permet alors de révéler l'ordre ou l'absence d'ordre cristallin.

Pour simplifier les notations, supposons que  $\mathbf{k}_i$  est orthogonal au plan des atomes (figure 5). L'intensité diffractée dans la direction  $\mathbf{k}$  est donc, après moyenne sur les fluctuations thermiques des écarts  $\mathbf{u}_j$  par rapport

aux positions d'équilibre  $\mathbf{R}_j$  :

$$\begin{aligned} I(\mathbf{k}) &\propto \left\langle \left| \sum_j e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j+\mathbf{u}_j)} \right|^2 \right\rangle \\ &\propto \sum_{j,j'} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j-\mathbf{R}_{j'})} \langle e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{u}_j-\mathbf{u}_{j'})} \rangle \end{aligned} \quad (45)$$

Après décomposition sur les modes de phonons, le déplacement relatif  $\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_{j'}$  s'écrit comme une somme de variables indépendantes. On peut donc utiliser le résultat classique pour une variable gaussienne  $\langle e^{i\theta} \rangle = e^{-(\theta^2)/2}$ , ce qui donne :

$$\begin{aligned} \langle \exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_{j'})] \rangle &= \exp\left[-\frac{k^2}{4}\langle(\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_{j'})^2\rangle\right] \\ &\approx \exp\left[-\frac{k^2 k_B T}{2\pi\kappa} \ln\left(\frac{R_j}{a}\right)\right] \\ &\approx \left(\frac{a}{R_{jj'}}\right)^\eta \end{aligned} \quad (46)$$

où l'exposant  $\eta$  est définie par :

$$\eta = \frac{k^2 k_B T}{2\pi\kappa}. \quad (47)$$

Rappelons que la raideur  $\kappa$  qui apparaît ici décrit de manière heuristique le potentiel de liaison entre atomes. Un traitement plus rigoureux fait apparaître les *constantes élastiques de Lamé* du solide (NELSON & HALPERIN 1979).

En absence de fluctuations thermiques,  $\eta = 0$ , tous les coefficients  $\langle e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{u}_j-\mathbf{u}_{j'})} \rangle$  sont égaux à 1 et l'intensité diffractée

$$I(\mathbf{k}) \propto \sum_{j,j'} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j-\mathbf{R}_{j'})} \quad (48)$$

est constituée de pics de Dirac (à la limite d'un réseau infini) localisés sur les vecteurs du réseau réciproque  $\mathbf{Q}$ .

En présence de fluctuations thermiques, les coefficients  $\langle e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{u}_j-\mathbf{u}_{j'})} \rangle$  décroissent algébriquement avec la distance  $R_{jj'}$  avec l'exposant  $\eta$ . Les

pics de Bragg sont alors élargis, puisque l'intensité varie au voisinage d'un vecteur  $\mathbf{Q}$  donné comme

$$\begin{aligned} I(\mathbf{k}) &\propto \sum_{j,j'} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_j-\mathbf{R}_{j'})} \left(\frac{a}{R_{jj'}}\right)^\eta \\ &\propto \int e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{Q})\cdot\mathbf{R}} \left(\frac{a}{R}\right)^\eta d^2R \end{aligned} \quad (49)$$

ou encore

$$I(\mathbf{k}) \propto |\mathbf{k} - \mathbf{Q}|^{\eta-2}. \quad (50)$$

Notons que ce résultat est notablement différent de celui qu'on aurait pour une assemblée d'atomes complètement désordonnée. Dans ce dernier cas, il n'y aurait aucune structure marquée dans une direction  $\mathbf{Q}$  donnée. Ici au contraire, on continue à observer une diffraction importante dans des directions privilégiées de l'espace, mais la structure du profil diffracté est moins "piqué" que pour un ordre cristallin parfait. On parle ainsi d'un quasi-ordre cristallin (NELSON & HALPERIN 1979; STRANDBURG 1992).

### 2-3 Le cristal tri-dimensionnel

Pour comprendre la spécificité des problèmes de dimension réduite, il est intéressant de reprendre le traitement qui précède pour un cristal tri-dimensionnel. Le point de départ est inchangé : après avoir introduit les écarts  $\mathbf{u}_j$  aux positions d'équilibre  $\mathbf{R}_j$  avec ici  $\mathbf{j} = (j_x, j_y, j_z)$ , on se ramène là encore à un hamiltonien quadratique en les  $\mathbf{u}_j$ . La décomposition en modes propres et le théorème d'équipartition de l'énergie conduisent à une estimation de la variance de l'écart relatif entre l'atome 0 et l'atome  $j$  :

$$\langle(\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_0)^2\rangle \sim \frac{k_B T}{m} \frac{12}{N^3} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\sin^2(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j/2)}{\omega_{\mathbf{q}}^2}, \quad (51)$$

pour un cristal de  $N \times N \times N$  sites, avec des conditions aux limites périodiques.

Le passage d'une somme discrète à une intégrale donne alors

$$\begin{aligned} \langle (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_0)^2 \rangle &\sim \frac{k_B T}{m} \frac{12}{N^3} \left( \frac{Na}{2\pi} \right)^3 \int_{\text{ZB}} \frac{\sin^2(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j/2)}{\omega_q^2} d^3q \\ &\sim \frac{3}{2\pi^3} \frac{ak_B T}{\kappa} \int_{\text{ZB}} \frac{\sin^2(\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_j/2)}{q^2} d^3q, \end{aligned} \quad (52)$$

où l'on a comme avant remplacé la pulsation  $\omega_q$  par son expression linéarisée<sup>2</sup>  $cq$ , et introduit une raideur caractéristique  $\kappa$  telle que  $mc^2 = \kappa a^2$ .

Appliquons à cette intégrale le même traitement qu'à une et deux dimensions, en coupant le domaine d'intégration en deux parties :

— Pour  $q \gtrsim \pi/R_j$ , la substitution du  $\sin^2$  par sa valeur moyenne 1/2 donne

$$\sim \frac{3}{2\pi^3} \frac{ak_B T}{\kappa} \int_{\pi/R_j}^{\pi/a} \frac{1}{2q^2} 4\pi q^2 dq \sim \frac{k_B T}{\kappa}. \quad (53)$$

— Pour  $q \lesssim \pi/R_j$ , la substitution du  $\sin$  par son argument donne

$$\sim \frac{k_B T}{\kappa} \frac{a}{R_j}. \quad (54)$$

Comme à deux dimensions, la contribution du premier terme est dominante :

$$\langle (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_0)^2 \rangle \sim \frac{k_B T}{\kappa}, \quad (55)$$

mais la forme de cette contribution est très différente : elle est désormais dominée par les grandes valeurs de  $q$ , typiquement  $q \sim 1/a$ , c'est-à-dire les longueurs d'onde de l'ordre de la maille du réseau. Une conséquence essentielle est que cette contribution est indépendante de la distance  $R_j$ . Cela entraîne qu'un ordre cristallin peut exister pourvu que ce terme soit petit devant le carré de la maille du réseau

$$\frac{k_B T}{\kappa} \ll a^2. \quad (56)$$

2. En fait, cette linéarisation n'est pas aussi bien justifiée qu'à 1D ou 2D, car les modes de grand vecteur d'onde ont une contribution significative à 3D, comme nous le verrons un peu plus loin. Mais comme nous ne cherchons ici que des lois d'échelle, cette approximation  $\omega_q \approx cq$  sera suffisante.

Quand cette condition est vérifiée, la position de l'atome  $j$  sera bien définie par rapport à celle de l'atome 0 à l'échelle de la maille cristalline, quelle que soit la distance  $R_j$  qui sépare ces deux sites. Plus précisément, le critère de Lindeman indique que l'ordre cristallin sera possible tant que (NELSON 2002)

$$[\langle (\mathbf{u}_j - \mathbf{u}_0)^2 \rangle]^{1/2} \sim 0.15 - 0.30 a \quad (57)$$

## 2-4 Le théorème de Mermin–Wagner–Hohenberg

Les conclusions auxquelles nous venons d'arriver sur l'existence ou non d'un ordre cristallin en fonction de la dimension d'espace ne sont qu'un cas particulier d'un résultat très général connu sous le nom de théorème de Mermin–Wagner–Hohenberg. Nous allons maintenant énoncer ce théorème, que nous retrouverons dans la suite de ce cours dans un autre cas, celui de l'existence ou non d'une condensation de Bose–Einstein.

Ce théorème a été prouvé par MERMIN & WAGNER (1966) et indépendamment<sup>3</sup> par HOHENBERG (1967). L'article de Mermin et Wagner s'intéressait au ferromagnétisme ou à l'antiferromagnétisme dans des systèmes 1D ou 2D, alors qu'Hohenberg prenait pour exemple le liquide de Bose ou les paires de Cooper dans un système supraconducteur. Leur démarche était similaire : partant d'une inégalité établie par BOGOLIUBOV (1962), ils arrivaient à un résultat qui peut se formuler de la manière générale suivante :

*Pour un système de dimension inférieure ou égale à 2 et des interactions à courte portée, il ne peut pas y avoir de brisure spontanée d'une symétrie continue à température non nulle.*

Nous ne démontrerons pas ce théorème dans le cas général [voir par exemple HERBUT (2007) ou MUDRY (2014)], mais nous allons insister sur quelques points importants :

— Les interactions doivent être à courte portée. Si la portée est infinie, on se retrouve dans une situation où la théorie de champ moyen peut

3. Ces deux articles ont été soumis à une semaine d'intervalle. L'article de Mermin et Wagner est paru en 1966 alors que l'article de Hohenberg est paru en 1967 ; toutefois Mermin et Wagner avaient connaissance du travail de Hohenberg puisqu'ils le citent explicitement en tant que *unpublished*.

s'appliquer et les transitions de phase "standard" prévues par cette théorie peuvent se produire, quelle que soit la dimension d'espace.

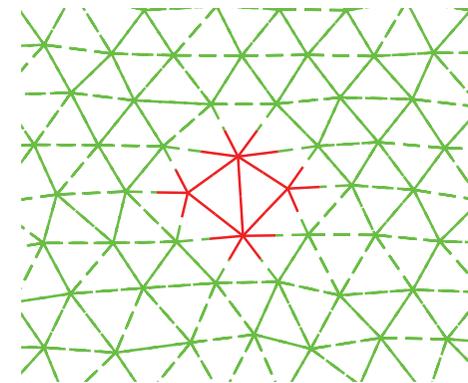
- On s'intéresse à la brisure d'une symétrie continue : c'est par exemple le cas de la symétrie de translation qui nous a intéressés dans ce chapitre. Ce peut également être la symétrie  $U(1)$  associée au choix de la phase d'une fonction d'onde macroscopique, dont la brisure correspond à la condensation de Bose–Einstein. En revanche, le théorème ne s'applique pas tel quel aux symétries discrètes. Par exemple, pour le modèle d'Ising où des spins  $\sigma_z = \pm 1$  sont placés sur un réseau avec des interactions entre proches voisins, il y a une transition de phase pour une température critique  $T_c > 0$  dans le cas bi-dimensionnel (ONSAGER 1944).
- On parle ici de transition à  $T \neq 0$ . À température nulle, le gaz de Bose 2D quantique en interaction est condensé [SCHICK (1971) et POPOV (1972) et plus récemment PILATI, BORONAT et al. (2005) et MORA & CASTIN (2009)]. Nous reviendrons sur ce problème au chapitre 6.

### 3 Les cristaux bi-dimensionnels au laboratoire

Dans leur article de 1973, Kosterlitz et Thouless avaient suggéré d'appliquer leur modèle théorique de transition de phase induite par des défauts au cas de cristaux bidimensionnels. Toutefois, la situation est plus complexe que ce que nous rencontrerons plus tard dans ce cours pour les superfluides, car deux transitions successives se produisent pour passer du cristal triangulaire parfait attendu à température nulle à l'état liquide pour les hautes températures. La théorie quantitative de la fusion à deux dimensions a été faite par HALPERIN & NELSON (1978a), HALPERIN & NELSON (1978b), NELSON & HALPERIN (1979) et YOUNG (1979) [on parle de la théorie KTHNY] et les principaux résultats sont détaillés dans l'article de revue de STRANDBURG (1988).

#### 3-1 Scénario pour la fusion d'un cristal 2D

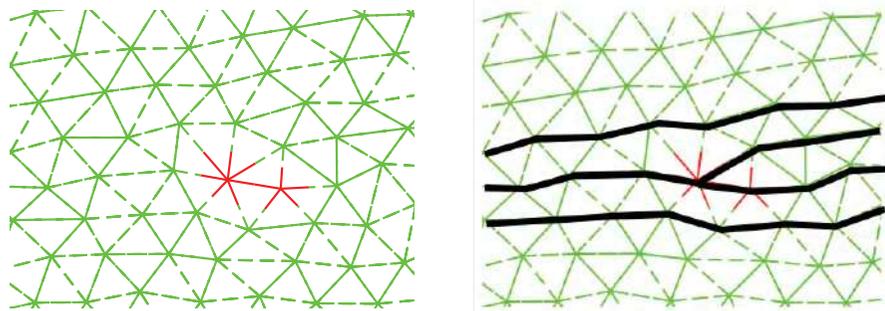
Résumons quelques points saillants du modèle KTHNY qui sont observés expérimentalement dans des systèmes colloïdaux [voir par exemple



**FIGURE 6.** Un défaut local dans une assemblée de particules présentant un quasi-ordre translationnel à longue portée. Ce défaut peut être vu comme une paire de dislocations, avec deux sites  $A_5$  (à cinq voisins) et deux sites  $A_7$  (à sept voisins). Figure extraite de WIERSCHEM & MANOUSAKIS (2011).

DEUTSCHLÄNDER, DILLMANN et al. (2015) et refs. in]. Ces points ont également été validés par des simulations récentes menées sur un gaz de  $10^5$  particules interagissant via un potentiel de Lennard–Jones (WIERSCHEM & MANOUSAKIS 2011).

- À température nulle, on a un cristal triangulaire parfait (au moins si on néglige les fluctuations quantiques) qui correspond à l'arrangement le plus dense. Dans ce cristal, chaque particule a exactement 6 voisins à égale distance.
- À très basse température, le réseau cristallin est presque triangulaire, les phonons détruisant l'ordre à longue portée comme nous l'avons vu plus haut. On a donc un quasi-ordre translationnel, avec une croissance logarithmique de l'écart quadratique moyen  $\langle (u_i - u_j)^2 \rangle$  avec la distance  $R_{ij}$ , ce qui induit une décroissance algébrique du paramètre d'ordre (pics de Bragg), comme nous l'avons vu plus haut. On a également un véritable ordre orientationnel, c'est-à-dire que la fonction de corrélation de l'orientation locale du cristal  $\theta(r)$  ne tend pas vers 0 à l'infini. Il peut y avoir des défauts locaux, comme celui indiqué sur la



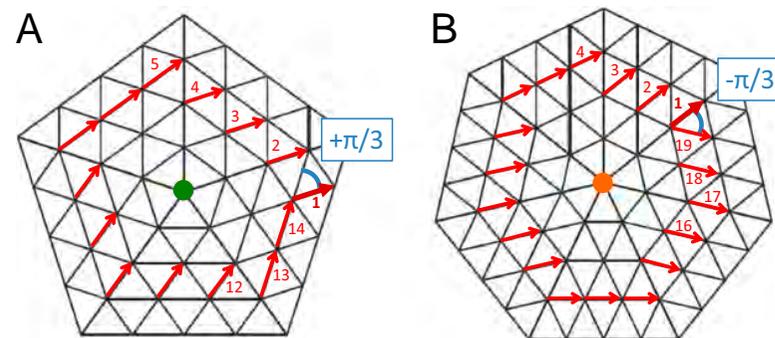
**FIGURE 7.** Dislocation isolée composée d'un site  $A_5$  et d'un site  $A_7$ , ce qui revient à insérer une demi-ligne supplémentaire d'atomes. Figure extraite de WIERSCHEM & MANOUSAKIS (2011).

figure 6, mais qui ne change pas la conclusion générale à laquelle nous avons abouti par notre étude des modes de phonons.

- Au dessus d'une température  $T_m$ , des défauts appelés *dislocations* ont une probabilité significative d'apparaître. Un exemple de dislocation est représenté sur la figure 7. Ce type de défaut est créé par une paire  $A_5 - A_7$ , c'est-à-dire un site à 5 voisins contigu d'un site à 7 voisins. La présence d'une dislocation revient à ajouter une demi-ligne d'atomes (figure 7, droite).

Cette phase intermédiaire est appelée *phase hexatique*. Dans cette phase, la présence de dislocations vient détruire le quasi-ordre translationnel et transforme la décroissance du paramètre d'ordre en une loi exponentielle. En effet, l'ajout d'une demi ligne entre les deux sites  $R_i$  et  $R_j$  change la distance  $R_{ij}$  d'une quantité qui est de l'ordre de la maille du réseau. On s'attend donc à une décorrélation complète des écarts  $u_j$  et  $u_j$  dès que  $R_{ij}$  est de l'ordre de la distance moyenne entre dislocations.

Toutefois, on constate sur l'image de droite de la figure 6 qu'une dislocation ne détruit pas complètement l'ordre orientationnel. En dépit de l'ajout de la demi-ligne d'atomes, les axes du réseau restent approximativement les mêmes (en fait, la fonction de corrélation de l'orientation locale  $\theta(r)$  décroît algébriquement dans ce régime).



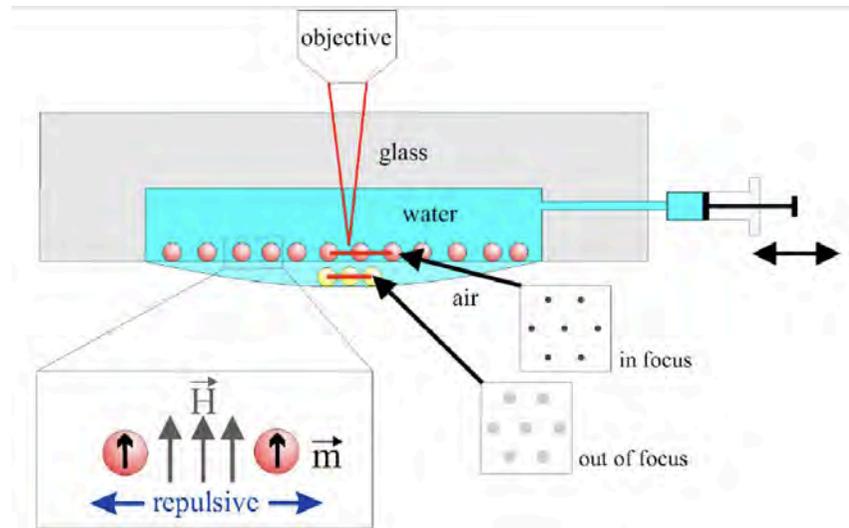
**FIGURE 8.** Disclinations correspondant à un défaut de type  $A_5$  ou  $A_7$ . La prolifération de ce type de défaut induit une perte de l'ordre orientationnel. Figure extraite de DEUTSCHLÄNDER, DILLMANN et al. (2015).

- Au dessus d'une deuxième température critique  $T_i$ , les deux membres  $A_5$  et  $A_7$  des dislocations peuvent s'éloigner arbitrairement loin l'un de l'autre. Or, un site  $A_5$  isolé ou un site  $A_7$  isolé, un défaut appelé *disclination*, change l'orientation du cristal, comme on le voit sur la figure 8. On perd alors également l'ordre orientationnel, la fonction de corrélation de l'orientation  $\theta(r)$  décroissant alors exponentiellement avec la distance.

### 3-2 Mise en évidence sur des systèmes colloïdaux

La mise en évidence expérimentale du scénario KTHNY a fait l'objet de nombreux travaux depuis sa proposition. Intéressons-nous ici aux résultats récents obtenus par le groupe de Constance, dirigé par Peter Keim et Georg Maret sur des monocouches colloïdales. Ces expériences sont menées sur des billes de polystyrène de diamètre 4.5 microns immergées dans de l'eau retenue par capillarité dans une cellule en verre (figure 9), avec une interface eau-air pour la surface inférieure (DEUTSCHLÄNDER, PUERTAS et al. 2014; DEUTSCHLÄNDER, DILLMANN et al. 2015).

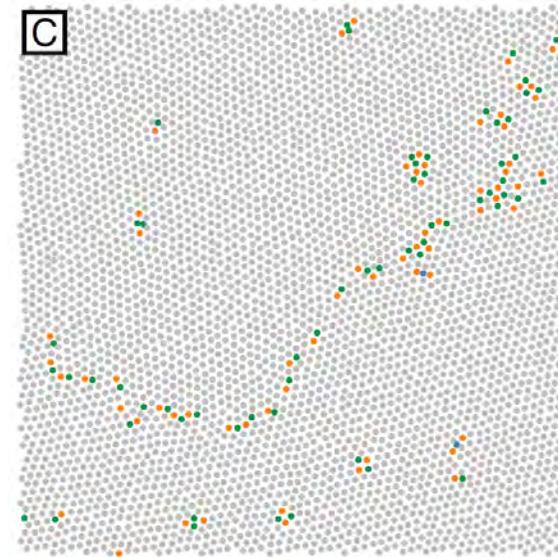
La densité des billes est de 1.7 et elles s'accumulent donc au fond de l'eau, à l'interface eau-air. Elle forment une monocouche d'environ  $10^5$  par-



**FIGURE 9.** Montage expérimental utilisé dans les expériences de Constance. Une goutte d'eau de diamètre 8mm est suspendue par capillarité. Des billes de polystyrène dopées par des nanoparticules d'oxyde de fer s'accumulent sur le plan inférieur, à l'interface eau-air. Un champ magnétique vertical induit un moment magnétique dans les billes, ce qui crée une interaction répulsive entre billes. Figure extraite de KEIM, MARET *et al.* (2007).

ticules, parmi lesquelles on sélectionne celles situées dans une fenêtre de  $1\text{ mm} \times 1\text{ mm}$  (figure 10). Il y a environ 4000 billes dans cette fenêtre et on suit la position de chacune grâce à un système d'imagerie de résolution sub-micrométrique.

Ces billes sont dopées avec des nanoparticules d'oxyde de fer, ce qui les rend paramagnétiques. En appliquant un champ magnétique perpendiculaire au plan de la cellule, on induit dans chaque bille un dipôle magnétique. Comme ces dipôles verticaux sont orthogonaux aux segments joignant deux billes, l'interaction dipôle-dipôle est répulsive et isotrope dans le plan; elle tend donc à former un ordre cristallin triangulaire. Pour les paramètres expérimentaux de l'expérience de Constance, la distance moyenne entre billes est de  $13\ \mu\text{m}$ . L'expérience est menée à température



**FIGURE 10.** Identification de défauts dans une assemblée d'environ 4000 billes paramagnétiques. Cette figure a été obtenue pour le rapport  $\Gamma = 98$ , après une trempe de pente  $\dot{\Gamma} = 1/(19\text{ jours})$ . Figure extraite de DEUTSCHLÄNDER, DILLMANN *et al.* (2015).

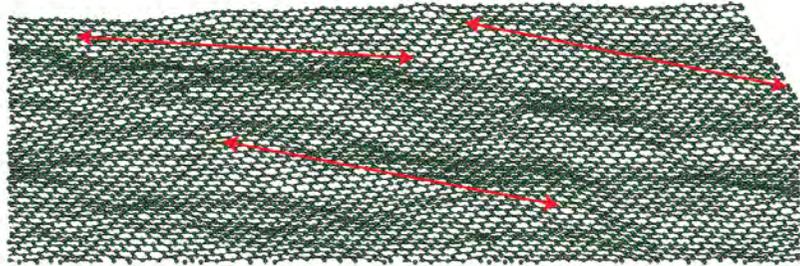
ambiante avec un contrôle de l'horizontalité de l'échantillon au microradian près. Les temps de thermalisation peuvent atteindre le mois, pendant lequel on suit les trajectoires des billes toutes les secondes.

Une image typique est montrée sur la figure 10 où l'on a colorié les défauts apparaissant dans la distribution spatiale des billes. Le paramètre de contrôle de l'expérience est le rapport

$$\Gamma = \frac{E_{\text{mag}}}{k_{\text{B}}T}, \quad (58)$$

entre l'énergie magnétique de deux dipôles voisins et l'énergie thermique caractéristique  $k_{\text{B}}T$ . Les deux transitions indiquées plus haut sont obtenues pour (DEUTSCHLÄNDER, PUERTAS *et al.* 2014) :

—  $\Gamma_m = 70.3$  pour la transition cristal/hexatique,



**FIGURE 11.** Simulation numérique d'une surface de graphène à 300K, avec  $N = 8640$  atomes, montrant que la surface est plissée sous l'effet des fluctuations thermiques. Les flèches ont une longueur de 8 nm. Figure extraite de FASOLINO, LOS et al. (2007).

—  $\Gamma_i = 67.3$  pour la transition hexatique/isotope,

en bon accord avec les valeurs obtenues par simulation numérique.

En fait, ces expériences d'une richesse remarquable permettent non seulement de valider les prédictions concernant l'état d'équilibre de matériaux bi-dimensionnels, mais aussi d'étudier l'évolution temporelle du système quand on croise les deux transitions de phase à vitesse  $\dot{\Gamma}$  finie. Il s'agit du problème de Kibble–Zurek, qui vise à caractériser le nombre de défauts engendrés en fonction de la vitesse de trempe (DEUTSCHLÄNDER, DILLMANN et al. 2015). Une autre étude récente sur ces systèmes a consisté à mesurer les fluctuations de densité à grande échelle spatiale (ILLING, FRITSCHI et al. 2017).

### 3-3 Et le graphène ?

L'exemple le plus célèbre d'un ordre cristallin à deux dimensions est sans conteste le graphène (CASTRO NETO, GUINEA et al. 2009). On peut donc s'interroger sur la compatibilité entre l'existence de ces feuilles d'atomes de carbone et le théorème de Mermin–Wagner–Hohenberg. On trouve dans la littérature deux classes de réponse, d'ailleurs compatibles :

— On peut remarquer que compte tenu de la raideur des liens dans le

graphène, on trouve une valeur gigantesque pour la distance caractéristique sur laquelle la perte de l'ordre cristallin devrait se manifester (THOMPSON-FLAGG, MOURA et al. 2009). Les effets de taille finie suffisent donc à eux seuls à expliquer l'ordre apparent dans les échantillons de laboratoire.

- La surface du graphène n'est pas plane : elle est plissée (figure 11) et les déviations par rapport au plan peuvent jouer, au moins au niveau fondamental, un rôle important (FASOLINO, LOS et al. 2007 ; SCHOELZ, XU et al. 2015). Le couplage non linéaire entre fluctuations de hauteur et déplacements parallèles à la surface change la nature des interactions en leur donnant une composante effective à longue portée, ce qui peut invalider le théorème de Mermin–Wagner–Hohenberg.

## Références

- ASHCROFT, N. W. & N. D. MERMIN (1976), *Solid State Physics*, New York : Holt, Rinehardt et Winston.
- BOGOLIUBOV, NN (1962), in *Physik. Abhandl. Sowjetunion* 6, p. 1–113–229.
- CASTRO NETO, A. H., F. GUINEA, N. M. R. PERES, K. S. NOVOSELOV & A. K. GEIM (2009), « The electronic properties of graphene », in *Rev. Mod. Phys.* 81 (1), p. 109–162.
- DEUTSCHLÄNDER, Sven, Patrick DILLMANN, Georg MARET & Peter KEIM (2015), « Kibble–Zurek mechanism in colloidal monolayers », in *Proceedings of the National Academy of Sciences* 112.22, p. 6925–6930.
- DEUTSCHLÄNDER, Sven, Antonio M PUERTAS, Georg MARET & Peter KEIM (2014), « Specific heat in two-dimensional melting », in *Physical review letters* 113.12, p. 127801.
- FASOLINO, Annalisa, JH LOS & Mikhail I KATSNELSON (2007), « Intrinsic ripples in graphene », in *Nature materials* 6.11, p. 858–861.
- HALPERIN, B. I. & David R. NELSON (1978a), « Theory of Two-Dimensional Melting », in *Phys. Rev. Lett.* 41.2, p. 121–124.
- (1978b), « Theory of Two-Dimensional Melting. », in *Phys. Rev. Lett.* 41 (7), p. 519–519.
- HERBUT, Igor (2007), *A modern approach to critical phenomena*, Cambridge University Press.

- HOHENBERG, P. C. (1967), « Existence of Long-Range Order in One and Two Dimensions », in *Phys. Rev.* 158, p. 383.
- ILLING, Bernd, Sebastian FRITSCHI, Herbert KAISER, Christian L KLIX, Georg MARET & Peter KEIM (2017), « Mermin–Wagner fluctuations in 2D amorphous solids », in *Proceedings of the National Academy of Sciences* 114.8, p. 1856–1861.
- KEIM, Peter, Georg MARET & Hans-Hennig von GRÜNBERG (2007), « Frank's constant in the hexatic phase », in *Physical Review E* 75.3, p. 031402.
- KOSTERLITZ, J. M. & D. J. THOULESS (1973), « Ordering, metastability and phase transitions in two dimensional systems », in *J. Phys. C : Solid State Physics* 6, p. 1181.
- MERMIN, N. D. (1968), « Crystalline Order in Two Dimensions », in *Phys. Rev.* 176 (1), p. 250–254.
- (1979), « Erratum : Crystalline order in two dimensions », in *Phys. Rev. B* 20 (11), p. 4762–4762.
- (2006), « Erratum : Erratum : Crystalline order in two dimensions [Phys. Rev. 176, 250 (1968)] [Phys. Rev. B 20, 4762 (1979)] », in *Phys. Rev. B* 74 (14), p. 149902.
- MERMIN, N. D. & H. WAGNER (1966), « Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models », in *Phys. Rev. Lett.* 17, p. 1133.
- MORA, Christophe & Yvan CASTIN (2009), « Ground State Energy of the Two-Dimensional Weakly Interacting Bose Gas : First Correction Beyond Bogoliubov Theory », in *Phys. Rev. Lett.* 102.18, 180404, p. 180404.
- MUDRY, Christopher (2014), *Lecture notes on field theory in condensed matter physics*, World Scientific Publishing Co Inc.
- NELSON, David R (2002), *Defects and geometry in condensed matter physics*, Cambridge University Press.
- NELSON, David R. & B. I. HALPERIN (1979), « Dislocation-mediated melting in two dimensions », in *Phys. Rev. B* 19.5, p. 2457–2484.
- ONSAGER, Lars (1944), « Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition », in *Physical Review* 65.3-4, p. 117.
- PEIERLS, R. E. (1934), in *Helv. Phys. Acta* 7.Suppl. 2, p. 81.
- PEIERLS, R. E. (1935), « Quelques propriétés typiques des corps solides », in *Ann. Inst. Henri Poincaré* 5, p. 177.
- PILATI, S., J. BORONAT, J. CASUELLERAS & S. GIORGINI (2005), « Quantum Monte Carlo simulation of a two-dimensional Bose gas », in *Phys. Rev. A* 71, p. 023605.
- POPOV, V. N. (1972), « On the theory of the superfluidity of two- and one-dimensional bose systems », in *Theoretical and Mathematical Physics* 11.3, p. 565–573.
- SCHICK, M. (1971), « Two-Dimensional System of Hard-Core Bosons », in *Phys. Rev. A* 3, p. 1067.
- SCHOELZ, JK, P XU, V MEUNIER, P KUMAR, M NEEK-AMAL, PM THIBADO & FM PEETERS (2015), « Graphene ripples as a realization of a two-dimensional Ising model : A scanning tunneling microscope study », in *Physical Review B* 91.4, p. 045413.
- SONDHI, S. L., S. M. GIRVIN, J. P. CARINI & D. SHAHAR (1997), « Continuous quantum phase transitions », in *Rev. Mod. Phys.* 69 (1), p. 315–333.
- STRANDBURG, Katherine J. (1988), « Two-dimensional melting », in *Rev. Mod. Phys.* 60.1, p. 161–207.
- STRANDBURG, Katherine J, éd. (1992), *Bond-orientational order in condensed matter systems*, Springer Science & Business Media.
- THOMPSON-FLAGG, Rebecca C, Maria JB MOURA & M MARDER (2009), « Rippling of graphene », in *EPL (Europhysics Letters)* 85.4, p. 46002.
- WIERSCHEM, Keola & Efstratios MANOUSAKIS (2011), « Simulation of melting of two-dimensional Lennard-Jones solids », in *Phys. Rev. B* 83 (21), p. 214108.
- YOUNG, A. P. (1979), « Melting and the vector Coulomb gas in two dimensions », in *Phys. Rev. B* 19 (4), p. 1855–1866.
- ZIMAN, John M (1960), *Electrons and phonons : the theory of transport phenomena in solids*, Oxford university press.