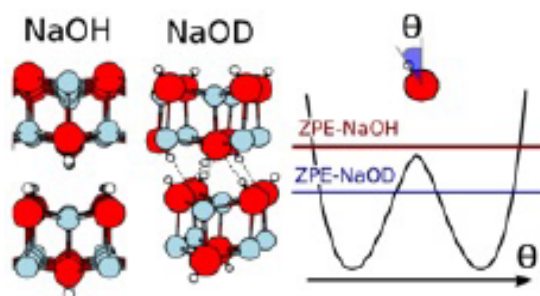


Transition quantique : quand le deutérium brise la symétrie

L'hydroxyde de sodium (NaOH), ou soude anhydre, ne présente pas de transition de phase à basse température. En remplaçant l'hydrogène par du deutérium (D), une transition apparaît à 153K entre deux structures cristallines distinctes, avec une forte dilatation (>5%). À température ambiante, les structures de NaOD et NaOH deviennent très similaires. Cette transition spectaculaire induite par échange isotopique, détectée en 1985, n'avait jamais été expliquée : généralement, en matière condensée, les noyaux sont considérés comme des objets classiques (au contraire des électrons, quantiques) et dans ce cadre, les propriétés statistiques sont insensibles aux isotopes. Des chercheurs de l'INSPI sont parvenus à élucider ce phénomène, à l'aide d'une description quantique des noyaux.

La principale correction quantique par rapport à la vision classique des noyaux est la présence d'énergie de point zéro, un effet quantique élémentaire : du fait du principe d'incertitude d'Heisenberg, les particules quantiques ne sont jamais totalement au repos et explorent le paysage d'énergie potentielle, même en l'absence d'agitation thermique. Dans NaOH et NaOD, les groupes OH ou OD ressentent un potentiel avec deux minima correspondant à deux orientations possibles des liaisons hydrogène. Dans NaOH, l'énergie de point zéro est supérieure à la barrière ce qui ne permet pas au système de se localiser dans aucun de ces deux minima. Ainsi, les liaisons hydrogène ne se forment pas et les groupes OH restent verticaux (à gauche sur la figure). En argot quantique, NaOH est un paraélectrique quantique car le dipôle résultant est nul.



Figure

La structure NaOH/D. Dans NaOH, les fluctuations quantiques interdisent la formation de liaisons hydrogène et les groupes OH oscillent autour de la verticale. Le deutérium, bien que chimiquement équivalent est plus lourd donc « moins quantique ». Son énergie de point zéro (ZPE) est inférieure à la barrière, les groupes OD sont piégés dans un des puits de potentiel et forment des liaisons hydrogène qui assurent la cohésion du cristal... jusqu'à ce que les fluctuations thermiques prennent le relais !

Lorsque D, plus lourd et « moins quantique », remplace H, l'énergie de point zéro diminue sous la hauteur de la barrière et les groupes OD sont alors piégés dans l'un des minima, la symétrie est brisée vers un ordre antiferroélectrique. Lorsque la température augmente, OD tend à s'échapper du puits, ce qui rompt les liaisons hydrogène et provoque une dilatation soudaine à la température de transition. À température ambiante, NaOH et NaOD convergent vers une même structure : c'est la limite classique de la mécanique quantique. Les simulations montrent aussi que sous pression, les liaisons hydrogène sont renforcées et la symétrie est brisée même dans NaOH, qui se comporte alors comme NaOD.

La présence inattendue d'une transition quantique dans un matériau si simple et la compétition entre effets de température et de pression ouvre un champ de recherche encore largement inexploré sur les effets quantiques dans la large famille des cristaux dont la cohésion est assurée par des liaisons hydrogène.

Référence

"When Quantum Fluctuations Meet Structural Instabilities: The Isotope- and Pressure-Induced Phase Transition in the Quantum Paraelectric NaOH"

S. Schaack, E. Mangaud, E. Fallacara, S. Huppert, P. Depondt and F. Finocchi

Physical Review Letters, 131, 126101 (2023)

<https://journals.aps.org/prl/abstract/10.1103/PhysRevLett.131.126101>

Contacts

Fabio Finocchi : fabio.finocchi@insp.jussieu.fr, Philippe Depondt : depondt@insp.jussieu.fr,

Simon Huppert : simon.huppert@insp.upmc.fr