

## Physique statistique

M. Philippe NOZIERES, membre de l'Institut  
(Académie des Sciences), professeur

### *COURS : FORME ET CROISSANCE DES CRISTAUX*

La croissance cristalline est un vieux problème. Les concepts thermodynamiques de base remontent à Gibbs, et depuis des décennies le problème a été très étudié en raison de ses applications pratiques. Malgré cela, la physique de l'interface liquide solide reste un problème ouvert, tant au niveau de la structure que de la cinétique de croissance. Récemment, la question a connu des progrès significatifs, grâce d'une part à une meilleure compréhension des mécanismes élémentaires au niveau de l'interface, d'autre part à l'étude de  $^4\text{He}$ , cristal « idéal » où l'on s'affranchit de tous les problèmes de conduction thermique (grâce à la superfluidité du liquide). Ce cours s'est efforcé de faire le point des progrès récents en la matière, l'accent étant mis cette année sur les propriétés d'équilibre et les aspects structurels (formes stationnaires, facetage, etc.). La partie dynamique (mécanismes dissipatifs, instabilités) sera traitée l'an prochain.

#### 1) *Description thermodynamique*

Elle est classique pour l'interface entre deux fluides. A partir de l'énergie superficielle  $\gamma$ , on définit une tension de surface, ensemble des forces qu'il faut exercer pour maintenir l'équilibre *mécanique*. Pour un fluide anisotrope ( $\gamma$  fonction de l'orientation), cette tension comprend un couple (souvent ignoré), qui tend à ramener l'interface dans l'orientation d'énergie minimum. Ce couple est essentiel pour comprendre la surpression capillaire [ $\sim (\gamma + \gamma')$ ], ou le raccordement à une paroi. L'équilibre *chimique* (transfert de masse d'une phase à l'autre) est directement contrôlé par la surpression capillaire.

Les efforts mécaniques à l'interface liquide solide sont beaucoup plus compliqués, du fait de la déformation élastique du solide sous-jacent. Heureusement, l'équilibre chimique, contrôlant la croissance, est lui très simple : la pression d'équilibre dans la phase liquide est la même que pour l'interface

entre deux fluides, fonction de la courbure. Dans l'équilibre fusion cristallisation, tout se passe comme si le solide était un fluide anisotrope, d'orientation gelée.

La forme d'équilibre d'un cristal correspond à une surpression constante dans le liquide : c'est la construction de Wulff, que l'on peut démontrer de diverses manières.

## 2) Surfaces cristallines

Même pour une orientation cristalline simple, elles impliquent toujours une *reconstruction* du réseau cristallin près de la surface (espacement différent des plans cristallins, ou même surstructure dans le plan de l'interface). Pour une surface « vicinale » inclinée par rapport au plan cristallin, il apparaît des *marches* localisées, qui peuvent à leur tour présenter des *décrochements*. Ces marches sont des entités topologiques, bien définies même si l'interface est étalé sur plusieurs plans atomiques (ce qui est le cas au contact solide-liquide). On peut les considérer comme des « solitons ».

Les marches ont une énergie finie. De ce fait, l'énergie superficielle  $\gamma(\theta)$  à température nulle présente une rupture de pente à  $\theta = 0$ , responsable du facettage. A température finie, les marches acquièrent une entropie de position : leur énergie libre diminue, pour s'annuler à une température  $T_R$ , où les marches prolifèrent spontanément.  $T_R$  est la température de *transition rugueuse*, au delà de laquelle le facettage disparaît pour donner un interface arrondi.

La statistique des marches dépend de façon critique de leur interaction. Celle-ci est due en partie au confinement statistique des fluctuations (deux marches ne peuvent pas se croiser), mais surtout à l'interaction *élastique* via la déformation du substrat (assez subtile à calculer). Dans les deux cas l'interaction entre deux marches de distance  $d$  varie comme  $1/d^2$ . Pour une surface vicinale, cette interaction est en compétition avec la périodicité *dans le plan* de l'interface, qui tend à localiser les marches aux nœuds du réseau. Il en résulte une transition de commensurabilité des marches, qui n'est rien d'autre que la transition rugueuse d'une face d'ordre plus élevé. On peut ainsi définir toute une hiérarchie de transitions rugueuses, correspondant à des indices de Miller croissants.

En dessous de  $T_R$ , la singularité de  $\gamma(\theta)$  donne naissance à des facettes rigoureusement planes à la surface du cristal. Si l'anisotropie est très prononcée, le facettage peut être complet (cristal polyédrique). Plus souvent, les facettes se raccordent à des parties arrondies, soit tangentiellement, soit avec un angle de contact fini. La *taille* des facettes est contrôlée par l'énergie des marches  $\beta(\phi)$  (c'est-à-dire la discontinuité de  $\gamma(\theta, \phi)$  pour  $\theta = 0$ ). L'anisotropie de  $\beta(\phi)$

contrôle à son tour la *forme* des facettes, obtenue par une construction de Wulff à deux dimensions. Au contact d'une paroi, l'angle de raccordement d'une facette est stable sur une plage de largeur finie ; lorsqu'on balaie cette plage la facette est progressivement « happée » par la paroi.

Formellement, on peut développer une description classique de cette transition de facettage, fondée sur une approximation de champ moyen (Andreev). Mais le paramètre d'ordre ainsi introduit est artificiel (la véritable physique est dans l'énergie superficielle  $\gamma(\theta, \phi)$ ), et ce modèle conduit à des prédictions erronées pour le rayon des facettes ( $T < T_R$ ) et la courbure de l'interface ( $T > T_R$ ).

### 3) Géométrie de la surface vue comme un équilibre de marches

Considérons un interface cylindrique (une seule courbure) : il est constitué de marches parallèles, dont la densité  $n(x)$  fixe le profil de la section droite. La suppression dans le liquide exerce une force *constante* sur ces marches, tendant à faire pousser le cristal. L'équilibre traduit un compromis entre cette force « appliquée » et la *répulsion* entre les marches cristallines. La thermodynamique de l'interface trouve ainsi une interprétation physique très transparente. Comme pour un gaz, on peut définir un « potentiel chimique  $\xi$  » et une « pression » des marches  $\bar{\omega}$ . Une paroi constitue une *source* de marches, fixant le potentiel chimique, c'est-à-dire la densité et l'angle de raccordement. Le contact partie arrondie — facette correspond à un équilibre « liquide-gaz » des marches, avec comme d'habitude continuité des potentiels chimiques et des pressions. Toutes les quantités physiques sont ainsi reliées à *l'interaction entre les marches*.

Dans une expérience typique, le ménisque est piégé entre deux parois. Pour trouver le profil d'équilibre, on considère d'abord les parties arrondies, pour lesquelles la répulsion ( $-\partial\xi/\partial x$ ) doit compenser la force appliquée  $F$ . Connaissant  $\xi$  à la paroi, on en déduit la densité  $n(x)$ . Le bord de la facette correspond à  $n = 0$  : au-delà, le bilan des forces n'intervient plus puisqu'il n'y a plus de marches. En l'absence de nucléation, la facette est métastable, sa largeur étant arbitraire. La nucléation, beaucoup plus lente, fait relaxer cette largeur vers la valeur prévue par l'équilibre thermodynamique. La généralisation à une géométrie circulaire est sans problème : il suffit d'ajouter aux forces une tension de ligne due à la courbure des marches. L'équilibre métastable de la facette disparaît alors pour un rayon critique  $R_c$ , au-dessous duquel la force appliquée  $F$  ne peut plus équilibrer la tension de ligne : pour  $R < R_c$ , la facette s'effondre et le cristal fond rapidement.

La nucléation de terrasses sur une facette de dimension macroscopique est pratiquement impossible. La croissance de la facette est alors due aux marches résiduelles ancrées sur les dislocations vis qui percent la surface. Ces marches

peuvent soit rejoindre la périphérie de la facette, soit s'ancrer sur deux dislocations de signes opposés (sources de Frank et Read). Pour une marche unique, on calcule facilement sa courbure, son angle de raccordement à une paroi, au contact entre deux facettes, etc. Lorsque la densité de marches augmente, une description globale devient nécessaire. On peut alors définir une *polarisation* des marches, caractérisant leur densité et leur orientation locale. Lorsque cette polarisation est grande, le fractionnement des marches en brins de longueur finie devient négligeable, et l'on retrouve le même comportement que pour un interface arrondi : en particulier, les seuils de croissance de Frank et Read sont considérablement abaissés (les marches « rampant » par croisements successifs d'un bout à l'autre de la facette).

#### 4) *Transition rugueuse*

A température finie, les fluctuations transverses d'une marche de longueur  $L$  sont d'ordre  $\sqrt{L}$ . Si la marche est soumise à un potentiel périodique qui tend à la localiser aux nœuds du réseau cristallin, les fluctuations sont réduites, mais restent  $\sim \sqrt{L}$  (elles traduisent alors la génération spontanée de décrochements thermiques) : quelle que soit la température, le potentiel périodique n'est pas « pertinent » à l'échelle macroscopique.

La situation est différente pour une *surface* de dimension  $L$ , qui lorsqu'elle est libre a des fluctuations de hauteur  $z^2 \sim T \text{Log } L$ . Le piégeage par un potentiel périodique est alors pertinent à basse température : la surface est bloquée sous forme d'une facette plane. A température élevée, en revanche, le piégeage devient négligeable aux grandes échelles : la surface se « libère » et devient rugueuse. C'est la « transition rugueuse », à une température  $T_R$  caractéristique.

On peut décrire cette transition par une méthode de *renormalisation*. Partant de l'échelle microscopique, on élimine peu à peu les fluctuations de courtes longueurs d'onde, corrigeant ainsi l'énergie superficielle et l'amplitude du potentiel de piégeage. Cette « renormalisation du pauvre » permet de comprendre le comportement critique et de calculer la longueur de corrélation en dessous de  $T_R$ . On prédit ainsi une discontinuité de courbure de l'interface à la température  $T_R$ , dont la valeur est universelle, et qui semble confirmée expérimentalement.

On peut de la même manière étudier les fluctuations *quantiques* à température nulle. Pour une marche linéaire, le comportement est le même que pour une surface à température finie. La constante de Planck joue le rôle de la température, et la marche a des fluctuations d'ordre  $\text{Log } L$  si  $\hbar$  dépasse un seuil critique  $\hbar_R$ . Ce modèle, dit de « Sine Gordon » quantique, a été très étudié : on peut en donner une analyse très économique par une méthode

variationnelle. Pour une *surface quantique*, en revanche, les fluctuations restent toujours microscopiques : il y a *toujours* facettage à  $T = 0$ , quelle que soit l'orientation cristalline considérée. On contredit ainsi le modèle classique de Burton, Cabrera et Frank, où le facettage est interprété comme une séparation liquide gaz dans le dernier plan atomique (formation spontanée d'une marche). Les fluctuations quantiques peuvent fort bien détruire cette transition, mais elles n'empêcheront pas les atomes de déborder sur le plan suivant, créant ainsi un autre type de marches.

### 5) Cinétique de la fusion (parties rugueuses)

Au niveau de l'interface, elle résulte du *mouvement des marches* lorsqu'elles sont soumises à une force résultante non nulle. La vitesse de croissance est donc contrôlée par la *densité* de ces marches, et par leur *mobilité*. Cette mobilité, à son tour, résulte de l'écoulement des décrochements le long d'une marche, contrôlé en fin de compte par les mécanismes de frottement microscopiques. Globalement, la croissance (ou la fusion) peut s'interpréter comme un *courant de masse*  $J$  au travers de l'interface, piloté (pour un interface plan) par la différence de potentiel chimique entre les deux phases. La mobilité  $k = J/\Delta\mu$  apparaît ainsi comme une « conductance chimique de l'interface ».

En réalité, la fusion s'accompagne toujours de transferts thermiques : il faut bien évacuer la chaleur latente. De ce fait, le courant de masse  $J$  est intimement couplé au courant de chaleur  $J_E$ , piloté lui par la différence de température  $\Delta T$ . En écrivant le bilan de production d'entropie, on obtient des relations du type Onsager, avec l'habituelle symétrie des coefficients croisés :

$$J = k \left[ \Delta\mu + \lambda \frac{\Delta T}{T} \right], \quad \Delta T = R [J_E - \lambda J]$$

$R$  est la *résistance de Kapitza* qui limite les transferts d'énergie. Le coefficient croisé  $\lambda$  est une espèce de « pouvoir thermoélectrique » de surface, qui détermine en fait de *quel côté* part la chaleur latente. Ces équations constituent la base de la thermodynamique irréversible de l'interface. Croissance et transferts thermiques y sont intimement couplés. Pour pouvoir jauger un modèle microscopique, il est impératif de mesurer simultanément les trois coefficients  $k$ ,  $R$  et  $\lambda$ .

Dans la pratique, le courant de chaleur débite sur l'impédance thermique des phases liquide et solide,  $Z_L$  et  $Z_S$ . De ce fait, on n'atteint jamais l'interface tout seul, mais seulement une combinaison des coefficients de surface et de volume, qui dépend des conditions expérimentales (isolement aux parois, fréquence de l'expérience, etc.). Dans les géométries simples, on peut définir des coefficients *effectifs*  $k$ ,  $R$ ,  $\lambda$ , incorporant les effets de volume et directement mesurables. Ces aspects plus expérimentaux seront développés l'an prochain.

### 6) Croissance des facettes

La nucléation homogène des terrasses exige un écart à l'équilibre important (en fait, elle n'est appréciable qu'au voisinage de  $T_R$ , lorsque l'énergie de marche est faible). Une fois nucléées, ces terrasses croissent rapidement en gardant une forme circulaire stable. Selon les cas, on peut avoir une croissance au coup par coup (une terrasse à la fois), ou au contraire une nucléation multiple (la vitesse de croissance est alors proportionnelle à  $u^{2/3}$ , où  $u$  est la vitesse des marches).

La barrière de nucléation disparaît lorsqu'on atteint le seuil d'effondrement d'une facette circulaire,  $F = F_c$ . La facette fond alors rapidement. La vitesse de fusion  $v(F)$  au voisinage du seuil est intéressante, car elle renseigne très directement sur la nature des interactions entre les marches au voisinage du seuil. Le calcul peut se faire explicitement jusqu'au bout. Si l'énergie d'une densité  $n$  de marches est du type  $\beta n + \gamma n^2$ , la caractéristique est du type  $v \sim (F - F_c)^{3/2}$ . Si au contraire  $E \sim \beta n + \gamma n^3$  (caractéristique d'une interaction en  $1/d^2$ ), on a  $v \sim (F_c - F)$ . On a là une signature très directe de la mécanique des marches.

Aux faibles surpressions, la nucléation homogène est pratiquement impossible : la croissance de la facette est contrôlée par les marches résiduelles liées aux dislocations. C'est le mécanisme classique de *croissance spirale*, que l'on peut analyser soit pour une marche unique, soit pour une source de Frank et Read.

### 7) Formes stationnaires de croissance

Ce sont celles qu'on observe en pratique, beaucoup plus que les formes d'équilibre, toujours difficiles à atteindre sur une échelle de temps raisonnable. Elles sont contrôlées par l'anisotropie de l'énergie superficielle  $\gamma(\theta, \phi)$  d'une part, de la mobilité  $k(\theta, \phi)$  d'autre part. La simple observation d'une forme en fonction de la surpression donne donc directement accès à  $k$ .

Le calcul macroscopique de la forme stationnaire est simple pour un interface cylindrique (profil unidimensionnel). Si l'on néglige les anisotropies, on constate que l'interface, au départ circulaire, tend à s'aplatir en croissance, alors qu'au contraire il s'épointe en fusion. Plus généralement, la croissance favorise les orientations  $\theta$  où  $\cos\theta/k$  est maximum, la fusion celles où ce même rapport est minimum. On démontre sans difficulté que ces formes sont stables. Ces tendances persistent en géométrie circulaire, mais le calcul ne peut alors se faire que numériquement, les équations n'étant pas intégrables. Ces résultats se traduisent sans problème dans un langage de marches, la seule difficulté étant l'annihilation de marches de signes opposés au sommet de l'interface.

## CONCLUSION

Ce cours était centré sur les aspects *morphologiques* de la croissance cristalline (il a donné lieu à des notes). L'étape suivante est l'application aux aspects plus cinétiques : observation expérimentale de la mobilité, instabilité, etc. : ce sera l'objet du cours de l'an prochain.

P.N.

## SÉMINAIRES

Les séminaires suivants ont été organisés, en liaison étroite avec le thème du cours :

17 janvier : P. PIERANSKI (Laboratoire de Physique des Solides, Université Paris Sud) : « Forme et croissance cristalline de la phase bleue I ».

24 janvier : S. BALIBAR (Ecole Normale Supérieure) : « Equilibre dynamique de surfaces libres ou rugueuses : cas des cristaux d'hélium ».

31 janvier : J.J. METOIS (C.R.M.C.C., Marseille) : « Morphologie des cristaux métalliques en milieu pur : formes cinétiques et formes d'équilibre ».

7 février : J. LAPUJOLADE (Service de Physique des atomes et des surfaces, Saclay) : « Etude de la stabilité thermique des faces cristallines de cuivre par diffraction d'atomes d'hélium ».

6 mars : B. CASTAING (C.R.T.B.T., Grenoble) : « La résistance de Kapitza à l'interface hélium liquide — hélium solide ».

## COURS DONNÉ A L'UNIVERSITÉ DE GRENOBLE

### *MAGNÉTISME ET CRISTALLISATION DANS LES FLUIDES QUANTIQUES*

Un liquide de fermions dégénéré en interaction peut être l'objet d'instabilités très diverses. Une attraction peut conduire soit à une instabilité de densité, du type séparation liquide gaz, soit à un état superfluide, avec condensation de Bose Einstein de paires liées, dans un état de spin singulet ou triplet. A l'inverse une répulsion peut conduire à une instabilité magnétique : c'est le modèle du magnétisme itinérant largement étudié depuis Stoner. A ces insta-

bilités macroscopiques viennent s'ajouter les instabilités de vecteur d'onde fini, avec apparition spontanée d'une modulation spatiale, de densité (pour une attraction) ou d'aimantation (pour une répulsion). En couplage fort, ces phases modulées se ramènent à un état cristallisé.

L'objet de ces cours était de comparer ces différentes instabilités dans des cas simples (électrons libres, ou mieux électrons sur un réseau dans le modèle de Hubbard), de préciser leurs conditions d'apparition et d'étudier leur compétition.

### 1) *Le modèle de Hubbard*

C'est un modèle de liaisons fortes, où les fermions se déplacent sur un réseau discret, avec une amplitude de saut  $T_{ij}$  du site  $i$  au site  $j$ . Du fait du principe d'exclusion, l'interaction  $U$  sur un même site ne couple que des fermions de spins opposés ; on peut inclure aussi une interaction  $V$  entre sites voisins (indépendante du spin), qui enrichit beaucoup le problème. Le cas le plus intéressant est celui d'un réseau qui se décompose en deux sous réseaux (par exemple le cubique simple ou le cubique centré). Si  $T_{ij}$  ne couple que des premiers voisins, le problème présente une symétrie « électron-trou » : la densité d'états  $\gamma(\epsilon)$  est paire et la surface  $\epsilon = 0$  est un polyèdre dont les faces sont des plans parallèles.

Pour une bande demi-remplie (un fermion par site), la surface de Fermi est précisément ce polyèdre  $\epsilon = 0$ . De ce fait, une interaction  $U$  infinitésimale suffit à faire apparaître des ondes de densité de spin ( $U > 0$ ) ou de charge ( $U < 0$ ). Ces états ont une structure très analogue à l'état supraconducteur du type BCS (qui lui existe pour  $U < 0$  quel que soit le remplissage). De fait, les trois états ont la même énergie en fonction de  $|U|$ . Cette ressemblance n'est pas accidentelle : suivant une suggestion de Haldane, on peut effectuer une transformation électron-trou sur un seul spin. On transforme ainsi le problème  $U > 0$  en  $U < 0$ . Selon son orientation, l'onde de densité de spin devient soit une onde de densité de charge, soit un état supraconducteur : ces deux états sont donc dégénérés. La dégénérescence disparaît lorsqu'on s'écarte du remplissage moitié : c'est alors l'état supraconducteur qui est favorisé.

### 2) *Influence du couplage entre sites voisins*

On pourrait penser que  $V$  renforce simplement le couplage local  $U$  : en fait, la situation est plus compliquée. Si l'on considère par exemple l'instabilité ferromagnétique dans une approximation de champ moyen, on constate qu'une *répulsion*  $V > 0$  favorise le ferromagnétisme lorsque la bande est presque vide (nombre de fermions  $n$  très inférieur au nombre de sites  $N$ ), mais qu'au

contraire elle l'inhibe lorsque  $n$  est comparable à  $N$ . De même, l'interaction  $V$  emporte la décision dans la compétition entre ondes de densité de charge et supraconductivité lorsque  $U < 0$  : une répulsion  $V$  favorise l'onde de densité de charge, et inversement. De ce fait, on aboutit à une contradiction lorsque  $V > 0$ ,  $n \neq N$  : l'écart du remplissage moitié favorise la supraconductivité, alors que  $V$  favorise la modulation de charge. On s'attend à une transition du premier ordre, vraisemblablement vers une structure incommensurable, ce qui rend une théorie détaillée difficile.

Lorsque  $V$  est attractif, une nouvelle possibilité apparaît : une supraconductivité *triplet*, où les paires condensées se forment dans un état  $\ell = 1$ . C'est ce qui se produit dans  $^3\text{He}$  superfluide, et depuis peu cette éventualité est très étudiée dans des matériaux à bande étroite. Un tel état est possible même si  $U > 0$  (dans un état impair, les fermions ne se trouvent jamais sur le même site). Lorsque  $U < 0$ , supraconducteurs singulets et triplets sont en compétition : c'est le plus lié qui gagne. A priori, rien ne s'oppose à une coexistence de la supraconductivité triplet avec le ferromagnétisme : l'appariement est possible avec un seul type de spin. On s'attend alors à deux transitions supraconductrices, correspondant à la condensation des fermions de spins majoritaires et minoritaires (c'est ce que l'on observe dans  $^3\text{He}$  superfluide sous champ magnétique). En réalité, le problème reste très ouvert : aligner les spins diminue l'énergie de condensation superfluide, et il est très possible que l'on puisse récupérer une partie de cette énergie en supprimant l'ordre magnétique à *longue distance*. Le ferromagnétisme macroscopique serait ainsi détruit, bien que persistant au niveau local. Le problème mérite d'être approfondi. (Bien des questions sont ouvertes : par exemple, pourquoi une répulsion locale  $U$  traitée *au second ordre* ne conduit-elle pas toujours à un état supraconducteur triplet ?)

### 3) La limite du couplage fort

Pour cerner le diagramme d'états, il est utile de compléter l'analyse classique en couplage faible (à la « BCS ») par une étude du couplage fort, où le saut d'un fermion d'un site à l'autre peut être traité comme une perturbation. Pour une forte *attraction*  $U < 0$ , la physique est très simple : les fermions se regroupent en paires localisées de spins opposés, qui constituent des *bosons à cœur dur* (du fait du principe d'exclusion). Ces bosons peuvent se déplacer par ionisation virtuelle : il en résulte une largeur de bande effective et une répulsion entre bosons voisins, toutes deux d'ordre  $T^2/U$ . L'interaction  $V$  ajoute un couplage supplémentaire  $4V$  entre sites voisins. Le problème est isomorphe à un système de spins  $1/2$ , avec des couplages parallèles et transverses différents. Si  $V > 0$ , on retrouve l'onde de densité de charge. Si  $V < 0$ , on passe à un état supraconducteur, qui disparaît par séparation liquide gaz lorsque  $V < -T^2/U$ .

Le problème est plus délicat dans le cas répulsif ( $U > 0$ ). Pour une bande demi-pleine, on a exactement un fermion par site, et seule la distribution des spins reste à fixer. Le saut virtuel d'un fermion conduit à un échange  $J = T^2/U$  *antiferromagnétique*, et l'état fondamental est la limite « atomique » de l'onde de densité de spin.

La situation change radicalement lorsque  $n < N$  : en ce cas, les lacunes cherchent à minimiser leur énergie en construisant une onde de Bloch aussi cohérente que possible, gagnant ainsi une énergie  $\sim T$ . Le désordre des spins s'oppose à cette cohérence : pour  $U \rightarrow \infty$ , l'état fondamental est donc *ferromagnétique*, et non pas antiferromagnétique (théorème de Nagaoka). On peut aborder ce problème sous un angle inhabituel en considérant un système avec *une* lacune et *un* spin retourné (magnon). Pour  $U = \infty$ , le magnon ne bouge pas sauf lorsque la lacune vient le heurter. On se ramène ainsi à un problème à deux corps que l'on peut diagonaliser explicitement. Le magnon correspond à un vecteur d'onde identiquement nul, c'est-à-dire à une rotation *globale* des spins, qui abaisse  $S_z$  sans toucher à  $S^2$  ; c'est une manière de retrouver le ferromagnétisme. Si l'on augmente le nombre de lacunes, on obtient un problème du type « effet Kondo » : le magnon agit comme un diffuseur « à mémoire » (sa position) qui induit une interaction entre les lacunes. Une analyse du type groupe de renormalisation devrait être possible, donnant accès à la densité  $n_s$  pour laquelle l'état ferromagnétique saturé cesse d'être stable : on pourrait ainsi jauger la validité des méthodes plus conventionnelles fondées sur une interaction effective (Kanamori).

En rapprochant tous ces cas limites, on peut construire un diagramme des différents états possibles dans le plan  $(U, V)$ , paramétré par le remplissage  $n/N$ . Ce diagramme est complexe, comprenant toutes les phases mentionnées précédemment : séparation liquide gaz moléculaire ou atomique, supraconductivité singulet ou triplet, ondes de densité de charge ou de spin, ferromagnétisme. Il reste très largement spéculatif, et n'exclut pas des structures plus complexes (coexistence d'ordres différents, structures spirales commensurables ou non, etc.). A ce stade, il n'a qu'une valeur indicative.

#### 4) Ondes de spin dans un ferromagnétique itinérant

Pour les obtenir, le plus simple est de calculer la réponse transverse  $\chi_{\perp}(q, \omega)$  à un champ magnétique perpendiculaire à l'aimantation d'équilibre. La réponse statique  $\chi_{\perp}(q, 0) \sim (Aq^2)^{-1}$  mesure la « raideur » des parois de Bloch. La constante  $A$  est très faible au voisinage du seuil d'instabilité (ferromagnétique faible). Elle devient négative lorsque le remplissage augmente, marquant ainsi le passage à une structure spirale et — en fin de compte — à l'état antiferromagnétique.

L'onde de spin est un mode collectif qui correspond au pôle de  $\chi_{\perp}(q, \omega)$ . Son spectre  $\omega \sim q^2$  est très aplati pour un ferromagnétique faible. On peut le retrouver par un argument macroscopique en écrivant que l'aimantation précesse dans le champ moléculaire local. Il est instructif d'adopter un point de vue hydrodynamique en écrivant une hiérarchie d'équations pour l'aimantation  $\vec{M}$ , le courant d'aimantation  $\vec{J}_M$ , etc. Chacune de ces quantités obéit à une équation de conservation, qui contient les termes habituels : entraînement, diffusion et *précession* dans un champ local qui n'est pas le même pour  $\vec{M}$ ,  $\vec{J}_M$ ... Lorsque l'aimantation d'équilibre est faible, le calcul est extrêmement simple, et redonne en quelques lignes le spectre des ondes de spin, avec en prime l'amortissement dû à la diffusion.

Cette analyse peut en fait s'effectuer dans le cadre plus général d'un liquide de Fermi (à la Landau). Elle s'applique aussi bien aux ferromagnétiques qu'à un paramagnétique dans un champ B appliqué. Dans ce dernier cas, les ondes de spin ont une fréquence finie à  $q = 0$  (c'est la fréquence de Larmor en l'absence d'interaction). Leur dispersion donne accès aux diverses composantes de l'interaction entre quasi particules. Dans le cas des électrons, qui possèdent une charge, la précession des spins est couplée au mouvement orbital de rotation cyclotron. Le formalisme hydrodynamique permet de décrire très simplement ces modes couplés, tels qu'ils ont été observés, par exemple, dans les métaux alcalins.

Les ondes de spin peuvent à leur tour influencer sur la température de Curie de l'état ferromagnétique. Très généralement, la température critique peut provenir de l'excitation thermique des particules individuelles ou des modes collectifs. Le premier cas correspond par exemple à la supraconductivité BCS (rupture des paires liées), ou au modèle de Stoner en magnétisme (réarrangement des surfaces de Fermi). Les modes collectifs sont au contraire responsables du  $T_c$  d'un superfluide en couplage fort (on ne casse pas les paires, on vide simplement l'état  $q = 0$ ). De même l'excitation thermique des ondes de spin peut détruire le ferromagnétisme, chaque magnon réduisant l'aimantation d'un quantum. Si on en excite assez, de vecteur d'onde  $q < \xi^{-1}$ , on détruit l'ordre magnétique à grande distance, tout en le préservant à une échelle  $< \xi$ . Ce mécanisme « collectif » de température critique est efficace lorsque le spectre des magnons est plat (ferromagnétique faible). Il pourrait intervenir dans les métaux où un ordre local a été observé.

P.N.

ACTIVITÉS SCIENTIFIQUE

I. - P. NOZIÈRES anime le groupe de Physique Théorique de l'Institut Laue-Langevin à Grenoble. Ce groupe comprend une dizaine de physiciens confirmés qui y effectuent des séjours limités (de un à cinq ans), et travaillent dans des domaines très divers. En 1983-1984, l'activité portait sur les thèmes suivants :

— *Physique nucléaire* : effets d'interactions faibles dans les forces nucléaires (B. DESPLANQUES, S. NOGUERA), modèles semi-classiques de la fusion (R. HASSE).

— *Physique des liquides* : viscoélasticité et structure des liquides complexes (S. HESS), rhéologie des suspensions (D. QUEMADA).

— Transitions de phase : couches adsorbés, conducteurs unidimensionnels (H.J. SCHULTZ), systèmes désordonnés (H.J. SOMMERS, T. ZIMAN).

Ne sont détaillés que les thèmes auxquels P. NOZIÈRES a effectivement participé.

*Structure et dynamique des interfaces liquide-solide* (avec M. UWAHA)

Un premier axe d'étude a été l'interprétation de la morphologie et de la croissance des cristaux comme un liquide de marches (un certain nombre de résultats nouveaux ont d'ailleurs été présentés dans le cadre du cours). La nature de l'interaction *élastique* entre deux marches cristallines a été précisée : pour bien la comprendre, il est essentiel de séparer la déformation élastique d'un cristal parfait de taille finie (sinon on trouve une loi en  $\text{Log } d$  au lieu de  $1/d^2$ ). Connaissant l'énergie  $E(n)$  d'une distribution de marches, on interprète facilement toutes les propriétés d'équilibre et de croissance de l'interface (voir résumé du cours).

Le mécanisme des sources de Frank et Read en présence d'une grande densité de dislocations a été élucidé. Lorsqu'un défaut aligne les marches piégées, les seuils sont considérablement abaissés (il suffit que deux marches se croisent pour s'échanger et progresser sur la surface). Les seuils de croissance correspondants ont été calculés. En régime de fusion stationnaire, les profils d'interface ont été déterminés, en particulier au voisinage du seuil d'effondrement des facettes.

L'étape suivante est l'étude des mécanismes dissipatifs au niveau de l'interface. Pour cela, il faut disposer de données expérimentales précises et complètes sur les mobilités et les résistances Kapitza en fonction de la *température* et de l'*orientation* de l'interface. Un certain nombre d'expériences ont été proposées, qui doivent permettre d'atteindre ces quantités dans une géométrie bien contrô-

lée (interface large et plan). Ces expériences font intervenir des résonances acoustiques ou thermiques de part et d'autre de l'interface. Leur analyse quantitative s'appuie sur une description thermodynamique de la dissipation en surface et en volume. C'est seulement lorsqu'on disposera de ces résultats que l'on pourra élucider les mécanismes microscopiques.

On peut atteindre la mobilité indirectement en mesurant la transmission acoustique, profondément modifiée par la fusion périodique du cristal. L'effet est important, mais difficile à exploiter quantitativement à cause des effets de réfraction. Une autre méthode beaucoup plus directe est fondée sur la variation de cette transmission avec la vitesse de l'interface. Cet effet du second ordre provient des termes d'ordre  $v^2$  dans les équations hydrodynamiques : à basse température, il est très important (la transmission, presque nulle, redevient finie pour un interface mobile). Pour l'étudier, il a fallu d'abord développer une dynamique de l'interface à l'ordre  $v^2$  (dans un modèle du type Van der Waals). On écrit ainsi des équations de mouvement pour le courant de masse (piloté par  $\mu + v^2/2$ ) et la vitesse de l'interface (pilotée par  $p + \rho v^2$ ), qui font intervenir des masses d'interfaces différentes (dépendant du choix de la surface de séparation). Sur cette base, on peut étudier la transmission acoustique, les ondes capillaires, etc., pour un interface mobile. L'expérience proposée consiste à moduler l'interface à basse fréquence  $\omega_1$ , et à transmettre une onde acoustique de fréquence  $\omega_2$ . Le signal à  $(\omega_1 \pm \omega_2)$  est directement proportionnel à la vitesse de fusion.

Dans le même ordre d'idées, M. UWABA a étudié la propagation du quatrième son dans une « superfuite » au voisinage du point de cristallisation : les parois des pores sont alors couvertes d'une couche solide, qui fond alternativement sous l'influence de l'onde de pression. Le diamètre des pores est ainsi modulé, ce qui modifie la vitesse du quatrième son (l'effet est observé). Quand on tient compte des effets thermiques (chaleur latente à la fusion), ce quatrième son est profondément modifié : on peut atteindre une région où c'est l'entropie qui est modulée, et non plus la pression. Le fluide normal ne bouge pas (il est piégé par les pores) : il est absorbé sur place par la cristallisation, l'inertie restant celle du superfluide. Outre le spectre  $\omega(q)$ , on peut calculer l'effet Doppler dans un écoulement superfluide surimposé, qui fournit une signature très directe des différents régimes (et qui permet de s'affranchir de l'interaction de Van der Waals avec les parois, mal connue).

PUBLICATIONS

M. UWAHA, *Sound propagation in a superleak covered with solid  $^4\text{He}$*  (sous presse au Journal de Physique).

*Température de transition des supraconducteurs* (avec S. SCHMITT-RINK)

Les supraconducteurs usuels correspondent à un régime de couplage faible, où les paires de Cooper, peu liées, ont un rayon très supérieur à la distance atomique ; la liaison est alors coopérative. Avec des matériaux à bande étroite, on peut envisager un régime de couplage fort, où les paires sont d'échelle atomique, se comportant comme des bosons localisés à cœur dur. Il n'y a pas de différence qualitative entre les deux régimes : on passe continuellement de l'un à l'autre.

La température critique, néanmoins, est d'origine très différente. En couplage faible, on casse les paires, et  $T_c$  est de l'ordre de l'énergie de liaison  $\Delta$ . En couplage fort, au contraire,  $T_c$  marque la condensation de Bose Einstein d'entités atomiques, due au vidage de l'état  $q = 0$  et non pas à la dissociation :  $T_c$  est contrôlé par la *masse totale* des paires. D'où l'intérêt de comprendre la transition entre ces deux régimes : le passage est-il continu ? Existe-t-il un  $T_c$  maximum en couplage intermédiaire.

Le problème a été abordé pour deux modèles, qui donnent des résultats différents en couplage fort. Dans le modèle de Hubbard attractif (électrons sur un réseau),  $T_c \rightarrow 0$  lorsque  $U \rightarrow \infty$  (les bosons deviennent infiniment lourds, car il faut les casser pour les faire bouger). Dans un modèle continu, au contraire,  $T_c$  devient indépendant de  $U$  (la masse totale des paires liées est constante). En étudiant l'instabilité de l'état normal, on a pu montrer que l'évolution du couplage faible au couplage fort était continue, et que  $T_c$  passait par un maximum que l'on peut évaluer qualitativement. Dans son état actuel, le modèle n'est guère réaliste, mais il dégage des tendances importantes.

II. - Outre cette activité centrée à Grenoble, nous envisageons la constitution progressive d'un petit groupe de théoriciens au sein du Collège. Pour l'instant, ce groupe ne comprend qu'une personne, D. SAINT JAMES, abritée au sein du Laboratoire de Physique Corpusculaire. Deux types de problèmes ont été étudiés, en collaboration avec C. ASLANGUL.

*Transitions entre excitons de Frenkel et excitons de Wannier*

Le mouvement interne de la paire électron-trou est traité d'un point de vue variationnel. Pour un couplage à très courte portée, on trouve un état lié

unique. Pour des forces à longue portée, au contraire, on trouve un continuum étroit d'instabilités. On peut ainsi étudier la dynamique d'une excitation initiale de type Frenkel. L'électron et le trou se séparent progressivement, et l'on voit se développer une onde de densité de charge dynamique dont l'amplitude tend vers zéro comme  $t^{-1}$ . Dans une approximation continue pour le réseau, on obtient naturellement, quoique de manière non simple et évidente, un spectre hydrogénoïde dont le plus bas état pourrait manquer, ce qui rappelle ce qui est observé dans certains cas ( $\text{Cu}_2\text{O}$ ).

### *Chaînes polyéniques à une dimension*

Ces chaînes présentent une conductivité anormale que l'on explique généralement à l'aide d'un modèle dû à Schrieffer, Su et Heeger : l'interaction électron-phonon conduit à une dimérisation (formation de doubles liaisons), les excitations prenant la forme de solitons.

En utilisant une approximation de champ moléculaire, on peut examiner l'influence de la répulsion électron-électron. Celle-ci s'oppose à la formation de doubles liaisons. Il en résulte un diagramme de phase : dans une première région, la chaîne est dimérisée, dans une seconde elle présente une structure d'onde de densité de spin antiferromagnétique sans dimérisation, et dans une région très étroite coexistence des deux phénomènes. Ce diagramme peut être tracé dans le plan de deux paramètres mesurant l'intensité de l'interaction électron-phonon et de la répulsion électron-électron rapportées à la largeur de bande.

Dans le cas du polymère le plus étudié, le polyacétylène, la valeur des paramètres est telle que le point représentatif se trouve près de la frontière entre ces trois états ; il est difficile de conclure ! (pour un modèle de Hubbard, on peut faire un calcul exact, qui réduit de beaucoup la région d'existence de l'état dimérisé).

Si on abandonne la dimérisation, il faut expliquer le fait qu'aucun effet magnétique ne semble avoir été observé, et rendre compte de la conductivité anormale. Pour cela, on remarque que dans le cas d'une onde de densité de spin antiferromagnétique, les excitations prennent aussi la forme d'excitons. Ces excitons sont en fait des parois de Bloch dans le système à une dimension. (Tout comme les solitons de Schrieffer, Su et Heeger étaient, en fait, des parois de Bloch dans un système d'antiphase). Ces solitons présentent des propriétés analogues à ceux de Schrieffer *et al* : relation charge-spin, existence d'un état en milieu de bande, conduction sans spin, etc. et fournissent donc la même explication de la conductivité anormale.

PUBLICATIONS

C. ASLANGUL and D. SAINT-JAMES, *Excitons ins a 1-d crystal with an electron-hole interaction of variable range and strength*, J. Physique, 44, 359-374 (1983).

C. ASLANGUL and D. SAINT-JAMES, *Non linear spin-density excitation in 1-d organic polymers*, J. Physique, 44, 953-955 (1983).

C. ASLANGUL and D. SAINT-JAMES, *Elasticity vs electron repulsion in 1-D polymers. An attempt to determine the ground state*, Physics Letters, 96, A-5, 247-249 (1983).

CONFÉRENCES

P. NOZIÈRES :

— Grenoble, septembre 1983, Congrès international sur la technologie des aimants : *The earth magnetic field : an instable dynamo*.

— Université d'Aix La Chapelle, avril 1984 : *From excitons to electron-hole plasmas : the interplay of pairing and screening*.

ACTIVITÉS DIVERSES, MISSIONS

P. NOZIÈRES assure cette année la présidence de la Société Française de Physique. A ce titre, il a dû effectuer un certain nombre de déplacements pour représenter la Société auprès des instances européennes (Genève, Winterthur), ou pour mettre en place les activités nationales (Nice). Une mission est prévue pendant l'été 1984 en Hongrie, sur invitation du Central Research Institute for Physics (K.F.K.I.).