L'ORDRE DANS LES SYSTÈMES A DEUX DIMENSIONS

B. Jancovici

JOURNAL DE PHYSIQUE *Colloque* C5a, *supplément au n°* 10, *Tome* 32, *Octobre* 1971, *page* C5a-185

L'ORDRE DANS LES SYSTÈMES A DEUX DIMENSIONS

B. JANCOVICI

Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies
Université de Paris-Sud, Orsay (*)

Résumé. — Ce rapport est un travail de revue sur les problèmes théoriques de l'ordre « à longue distance » dans les systèmes à deux dimensions. Quoique de nombreux systèmes à deux dimensions ne puissent pas avoir d'ordre à longue distance au sens strict, ils peuvent avoir un quasi-ordre dont on discutera des explications possibles.

Abstract. — This report is a review on the theoretical problems of the « long-range » order in two-dimensional systems. Although many two-dimensional systems cannot have, strictly speaking, a long-range order, they may have a quasi-order, possible explanations of which will be discussed.

I. **Absence d'ordre à longue distance.** — Rappelons que, si un système est doué d'un paramètre d'ordre, cela implique l'existence de corrélations à portée infinie, d'où le nom d'ordre à longue distance. Par exemple, un ferromagnétique en dessous de son point de Curie peut être caractérisé indifféremment soit en disant que le spin sur un site i quelconque a une valeur moyenne $< \mathbf{S}_i >$ non nulle (rupture de symétrie), soit en disant que la fonction de corrélation $< \mathbf{S}_i . \mathbf{S}_j >$ tend vers une limite différente de zéro pour des sites i et j infiniment éloignés. L'ordre dans un superfluide ou un supraconducteur est un ordre à longue distance non diagonal.

On a montré théoriquement que, dans de nombreux cas, un tel ordre à longue distance ne peut pas s'établir dans un système à une ou deux dimensions, à température finie. Un tel ordre serait détruit par les fluctuations thermiques de grande longueur d'onde, dont l'importance relative est d'autant plus grande que le nombre de dimensions est plus faible.

Considérons par exemple un solide cristallin [1], [2] à n dimensions, formé d'atomes de masse m. Un phonon de petit nombre d'onde k et de fréquence angulaire ck (c est la vitesse du son) a une amplitude fluctuante $\tilde{u}_{\mathbf{k}}$ à laquelle est associée une énergie potentielle d'oscillateur harmonique dont la valeur moyenne est donnée par l'équipartition de l'énergie à la température T :

$$\frac{1}{2} mc^2 \, k^2 < \tilde{u}_{\mathbf{k}}^2 > = \frac{n}{2} k_{\mathrm{B}} T$$

(le symbole $< \ldots >$ désigne une moyenne thermique). Le déplacement carré moyen $< u_i^2 >$ d'un atome i est la somme des contributions $< \tilde{u}_{\mathbf{k}}^2 >$ venant de chaque mode de vibration :

$$< u_i^2 > = \sum_{\mathbf{k}} < \tilde{u}_{\mathbf{k}}^2 > \sim \int_0 \frac{\mathrm{d}^n \mathbf{k}}{k^2} .$$

Si $n = 1$ ou 2, cette somme diverge ; l'atome ne reste pas lié à son site, et le « solide » n'est pas un solide au sens habituel du terme.

Un raisonnement analogue [3], [4] montre qu'il ne peut pas y avoir un paramètre d'ordre supraconducteur dans un système à une ou deux dimensions. Ce paramètre d'ordre $\psi(\mathbf{r})$ fluctue surtout par sa phase $\varphi(\mathbf{r})$; nous considérerons l'amplitude ψ_0 comme constante :

$$< \psi(\mathbf{r}) > \; = \; \psi_0 < \mathrm{e}^{i\varphi(\mathbf{r})} > \; = \; \psi_0 \, \mathrm{e}^{-\frac{1}{2} < \varphi(\mathbf{r})^2 >}$$

(la dernière égalité s'obtient en supposant que $\varphi(r)$ a une distribution statistique gaussienne). La vitesse locale du supercourant est

$$\mathbf{v}(\mathbf{r}) = \frac{1}{m} \, \mathbf{grad} \, \varphi(\mathbf{r}) .$$

Chaque composante de Fourier $\tilde{\varphi}_{\mathbf{k}}$ de $\varphi(\mathbf{r})$ contribue à l'énergie cinétique moyenne par un terme

$$\psi_0^2 \frac{k^2 < | \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}} |^2 >}{2 \, m} = \frac{1}{2} k_{\mathrm{B}} T$$

(du moins pour un supraconducteur neutre). Donc, la fluctuation de $\varphi(r)$,

$$< \varphi(\mathbf{r})^2 > = \sum_{\mathbf{k}} < | \tilde{\varphi}_{\mathbf{k}} |^2 > \sim \int_0 \frac{\mathrm{d}^n \mathbf{k}}{k^2} ,$$

diverge si $n = 1$ ou 2, et $< \psi(\mathbf{r}) >$ s'estompe alors à zéro.

(*) Laboratoire associé au Centre National de la Recherche Scientifique. Adresse postale : Laboratoire de Physique Théorique et Hautes Energies, Bâtiment 211, Université de Paris-Sud, Centre d'Orsay, F-91, Orsay, France.

Plus généralement, on est amené à penser qu'un ordre à longue distance associé à la rupture d'un groupe de symétrie continu est impossible à une ou deux dimensions, du moins si les forces sont à courte portée. Cette absence d'ordre à longue distance a pu être démontrée *rigoureusement*, pour diverses classes de systèmes. Les démonstrations, voisines les unes des autres, utilisent une inégalité mathématique due à Bogoliubov [5] pour calculer une borne inférieure pour les fluctuations d'une variable, lorsqu'un paramètre d'ordre est présent ; on montre alors que des fluctuations aussi fortes conduisent à une contradiction. On obtient ainsi les résultats suivants :

A une ou deux dimensions, il ne peut pas y avoir d'ordre cristallin ; il n'existe aucun vecteur de réseau réciproque **K** (autre que zéro) tel que la composante de Fourier de la densité $\rho_{\mathbf{K}}$ ait une valeur moyenne non nulle. Ce résultat a été établi [6] sous des hypothèses assez générales concernant les forces interatomiques ([1]). Ici, les variables dont on étudie les fluctuations sont les composantes de Fourier $\rho_{\mathbf{K}+\mathbf{k}}$ voisines de $\rho_{\mathbf{K}}$, engendrées par les distorsions thermiques du réseau.

A une ou deux dimensions, il ne peut pas y avoir d'ordre à longue distance spontané ferromagnétique ou antiferromagnétique, dans un modèle de Heisenberg *isotrope* avec interactions d'échange à portée finie [8], [9], ou dans un modèle d'électrons itinérants [10]. Les fluctuations qui empêchent l'aimantation spontanée (ou l'aimantation d'un sous-réseau dans le cas antiferromagnétique) sont des modes de torsion dans lesquels la direction des spins varie progressivement de site en site. De tels modes n'existent pas dans le modèle d'Ising ; on sait bien que le modèle d'Ising à deux dimensions, lui, peut avoir une aimantation spontanée ([2]). Si le modèle de Heisenberg à 2 dimensions est très anisotrope, et voisin d'un modèle d'Ising, il s'ordonne à basse température comme un modèle d'Ising [12], [13]. Si l'anisotropie est dans la direction Oz, les directions Ox et Oy étant équivalentes, il ne peut pas en tout cas y avoir d'aimantation spontanée dans le plan xOy.

A une ou deux dimensions, il ne peut pas y avoir d'ordre superfluide [14], c'est-à-dire qu'il n'y a pas de condensation de Bose-Einstein (même en présence d'interactions), ou, ce qui revient au même, il n'y a pas d'ordre à longue distance non diagonal. En présence d'un condensat dans l'état de quantité de mouvement zéro, les fluctuations thermiques engendreraient une densité de particules infinie dans l'ensemble des états de faible quantité de mouvement, ce qui est absurde. On montre par un raisonnement analogue qu'il ne peut pas y avoir d'ordre supraconducteur à une ou deux dimensions.

Les résultats précédents peuvent s'étendre aux systèmes analogues qui ne sont pas strictement à une ou deux dimensions, mais qui ont une section ou une épaisseur finie [15], tout en étant infinis dans l'autre ou les autres dimensions : fil de longueur infinie, ou film de surface infinie.

II. Comportement de quelques systèmes à deux dimensions. — Malgré les considérations théoriques qui précèdent, c'est un fait que beaucoup de systèmes à deux dimensions, ou de faible épaisseur, ont des caractéristiques qui semblent impliquer l'existence de quelque chose qui ressemble beaucoup à un ordre à longue distance.

La simulation sur ordinateur d'un système de disques durs [16] montre que ce système subit une transition de phase quand on en augmente la densité, et passe dans un état apparemment ordonné qui ressemble beaucoup à un cristal à deux dimensions. Pour un système d'ellipses dures [17], on observe de plus un état de type nématique, avec un ordre directionnel, alors que là aussi, des considérations simples sur les fluctuations de type élastique semblent interdire l'ordre [18].

Dans la nature, on connaît des systèmes magnétiques où se manifeste un ordre à deux dimensions. Un cas particulièrement net est celui d'antiferromagnétiques du type de K_2NiF_4. Ces substances possèdent des plans cristallins bien séparés, à l'intérieur de chacun desquels la diffusion des neutrons [19], [20] révèle un ordre à deux dimensions. Ici, l'existence d'une très faible anisotropie dans le couplage spin-spin peut suffire à expliquer l'ordre [19], [21], [22].

Et puis, il est bien connu qu'il existe des films d'hélium superfluide et des films supraconducteurs.

Ainsi, même en mettant à part les systèmes magnétiques, où le modèle de Heisenberg *isotrope* à deux dimensions n'est jamais parfaitement réalisé, il est clair qu'il existe de nombreux systèmes à deux dimensions où, quoique l'ordre à longue distance soit théoriquement interdit, il y a un quasi-ordre à longue distance. Nous allons examiner trois types d'explications possibles pour ce paradoxe.

III. Les systèmes réels sont finis. — Les démonstrations de l'absence d'ordre à longue distance pour deux dimensions ne sont valables que pour un système d'épaisseur finie mais de surface infinie. Une explication du quasi-ordre peut être recherchée dans le caractère fini des systèmes réels [23].

Reprenons le calcul du déplacement carré moyen d'un atome dans un cristal à deux dimensions, formé d'un nombre d'atomes N fini [24]. Soit a la distance interatomique ; le nombre d'onde des phonons a une valeur minimum de l'ordre de $1/a\sqrt{N}$, et le déplacement carré moyen est de l'ordre de Log N. Dans un « mono-

([1]) Deux cas intéressants étaient exclus par ces hypothèses : les potentiels à cœur dur et le potentiel coulombien (en dernière analyse, un cristal est fait de noyaux et d'électrons en interaction coulombienne). L'absence d'ordre dans ces deux cas a été montrée plus récemment, mais la démonstration [7] demande sans doute à être améliorée.

([2]) Même un modèle d'Ising à une dimension peut avoir une aimantation spontanée, si les interactions entre spins sont à longue portée [11].

cristal à deux dimensions » de 1 cm de côté, $\text{Log}\, N$ n'est guère que de l'ordre de 10 ; à 100 °K, on trouve un déplacement carré moyen qui n'est que $a/10$ environ. Il faut noter que ces considérations ne s'appliquent guère telles quelles aux systèmes réels du type cristal à deux dimensions, car ces systèmes sont toujours portés par une matrice qui joue certainement un rôle essentiel. Par contre, dans les expériences en ordinateur (N y est de l'ordre de quelques centaines de particules au mieux), la valeur finie de N explique bien qu'on observe un quasi-ordre solide ou nématique indiscernable d'un ordre vrai.

Il n'y a pas de condensation de Bose-Einstein possible pour un film d'hélium de surface infinie. Mais pour un film de surface finie, formé de N atomes, un calcul basé sur le modèle d'un gaz de Bose libre prévoit une condensation (3) à une température T inférieure à la température de condensation T_0 d'un gaz à trois dimensions de même densité. Si $\text{Log}\, N$ est grand devant le nombre de couches atomiques du film, on trouve $T \sim T_0/\text{Log}\, N$; sinon, on a des formules plus compliquées. On a pu ainsi rendre compte de l'existence et de la valeur des températures critiques dans des films d'hélium, en supposant que ces films sont composés de domaines de dimensions linéaires de l'ordre de 1 000 Å [25]. Cependant, pour des films d'épaisseur monoatomique étudiés récemment, la transition de phase suggérée par l'existence d'un pic de chaleur spécifique [26] se situe vers 1 °K, ce qui impliquerait des domaines de 10 Å, alors que les défauts du substrat sont à une échelle bien plus grande.

IV. La condensation de Bose en présence d'un champ extérieur. — La démonstration de l'impossibilité d'une condensation de Bose à une ou deux dimensions n'est valable que pour un fluide homogène, car cette démonstration utilise l'invariance par translation. En présence d'un champ extérieur, la condensation devient possible. On a montré explicitement qu'une telle condensation a lieu pour un gaz libre à une ou deux dimensions dans un champ de pesanteur et pour un gaz libre à deux dimensions en rotation [27] (le modèle en rotation a la curieuse propriété qu'un nombre infini de niveaux sont macroscopiquement occupés [28]). Mais dans ces modèles de gaz libre, la densité devient infinie en certains points. Si on ajoute la restriction que la densité doit être partout finie (ce qui est certainement vrai pour un gaz réel avec interactions), on peut à nouveau démontrer qu'il ne peut pas y avoir de condensation de Bose à une ou deux dimensions, même en présence d'un champ extérieur [28], [29]. Cependant, lorsque le gaz libre a un changement de phase, on peut s'attendre à ce que le gaz avec interactions, à qui ce changement de phase est interdit, ait dans son comportement des singularités arrondies, qui soient les restes des singularités vraies du gaz libre.

Une explication vient d'être proposée [30] sur cette base pour le pic de chaleur spécifique observé [26] pour des couches monoatomiques d'hélium. Le modèle est celui d'un gaz de Bose libre à deux dimensions dans un potentiel extérieur harmonique dû à une inhomogénéité du substrat. On trouve une singularité de chaleur spécifique qui ressemble beaucoup au pic expérimental.

V. Le quasi-ordre à longue distance des systèmes infinis à deux dimensions. — Vers 1966, au moment même où l'on démontrait rigoureusement que dans un modèle de Heisenberg isotrope à deux dimensions il ne peut pas y avoir d'ordre à longue distance [8], des calculs [31] (basés sur l'extrapolation, par la méthode des approximants de Padé, d'un développement en série valable à haute température) suggéraient fortement que, dans ce même modèle, la susceptibilité magnétique χ devient infinie à une température finie T_c, tout au moins si le spin est supérieur à $\frac{1}{2}$. Tout récemment, on a trouvé une susceptibilité infinie du même type pour le modèle XY à deux dimensions et spin $\frac{1}{2}$ [32].

La relation entre réponse et fluctuations, qui est dans le modèle de Heisenberg isotrope

$$\chi = \frac{1}{3\,kT} \sum_j < \mathbf{S}_i . \mathbf{S}_j > ,$$

fait qu'une susceptibilité infinie indique une fonction de corrélation à longue portée. Mais ici, puisqu'il n'y a pas d'ordre à longue distance, $< \mathbf{S}_i . \mathbf{S}_j >$ tend vers zéro quand i et j s'éloignent l'un de l'autre. Il est cependant possible qu'il y ait un « quasi-ordre à longue distance », caractérisé par une fonction de corrélation $< \mathbf{S}_i . \mathbf{S}_j >$ qui tend vers zéro à longue distance, mais suffisamment lentement pour que la somme $\sum_j < \mathbf{S}_i . \mathbf{S}_j >$ soit infinie, et ceci à toute température $T \leqslant T_c$. Un tel comportement est effectivement celui qu'on trouve pour des modèles simples : le modèle de Heisenberg classique traité dans une approximation harmonique [33] ou le solide harmonique [34]. Pour ces modèles, la fonction de corrélation décroît en fonction de la distance R_{ij} entre les sites i et j comme $R_{ij}^{-\alpha T}$, et elle cesse d'être intégrable pour $T \leqslant T_c = 2/\alpha$. Il est possible que les films d'hélium superfluide aient un quasi-ordre non diagonal d'un type analogue [35].

Pratiquement, le quasi-ordre ressemblera beaucoup à un ordre vrai. L'existence d'un quasi-ordre dans un cristal ou une substance magnétique donnera lieu à une diffusion de Bragg très voisine de celle que produirait un ordre vrai [36], [37]. D'autre part, dans un cristal, le quasi-ordre à longue distance s'accompagne d'un ordre directionnel [6] : quoique chaque atome ait des fluctuations de position infinies, deux atomes voisins se déplacent avec ensemble et le segment qui les joint a une direction moyenne bien définie. Quant à la supraconductivité, un quasi-ordre pourrait y suffire [37].

Le comportement thermodynamique au voisinage

(3) Dès lors que N est fini, il n'y a pas de transition de phase au sens strict d'une singularité mathématique ; mais le nombre de particules dans l'état fondamental se met à croître très brusquement au voisinage d'une certaine température.

de la température T_c à laquelle la susceptibilité devient infinie n'est pas clair. Dans le modèle simple du solide harmonique, T_c n'est pas une singularité thermodynamique : l'énergie interne est une fonction régulière de T, quel que soit T. On ne sait pas ce qu'il en serait dans un modèle anharmonique.

V. **Conclusion.** — Nous emprunterons notre conclusion à l'un des articles [37] que nous avons cités : l'absence d'ordre à longue distance dans des systèmes à deux dimensions, quoique d'un intérêt de principe considérable, n'entraîne aucun changement radical de la plupart des propriétés physiques.

Bibliographie

[1] PEIERLS (R. E.), *Ann. Inst. Henri Poincaré*, 1935, **5**, 177.
[2] LANDAU (L. D.), *Phys. Z. Soviet.*, 1937, **11**, 26.
[3] DE GENNES (P. G.), « 1965 Tokyo Lectures in Theoretical Physics », édité par KUBO (R.), Vol. I, p. 117, Benjamin, New York.
[4] RICE (T. M.), *Phys. Rev.*, 1965, **140**, A 1889.
[5] BOGOLIUBOV (N. N.), *Phys. Abhandl. Sowjet.*, 1962, **6**, 1, 113, 229.
[6] MERMIN (N. D.), *Phys. Rev.*, 1968, **176**, 250.
[7] FERNÁNDEZ (J. F.), *Phys. Rev.*, 1970, **B 1**, 1345, et à paraître.
[8] MERMIN (N. D.) et WAGNER (H.), *Phys. Rev. Letters*, 1966, **17**, 1133.
[9] MERMIN (N. D.), *J. Math. Phys.*, 1967, **8**, 1061.
[10] WEGNER (F.), *Phys. Letters*, 1967, **24A**, 131.
[11] DYSON (F. J.), *Comm. Math. Phys.*, 1969, **12**, 91, 212, 1971, **21**, 269.
[12] GINIBRE (J.), *Comm. Math. Phys.*, 1969, **14**, 205.
[13] ROBINSON (D. W.), *Comm. Math. Phys.*, 1969, **14**, 195.
[14] HOHENBERG (P. C.), *Phys. Rev.*, 1967, **158**, 383.
[15] CHESTER (G. V.), FISHER (M. E.) et MERMIN (N. D.), *Phys. Rev.*, 1969, **185**, 760.
[16] ALDER (B. J.) et WAINWRIGHT (T. E.), *Phys. Rev.*, 1962, **127**, 359.
[17] VIEILLARD-BARON (J.), Thèse, 1970, Orsay ; *J. Chem. Phys.*, *Phys. Rev.* 1971, **A 4**, 675.
[18] STRALEY (J. P.), *Phys. Rev.*, 1971, **A 4**, 675.
[19] BIRGENAU (R. J.), GUGGENHEIM (H. J.) et SHIRANE (G.), *Phys. Rev.*, 1970, **B 1**, 2211.
[20] SKALYO (J. Jr), SHIRANE (G.) et BIRGENEAU (R. J.), *J. Physique*, 1971, **32**, Suppl. C1-883, et références citées là.
[21] LINES (M. E.), *Phys. Rev.*, 1967, **164**, 736.
[22] RASTELLI (E.) et REATTO (L.), *J. de Phys.*, 1971, **32**, Suppl. C1-884.
[23] IMRY (Y.), *Ann. of Phys.*, 1969, **51**, 1.
[24] GUNTHER (L.), *Phys. Letters*, 1967, **25A**, 649 ; erratum **26A**, 216.
[25] ZIMAN (J. M.), *Phil. Mag.*, 1953, **44**, 548.
[26] BRETZ (M.) et DASH (J. G.), *Phys. Rev. Letters*, 1971, **26**, 963.
[27] WIDOM (A.), *Phys. Rev.*, 1968, **176**, 254.
[28] REHR (J. J.) et MERMIN (N. D.), *Phys. Rev.*, 1969, **B 1**, 3160.
[29] FERNÁNDEZ (J. F.), *Phys. Rev.*, 1971, **A 3**, 1104.
[30] CAMPBELL (C. E.), DASH (J. G.) et SCHICK (M.), *Phys. Rev. Letters*, 1971, **26**, 966.
[31] STANLEY (H. E.) et KAPLAN (T. A.), *Phys. Rev. Letters*, 1966, **17**, 913 ; *J. Appl. Phys.*, 1967, **38**, 975.
[32] BETTS (D. D.), ELLIOTT (C. J.) et DITZIAN (R. V.), à paraître.
[33] WEGNER (F.), *Z. Physik*, 1967, **206**, 465.
[34] JANCOVICI (B.), *Phys. Rev. Letters*, 1967, **19**, 20.
[35] REATTO (L.), *Phys. Letters*, 1968, **26A**, 400.
[36] IMRY (Y.) et GUNTHER (L.), *Phys. Letters*, 1969, **29A**, 483.
[37] MIKESKA (H. J.) et SCHMIDT (H.), à paraître.