

PLAN DE LA PRESENTATION

I. CARACTERES GENERAUX DES SYMETRIES BRISEES

- I. A Classification zoologique d'Ehrenfest.
- I. B Concept de symétries brisées: symétrie rime (généralement) avec entropie.
 - symétries globales continues
 - symétries locales de jauge continues symétries discrètes
- I. C Introduction d'un paramètre d'ordre m.
 - quantifie la brisure de symétrie
 - classification de Landau des transitions
 - au-delà de la classification de Landau

II. THERMODYNAMIQUE LORS D'UNE BRISURE DE SYMÉTRIE

II. A Champ moyen de Weiss

II. B Énergie libre de Landau au voisinage de Tc

- Transition du 2nd ordre
- Transition du 1^{er} ordre
- Changement d'ordre de la transition (point tricritique)
- Exposants critiques et relations entre exposants

III. LA TRANSITION BEREZINSKII-KOSTERLITZ-THOULESS (BKT) A 2D

III. A Fluctuations de grandes longueurs d'ondes du modèle XY. Quasi-ordre de phase

III. B Défauts topologiques : description heuristique de la transition BKT

- Vortex - Antivortex

I. CARACTERES GENERAUX DES SYMETRIES BRISEES

Des transitions réversibles entre phases peuvent être observées

à la limite thermodynamique
à paramètres intensifs fixés (P, T, H, E,...)

A l'origine de ces phénomènes se trouvent les interactions entre entités constituant le système, qui peuvent favoriser différents états d'équilibre macroscopique.

Potentiel Lennard-Jones entre molécules d'un fluide non polaire

Interaction d'échange Heisenberg entre spins classiques



$$u(r) = \frac{-a}{r^6} + \frac{b}{r^{12}}$$

(a, b >0)

$$H = -\sum_{ij} J_{ij}(\boldsymbol{s}_i \cdot \boldsymbol{s}_j)$$

J_{ij} >0 (<0) ferro (antiferro)



Entropie

L'entropie s'oppose à l'établissement de l'ordre

F=E-TS ou G=H-TS

Energie



Lorsque la dérivée d'ordre \mathbf{n} du potentiel chimique par rapport aux variables intensives est discontinue en un point, sur une ligne,.... du diagramme de phase dans l'espace des paramètres intensifs, on a affaire à une transition de phase d'ordre \mathbf{n} .

μ =G/N ou G/M

n =1 ⇒ transition du premier ordre (ex. liquide-gaz; coexistence de phases possibles)

n =2 ⇒ **transition du deuxième ordre** (ex. paramagnétique-ferromagnétique; une phase disparait au profit d'une autre)

n =3 ⇒ **transition du troisième ordre** (ex. condensation de Bose)

 $n = \infty \Rightarrow$ transition d'ordre infini (Berezinskii-Kosterlitz-Thouless)

$$d\mu = -s \, dT + \frac{1}{\rho} \, dp$$



$$d\mu_1 = d\mu_2 \rightarrow \frac{\Delta S}{\Delta(1/\rho)} = \frac{dp}{dT}$$



 $d\mu = -s \, dT - m \, dh$



Le long de la ligne de transition du 2^{ème} ordre

$$\frac{dH}{dT} = \frac{C_1 - C_2}{l_2 - l_1} = \frac{1}{T} \frac{l_1 - l_2}{(\chi_2 - \chi_1)} \qquad \chi = (\frac{\partial m}{\partial H})_T \qquad ; \qquad l = T(\frac{\partial m}{\partial T})_H$$

Variables relatives aux systèmes de fluides				
vs relatives aux systè	mes magnétiques			
Р	h			
V	-M = -Nm			
$\kappa_T = -rac{1}{V}rac{\partial V}{\partial P}$	$\chi = rac{\partial m}{\partial h}$			
A=A(N,V,T)	A=A(N,M,T)			
G = A + PV(P)	G = A - hM(h)			
$P=-rac{\partial A}{\partial V}$	$h=rac{\partial A}{\partial M}$			
$V = rac{\partial G}{\partial P}$	$M=-rac{\partial G}{\partial h}$			
$C_V = -T \left(rac{\partial^2 A}{\partial T^2} ight)_V$	$C_M = -T \left(\frac{\partial^2 A}{\partial T^2} \right)_M$			
$C_P = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2}\right)_P$	$C_{h} = -T \left(\frac{\partial^{2}G}{\partial T^{2}} \right)_{h}$			



Transitions de phases identiques selon Ehrenfest



Fig. 4.8. Critical exponent β as a function of film thickness for Ni(111)/W(110).



- I. B Concept de symétries brisées: symétrie rime (généralement) avec entropie.
 - symétries globales continues
 - symétries locales de jauge continues symétries discrètes



Curie-Landau observent que les transitions de phases sont souvent associées à une brisure de symétrie :

□ les symétries de la phase « basse température » forment un sous-groupe du groupe des symétries de la phase « haute température ».

□ la brisure de symétrie se manifeste par l'apparition d'un paramètre d'ordre qui est nul dans la phase « haute température » et non-nul dans la phase « basse température ». Cette grandeur extensive se transforme comme une représentation irréductible du groupe de symétrie de la phase « haute température ». Si l'apparition est (dis-)continue, la transition de phase est du (1^{er})2^{ème} ordre.

□ si le groupe de symétrie de la phase « basse température » n'est pas contenu dans celui de la phase « haute température », la transition de phase est généralement du premier ordre (ex. liquide-gaz, solide-gaz, sol-liqu,variétés polymorphes du soufre).

Parfois on a des transitions de phases continues sans paramètre d'ordre : e.g Berezinskii-Kosterlitz-Thouless, transition de localisation d'Anderson, transition de Mott, effet Hall quantique.



Parfois on a des transitions de phases dont le paramètre d'ordre ne se déduit pas directement des symétries « visibles » du système : cas des systèmes frustrés géométriquement. Parfois les transitions impliquent plusieurs variables thermodynamiques : e.g BaTiO₃ où l'instabilité de structure s'accompagne de ferroélectricité, les multiferroïques, VO2 où l'instabilité de structure donne des transitions métal-isolant.



Figure 1 | Phase transitions with triple points. a, The phase diagram of water. At only one pressure and temperature can solid, liquid and gaseous water coexist in equilibrium. This triple point defines the Kelvin temperature scale. b, Park *et al.*¹ have mapped the phase diagram of vanadium dioxide. The triple point at zero tensile stress and the slopes of the phase boundaries greatly constrain theories that seek to understand the transitions from metal (R) to insulator (M1 or M2) in this material. Part b is based on Fig. 4b of the paper.



Translation et renversement du sens du temps; inversion; rotations

$$H = \sum_{i} \frac{Pi^2}{2m} + \sum_{ij} U(|\mathbf{r}_j - \mathbf{r}_i|) \qquad \mathbf{r}_i \to -\mathbf{r}_i ; t \to -t ; t \to t + t_0$$

Cristal ou modulation périodique de la densité dans une direction de l'espace brise translations et rotations continues; fluide en rotation brise invariance par renversement du sens du temps.

Symétries continues locales



- Groupes de symétries des cristaux
- Symétries ponctuelles : rotation, réflexions par rapport à des plans ou axes, inversion (32 éléments à 3D).
- Symétries ponctuelles + translations (230 éléments à 3D).
- Groupes magnétiques incluant la symétrie par renversement du sens du temps (1651 éléments à 3D).



Symétries discrètes locales

Spins sur réseau : Z(n) contient l'inversion (invariance sous $t \rightarrow -t$); Ising $\rightarrow n=2$



Symétries discrètes locales

Modèle de Potts sur réseau : n états

ex : monocouche de krypton adsorbé sur du graphite; au remplissage 1/3, l'effet stérique favorise l'occupation des sites 2^{ème} voisins.





I. C Introduction d'un paramètre d'ordre - quantifie les brisures de symétrie précédentes

Spins Heisenberg: ordre dans une direction z :

$$s_z = \frac{1}{N} \sum_i S_{i,z} \ (N \to \infty)$$
ou $s_z = \frac{1}{V} \sum_i S_{i,z} \ (V \to \infty)$ (densité)

brise t \rightarrow -t et rotations faisant tourner l'axe z (O(3) \rightarrow O(2))

Nématique: ordre dans une direction θ par rapport à l'axe z :

$$<(Cos^2(\theta) - 1/3) >_{sphere unite}$$
; $<(Cos^2(\varphi) >_{sphere unite} = \frac{1}{2})$

brise les rotations faisant tourner l'axe portant le directeur **n**.

Potts à deux états (« Ising »); Réseau bipartite de sites A et B; C_A (C_B) est l'écart de concentration par rapport à 50% d'un atome de Cu (Zn) sur A (B) pour CuZn:

 $C_A + C_B$

brise la symétrie d'occupation des sites A par Cu ou Zn.

II. THERMODYNAMIQUE LORS D'UNE BRISURE DE SYMÉTRIE

II. A Champ moyen de Weiss

II. A1 Equation d'état de Van der Waals

$$H = \sum_{i} \frac{Pi^2}{2m} + \sum_{ij} U(|\boldsymbol{r}_j - \boldsymbol{r}_i|)$$

Si les N molécules du fluide contenu dans l'enceinte de volume V sont réparties de façon homogène et isotrope, en moyenne, un volume $dV = 4\pi r^2 dr$ en contient $dN = \frac{N}{V} dV$ L'énergie interne contient la contribution cinétique (gaz parfait) plus une correction



$$E_{int} = N \int_{\sigma}^{\infty} u(r) \frac{N}{V} dV \equiv -\frac{N^2}{V} a'$$

La pression attractive liée aux interactions est $\frac{\partial E_{int}}{\partial V}$ et cause le changement d'état.

$$(P + \frac{\alpha}{V^2})(V - \sigma) = NRT$$

II. A Champ moyen de Weiss



II. A2 Cas des spins sur réseau



Interactions premiers voisins : chaque spin S_i voit un environnement moyen $s_z = \frac{1}{N} \sum_i S_{i,z}$ de ses z voisins soit un champ moyen $B_m = z \int_{-\infty}^{s_z} g_{\mu B}$ indépendamment du champ extérieur appliqué, $h_{0,z}$ qui oriente les spins selon z et que l'on fait tendre vers zéro une fois prise la limite thermodynamique $N \rightarrow \infty$



II. A Champ moyen de Weiss

II. A2 Cas des spins sur réseau (suite)



 $S_i = S_i - s_z u_z + s_z u_z = s_z u_z + \delta S_i$. On néglige δS_i . δS_j dans H. On a alors un problème de spins indépendants plongés dans un champ moyen. On calcule la fonction de partition

$$\mathscr{Z}=\sum_{\{\varphi,\theta\}}exp-eta H$$

à la limite thermodynamique $N{\rightarrow}\infty$

$$m_z = g\mu_B s_z = g\mu_B L(\beta g\mu_B B_m)$$

où L(x)=coth (x)-1/x

$$f = \frac{1}{2} \frac{z J}{(g\mu_B)^2} \left[\boldsymbol{m_z}^2 \left(1 - \frac{\beta z J}{3} \right) + \boldsymbol{m_z}^4 \frac{3}{10g^2 \mu^2} \right]$$

II. B Energie libre de Landau au voisinage de Tc

II. B1 Construction sur un cas particulier

Landau postule que, au voisinage d'une transition de phase, l'énergie libre du système s'exprime sous la forme d'un polynôme du paramètre d'ordre.

$$f(T, X, m) = f(T, X) + am^2 + bm^3 + cm^4 + \dots$$

 Pas de termes linéaires : f possède les symétries de la phase « haute température » où m=0.



La transition se produit à paramètres intensifs fixés (cf plus loin)



Cu



T>Tc

$$C_A = \frac{N_{Cu}(A)}{N_A} - 0.5$$
 $C_B = \frac{N_{Zn}(B)}{N_B} - 0.5$

Symétries

identité

$$e: \mathcal{C}_A o \mathcal{C}_A$$
 , $\mathcal{C}_B o \mathcal{C}_B$

excès Cu sur A b: $C_A \rightarrow -C_A$, $C_B \rightarrow -C_B$

échange excès c=ab : $C_A \rightarrow -C_A$, $C_B \rightarrow -C_B$

$$C_A = \frac{N_{Cu}(A)}{N_A} - 0.5$$

$$C_B = \frac{N_{Zn}(B)}{N_B} - 0.5$$

e, a, b, c est le groupe de symétrie de la phase haute température

e	۵	Ь	С	irrep
1	1	1	1	1, $C_A^2 + C_B^2$, $C_A C_B$
1	-1	-1	1	$C_A - C_B$
1	-1	1	-1	$C_A^2 - C_B^2$
1	1	-1	-1	$C_A + C_B$



Energie libre de Landau près de Tc: transition du 2^{ème} ordre

Ferromagnétique

groupe de symétrie initial O(3); brisure $t \rightarrow -t$ i.e. $\mathbf{m} \rightarrow -\mathbf{m}$

paramètre d'ordre m =
$$\frac{g\mu_B}{V}\sum_i S_i$$

$$f(T, X, m) = f(T, X) + a_0(T-Tc) m^2 + b(m^2)^2 + ...$$

(pas de termes cubiques)

$$\left|\frac{\partial^2 f}{\partial m_i \partial m_j}\right| \geq \mathbf{0}$$

 $\mathbf{h} = \frac{\partial f}{\partial m} = \mathbf{0}$

(pour la stabilité de l'état thermodynamique)









Exposants critiques de champ moyen

grandeur	comportement T≥Tc		comportement T≤Tc
Δc _H	† -α		(-†) -α'
mo		-	(-†) ^β
χ	+ -γ		(-†) -γ'
ξ	† -v		(-†) ^{-v'}
	$m_0(Tc) \sim sign(H)H^{1/\delta}$		
α=α'			0
β			1/2
γ=γ'			1
δ			3

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

← <u>cf</u>relation_thermodynamique <u>d'Ehrenfest_pour une transition du 2^{ème} ordre</u> Energie libre de Landau près de Tc: transition du 1^{er} ordre

Modèle de Potts

groupe de symétrie initial P(s) (permutations de s objets);

paramètre d'ordre m =
$$\frac{1}{(s-1)}(s\delta_{\sigma,1}-1)$$

énergie libre par unité de volume : f(T, X, m) = f(T, X) + a₀(T-Tc) m² – b m³ + c m⁴ b, c >0



$$a_0(T-Tc) m^2 - b m^3 + c m^4 b, c > 0$$



$$m_0 = \frac{b}{2c}$$
 $T_0 - Tc = \frac{b^2}{4a_0c}$ $\chi = \frac{1}{2a_0(T_0 - Tc)} > 0$

 χ diverge à Tc, limite de métastabilité.

Energie libre de Landau près de Tc: point tricritique

Point de rencontre d'une ligne du 1^{er} et du 2^{ème} ordre

paramètre d'ordre m $= \frac{g\mu_B}{V} \sum_i S_i$

groupe de symétrie initial O(3); brisure t \rightarrow -t i.e. $\mathbf{m} \rightarrow -\mathbf{m}$

énergie libre par unité de volume :

$$f(T, X, m) = f(T, X) + a_0(T-Tc) m^2 + b_0(p-pc) (m^2)^2 + c(m^2)^3 + ...$$

(pas de termes cubiques)

si p-pc >0 \rightarrow transition du second ordre

si p-pc $\langle 0 \rightarrow$ transition du premier ordre

si p-pc =0 \rightarrow point tricritique

Exposants TRIcritiques de champ moyen

grandeur	comportement T≥Tc	comportement T≤Tc
Δc_{H}	† -α	(-†) -α'
mo	-	(-†) ^β
χ	† -γ	(-†) -γ'
ξ	† -v	(-†) ^{-v'}

 $m_0(Tc) \sim sign(H)H^{1/\delta}$

α=α'	1/2
β	1/4
γ=γ'	1
δ	5

$$\alpha + 2\beta + \gamma = 2$$

 $\leftarrow cf \ relation \ thermodynamique \\ d'Ehrenfest \ pour une \ transition \ du \ 2^{eme} \ ordre$

Une remarque très cri(p)tique

Lorsque la symétrie est brisée, et que le système est ordonné le paramètre d'ordre prend une valeur uniforme, indépendante du site, en champ moyen :



Symétrie brisée => peuplement macroscopique d'un mode q (condensation de Bose dans l'espace de Fourier.

La théorie de Curie-Landau s'avère très féconde, mais des déviations sont observées par rapport à ses prédictions :

 I. Les exposants critiques dépendent du nombre de composantes n du p.o à D donnée et de D à n donné. Ils diffèrent des exposants de champ moyen.

Exposants Critiques	Champ moyen	lsing D=2	lsing D=3	XY D=3	Heisenberg D=3
α=α'	0	0	0.12	- 0.013	- 0.13
β	1/2	1/8	0.326	0.348	0.368
γ=γ'	1	7/4	1.24	1.318	1.392
δ	3	15	5.2		
ν	(1/2)	1	0.631	0.68	0.708
η	(0)	1/4	0.035	0.037	0.037

La théorie de Curie-Landau s'avère très féconde, mais des déviations sont observées par rapport à ses prédictions :

II. L'existence, l'ordre et la nature de la transition de phase à T finie dépend de n, D, de la portée des interactions.

Nature du paramètre d'ordre	Transition à D=1 Ordre	Transition à D=2 Ordre	Transition à D=3 Ordre
Ising	*		2
Potts	*	1 ET 2	1 ET 2
XY	*	BKT	2
Heisenberg	*	*	2

Dans le cas de systèmes de spins frustrés et désordonnés (verres de spin) il existe une symétrie brisée et un type d'ordre. Mais il y a une infinité de modes de Fourier non nuls, d'occupation comparable (complexité de l'espace des phases). Mène à des dynamiques complexes.





oisinage de Tc

A Tc, ξ diverge; tout les spins sont corrélés (mais l'ordre à longue portée n'est pas encore établi)



$$\Delta E=2L \times J \rightarrow$$

L aussi petit que possible

Transition Berezinskii-Kosterlitz-Thouless (BKT) du modèle XY à D=2

Concerne les films supraconducteurs, les couches de suprafluides, les spins Classiques à 2 composantes, les spins quantiques S=1/2 à D=1,...



L'onde de spin est la manifestation de la symétrie brisée : elle « accompagne » l'ordre qui s'établit à T<Tc.

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \cos(\varphi_i - \varphi_j)$$

$$\varphi_i \equiv \varphi(x_i)$$
; $\varphi_j \equiv \varphi(x_j) \approx \varphi(x_i) + \sum_j a \, u_j \cdot \nabla \varphi$ a est le pas du réseau

$$H = -2NJ + \frac{J}{2} \iint d^2 S(\nabla \varphi)^2$$

Les fluctuations de phase dominent les effets thermiques à basse T (celles d'amplitudes donnent une contribution exponentiellement faible)

 $D=3 \rightarrow m \sim 1 - \frac{\alpha T}{J}$ $D=2 \rightarrow m=0$ pour toute température finie !!





<Si.Sj> ~ 1/r^η T≤Tc



Antivortex





Défauts topologiques :
> stables thermiquement
> non transformables l'un dans l'autre par rotation.
> énergie 2J



Configuration de vortex et antivortex dans le modèle XY









Où l'énergie rencontre l'entropie dans le modèle XY



$$E(paire V - AV) = 2\pi (\frac{\xi_0}{a})^2 J + \pi \tilde{J}(-1) (+1) Log \frac{r}{\xi_0} \qquad r = |\mathbf{x}_j - x_i|$$

coeur dipole V-AV

 $< r^2 > = \iint d^2 S r^2 exp - \beta E(paire V - AV) / \iint d^2 S exp - \beta E(paire V - AV)$

$$= Cte \; rac{1 - \pi J eta}{2 - \pi J eta} \; \Rightarrow k_B T_{BKT} = \pi J/2$$

Quelques références :

- M. Le Bellac Des phénomènes critiques aux champs de jauge
- * P. Chaikin, T. Lubensky Principles of Condensed Matter Physics
- * M. Kardar Statistical Mechanics II: Statistical Physics of Fields (MIT ocw)
- **B. Simons** *Phase Transitions and Collective Phenomena* (*Cambridge Lecture Notes*)