Fluides quantiques de basse dimension et transition de Kosterlitz-Thouless

Jean Dalibard

Chaire *Atomes et rayonnement*

Année 2016-17

COLLÈGE DE FRANCE 1530

Un monde à deux dimensions

De la sociologie…

… à la physique

R. Peierls 1907-95

Que deviendraient les objets habituels de la physique, cristaux, aimants, si nous vivions dans un monde à deux dimensions?

Objets physiques 2D « du quotidien »

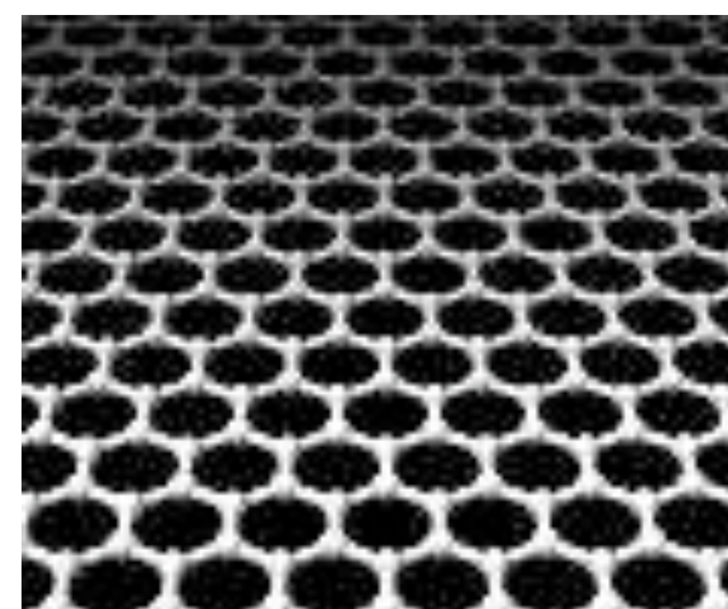
LANL

Puits quantiques en électronique, diodes laser, photodétecteurs, composants électroniques à bas bruit

Supraconducteurs à haute température critique

wikipedia

Graphène



wikipedia

Le résultat de Peierls

En basse dimension, les fluctuations thermiques ($T \neq 0$) et quantiques ($T = 0$) jouent un rôle accru, car les contraintes imposées par les positions des voisins sont moins importantes

Ces fluctuations empêchent l'apparition d'un ordre à longue portée similaire à celui rencontré à trois dimensions, comme l'ordre cristallin.

Mermin - Wagner - Hohenberg

(hypothèses précisées dans la suite du cours)

Ce résultat entraîne-t-il l'absence complète de transition de phase à deux dimensions pour les systèmes avec une symétrie continue ?

L’ordre topologique

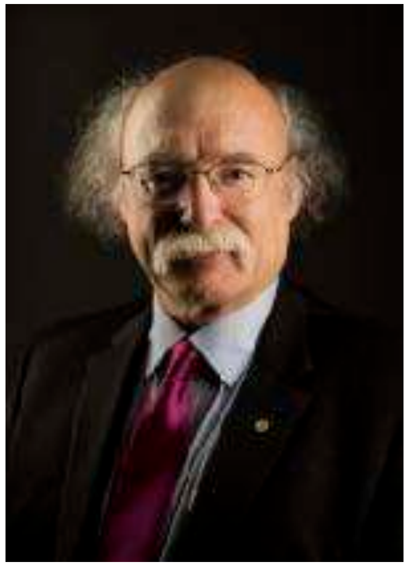
1973, Kosterlitz & Thouless :

Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems

Prix Nobel de physique 2016 pour « *les découvertes théoriques des transitions de phase topologiques et des phases topologiques de la matière* »

J.M. Kosterlitz

D.J. Thouless



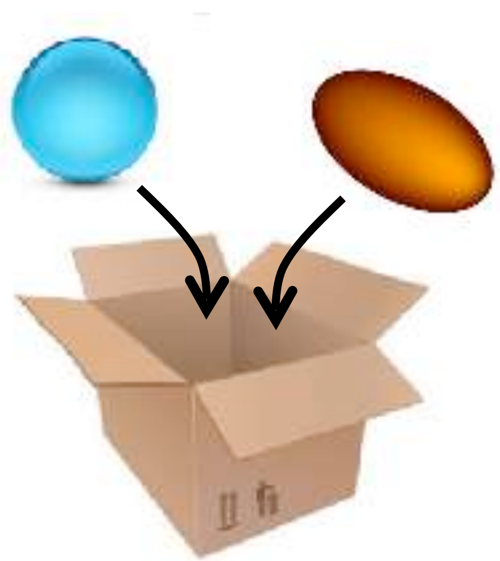
F.D. Haldane

Pourquoi la topologie joue-t-elle un rôle ?

Topologie : étude mathématique des formes, visant à établir une équivalence entre des objets qui peuvent se transformer l'un en l'autre par une déformation continue

Nombre g d'anses ou de poignées d'un objet :

« genre » d'une surface fermée dans l'espace 3D



$g = 0$

$g = 1$

$g = 2$

Un changement de classe ne peut se faire qu'en passant par une singularité :
protection topologique

Le lien entre topologie et géométrie

En géométrie, on peut définir en tout point d'une surface fermée régulière et orientable la courbure $\Omega(\boldsymbol{r})$, avec par exemple pour une sphère $\Omega = 1/R^2$

Le théorème de Gauss - Bonnet : $$\frac{1}{4\pi}\int_{\mathcal{S}} \Omega(\boldsymbol{r})\ \mathrm{d}^2 r = 1 - g$$

Figure extraite de la page web de Scientific American et réalisée par Keenan Crane (Columbia U.)

La protection topologique en physique

Si une quantité physique peut s'exprimer comme

$$\int_\Lambda \Omega(\lambda)\ \mathrm{d}\lambda$$

où Λ est une ligne ou une surface fermée, cette quantité peut être :

- quantifiée (par exemple, la conductivité de l'effet Hall quantique)
- protégée topologiquement (inchangée par une perturbation ou du désordre)

Important à la fois pour l'aspect conceptuel et l'aspect pratique

Réalisation de standards « macroscopiques » invariants d'un laboratoire à l'autre

Le gaz de Bose à deux dimensions

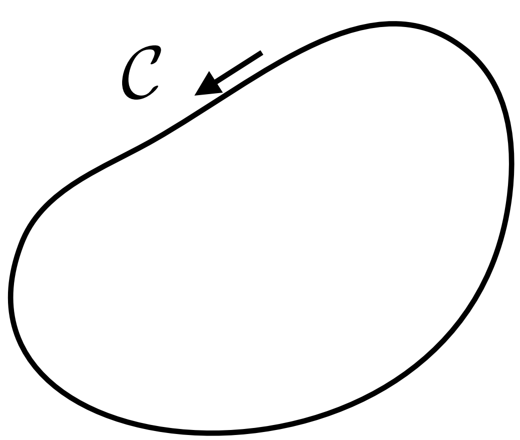
Fluide de particules identiques de masse m obéissant à la statistique de Bose-Einstein

On suppose que l'on peut décrire ce fluide par un champ « classique » complexe (onde de matière) :

$\boldsymbol{r} = (x, y)$ $\qquad\qquad \psi(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\rho(\boldsymbol{r})}\ \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(\boldsymbol{r})}$ $\qquad\qquad \rho(\boldsymbol{r})$: densité spatiale du fluide

La phase $\theta(\boldsymbol{r})$ est définie modulo 2π en tout point où la densité est non nulle

Invariant topologique sur un contour fermé du plan *xy* sur lequel $\rho(\boldsymbol{r})$ ne s'annule pas

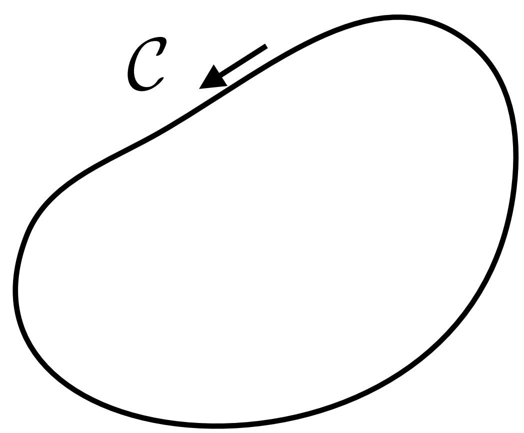


$$\oint_{\mathcal{C}} \boldsymbol{\nabla}\theta(\boldsymbol{r}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} = n\ 2\pi \qquad\qquad n \in \mathbb{Z}$$

Champ de vitesses du fluide et vortex

Fluide de Bose décrit par l'onde $\psi(\boldsymbol{r}) = \sqrt{\rho(\boldsymbol{r})}\, \mathrm{e}^{\mathrm{i}\theta(\boldsymbol{r})}$

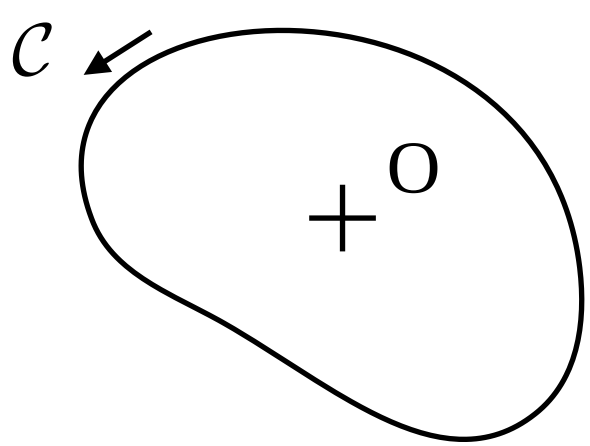
Le champ de vitesses du fluide se déduit de $\psi(\boldsymbol{r})$: $\qquad \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}) = \dfrac{\hbar}{m}\, \boldsymbol{\nabla}\theta(\boldsymbol{r})$



La circulation de la vitesse sur tout contour fermé sur lequel $\rho(\boldsymbol{r}) \neq 0$ est quantifiée

$$\oint_{\mathcal{C}} \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} = n\, \frac{2\pi\hbar}{m} \qquad\qquad n \in \mathbb{Z}$$

Un vortex (tourbillon) est associé à un zéro de $\psi(\boldsymbol{r})$, par exemple

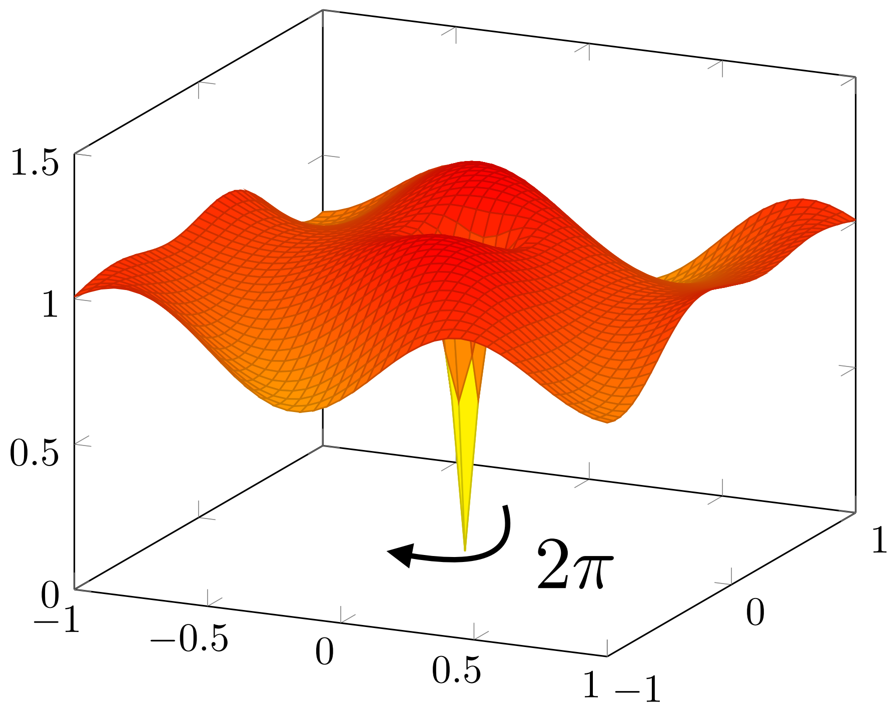


$$\psi(\boldsymbol{r}) = (x \pm \mathrm{i}y)\, F\left(x^2 + y^2\right) \qquad = r\, F(r^2)\, \mathrm{e}^{\pm i\varphi}$$

$$\longrightarrow \qquad \oint_{\mathcal{C}} \boldsymbol{v}(\boldsymbol{r}) \cdot \mathrm{d}\boldsymbol{r} = \pm \frac{2\pi\hbar}{m}$$

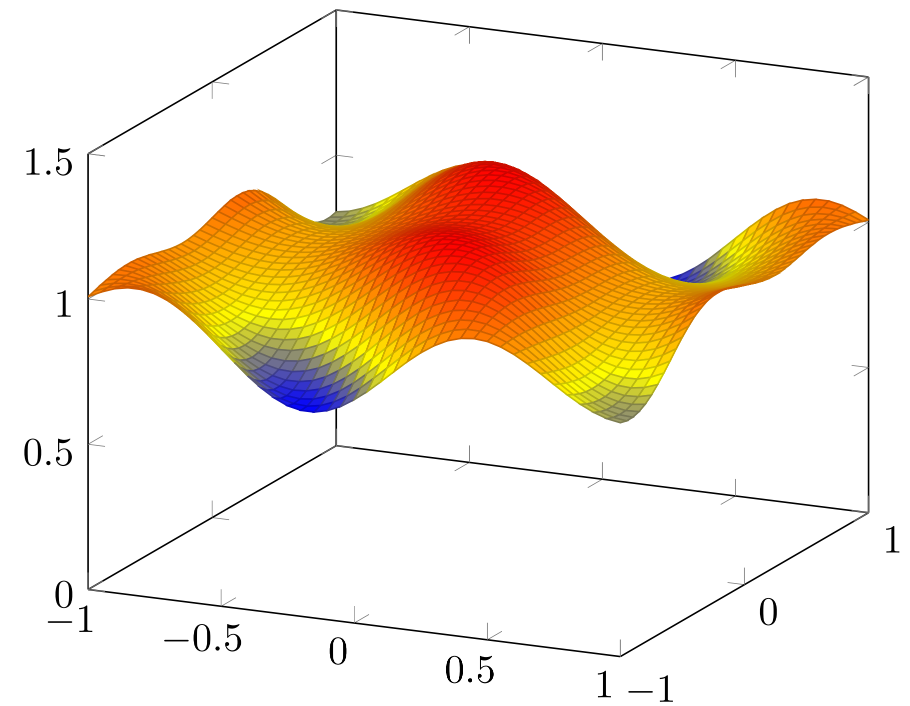
Protection topologique d’un vortex

Représentation graphique de $|\psi(\boldsymbol{r})|$

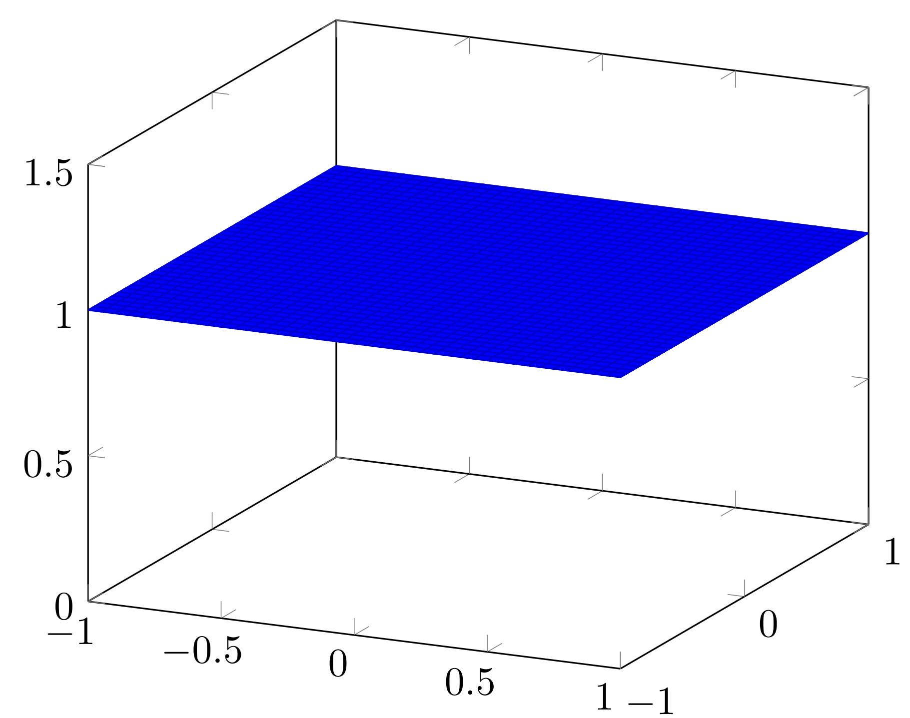


avec un vortex

topologiquement équivalents



sans vortex



La transition de Kosterlitz - Thouless

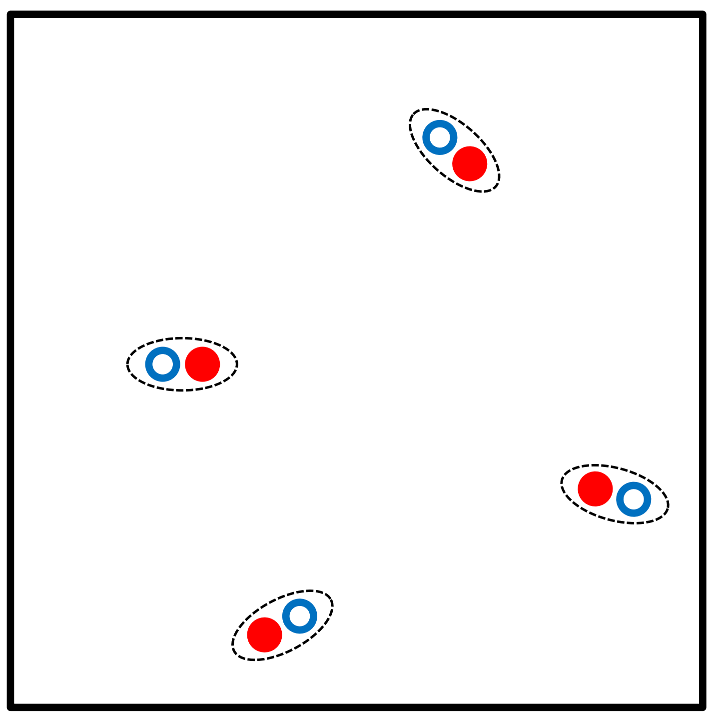
1971: Vadim Berezinskii (1935-1980)
1973: J. Michael Kosterlitz et David J. Thouless

mécanisme BKT

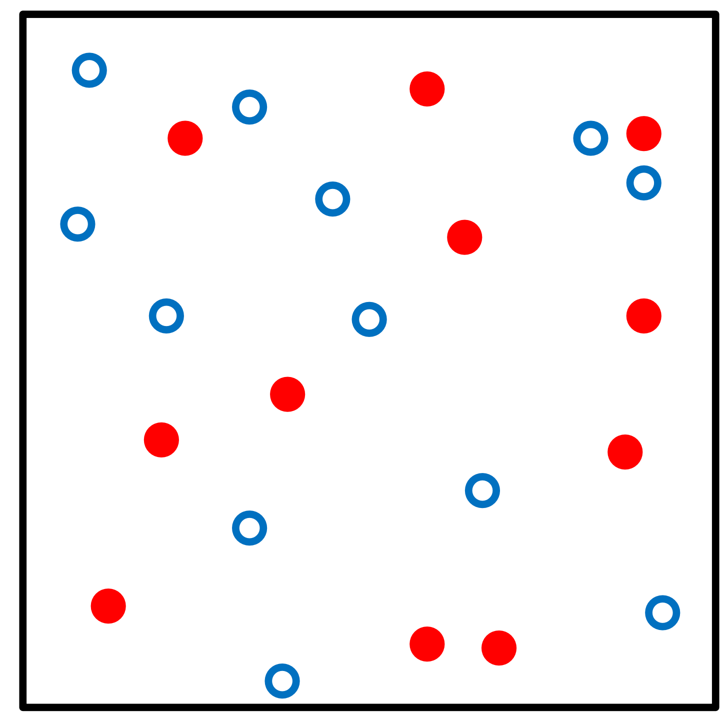
Transition de phase liée à l'appariement des défauts topologiques (vortex):

: vortex $+2\pi$

: vortex -2π



Basse température : pas vraiment un ordre usuel, mais un ordre topologique



Haute température : état désordonné

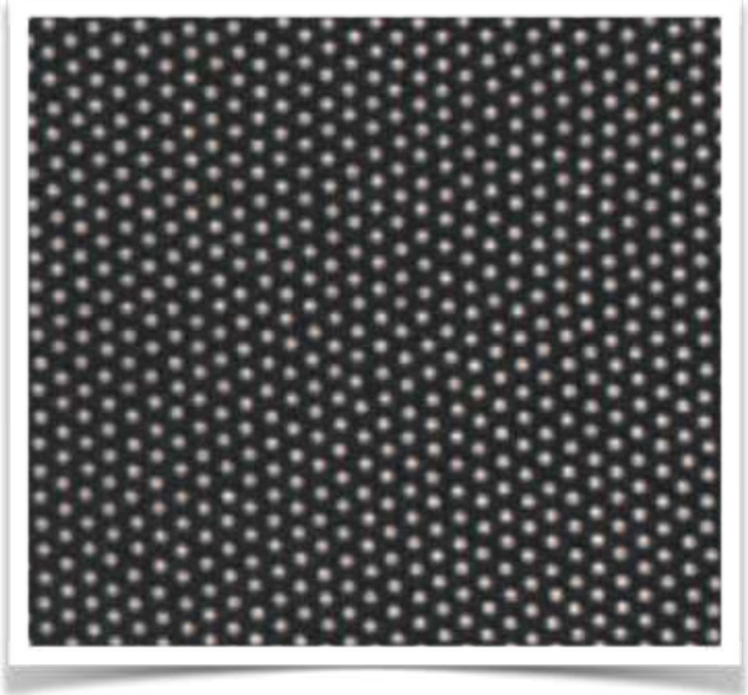
Les buts de cette série de cours

- Mettre en place les outils pour comprendre le résultat de Peierls

- Analyser le mécanisme BKT sur le cas du gaz de Bose et des vortex

- Discuter plusieurs exemples de systèmes bidimensionnels

  - Liquides colloïdaux
  - photons dans des cavités électromagnétiques
  - films d'hélium liquide
  - gaz atomiques (bosons ou fermions)
  - particules hybrides lumière-matière (polaritons de cavité)



Dillmann, Maret & Keim

Documents en ligne

Notes de cours et copies des diapositives :

http://www.phys.ens.fr/~dalibard/2017_CdF.html

Pour recevoir les annonces liées au cours, envoyer un courrier électronique à :

listes-diffusion.cdf@college-de-france.fr

avec pour sujet : subscribe chaire-ar.ipcdf

Séminaires

3 mai 2017 : Yves Couder, laboratoire Matière et Systèmes Complexes, Université Paris Diderot : *Une dualité onde-particule à échelle macroscopique : le rôle d'une mémoire*

10 mai 2017 : Klaus Moelmer, Aarhus University, Danemark : *A relaxed approach to quantum state engineering*

17 mai 2017 : Alexia Auffeves, Institut Néel – CNRS, Grenoble : *Contexts, systems, modalities: A physically realist framework for quantum mechanics*

24 mai 2017 : Thierry Giamarchi, Université de Genève, Suisse : *Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition and Sine-Gordon theory: from superconductors to cold atomic gases*

31 mai 2017 : Tilman Pfau, Université de Stuttgart, Allemagne : *Dipolar quantum gases and liquids*

7 juin 2017 : Isabelle Bouchoule, Laboratoire Charles Fabry, Palaiseau : *Physics of one-dimensional Bose fluids: Using ultra-cold gases as quantum simulators*

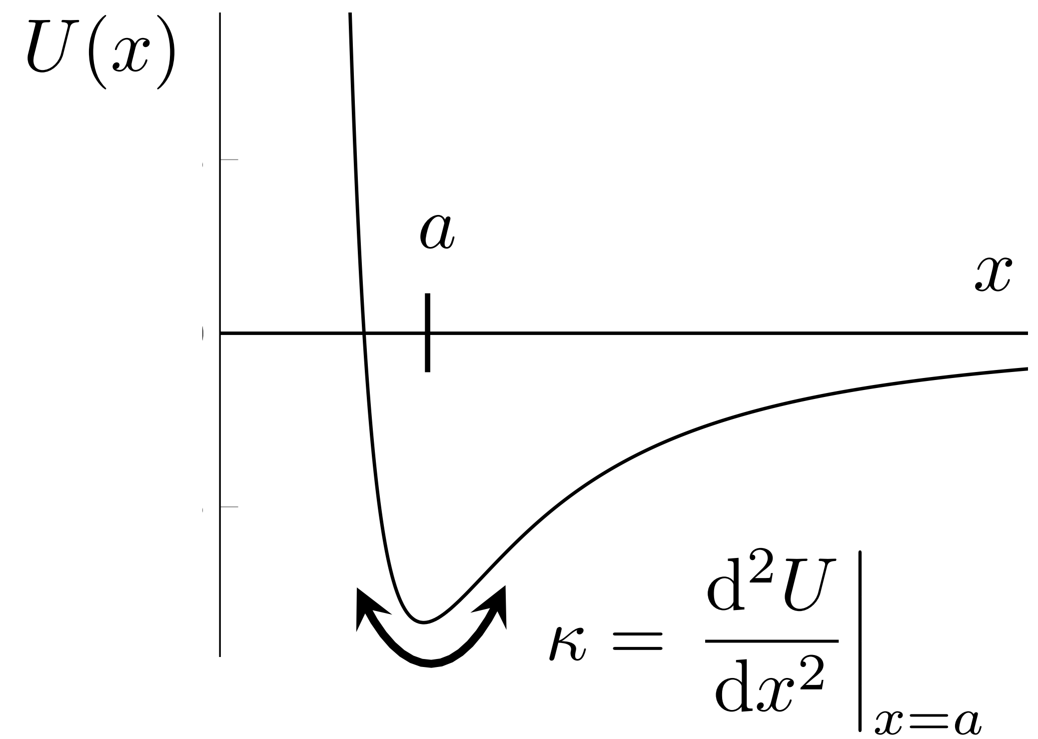
Cours 1

Peierls et l'ordre cristallin en basse dimension

L'argument de Peierls à une dimension

Une version simple : l'empilement de défauts

Température nulle : chaîne ordonnée



Température non nulle :

Fixons la position x_0 de l'atome $j = 0$. La position de l'atome $j = 1$ peut fluctuer :

$$x_1 = x_0 + a + \delta_1 \qquad \langle \delta_1 \rangle = 0 \qquad \langle \delta_1^2 \rangle \sim \frac{k_{\mathrm{B}} T}{\kappa}$$

L'empilement de défauts (suite)

$$\left\{\begin{array}{ll} x_1 = x_0 + a + \delta_1 & \langle \delta_1^2 \rangle \sim \dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{\kappa} \\ x_2 = x_1 + a + \delta_2 & \\ . & \\ . & \\ . & \\ x_j = x_{j-1} + a + \delta_j & \langle \delta_j^2 \rangle \sim \dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{\kappa} \end{array}\right.$$

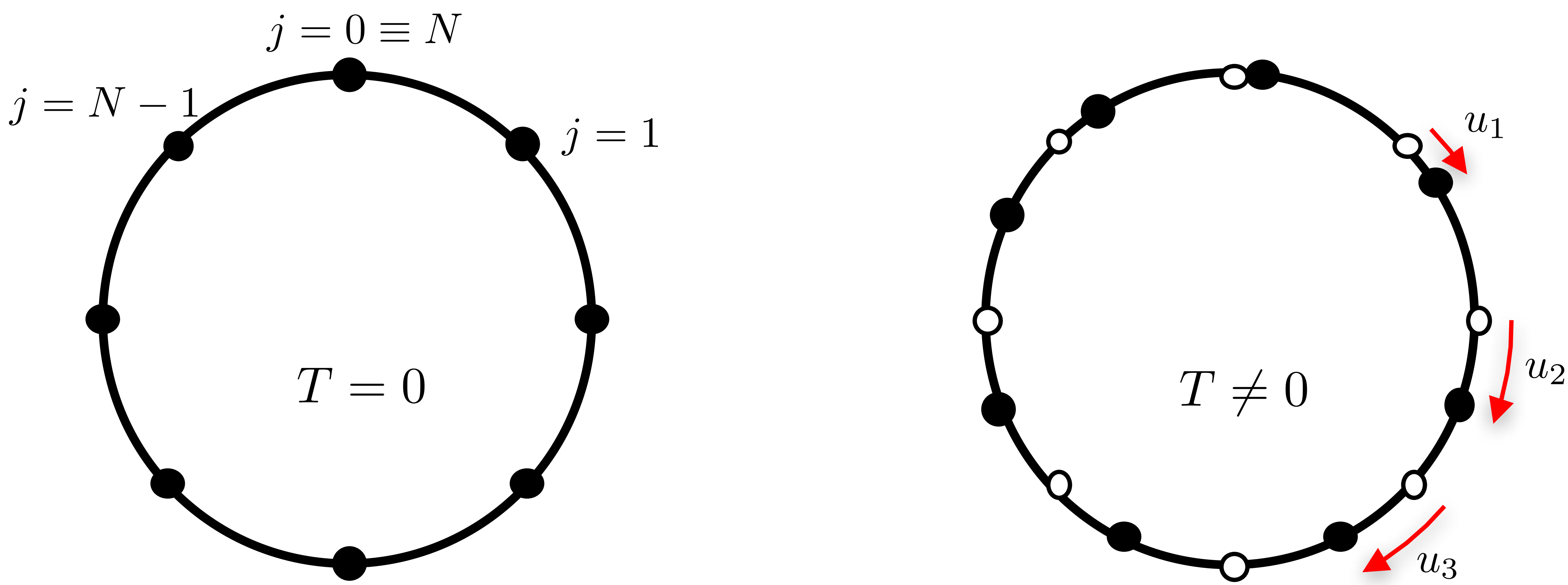
$$\longrightarrow \quad x_j = x_0 + ja + \Delta_j \qquad \Delta_j = \delta_1 + \delta_2 + \ldots + \delta_j$$

Somme de variables indépendantes : $\langle \Delta_j^2 \rangle \sim \dfrac{k_{\mathrm{B}}T}{\kappa}\, j.$

Si $\langle \Delta_j^2 \rangle \gtrsim a^2$, c'est-à-dire si $j \gtrsim \dfrac{\kappa a^2}{k_{\mathrm{B}}T}$, on a perdu toute information sur la position de l'atome *j* par rapport à la maille du cristal : pas d'ordre à longue portée

Le cristal harmonique classique 1D

Conditions aux limites périodiques



Energie du système : $E = \sum_{j=1}^{N} \frac{1}{2} m \dot{u}_j^2 \; + \; \frac{\kappa}{2}(u_{j+1} - u_j)^2$

Hypothèse : $|u_{j+1} - u_j| \ll a$ mais pas nécessairement $|u_j| \ll a$

Equations du mouvement : $m\, \ddot{u}_j = \kappa(u_{j+1} - 2u_j + u_{j-1})$

Solutions des équations du mouvement

Passage dans l'espace de Fourier : $\hat{u}_q = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\, q X_j} \; u_j$ $\qquad X_j = ja$

nombre d'onde q : $\quad q = -\frac{\pi}{a}, \ldots, -\frac{2\pi}{Na}, \; 0, \; \frac{2\pi}{Na}, \ldots, +\frac{\pi}{a}$

N équations indépendantes pour chaque nombre d'onde q :

$$\ddot{\hat{u}}_q + \omega_q^2 \hat{u}_q = 0 \qquad \text{avec} \qquad \omega_q = 2\sqrt{\frac{\kappa}{m}} \, |\sin \frac{qa}{2}|$$

Pour les petits nombres d'onde, $q \ll \pi/a$, on a la relation de dispersion linéaire :

$$\omega_q = c\,|q| \qquad \text{avec} \qquad c = a\sqrt{\frac{\kappa}{m}}$$

Ondes sonores (phonons)

L'équilibre thermodynamique du système 1D

Retour dans l'espace des positions : quelle est la corrélation entre les déplacements de deux atomes séparés de *j* sites ?

$$u_j - u_0 = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q \left(\mathrm{e}^{\mathrm{i}qX_j} - 1\right) \hat{u}_q \qquad X_j = ja$$

Moyenne prise à l'équilibre thermique : $\langle \hat{u}_q \hat{u}^*_{q'} \rangle = 0 \text{ si } q \neq q'$

$$\frac{1}{2} m\omega_q^2 \langle |\hat{u}_q|^2 \rangle = \frac{1}{2} k_\mathrm{B} T \longrightarrow \langle |u_q|^2 \rangle = \frac{k_\mathrm{B} T}{m\omega_q^2}$$

$$\longrightarrow \langle u_j - u_0 \rangle = 0$$

$$\longrightarrow \langle (u_j - u_0)^2 \rangle = \frac{k_\mathrm{B} T}{m} \frac{4}{N} \sum_q \frac{\sin^2(qX_j/2)}{\omega_q^2}$$

à calculer…

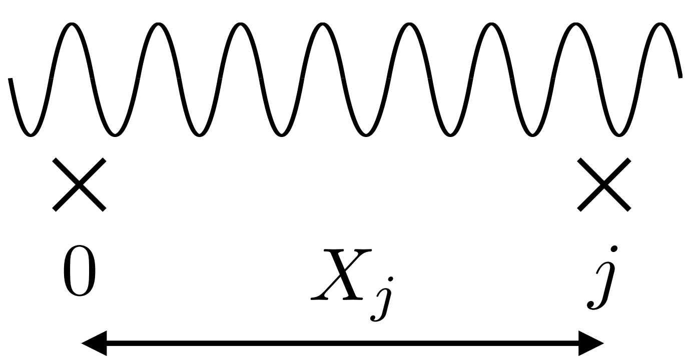
Estimation de $\langle (u_j - u_0)^2 \rangle$

Passage d'une somme discrète sur q à une intégrale et utilisation de $\omega_q \approx c\,|q|$

$$\langle (u_j - u_0)^2 \rangle \approx \frac{4}{\pi}\,\frac{k_B T}{\kappa a} \int_0^{\pi/a} \frac{\sin^2(qX_j/2)}{q^2}\,\mathrm{d}q$$

On coupe l'intégrale en deux morceaux sur lesquels on fait des approx. différentes :

- Modes de grand nombre d'onde (i.e., courte longueur d'onde) : $q > \pi/X_j$



$$\sin^2(qX_j/2) \approx \frac{1}{2}$$

- Modes de petit nombre d'onde (i.e., grande longueur d'onde) : $q < \pi/X_j$

$$\sin^2(qX_j/2) \approx (qX_j/2)^2$$

Estimation de $\langle (u_j - u_0)^2 \rangle$ (suite)

Contribution des deux types de modes

Modes de grand nombre d'onde : $$\langle (u_j - u_0)^2 \rangle \approx \frac{4}{\pi} \, \frac{k_\mathrm{B}T}{\kappa a} \int_{\pi/X_j}^{\pi/a} \frac{1}{2q^2} \, \mathrm{d}q$$
$$\sim \frac{k_\mathrm{B}T}{\kappa a} \, X_j$$

Modes de petit nombre d'onde : $$\langle (u_j - u_0)^2 \rangle \approx \frac{4}{\pi} \, \frac{k_\mathrm{B}T}{\kappa a} \int_{0}^{\pi/X_j} \frac{(qX_j/2)^2}{q^2} \, \mathrm{d}q$$
$$\sim \frac{k_\mathrm{B}T}{\kappa a} \, X_j$$

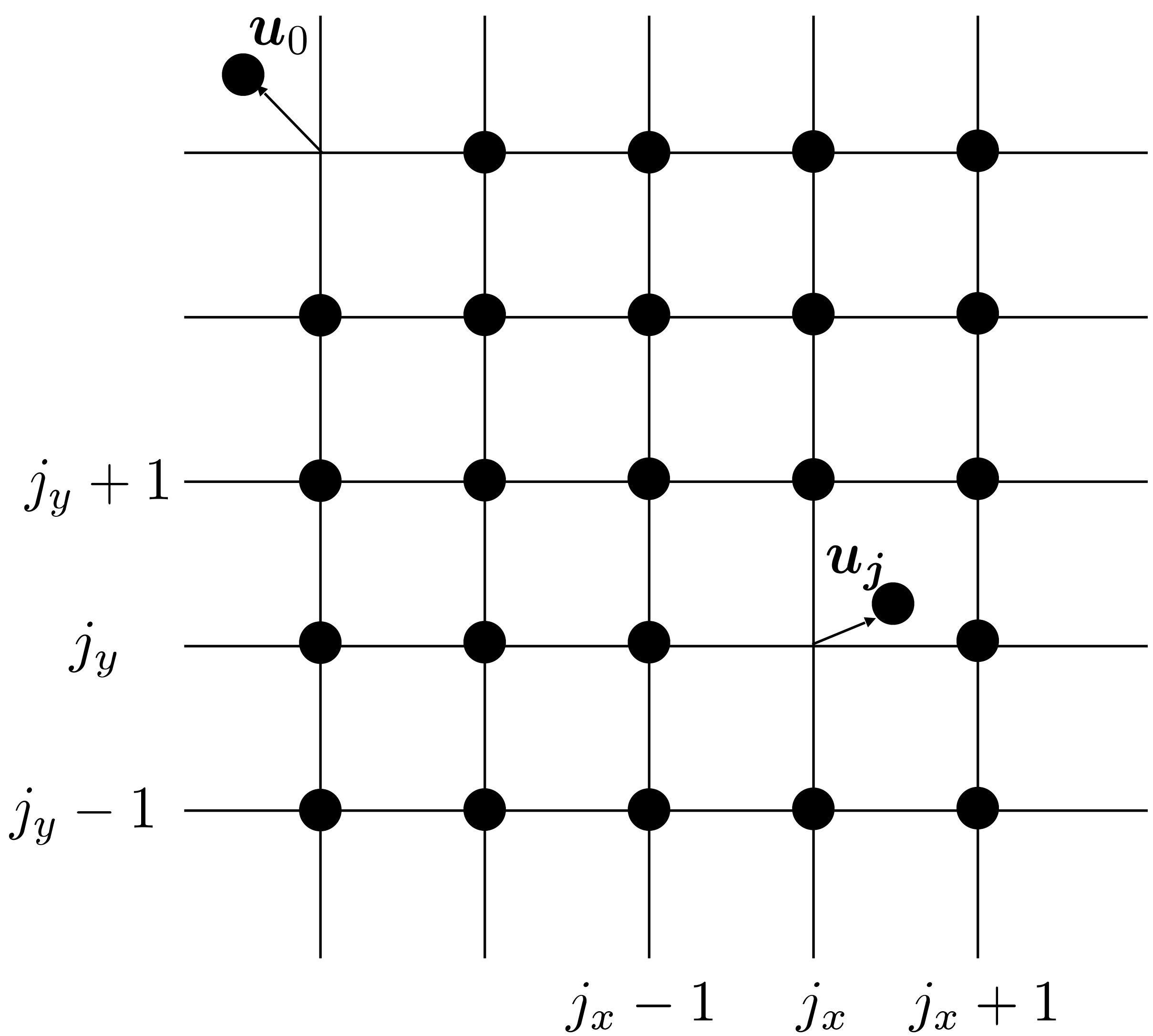
Les deux morceaux sont similaires et redonnent le résultat trouvé par l'argument fondé sur l'empilement de défauts. La contribution essentielle vient des modes :

$$q \sim \frac{\pi}{X_j}$$ *responsables de la perte d'ordre à longue portée*

2.

Cristaux à deux ou à trois dimensions

Ecarts à l'équilibre dans un réseau bi-dimensionnel



$$\boldsymbol{j} \equiv (j_x, j_y)$$

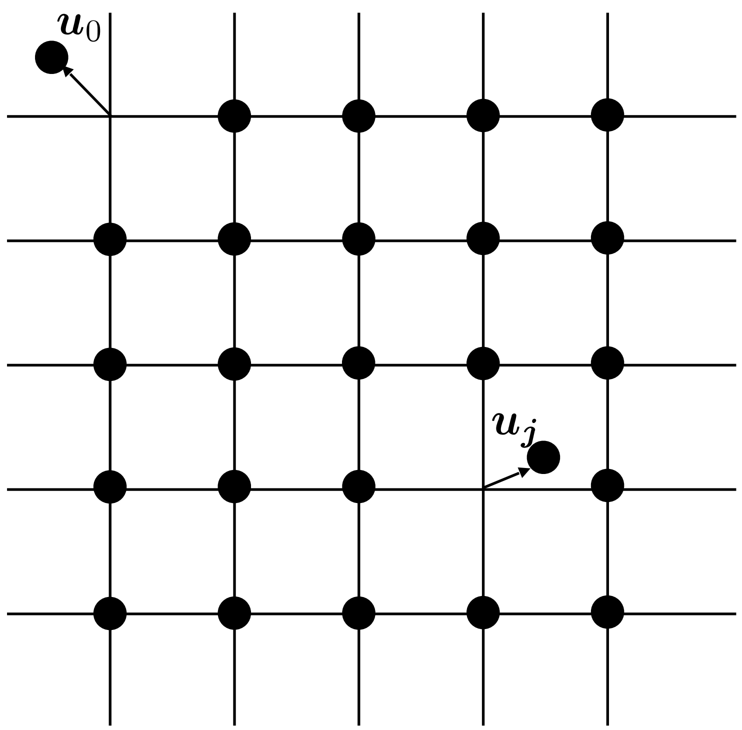
Analyse similaire au cas 1D, passant par la recherche des modes propres caractérisés par un vecteur d'onde $\boldsymbol{q}$

$$\boldsymbol{q} \equiv (q_x, q_y)$$

L'étude détaillée est compliquée par le fait que les phonons peuvent avoir deux états de polarisations : parallèle à $\boldsymbol{q}$ ou perpendiculaire à $\boldsymbol{q}$

Nous allons nous contenter ici de lois d'échelle

Ecart à l'équilibre à deux dimensions



Un traitement similaire au cas 1D conduit à :

$$\langle (\boldsymbol{u_j} - \boldsymbol{u}_0)^2 \rangle \sim \frac{k_\mathrm{B}T}{\kappa}\, \frac{2}{\pi^2} \int_\mathrm{ZB} \frac{\sin^2(\boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{R_j}/2)}{q^2}\, \mathrm{d}^2 q.$$

où le vecteur $\boldsymbol{q} = (q_x, q_y)$ évolue dans la zone de Brillouin

$$-\frac{\pi}{a} < q_{x,y} < +\frac{\pi}{a}$$

On coupe là aussi l'intégrale en deux morceaux :

- Grands vecteurs d'onde : $q > \pi/R_j$

$$\sim\ \frac{1}{\pi^2}\, \frac{k_\mathrm{B}T}{\kappa} \int_{\pi/R_j}^{\pi/a} \frac{1}{q^2}\, 2\pi q\ \mathrm{d}q \quad \sim\ \frac{2}{\pi}\frac{k_\mathrm{B}T}{\kappa} \log(R_j/a)$$

dominant

- Petits vecteurs d'onde : $q < \pi/R_j$

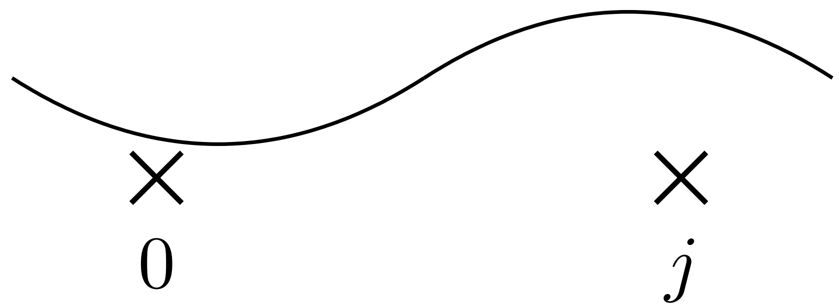
$$\sim \frac{1}{2\pi^2}\, \frac{k_\mathrm{B}T}{\kappa}\, R_j^2 \int_0^{\pi/R_j} \pi q\ \mathrm{d}q \quad \sim \frac{\pi}{4}\, \frac{k_\mathrm{B}T}{\kappa}$$

Absence d'ordre à longue portée à 2D

R. Peierls

Bilan du calcul précédent : $\langle(\boldsymbol{u_j} - \boldsymbol{u}_0)^2\rangle \sim \dfrac{k_\mathrm{B}T}{\kappa}\log(R_{\boldsymbol{j}}/a)$

avec une contribution dominante des vecteurs d'onde $q \sim \pi/R_j$ comme à 1D.



L'ordre cristallin à longue portée n'existe pas à 2D:

$$\langle(\boldsymbol{u_j} - \boldsymbol{u}_0)^2\rangle \to \infty \quad \text{quand} \quad R_j \to \infty$$

mais la divergence n'est que logarithmique alors qu'elle était linéaire à 1D.

On qualifie souvent cette situation de « quasi-ordre à longue portée »

Et le cas tri-dimensionnel ?

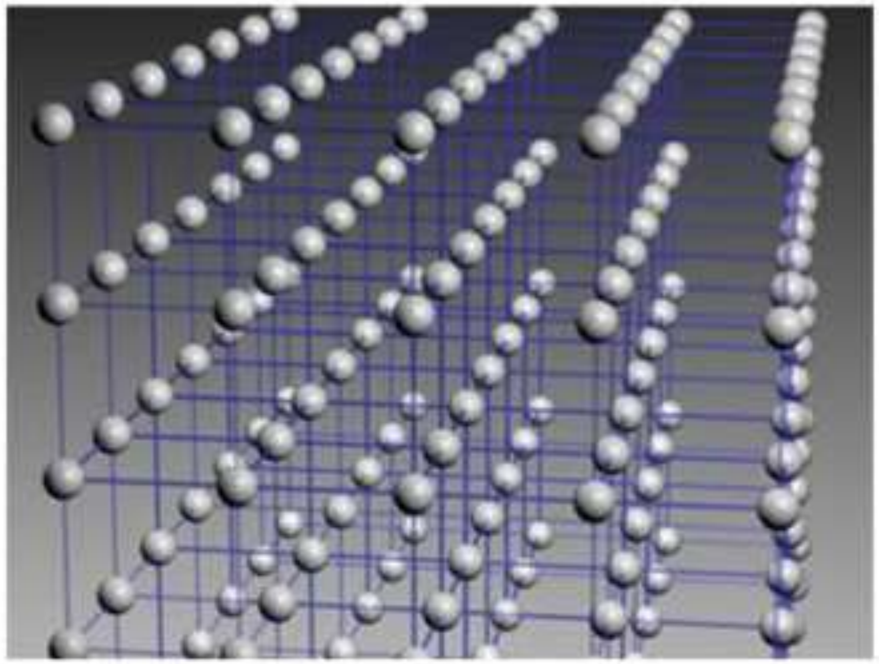


image I. Bloch

Le même type d'analyse peut être mené, conduisant à une forme similaire pour les écarts à l'équilibre :

$$\langle (\boldsymbol{u_j} - \boldsymbol{u}_0)^2 \rangle \sim \frac{a k_\mathrm{B} T}{\kappa} \int_\mathrm{ZB} \frac{\sin^2(\boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{R_j}/2)}{q^2} \, \mathrm{d}^3 q$$

$\mathrm{d}^3 q = q^2 \, \mathrm{d}q \, \mathrm{d}^2\Omega$ $\longrightarrow$ plus de divergence en $q = 0$

On arrive alors à $\langle (\boldsymbol{u_j} - \boldsymbol{u}_0)^2 \rangle \sim \dfrac{k_\mathrm{B} T}{\kappa}$: résultat indépendant de R_j

Si $\dfrac{k_\mathrm{B} T}{\kappa} \ll a^2$, l'ordre cristallin peut exister avec une portée infinie.

Le théorème de Mermin - Wagner - Hohenberg

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

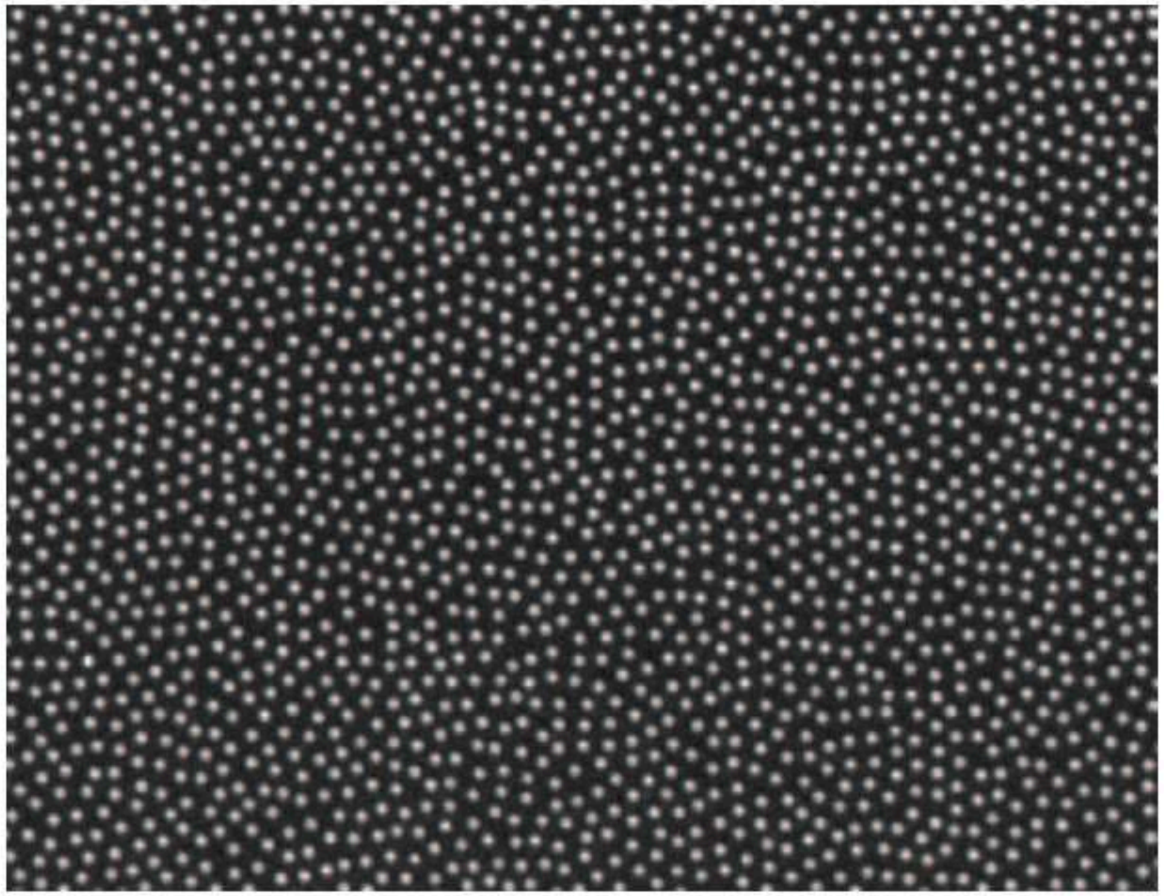
- Si la portée est infinie, la théorie de champ moyen s'applique et les transitions de phase "standard" prévues par cette théorie peuvent se produire.

- Symétrie continue (translation, magnétisme de Heisenberg, condensation de Bose-Einstein). Le théorème ne s'applique pas tel quel aux symétries discrètes (Ising).

- A température nulle, le gaz de Bose 2D quantique en interaction est condensé

3.

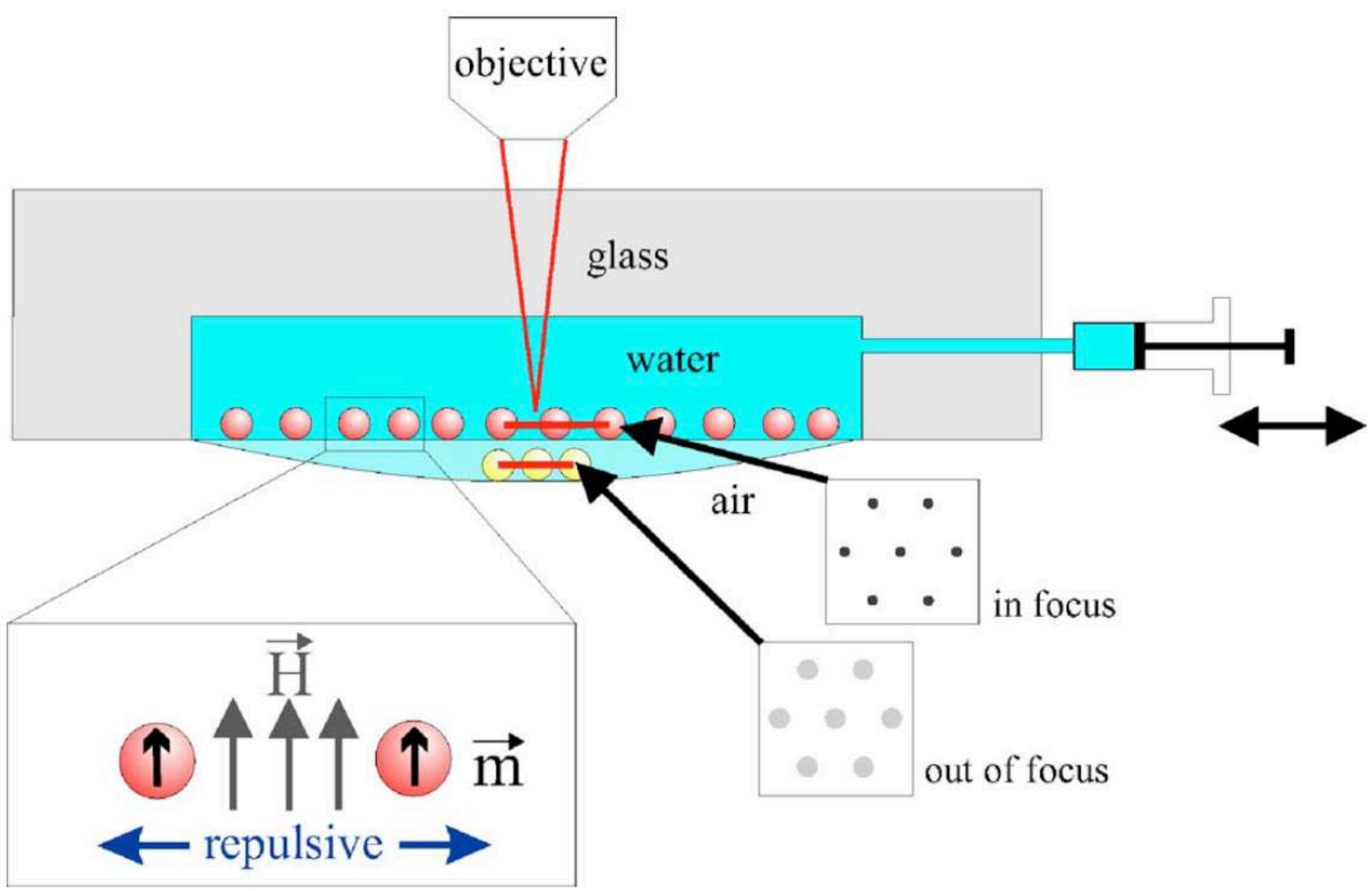
Fluides et cristaux bi-dimensionnels au laboratoire



Expériences faites à Constance dans le groupe de Georg Maret et Peter Keim sur des systèmes colloïdaux

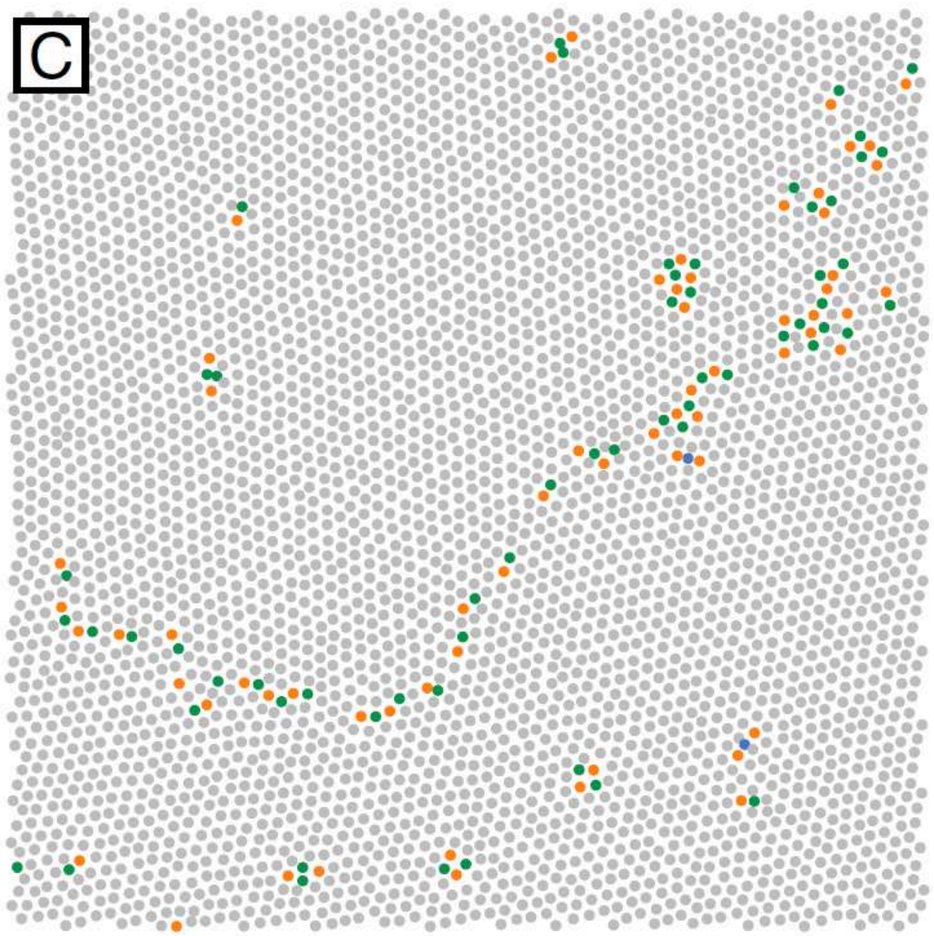
Le montage expérimental de Constance

- Goutte d'eau (diamètre 8 mm) suspendue par tension superficielle
- Contrôle de l'horizontalité au micro radian près
- 10^5 billes de polystyrène de diamètre 4.5 µm (densité 1.5) à l'interface eau-air
- Dopage des billes avec des nanoparticules d'oxyde de fer + champ magnétique vertical : force de répulsion dipôle-dipôle entre les billes



Keim et al, Phys. Rev. E **75**, 031402 (2007)

Le montage expérimental de Constance (suite)



Deutschlander et al., 2015

On sélectionne une fenêtre de 1 mm x 1mm : environ 4000 billes, avec une distance moyenne entre billes de 15 µm

On enregistre la position de chaque bille avec une précision submicrométrique chaque seconde

Les constantes de temps pour atteindre l'équilibre peuvent dépasser un mois !

Paramètre de contrôle de l'expérience : $\Gamma = \frac{E_{\mathrm{mag}}}{k_{\mathrm{B}}T}$

Les différentes phases pour l'assemblée de particules

KTHNY : Kosterlitz, Thouless, Halperin, Nelson, Young (1973-1979) $\Gamma = \frac{E_{\mathrm{mag}}}{k_{\mathrm{B}}T}$

Scénario validé par les expériences et les simulations numériques

- $T = 0$: cristal triangulaire parfait (si on néglige les fluctuation quantiques)
- Température très basse : fluctuations logarithmiques à la Peierls

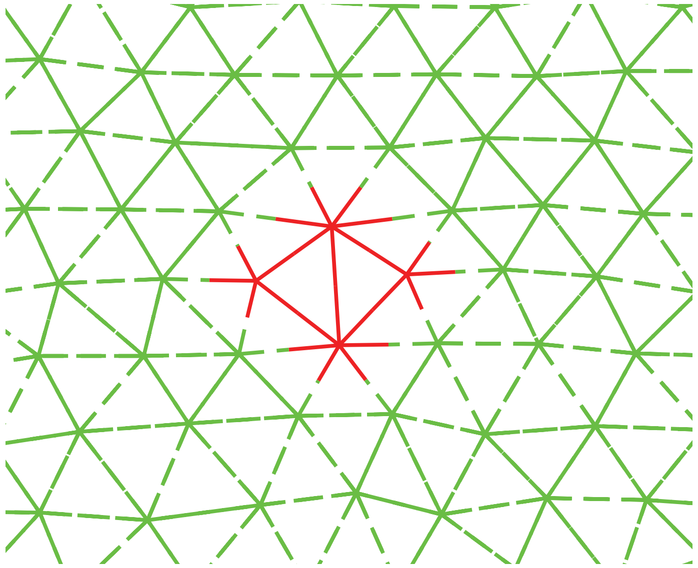
Quasi-ordre translationnel : $\langle(\boldsymbol{u_j} - \boldsymbol{u}_0)^2\rangle \;\propto\; \log(R_{\boldsymbol{j}}/a)$

Défauts locaux sans importance sur le comportement à longue portée

7

5 **5**

7



Wierschem & Manousakis (2011)

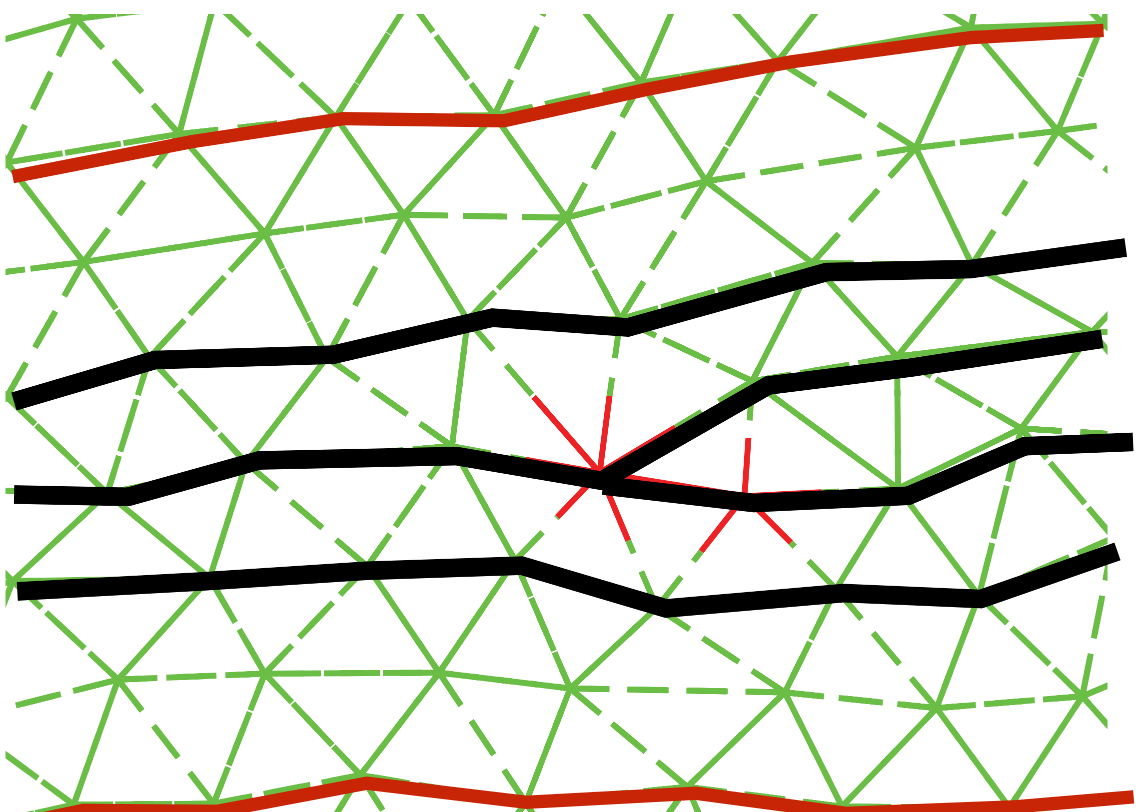
Véritable ordre orientationnel : $\langle(\theta_{\boldsymbol{j}} - \theta_0)^2\rangle$ ne tend pas vers 0 à l'infini

Les différentes phases pour l'assemblée de particules (2)

Première transition de phase à une température T_m telle que

$$\Gamma_m = \frac{E_{\text{mag}}}{k_{\text{B}} T_m} = 70.3$$

Apparition de « dislocations » : défauts de type 7-5 correspondant à l'ajout d'une demi-ligne d'atomes



Wierschem & Manousakis (2011)

- Détruit le quasi-ordre transactionnel à la Peierls
- Un quasi-ordre orientationnel subsiste

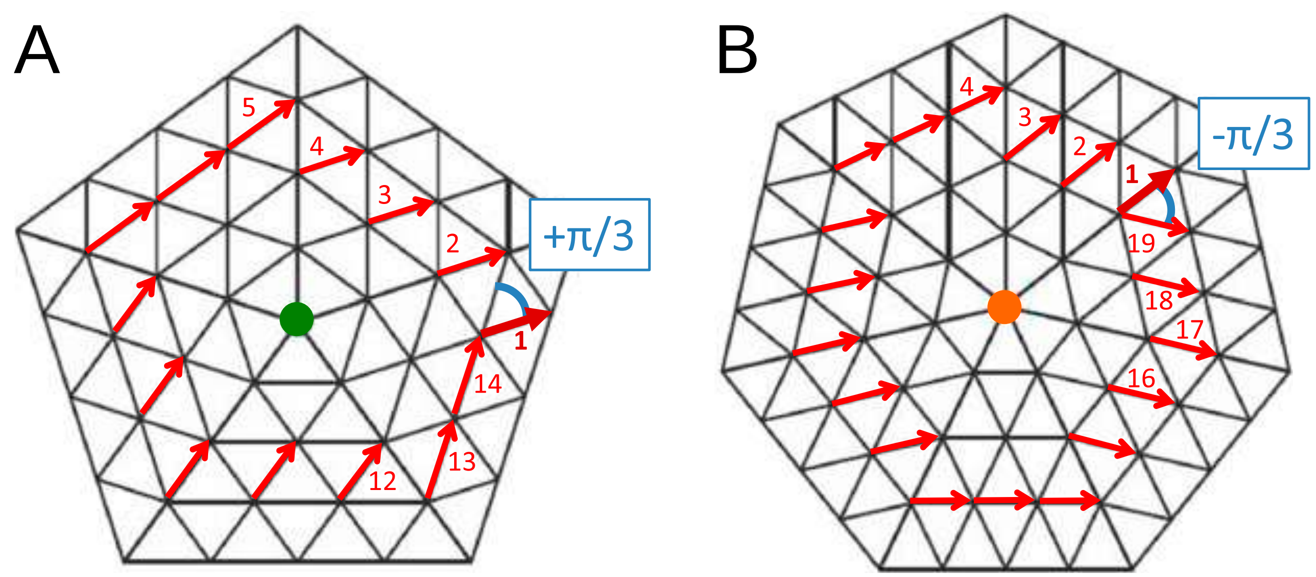
Phase hexatique

Les différentes phases pour l'assemblée de particules (3)

Deuxième transition de phase à une température T_i telle que

$$\Gamma_i = \frac{E_{\mathrm{mag}}}{k_{\mathrm{B}} T_i} = 67.3$$

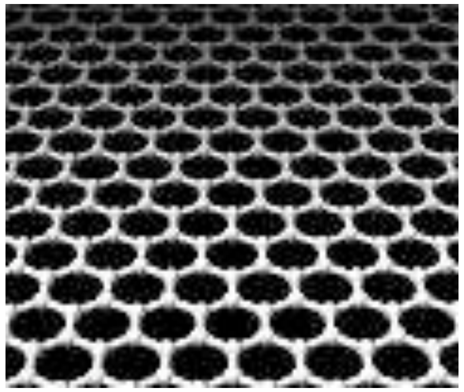
Apparition de « disclinations » : défauts isolés de type 7 ou de type 5



Deutschlander et al., 2015

Perte de l'ordre orientationnel : il ne subsiste aucun ordre (ou quasi-ordre) à longue portée

Et le graphène ?



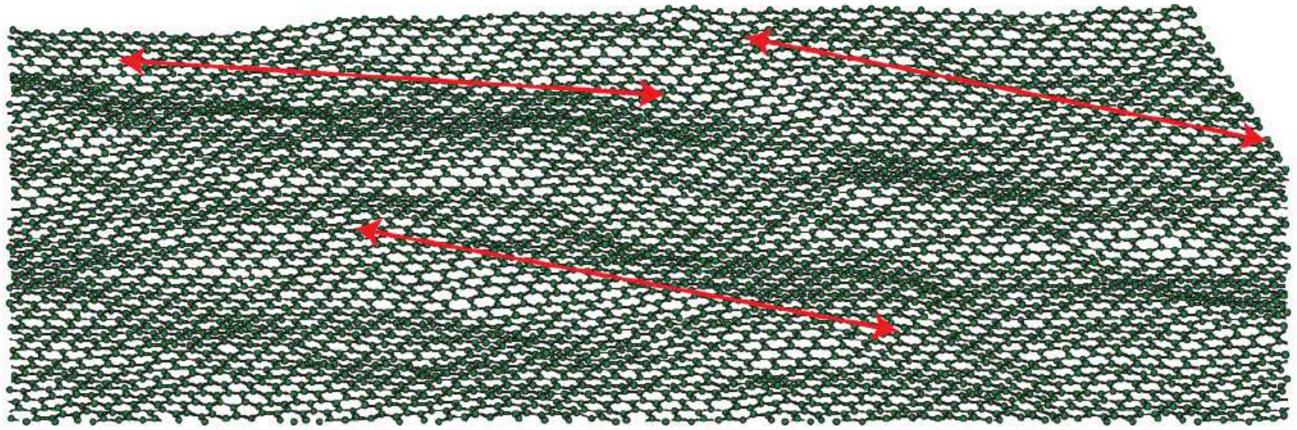
Feuille d'atomes de carbone présentant un ordre cristallin à deux dimensions

Compatibilité avec le théorème de Mermin - Wagner - Hohenberg ?

- Compte tenu de la raideur des liens, la perte de l'ordre cristallin ne se manifeste que sur de très longues distances

  Un échantillon de taille finie raisonnable peut présenter un ordre cristallin

- La surface est plissée et le couplage non-linéaire entre fluctuations de hauteur et déplacements parallèles à la surface induit une composante effective à longue portée



Fasolino et al, 2007

En résumé, pour l'état cristallin à 1D et 2D …

Résultat de Peierls généralisé par le théorème de Mermin-Wagner - Hohenberg:

A température non nulle, il n'y a pas d'ordre translationnel à longue portée en dimension réduite. La contribution des phonons (dominante à basse T) donne :

1D : $\langle (\boldsymbol{u_j} - \boldsymbol{u}_0)^2 \rangle \sim \dfrac{k_\mathrm{B}T}{\kappa}\,\dfrac{R_j}{a}$: décroissance rapide des corrélations

2D : $\langle (\boldsymbol{u_j} - \boldsymbol{u}_0)^2 \rangle \sim \dfrac{k_\mathrm{B}T}{\kappa}\log(R_{\boldsymbol{j}}/a)$: quasi-ordre

A plus haute température et à 2D, dissociation de défauts locaux de type $\mathbf{7}\,\substack{\mathbf{5}\\ \mathbf{5}}\,\mathbf{7}$.
Une fois dissociés, ces défauts détruisent complètement l'ordre translationnel

Le rôle des fluctuations quantiques, seules présentes à température nulle :

1D, $T = 0$: $\langle (\boldsymbol{u_j} - \boldsymbol{u}_0)^2 \rangle \sim \dfrac{\hbar}{m\omega}\log(R_{\boldsymbol{j}}/a)$ $\qquad \omega = \sqrt{\kappa/m}$

loi similaire aux fluctuations thermiques à 2D