
L'ordre en deux dimensions

Leticia F. Cugliandolo

Sorbonne Université

`leticia@lpthe.jussieu.fr`

`www.lpthe.jussieu.fr/~leticia`

Mon travail, en collaboration avec

C. Caporusso, P. Digregorio, G. Gonnella & I. Petrelli (Bari, Italia)

A. Suma (Bari & Trieste, Italia & Philadelphia, USA)

D. Levis, Y. Rouzair & I. Pagonabarraga (Barcelona, España & Lausanne, Suisse)

Ben Guerir, Morocco, 2025

Le but

Mieux comprendre **la fusion** en deux dimensions

Pourquoi le plan ?

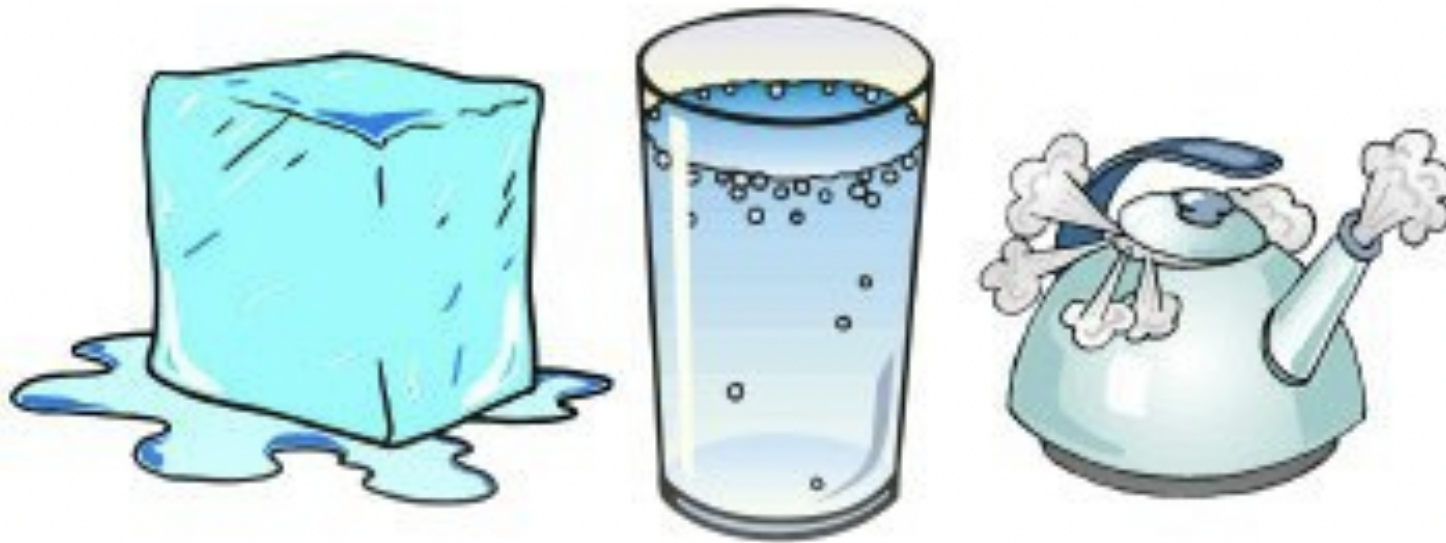
Quelques situations réelles, mais, aussi,
parce que le problème est intéressant
d'un point de vue fondamental

**un exposé sur un problème classique,
avec une application d'actualité
à la matière active**

Une observation

Les états de la matière

Par exemple, H_2O et ses transitions de phase



La glace $\xrightarrow{0^\circ\text{C}}$ l'eau $\xrightarrow{100^\circ\text{C}}$ la vapeur

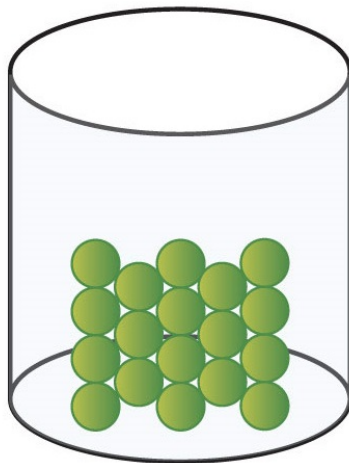
Les molécules sont toujours les mêmes H_2O

Un changement physique s'opère, mais pas chimique

Les états de la matière

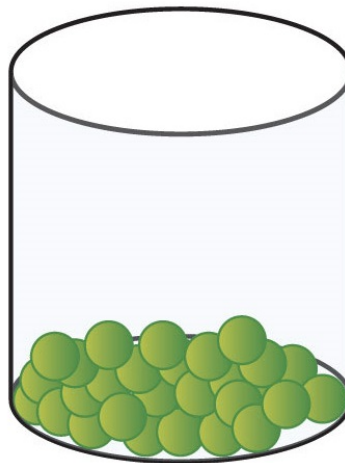
Par exemple, H_2O et ses propriétés macroscopiques

La glace



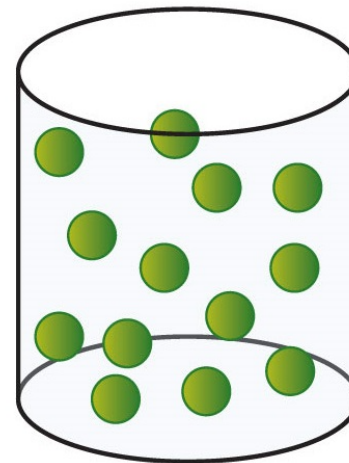
Solide

l'eau à boire



Liquide

la vapeur



Gaz

rigidité

oui

non

non

forme

fixe

non

non

compressible

non

non

oui

coule

non

oui

oui

structure
microscopique

ordonné

désordonné

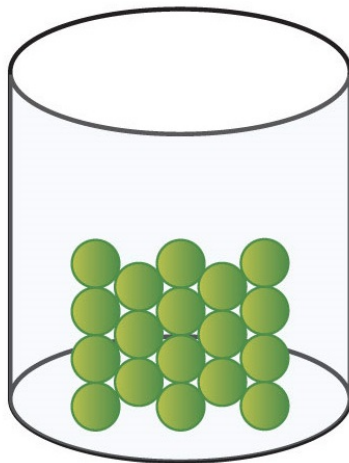
désordonné

Macroscopique

Les états de la matière

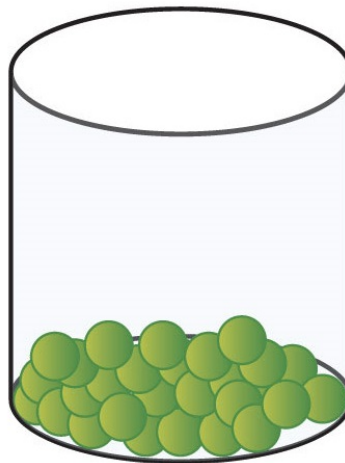
Par exemple, H_2O et ses propriétés microscopiques

La glace



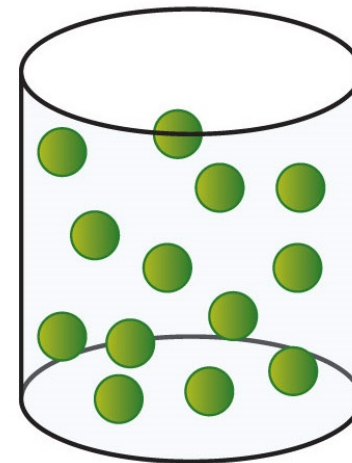
Solide

l'eau à boire



Liquide

la vapeur



Gaz

rigidité

oui

non

non

forme

fixe

non

non

compressible

non

non

oui

coule

non

oui

oui

structure

microscopique

ordonné

désordonné

désordonné

Macroscopique

Le cadre théorique

La physique statistique

Du microscopique au macroscopique

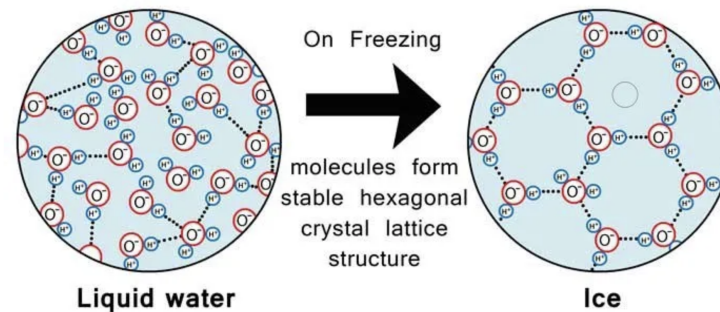
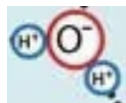
Elle part de modèles simplifiés et utilise des méthodes mathématiques pour

aller du

microscopique

au

macroscopique



Elle décrit le **macroscopique** et les **transitions de phase** (de façon très précise)

La théorie des probabilités et la statistique sont centrales $1 \mapsto N \gg 1$

La physique statistique

De nombreux succès

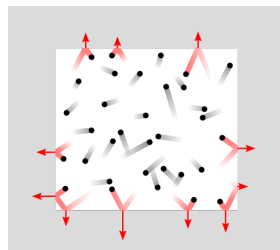
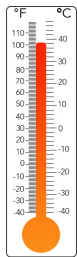
Définition microscopique & dérivation de concepts **thermodynamiques**

Compréhension de l'origine de
Température, pression

équations d'état

Loi des gaz parfaits

$$PV = nRT$$



Loi de van der Waals

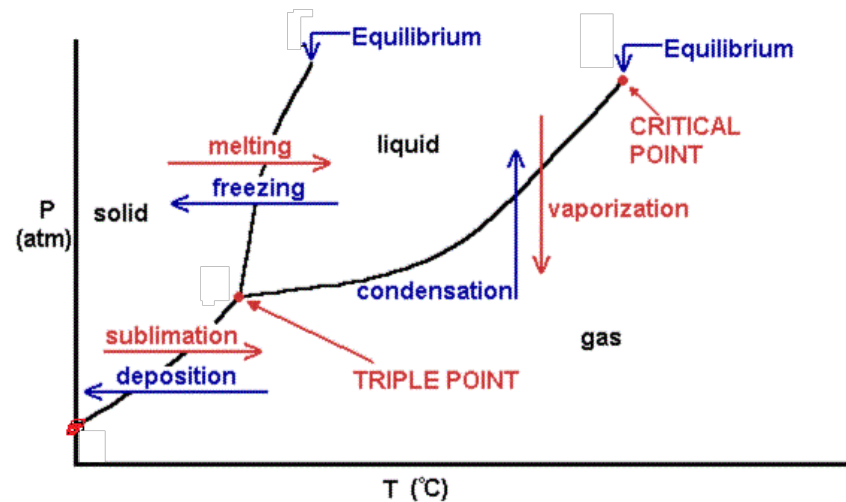
$$\left(P + \frac{an^2}{V^2}\right) (V - nb) = nRT$$

Boltzmann, fin XIXe

La physique statistique

De nombreux succès

Compréhension des **effets collectifs** $\Rightarrow$ **diagrammes de phase**



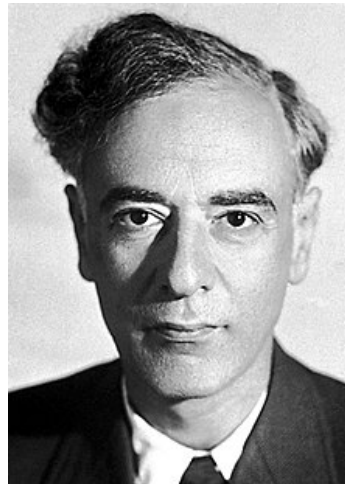
Transitions de Phase : changement abrupt du comportement macroscopique
si un paramètre externe (e.g. la température ambiante)
ou un paramètre interne (e.g. l'énergie potentielle) est modifié

Les calculs peuvent être durs mais le cadre **théorique** est bien établi.

Physique Statistique

Trois acteurs importants

L. D. Landau



Transitions de Phase

Brisure de symétrie

P. W. Anderson



Mécanisme de Higgs

Verres, Localization

K. G. Wilson



Renormalization

Universalité

Theoretical description of phase transitions

Importance of randomness

More is different

Physique Statistique

Transitions de Phase

L. D. Landau (Kharkiv/Moscow) - URSS

Nobel 1962 “for his development of a mathematical theory of superfluidity that accounts for the properties of liquid helium II at a temperature below 2.17K (-270.980°C)”

P. W. Anderson (Princeton) - USA

Nobel 1977 “for their fundamental theoretical investigations of the electronic structure of magnetic and disordered systems”

K. G. Wilson (Cornell) - USA

Nobel 1982 “for his theory for critical phenomena in connection with phase transitions”

Tout va bien en dimension trois ; mais en deux ?

La question

Fusion en deux dimensions

Questions

Understanding the complex by studying the simple

Le cadre : physique **classique non-relativiste**

sans effets quantiques $\hbar \rightarrow 0$, basses vitesses $v/c \rightarrow 0$

Les constituents :

On simplifie, on passe de molécules aux **disques**.

On identifie une situation facile

L'état le plus **ordonné** et compacte

Comment le système **transite** de cet état ordonné au **liquide**,

en augmentant la température ambiante ou en diminuant la densité ?

Le problème

Disques durs sur une table

Réseau carré avec quatre voisins

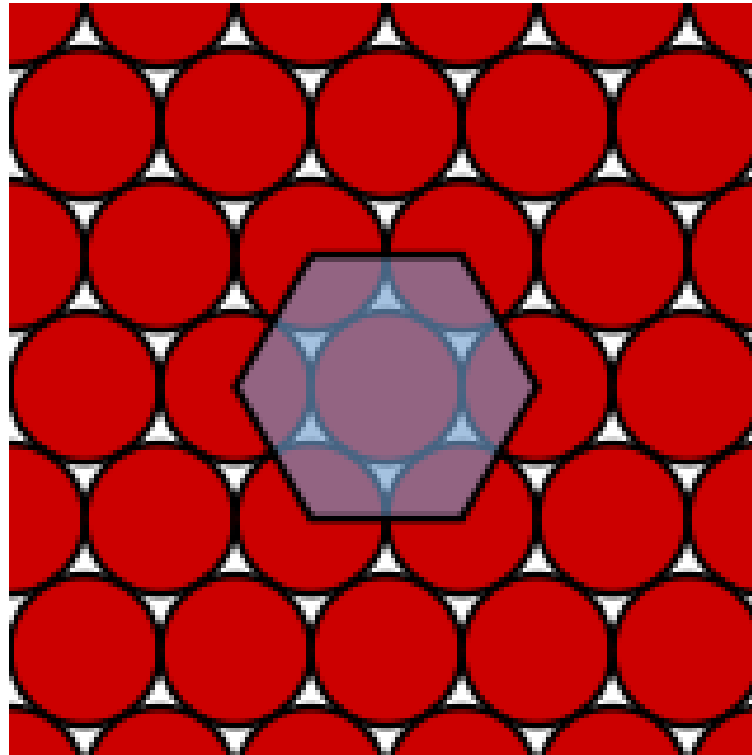


Taux d'empilement $\phi = S_{\text{occupied}}/S$

Réseau carré, $\phi_{\square} \sim 0.78$, il n'est pas optimal

Disques durs sur une table

Réseau triangulaire avec six voisins

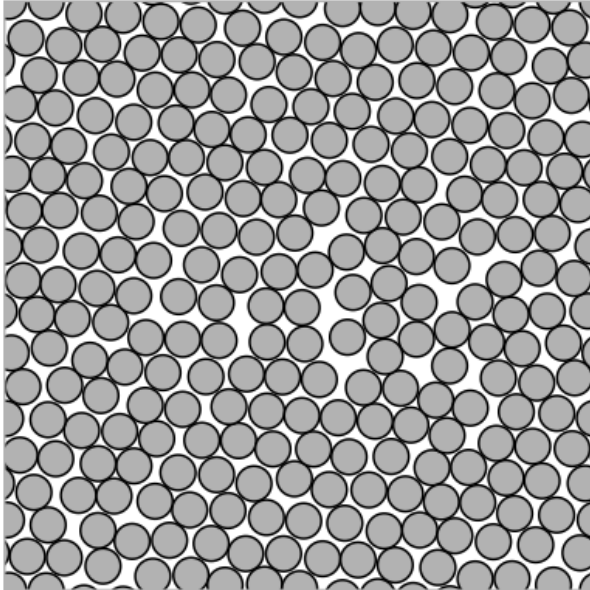


Taux d'empilement $\phi = S_{\text{occupied}}/S$

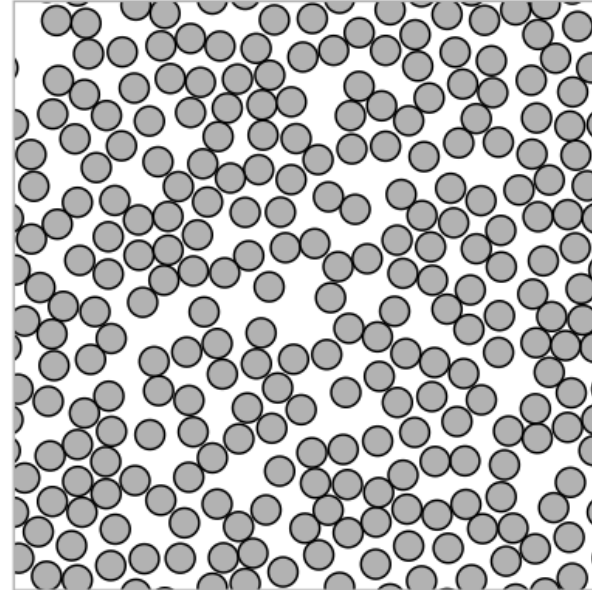
Empilement le plus compact $\phi_{\Delta} \approx 0.91 > \phi_{\square} = 0.78$

Fusion

Disques durs sur une table



Solide à haute densité

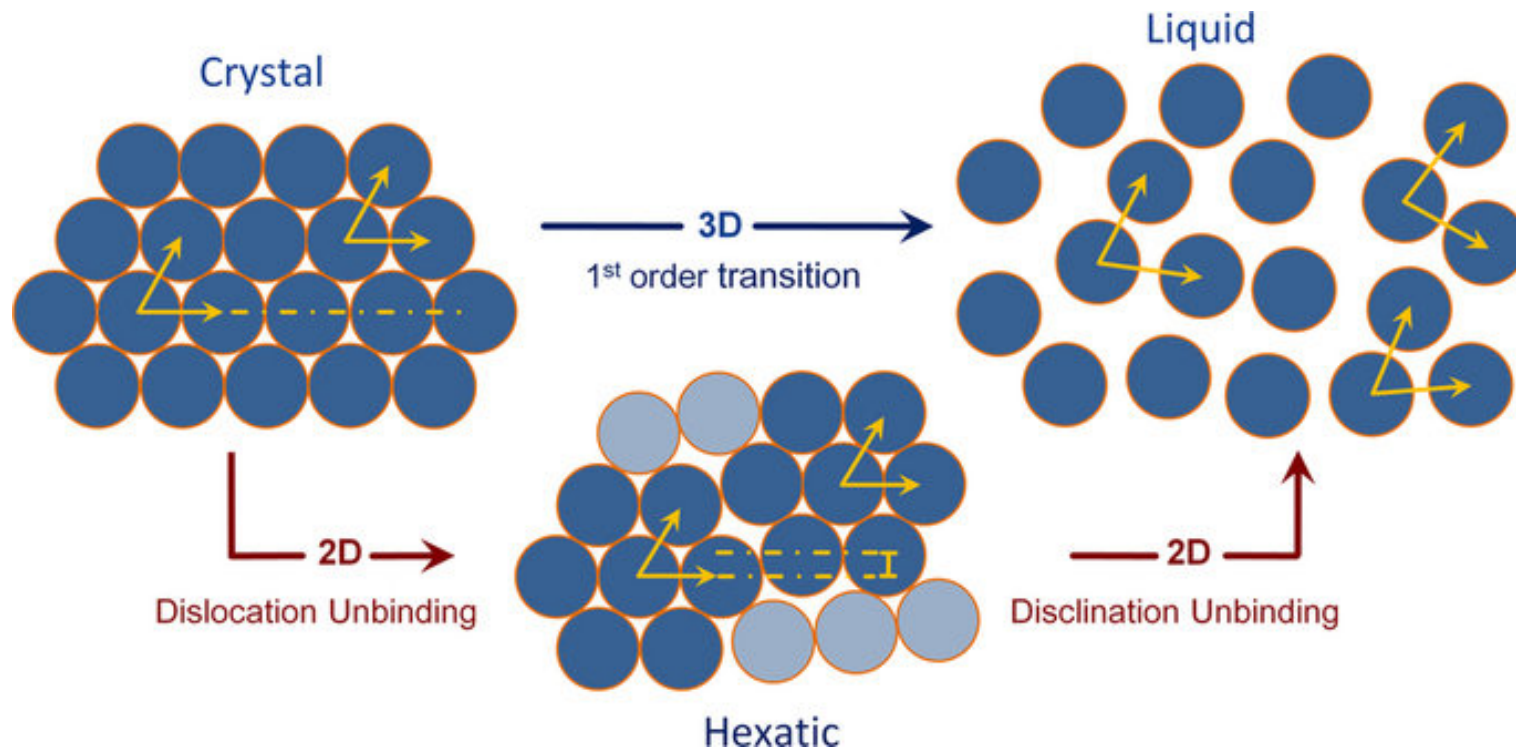


Liquide à basse densité

Fusion

Quels mécanismes ?

$T = 0$ L'ordre de positions & orientations est perdu simultanément



Il n'y a pas d'ordre périodique des centres des disques

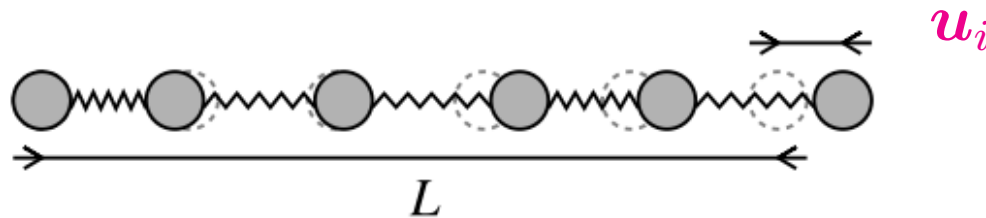
L'ordre d'orientation est préservé $\mapsto$ il est aussi perdu

Un calcul simple

Solides harmoniques

Peierls 30s: il n'y a pas d'ordre translationnel à longue portée à $T > 0$

Considérons un cristal constitué d'atomes reliés à leurs plus proches voisins par des ressorts de Hooke. À température finie T , les positions atomiques, $\mathbf{r}_i$, fluctuent, $\mathbf{r}_i = \mathbf{R}_i + \mathbf{u}_i$, où $\mathbf{u}_i$ représente le déplacement local à partir d'un site régulier du réseau situé en $\mathbf{R}_i$.



Open dashed: réseau parfait $\mathbf{R}_i$

Filled gray: les positions réelles $\mathbf{r}_i$

L'ordre positionnel à longue portée subsiste-t-il à température finie ?

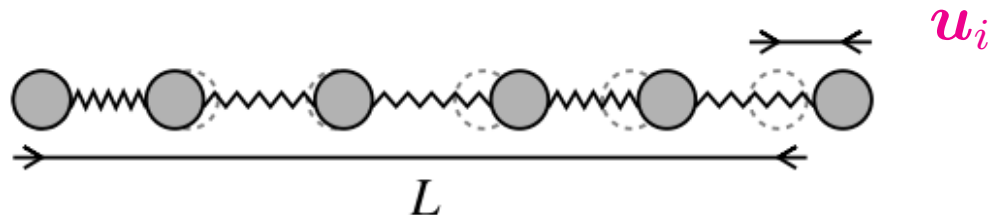
Non, en $d = 2$, car le déplacement quadratique moyen croît avec la distance

$$\Delta^2(\mathbf{r}) \equiv \langle (\mathbf{u}(\mathbf{r}) - \mathbf{u}(\mathbf{0}))^2 \rangle \simeq k_B T \ln r$$

Solides harmoniques

Peierls 30s: mais l'ordre orientationnel est possible à $T > 0$

Considérons un cristal constitué d'atomes reliés $\tilde{A}$ leurs plus proches voisins par des ressorts de Hooke. À température finie T , les positions atomiques, $\mathbf{r}_i$, fluctuent, $\mathbf{r}_i = \mathbf{R}_i + \mathbf{u}_i$, où $\mathbf{u}_i$ représente le déplacement local à partir d'un site régulier du réseau situé en $\mathbf{R}_i$.



Dashed: réseau parfait $\mathbf{R}_i$

Gray: positions réelles $\mathbf{r}_i$

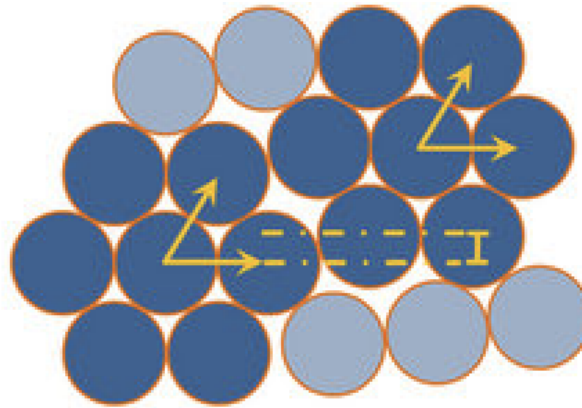
L'ordre positionnel à longue portée subsiste-t-il à température finie ?

oui, même en $d = 2$ parce que

$$C_{\text{orient}}(\mathbf{r}) \equiv \langle \mathbf{u}(\mathbf{r}) \cdot \mathbf{u}(\mathbf{0}) \rangle \rightarrow \text{cst}$$

Solides harmoniques

Il n'y a pas d'ordre de translations à longue portée
mais il y a d'ordre d'orientation à longue portée



Les angles sont préservés tandis que l'ordre périodique ne l'est pas

Peut-on quantifier l'ordre d'orientation ?

Observables

Ordre des positions

Densité

La densité locale

$$\rho(\mathbf{r}_0) = \sum_{i=1}^{\text{Box}(\mathbf{r}_0)} \delta(\mathbf{r}_0 - \mathbf{r}_i)$$

avec normalisation $\int d^d \mathbf{r}_0 \rho(\mathbf{r}_0) = N$.

La corrélation densité-densité

$$C(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) = \langle \rho(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0) \rho(\mathbf{r}_0) \rangle$$

Homogène : indépendance d point de reference $\mathbf{r}_0$

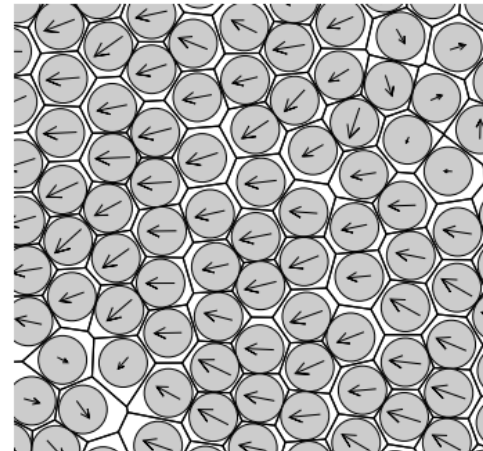
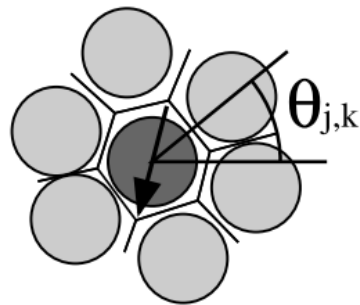
Isotropique : indépendance de l'angle de mesure $\mathbf{r} \mapsto |\mathbf{r}| = r$

$$C(\mathbf{r} + \mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0) = C(r)$$

Ordre d'orientation

Le paramètre d'ordre hexatique

Le paramètre d'ordre hexatique local $\psi_{6j} = \frac{1}{N_{nn}^j} \sum_{k=1}^{N_{nn}^j} e^{6i\theta_{jk}}$ (Voronoi cells)



(Disques placés sur les noeuds d'un **réseau triangulaire**, chaque disque j a six voisins, $k=1, \dots, N_{nn}^j=6$, les angles sont $\Delta\theta_{jk} = \frac{2\pi}{6}$ et $\psi_{6j} = 1$ if $\theta_{j1} = 0$)

associe des **fleches** (directions) aux disques

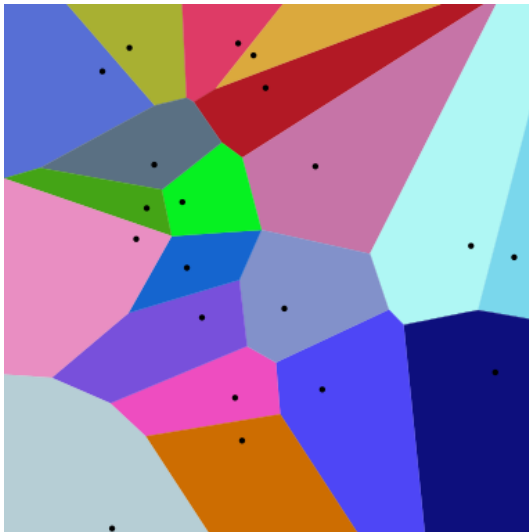
et **mesure l'ordre d'orientation**

Voisinage

Tessellation de Voronoï pour identifier les plus proches voisins

Un **diagramme de Voronoï** est induit par un ensemble de points, appelés sites, qui dans notre cas sont les centres des disques.

Le plan est divisé en faces, les régions qui sont plus proches d'un site.



Concentrons-nous sur la face vert clair au centre.

Tous les points de cette région sont plus proches du point qu'elle contient que de tout autre point du plan.

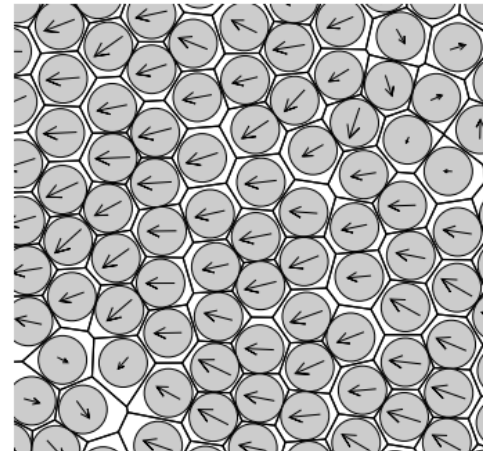
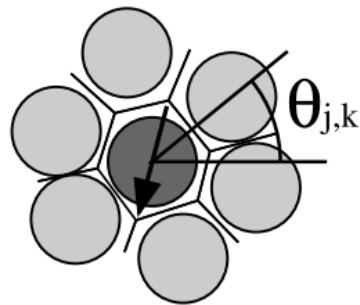
Cette région possède cinq cellules voisines dont elle est séparée par une arête.

La zone grise possède six cellules voisines

Ordre d'orientation

Le paramètre d'ordre hexatique

Le paramètre d'ordre hexatique local $\psi_{6j} = \frac{1}{N_{nn}^j} \sum_{k=1}^{N_{nn}^j} e^{6i\theta_{jk}}$ (Voronoi cells)



(Disques placés sur les noeuds d'un **réseau triangulaire**, chaque disque j a six voisins, $k=1, \dots, N_{nn}^j=6$, les angles sont $\Delta\theta_{jk} = \frac{2\pi}{6}$ et $\psi_{6j} = 1$ if $\theta_{j1} = 0$)

associe des **fleches** (directions) aux disques

et **mesure l'ordre d'orientation**

Observables

L'ordre Hexatique

Le paramètre d'ordre hexatique local

$$\psi_6(\mathbf{r}_0) \propto \sum_{j=1}^{\text{Box}(\mathbf{r}_0)} \frac{1}{N_{\text{nn}}} \sum_{k=1}^{N_{\text{nn}}} e^{6i\theta_{jk}}$$

La fonction de corrélation

$$G_6(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = \langle \psi_6^*(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}) \psi_6(\mathbf{r}_0) \rangle$$

Homogène : indépendance du point de reference $\mathbf{r}_0$

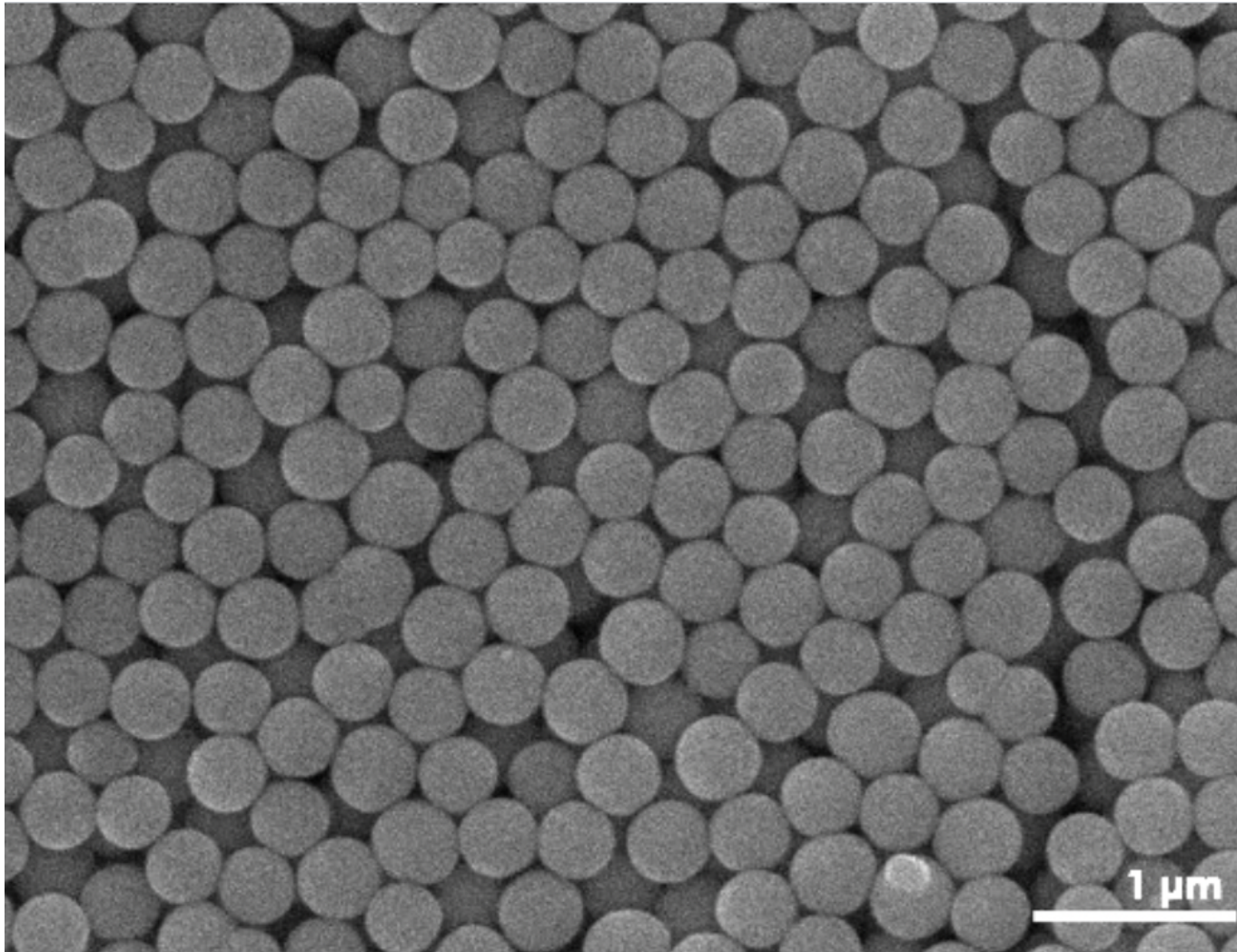
Isotropique : indépendance de l'angle de mesure $\mathbf{r} \mapsto |\mathbf{r}| = r$

$$G_6(\mathbf{r}_0 + \mathbf{r}, \mathbf{r}_0) = G_6(r)$$

Expériences

Suspension colloïdale

Expériences



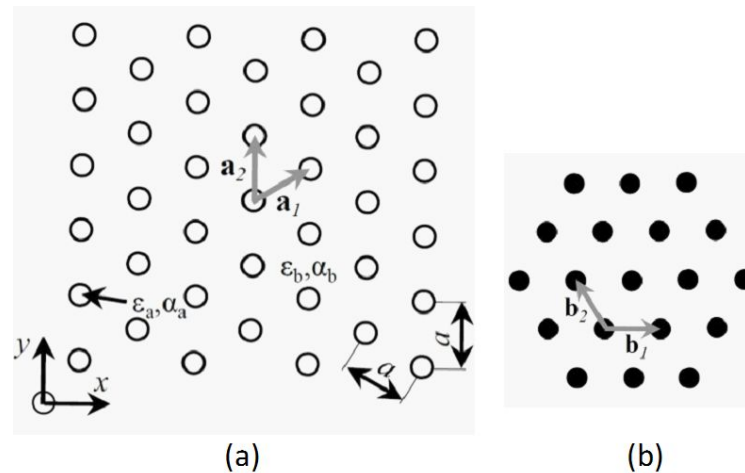
Test de l'ordre des positions

Facteur de structure

$\mathbf{r}_i$ et $\mathbf{r}_j$ sont les positions des disques i et j et $\mathbf{q}$ est un vecteur d'onde.

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle e^{i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \rangle$$

Visualisation: représentation sur le plan (q_x, q_y) des pics ponctuels.



Réseau triangulaire dans l'espace réel

Réseau hexagonal dans l'espace réciproque

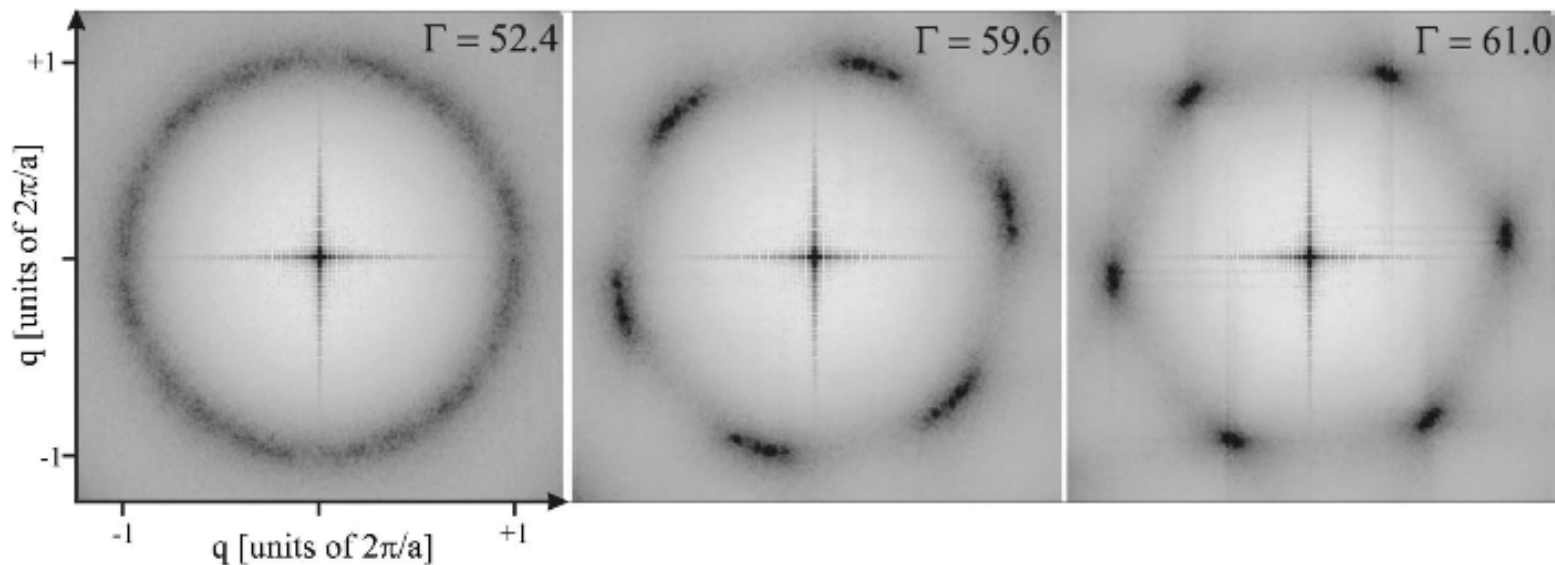
Suspensions colloïdales

Facteur de structure : des pics flous lorsque T diminue

$$S(\mathbf{q}) = \frac{1}{N} \sum_{ij} \langle e^{-i\mathbf{q} \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j)} \rangle$$

High T low ϕ

Low T high ϕ



Liquid

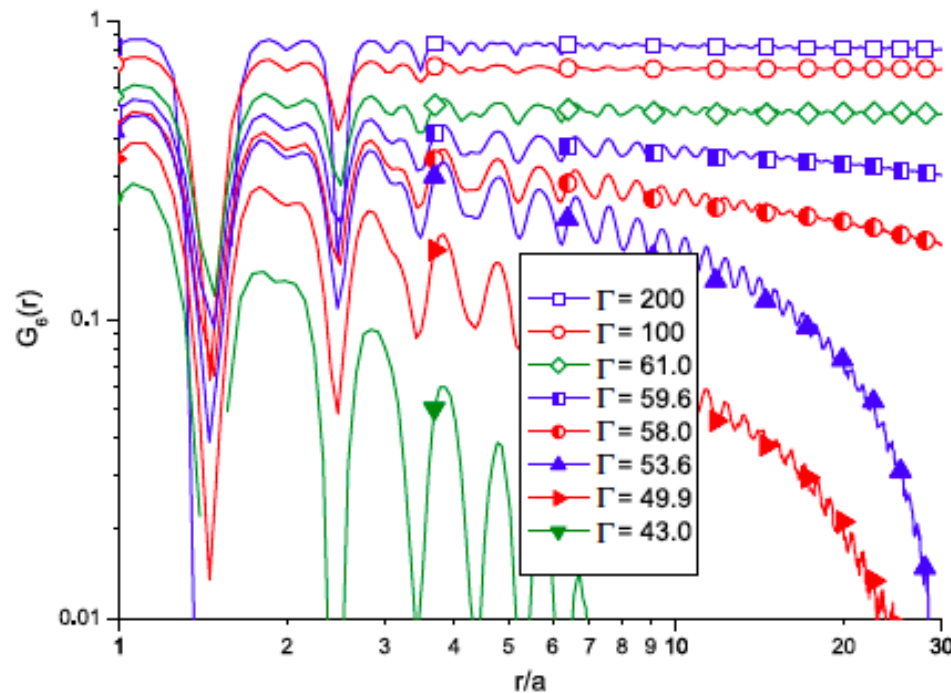
Hexatic

Solid

Keim, Maret and von Grünberg, PRE 75, 031402 (2007)

Suspensions colloïdales

Corrélation hexatiques $G_6(r) = \langle \psi_6^*(\mathbf{r}) \psi_6(\mathbf{0}) \rangle$



Ordre à longue portée

Ordre à quasi longue portée

Ordre à courte portée

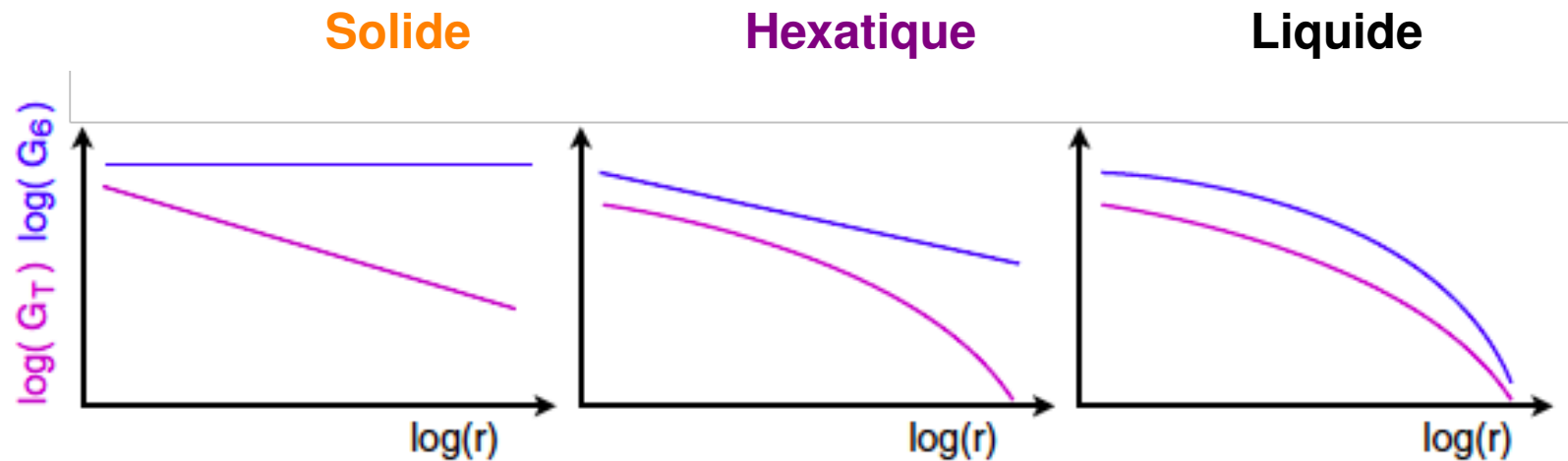
Keim, Maret & von Grünberg, PRE 75, 031402 (2007)

Corrélations & défauts

Hexatique

Positionnel

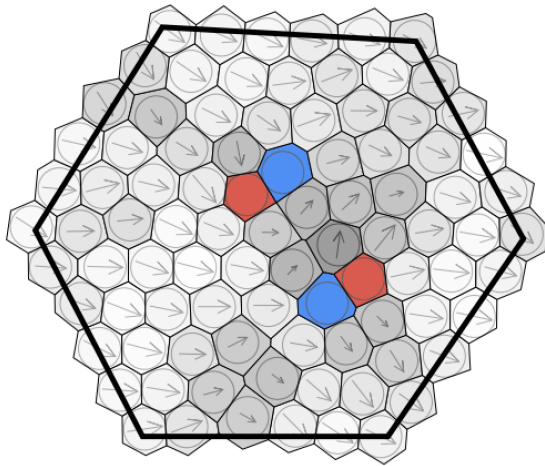
• 7 voisins • 5 voisins



$$G(r) \approx \begin{cases} \text{ct} & r^{-\eta} & \text{Solide} & \text{long/quasi-long range order} \\ r^{-\eta_6} & e^{-r/\xi} & \text{Hexatique} & \text{quasi-long/short range order} \\ e^{-r/\xi_6} & e^{-r/\xi} & \text{Liquide} & \text{short/short range order - disorder} \end{cases}$$

Défauts

Déliement des dislocations : du solide vers la phase hexatique



Une paire liée de dislocations

Une dislocation libre

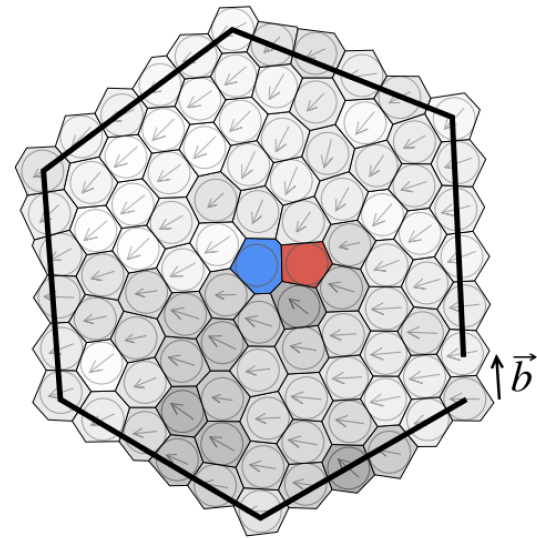
Dans le cristal, les centres des disques forment un réseau triangulaire.

Les disques **bleus** ont sept voisins et les disques **rouges** ont cinq

Sur l'image de gauche : le contour extérieur se referme et forme un hexagone parfait. Les effets des défauts sont confinés. C'est la phase **solide**.

Défauts

Déliement des dislocations : du solide vers la phase hexatique



Une paire liée de dislocations

Une dislocation libre

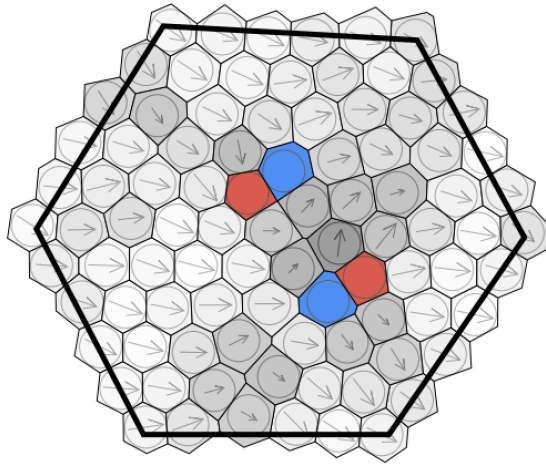
Dans le cristal, les centres des disques forment un réseau triangulaire

Les disques **bleus** ont sept voisins et les disques **rouges** en ont cinq.

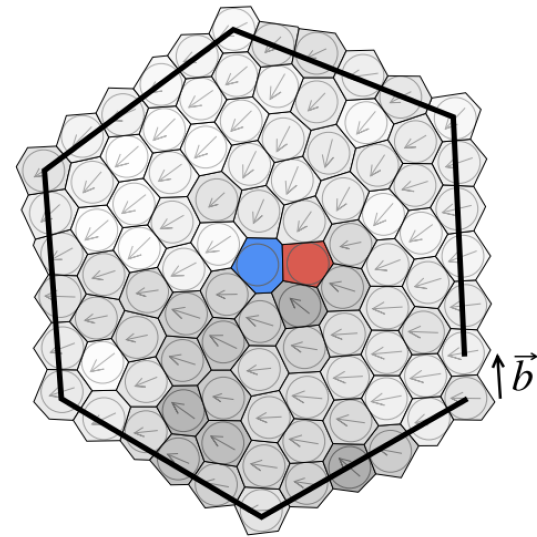
Sur l'image de droite : le contour extérieur ne forme pas un hexagone parfait. L'effet des défauts détruit l'ordre de translation : phase **hexatique**.

Défauts

Déliement des dislocations : du solide vers la phase hexatique



Une paire liée de dislocations



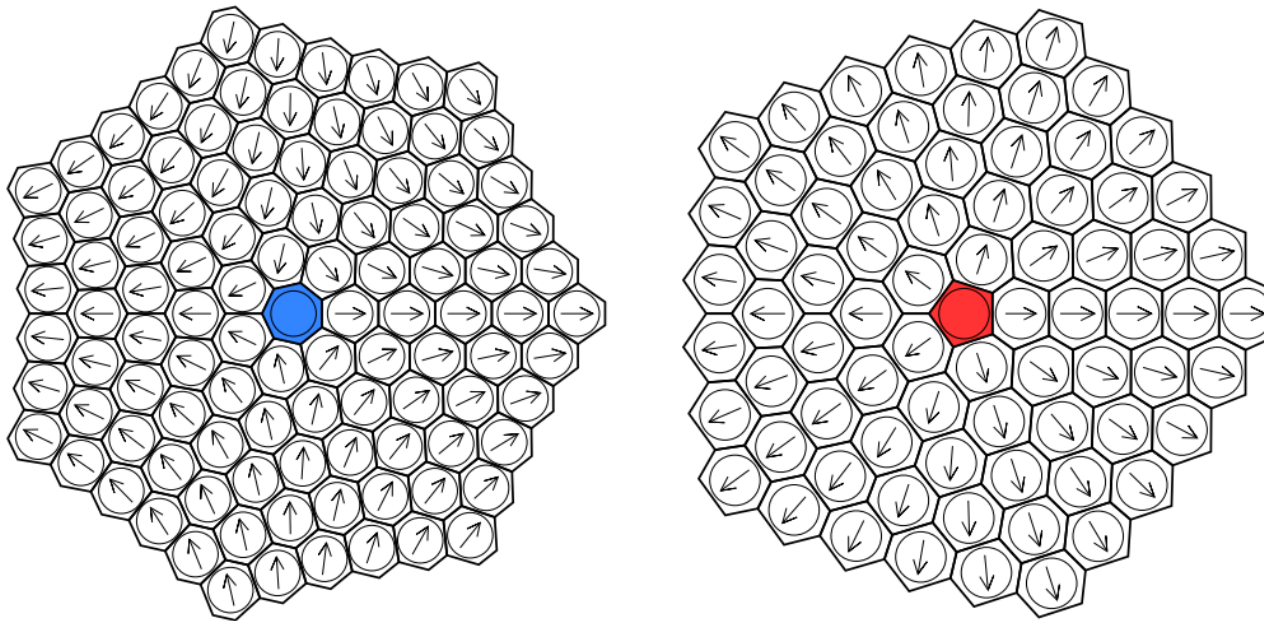
Une dislocation libre

Dans le cristal, les centres des disques forment un réseau triangulaire
Les disques **bleus** ont sept voisins et les disques **rouges** en ont cinq.

Les flèches sont approximativement alignées dans les deux images. La phase hexatique conserve un **ordre orientational à quasi longue portée**.

Défauts

Déliement des disclinaisons : de la phase hexatique vers la phase liquide

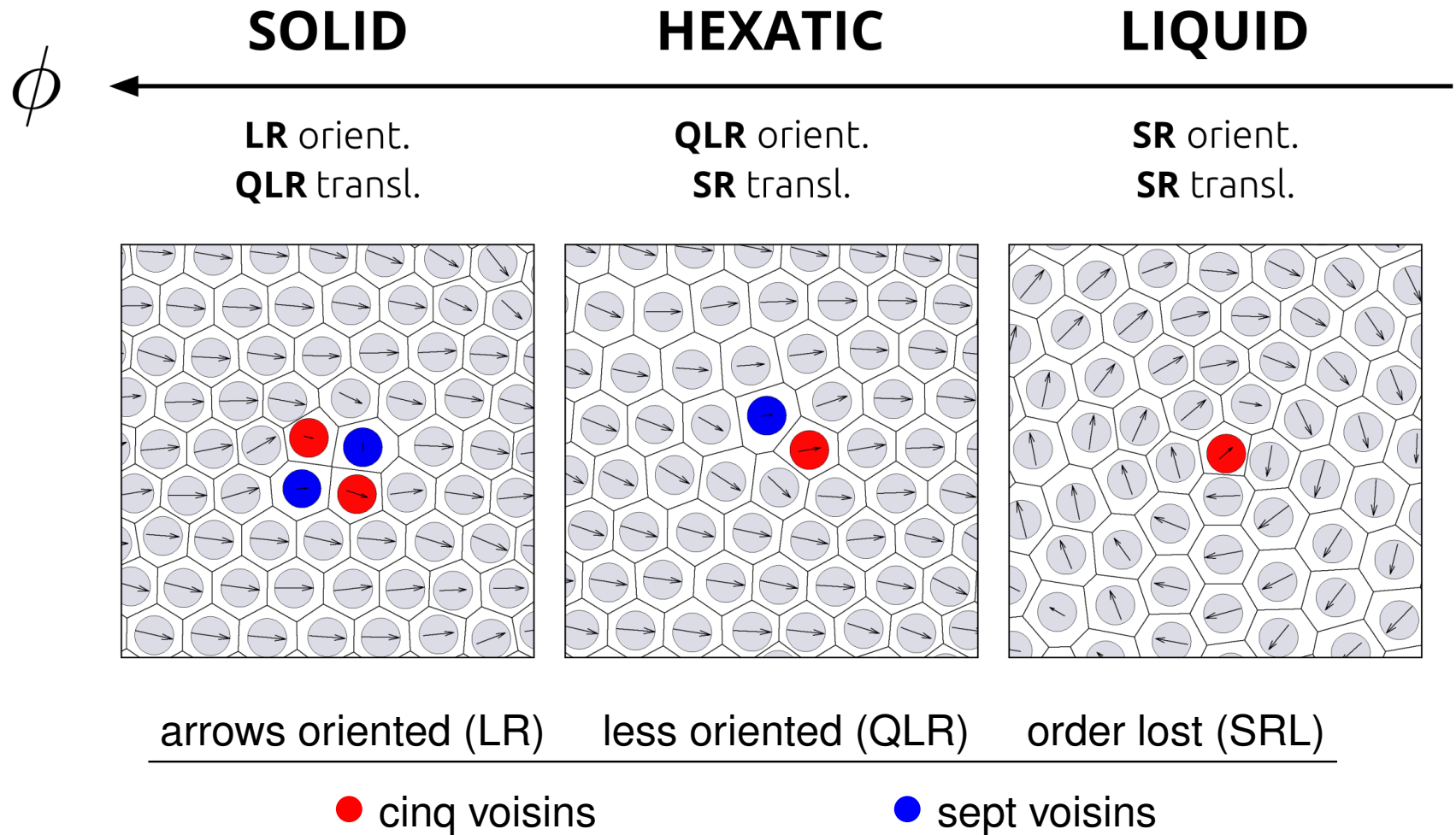


L'orientation tourne de $\pm 2\pi$ autour des défauts **bleus** (sept) et **rouges** (cinq).

Très similaire aux vortex dans le modèle magnétique $2d$ XY.

Scénario de Halperin, Nelson & Young : le déliement des disclinaisons provoque une seconde transition de type BKT vers le **liquide**.

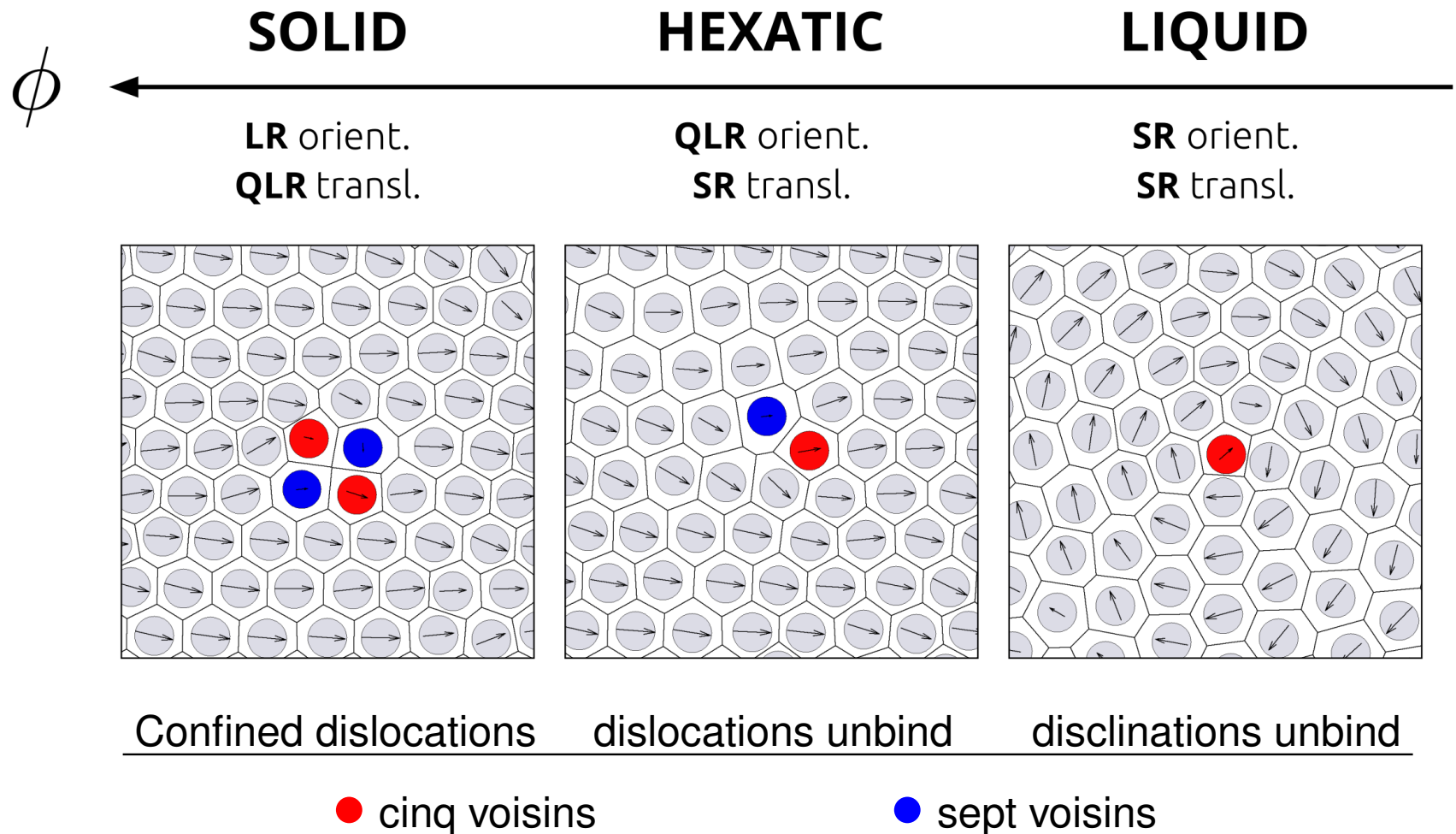
Fusion



tessellation de Voronoï

Fusion - défauts

Mécanismes



Tesselation de Voronoï

Physique Statistique

Trois acteurs importants

D. J. Thouless

J. M. Kosterlitz

F. H. Haldane



Topologie
défauts



Topologie
défauts



Topologie
défauts

Description théorique des transitions de phase en 2d

F. D. Haldane (Princeton), J. M. Kosterlitz (Brown) & D. J. Thouless (Seattle) - UK

Nobel 2016 “*for theoretical discoveries of topological phase transitions and topological phases of matter*”

Transitions de phase en 2d

Berezinskii, Kosterlitz, Thouless, Halperin, Nelson & Young 70s

	BKT-HNY
Solide	QLR positionnel & LR orientationnel
transition	BKT (déliement des dislocations)
Hexatique	SR positionnel & QLR orientationnel
transition	BKT (déliement des disclinations)
Liquide	SR positionnel & orientationnel

Longueur de corrélation $\xi \propto e^{\delta^{-\nu}}$ for $\delta = |\phi - \phi_c| \rightarrow 0$

transitions de **Berezinskii, Kosterlitz & Thouless**

Group de renormalisation $\nu_{SH} \simeq 0.37$ and $\nu_{HL} \simeq 0.5$



C'est ça ?

Transitions de phase

BKT-HNY vs. un nouvel scénario

	BKT-HNY	BK
Solide	QLR pos & LR orient	QLR pos & LR orient
transition	BKT (déliement des dislocations)	BKT
Hexatique	SR pos & QLR orient	SR pos & QLR orient
transition	BKT (déliement des disclinations)	1er ordre
Liquide	SR pos & orient	SR pos & orient

Les phases sont les mêmes, mais la transition **hexatique-liquide** est différente, permettant la **coexistence des deux phases**

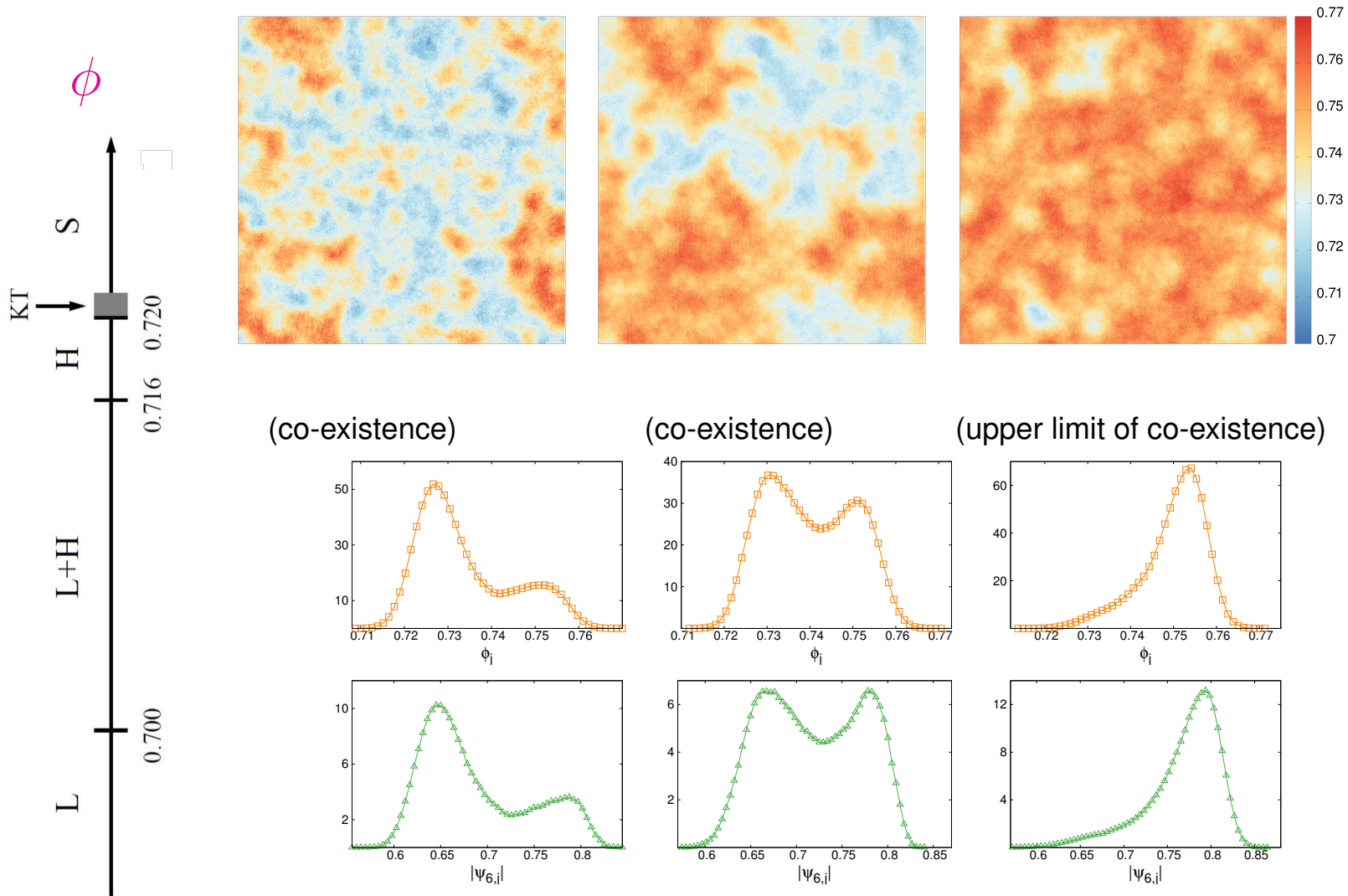
Bernard & Krauth, Phys. Rev. Lett. 107, 155704 (2011)

Event driven MC simulations

Simulations numériques

Mesures locales

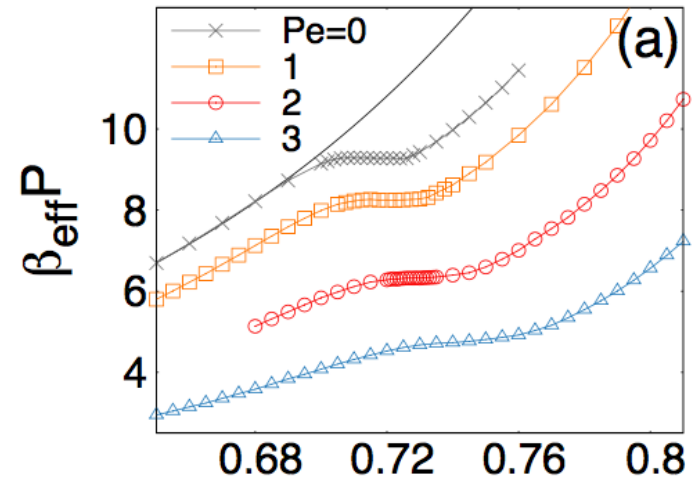
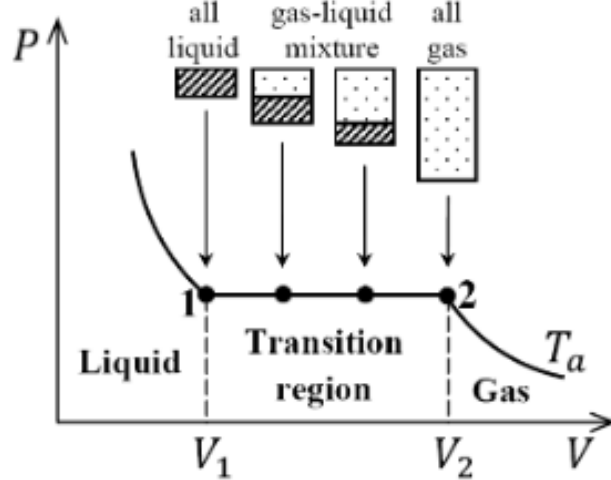
Co-existence, Densité & paramètre d'ordre hexatique



Liquid Hexatic

Equation d'état

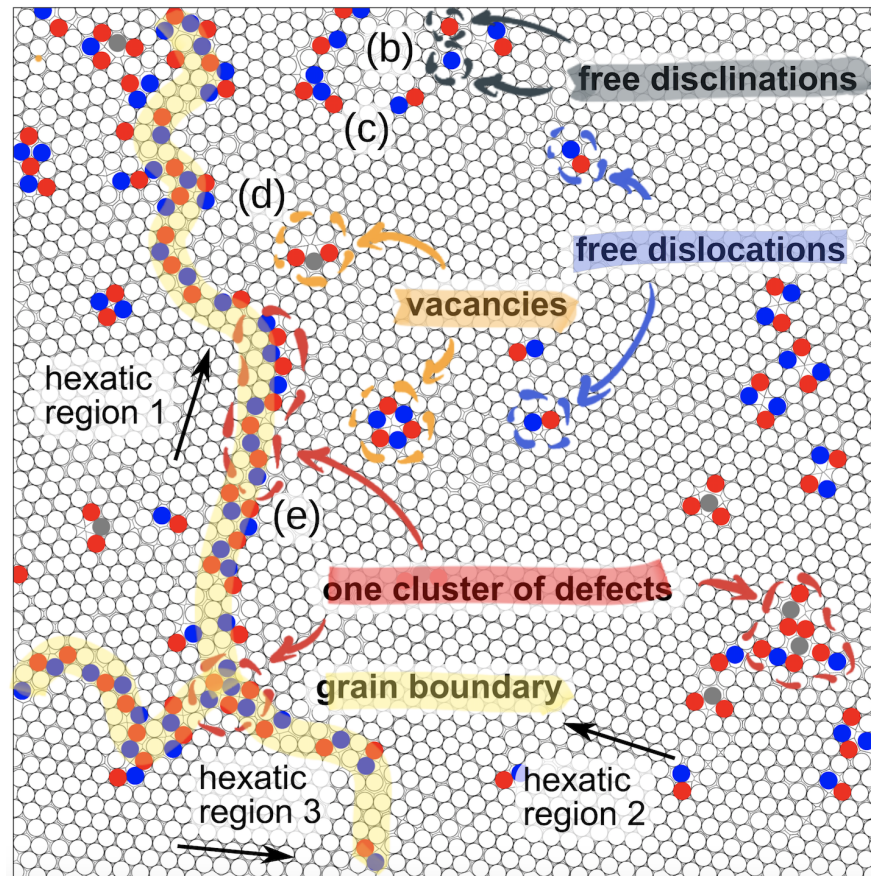
Pression vs Volume



$$\Delta P = P - P_{\text{gas}} = -\frac{1}{4V} \sum_{i,j} \langle \nabla_i U(r_{ij}) \cdot (\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j) \rangle$$

Clusters de défauts

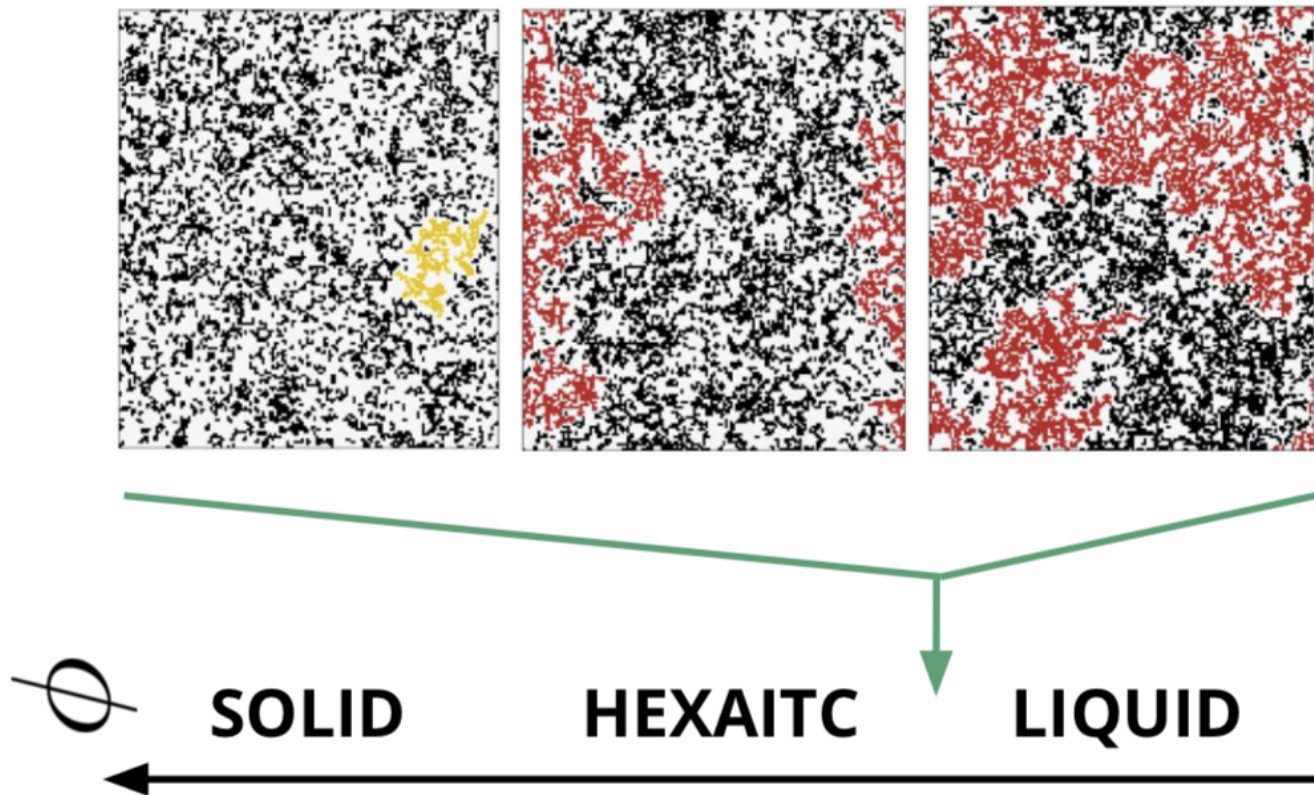
Prolifération dans la zone de transition hexatique-liquide



The classification in Pertsinidis & Ling, PRL 87, 098303 (2001)

Clusters de défauts

Percolation



Les clusters de défauts plus grands sont marqués en **jaune** et **rouge**

Percolation : le plus grand cluster traverse le système d'un bout à l'autre

Transitions de phase

BKT-HNY vs. un nouvel scénario

	BKT-HNY	BK
Solide	QLR pos & LR orient	QLR pos & LR orient
transition	BKT (déliement des dislocations)	BKT
Hexatique	SR pos & QLR orient	SR pos & QLR orient
transition	BKT (déliement des disclinations)	1er ordre
Liquide	SR pos & orient	SR pos & orient

Les phases sont les mêmes, mais la transition **hexatique-liquide** est différente, permettant la **coexistence des deux phases**

Event driven MC simulations - Dynamique moléculaire

La matière active

Active matter

Définition

La matière active est composée d'un grand nombre d'“agents” actifs, dont chacun consomme de l'énergie afin de se déplacer ou d'exercer des forces mécaniques.

En raison de cette consommation d'énergie, ces systèmes sont intrinsèquement hors d'équilibre thermique.

Injection d'énergie uniforme à l'intérieur des échantillons (et non depuis les bords).

Le couplage avec l'environnement (le bain) permet la dissipation de l'énergie injectée.

Active matter

Realisations & modelling

- Large gamme d'échelles! : du macroscopique au microscopique

Exemples naturels : les oiseaux, les poissons, les cellules et les bactéries.

- Réalisations artificielles : particules de Janus, milieux granulaires, etc.

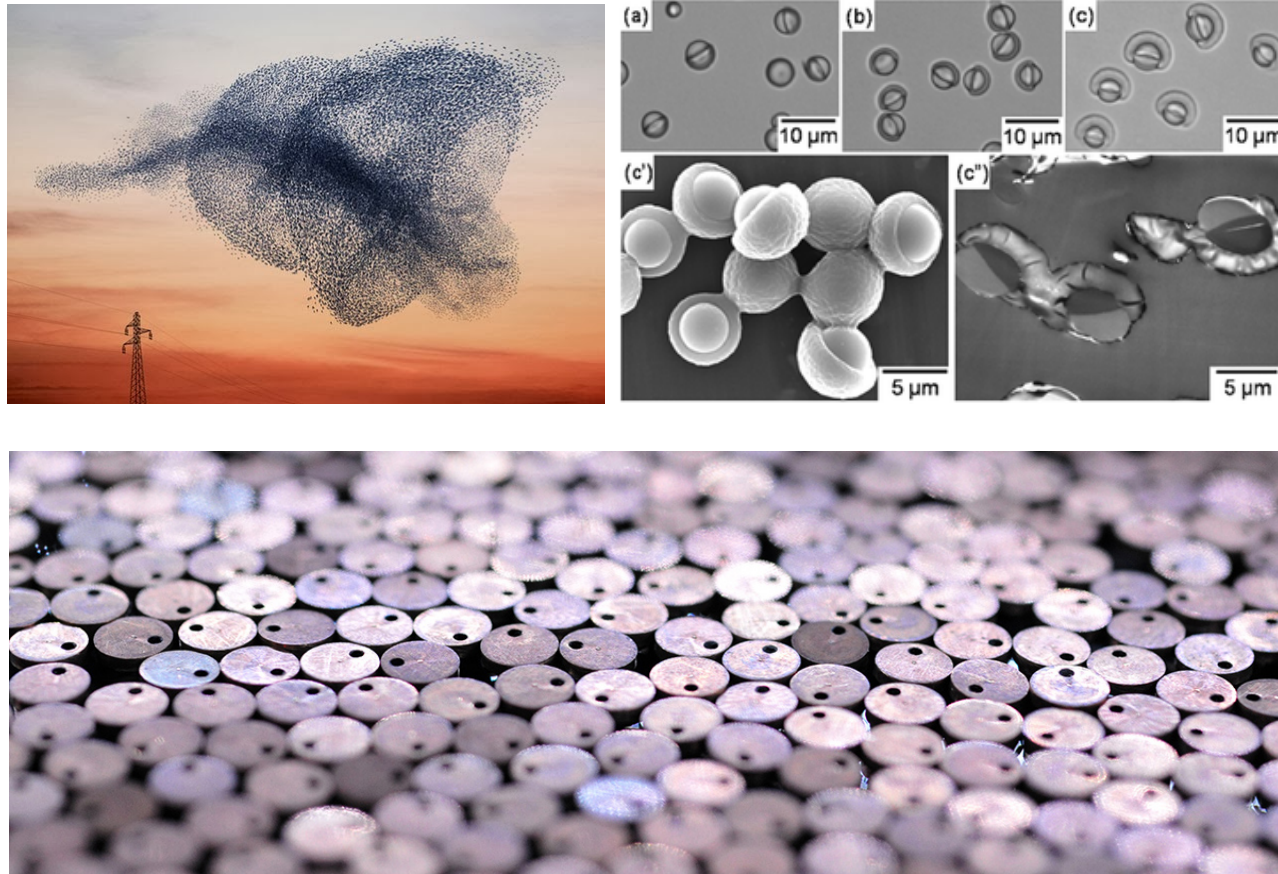
- $3d$, $2d$ et $1d$.

- Modélisation : du très détaillé aux modèles schématiques.

- microscopique ou *ab initio*, centrée sur le mécanisme actif,
- *mésoscopique*, des forces ne dérivant pas d'un potentiel,
- *Automates cellulaires*, comme dans le modèle de Vicsek.

Active matter

Systèmes naturels et artificiels



Expériences & observations **Bartolo et al.** Lyon, **Bocquet et al.** Paris, **Cavagna, et al.** Roma, **di Leonardo et al.** Roma, **Dauchot et al.** Paris, e.g. en Europe

Le modèle standard

Active Brownian disks

Le modèle standard

Force active $\mathbf{F}_{\text{act}}$ selon la direction fluctuante $\mathbf{n}_i = (\cos \theta_i(t), \sin \theta_i(t))$

$$m\ddot{\mathbf{r}}_i + \gamma\dot{\mathbf{r}}_i = F_{\text{act}}\mathbf{n}_i - \nabla_i \sum_{j(\neq i)} U_{\text{Mie}}(r_{ij}) + \boldsymbol{\xi}_i, \quad \dot{\theta}_i = \eta_i,$$

$\mathbf{r}_i$ position du centre de la part i & $r_{ij} = |\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ distance inter-part,

potential d'interaction $U_{\text{Mie}} \approx \left(\frac{r}{\sigma}\right)^{-2n} - \left(\frac{r}{\sigma}\right)^{-n}$

Bruit Gaussian avec $\xi_i^a \propto \sqrt{2\gamma k_B T}$ and $\eta_i \propto \sqrt{2D_\theta}$

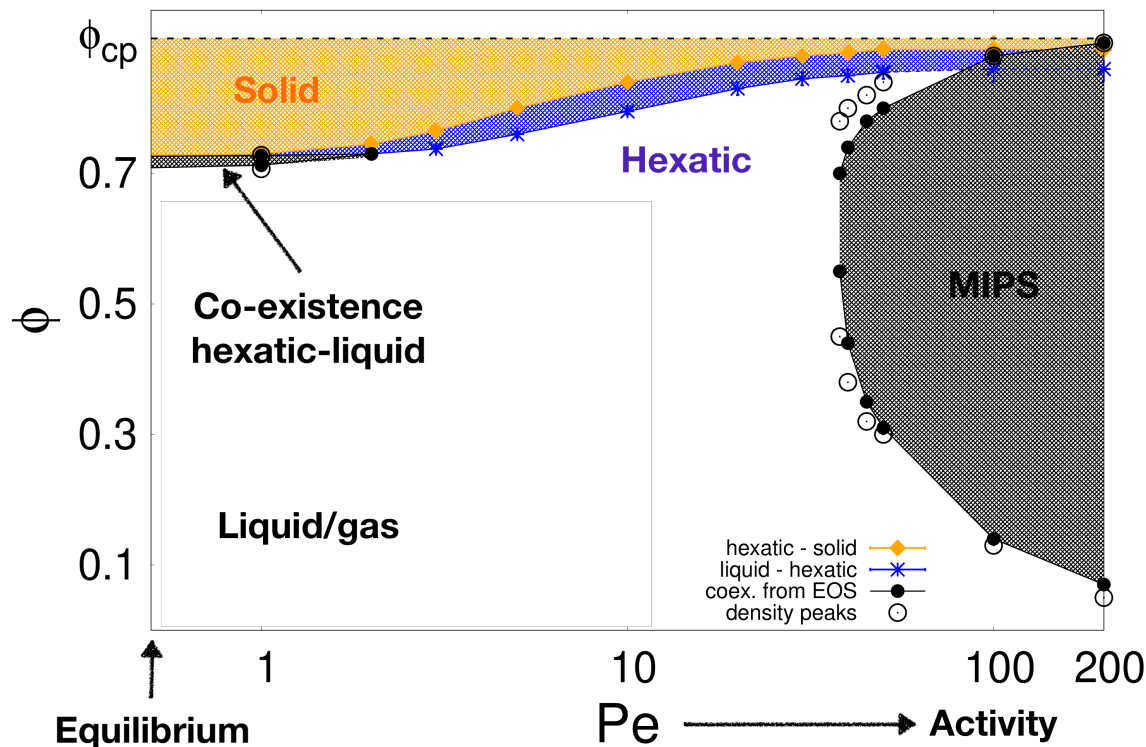
Echelle temporelle $\tau_p = D_\theta^{-1}$ avec $D_\theta = 3k_B T / (\gamma\sigma_d^2)$ crossover entre mouvement ballistic et diffusif ($\approx$ persistent random walk)

Péclet number $\text{Pe} = F_{\text{act}}\sigma_d / (k_B T)$ fraction d'empilement $\phi = \pi\sigma_d^2 N / (4S)$

Bialké, Speck & Löwen, PRL 108, 168301 (2012). Fily & Marchetti, PRL 108, 235702 (2012).

Active Brownian disks

Phase diagram hexatic, liquid, co-existence and MIPS



Gray zone at high Pe
Motility induced
phase separation (MIPS)
gas & dense

Cates & Tailleur
Ann. Rev. CM 6, 219 (2015)
Farage, Krinninger & Brader
PRE 91, 042310 (2015)

Pressure $P(\phi, Pe)$ (EOS), correlations $G_T(r)$, $G_6(r)$, and distributions of ϕ_i , $|\psi_{6i}|$

Digregorio, Levis, Suma, LFC, Gonnella & Pagonabarraga, PRL 121, 098003 (2018)

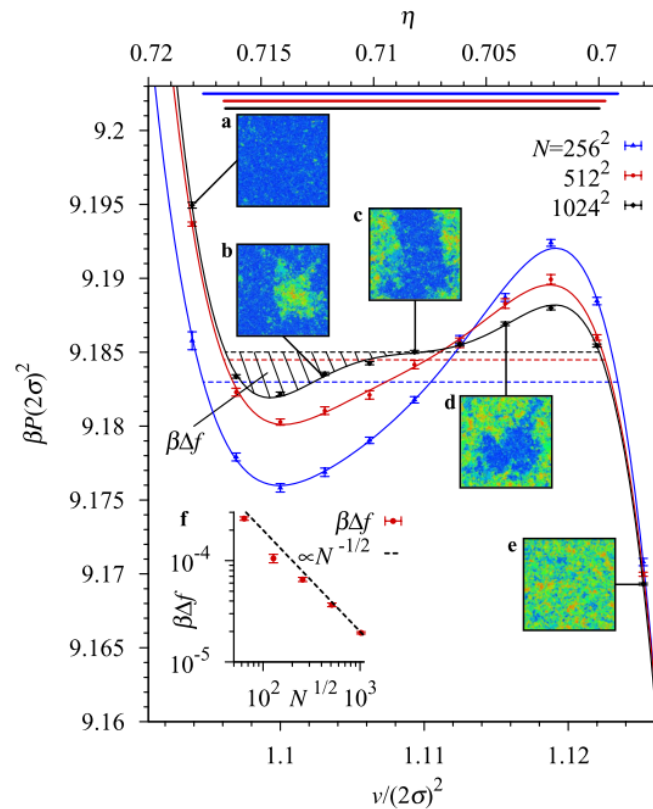
Un comportement très riche !

Hard disks in two dimensions

Pressure loop and finite N dependence

Hexatic

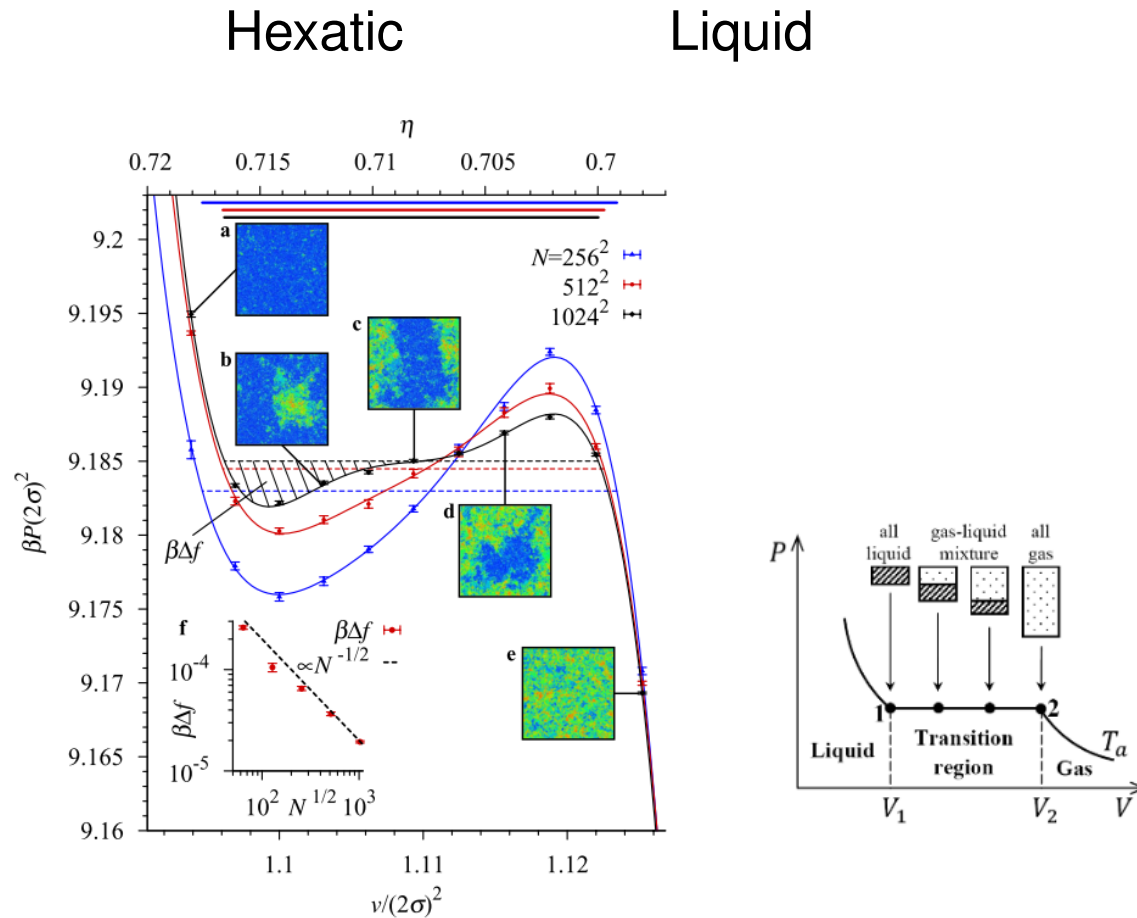
Liquid



A system with PBCs has a $\sim$ flat interface with surface energy scaling as $S \simeq L^{d-1} = \sqrt{N}$ and $f \simeq N^{-1/2}$. Verified in the inset for $\phi \simeq 0.708$

Hard disks

Pressure loop and finite N dependence: evidence for 1st order



Similar to Van der Waals model for 1st order phase transitions

P cannot increase with V (stability): phase separation *via* Maxwell construction

Active disks

Solid, hexatic, liquid & MIPS

1st order
w/co-existence

à la KTHNY

free dislocations at solid-hex

free disclinations in the liquid

in MIPS

