



Doctoral Thesis

## Structural Competition in Two-Dimensional Dipolar Systems

**Author(s):**

Gränz, Barbara Katharina

**Publication Date:**

2014

**Permanent Link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-010361946> →

**Rights / License:**

[In Copyright - Non-Commercial Use Permitted](#) →

This page was generated automatically upon download from the [ETH Zurich Research Collection](#). For more information please consult the [Terms of use](#).

Diss. ETH No. 22378

# STRUCTURAL COMPETITION IN TWO-DIMENSIONAL DIPOLAR SYSTEMS

A thesis submitted to attain the degree of  
DOCTOR OF SCIENCES of ETH ZURICH  
(Dr. sc. ETH Zurich)

presented by

BARBARA KATHARINA GRÄNZ

Dipl. Phys. ETHZ  
born on October 18, 1983  
citizen of Doppleschwand and Malters, Luzern

accepted on the recommendation of  
Prof. Dr. J. W. Blatter, examiner  
Prof. Dr. M. Sigrist, co-examiner  
PD Dr. V. B. Geshkenbein, co-examiner

2014

# Abstract

Competing structures and effects of commensuration appear in numerous physical systems. Prominent examples are atoms on crystalline surfaces or flux quanta in structured superconductors. A new realization of this physics is accomplished by assembling cold polar molecules in a two-dimensional optical trap and stabilizing them with the help of a perpendicular electric field; adding a square optical lattice provides an effective substrate potential which competes against the triangular lattice arrangement favored by the long-range repulsive dipolar interaction. The system exhibits an interesting phase diagram with an interplay between commensuration effects and quantum/classical floating and melting transitions. In this thesis, we find the minimal-energy states at commensurate density in the absence of quantum and thermal fluctuations and thereby establish the complete transformation pathway from the square to the triangular lattice.

In the simplest case, the transformation pathway between lattices with different symmetries may involve a sequence of other uniform lattices. An interesting situation arises when new topological objects show up in intermediate non-uniform phases. The original ‘misfit problem’ between a particle lattice with lattice constant  $a$  and a periodic substrate with incommensurate periodicity  $b \neq a$  has first been formulated in one dimension; these studies have shown that the locked system (with particle separation  $b$ ) at large substrate potential amplitude  $V$  smoothly transforms into the free lattice (with particle separation  $a$ ) at  $V = 0$  via a non-uniform soliton phase, where soliton cores approximating the free phase separate regions of locked phase. The commensurate-incommensurate transition in two dimensions has been addressed by Pokrovsky and Talapov; within their ‘resonance approximation’, the problem reduces to a one-dimensional one and the system develops a secondary structure in the form of a soliton-line array. Going beyond the resonance approximation, we find that the square-to-triangular transformation in the dipolar system involves three separate transitions related to the formation of a period-doubled zig-zag lattice as well as two instabilities towards non-uniform soliton phases.

For weak substrate potentials, the substrate-induced deformation of the particle lattice is studied in perturbation theory and the resulting distorted phase is characterized by a non-trivial rotation angle. In the opposite limit of strong substrate potentials, the particles are locked in a square-lattice configuration. Reducing the potential amplitude, the square lattice becomes unstable towards a shear mode residing at the Brillouin zone edge. The new lattice features a period-doubling resulting in a orthorhombic unit cell with two atom basis: the atoms arrange in a zig-zag structure along one principal direction. The ordered triangular and square lattices smoothly transform into the rotated and distorted triangular and the period-doubled phases, respectively. The transition away from the period-doubled to the solitonic phases appears rather sharp (as the weak interaction between solitons leads to a rapid flooding of the sample) but is of second order as well. The various phases and transitions are found using perturbation theory and an elastic description at small  $V$ , a harmonic ( $k$ -space) stability analysis at large  $V$ , and a variational minimization scheme combined with a stability analysis in the intermediate regime. The solitonic arrays are obtained by a variational ansatz combining a global distortion (shearing/compressing and rotating the lattice) and a periodic modulation. Furthermore, due to large anharmonic effects, the different candidate soliton solutions are relaxed numerically to find the correct low-lying states. The additional complication generated by the presence of long-range interactions is coped with using the Ewald summation technique.

Contrary to typical situations in the past, in the case with cold molecules the system can be tuned through all regimes of the phase diagram, as the various system parameters, density, strength of the substrate potential, and, within a restricted regime, the interaction strength can be easily changed. Even more, changing the orientation or the number of lasers the symmetry of the optical lattice generating the substrate potential can be modified. In particular, rather than a square substrate lattice, it is even simpler to install a one-dimensional corrugation what provides already a wealth of interesting results. We discuss the prospects to observe such structurally competing phases in a cold molecule system and address possible future directions of research.

# Kurzfassung

Auf Kristalloberflächen absorbierte Atome und Flussquanten in strukturierten Supraleiter zählen zu den typische Beispielen physikalischer Systeme, in welchen ein struktureller Wettkampf und Kommensurabilitätseffekte auftreten können. Eine neue Realisierung dieser Physik kann mit kalten polaren Molekülen, gefangen in einer zwei-dimensionalen optischen Falle und stabilisiert durch ein darauf senkrecht stehendes elektrisches Feld, erreicht werden; ein zusätzliches optisches Gitterpotential erzeugt ein effektives Substratspotential, dessen quadratische Gittersymmetrie mit der durch die langreichweitige Dipol-Dipol-Abstossung favorisierten Dreiecksanordnung konkurriert. Dieses System besitzt ein interessantes Phasendiagramm, welches durch das Zusammenspiel von Kommensurabilitätseffekten, Quanten-/klassischem Schmelzen und ‘pinning/depinning’ Phasenübergängen geprägt ist. In der vorliegenden Dissertation interessieren wir uns für den vollständigen Transformationspfad vom Quadrat- zum Dreiecksgitter als Funktion der relativen Stärke  $v = E_{\text{sub}}/E_{\text{int}}$  zwischen dem Substratspotential und der Teilchen-Teilchen-Wechselwirkung. Dabei beschränken wir uns auf den Fall kommensurabler Dichte (ein Teilchen pro Substratsminimum) und vernachlässigen sowohl Quanten- als auch thermische Fluktuationen.

Im einfachsten Fall erfolgt die Umwandlung zwischen Gittern unterschiedlicher Symmetrien über eine Abfolge anderer, regelmässiger Gitter. Ein interessanter Aspekt kommt hinzu, wenn unregelmässige Zwischenphasen mit neuen topologischen Objekten auftreten. Das ursprüngliche ‘Anpassungsproblem’ zwischen einem Teilchengitter mit Gitterkonstante  $a$  und einem periodischen Substrat mit inkommensurabler Periodizität  $b \neq a$  wurde zuerst in einer Dimension untersucht; der Übergang von der kommensurablen ‘locked’ Phase (alle Teilchen sitzen in Substratsminima mit Abstand  $b$ ) bei grosser Substratsamplitude  $V$  zur inkommensurablen ‘freien’ Phase (mit Teilchenabstand  $a$ ) bei  $V = 0$  vollzieht sich via einer unregelmässigen ‘Soliton-Phase’, in welcher Bereiche der locked Phase getrennt werden durch Solitonen, die in ihrem Innern die freie Phase approximieren. Pokrovsky und Talapov untersuchten den Übergang von kommensurabel zu inkommensurabel in zwei Dimensionen; im Rahmen ihrer ‘Resonanzapproximation’ reduziert sich das

Problem auf ein eindimensionales mit der Lösung einer periodischen Zweitstruktur aus Solitonlinien. Wir widmen uns dem vollständigen Problem und finden, dass die Transformation von Quadrat- zu Dreiecksstruktur im dipolaren System mit drei getrennten Übergängen einhergeht, welche verbunden sind mit der Bildung einer perioden-verdoppelten Zick-Zack- sowie zwei Soliton-Phasen.

Die substrat-induzierte Verformung des Teilchengitters bei schwachem Substratspotential wird im Formalismus der Störungsrechnung behandelt; es resultiert eine deformierte Phase mit einer fixen, nicht-trivialen Ausrichtung relativ zum Substrat. Im entgegengesetzten Fall zwingt ein genügend starkes Substratspotential die Teilchen in die unterliegende Quadratstruktur; unterhalb eines Schwellenwertes  $V_{\square}$  wird diese Anordnung jedoch instabil und erfährt eine Periodenverdopplung via einer Schubverformung hin zu einem orthorhombischen Gitter mit zwei-atomiger Basis: die Teilchen ordnen sich in einer Zick-Zack-Struktur entlang einer Substrats-Hauptachse. Die regulären Dreiecks- und Quadratgitter gehen stetig in die rotierte und deformierte Dreiecks- bzw. die perioden-verdoppelte Zick-Zack-Phase über. Die schwache Wechselwirkung zwischen Solitonen führt zu einer raschen Soliton-Überflutung der Zick-Zack-Struktur. Folglich erscheint der Übergang in die Solitonphase unstetig – tatsächlich ist es aber ein Phasenübergang zweiter Ordnung. Wir erhalten die unterschiedlichen Phasen und damit verbundenen Übergänge unter Verwendung der Störungstheorie und einer elastischen Beschreibung für kleine Amplituden  $V$ , einer harmonischen ( $k$ -Raum) Stabilitätsanalyse für grosse  $V$  und einer variationellen Minimierung kombiniert mit einer Stabilitätsanalyse für dazwischenliegende  $V$ -Werte. Der variationelle Ansatz für die Solitonphasen ist eine Kombination von globaler Verformung (Scherung/Kompression und Rotation) und periodischer Modulation. Aufgrund starker Anharmonizitäten werden unterschiedliche Soliton-Strukturen zusätzlich numerisch relaxiert um den tieflegendsten Energiezustand zu bestimmen. Erschwernisse im Zusammenhang mit der Langreichweitigkeit der Wechselwirkung werden mit der Ewald Summationstechnik bewältigt.

Im Gegensatz zu vielen bereits untersuchten Systemen haben kalte Gase den Vorteil, dass unterschiedliche Systemparameter wie Teilchendichte, Stärke des Substratspotentials und (beschränkt auch) der dipolaren Wechselwirkung

## *Kurzfassung*

relativ einfach beeinflusst werden können und man somit experimentellen Zugang zu grossen Bereichen des Phasendiagramms erhält. Zudem lässt sich durch Ändern der Orientierung und Anzahl der Laser der Einfluss unterschiedlicher Symmetrien des optischen Gitterpotentials und damit des Substrats studieren. Insbesondere bringt bereits die Präsenz des simplen eindimensionalen Waschbrettpotentials eine Vielzahl interessanter Resultate hervor. Wir erörtern Möglichkeiten zur experimentellen Beobachtung und weiterführenden Untersuchung solcher struktureller Wettkämpfe in kalten molekularen Systemen.