Phases isolantes d'une échelle fermionique quart-remplie

E. Orignac[a] and R. Citro[b]

[a]LPT-ENS, 24 Rue Lhomond, 75231 Paris

[b]Dipartamento di Fisica "E. R. Caianiello", Universita di Salerno, 84081 Baronissi (Sa)

Échelle fermionique 1/4 remplie:
modèle pour la Transition ordre de charge à T=35 K de NaV_2O_5
(Mostovoy & Khomskii 2000).
Transition ordre de charge dans $(TMTTF)_2X$
Système de chaînes couplées 1/4 remplies.
Modèle très simplifié de formation de “stripes”

Hamiltonien

$$H = -t \sum_{i,p,\sigma} (c^\dagger_{i+1,p,\sigma} c_{i,p,\sigma} + c^\dagger_{i,p,\sigma} c_{i+1,p,\sigma}) - t_\perp \sum_{i,\sigma} (c^\dagger_{i,2,\sigma} c_{i,1,\sigma} + \text{H.c.}) + U \sum_{i,p} n_{i,p,\uparrow} n_{i,p,\downarrow} + V_{\|} \sum_{i,p} n_{i,p} n_{i+1,p} + V_\perp \sum_i n_{i,1} n_{i,2} \quad (1)$$

Forte répulsion $U, V_{\|} \sim t \gg t_\perp$ négligeable.

Interaction d'échange generée $J \sim t_\perp^2/U$.

$$H_{\text{exch.}} = J_\perp \sum_i \vec{S}_{i,1} \cdot S_{i,2} \quad (2)$$

Hamiltonien de phase (I)
Excitations de charge:

$$H_+ = \int \frac{dx}{2\pi} \left[u_{\rho+} K_{\rho+} (\pi \Pi_{\rho+})^2 + \frac{u_{\rho+}}{K_{\rho+}} (\partial_x \phi_{\rho+})^2 \right] + \frac{2V_\perp}{(2\pi a)^2} \int dx \cos 4\phi_{\rho+} \quad (3)$$

$[\phi_{\rho+}(x), \Pi_{\rho+}(x')] = i\delta(x - x')$: Hamiltonien de sine Gordon

$\Rightarrow$ État isolant si $K_{\rho+} < 1/2$.

Sans interaction, $K_\rho = 1$,

Avec $U \neq 0, V_{||} = 0$, $K_\rho \geq 1/2$,

$\Rightarrow V_{||}$ nécessaire pour obtenir l'état isolant.

Hamiltonien de phase (II)
Séparation spin-charge
Excitations de spin et modes "orbitaux"

$$
\begin{aligned}
H &= \int \frac{dx}{2\pi} \sum_{\nu\in\{\rho-,\sigma+,\sigma-\}} \left[u_\nu K_\nu (\pi\Pi_\nu)^2 + \frac{u_\nu}{K_\nu}(\partial_x\phi_\nu)^2 \right] \\
&+ \frac{2g_1}{(2\pi a)^2}\int dx \cos 2\phi_{\sigma+} \cos 2\phi_{\sigma-} + \frac{2g_2}{(2\pi a)^2}\int dx \cos 2\phi_{\sigma+} \cos 2\theta_{\sigma-} \\
&+ \frac{2g_3}{(2\pi a)^2}\int dx \cos 4\phi_{\rho-} + \frac{2g_4}{(2\pi a)^2}\int dx \cos 2\phi_{\rho-} \cos 2\phi_{\sigma+} \\
&+ \frac{2g_5}{(2\pi a)^2}\int dx \cos 2\phi_{\rho-} \cos 2\phi_{\sigma-} + \frac{2g_6}{(2\pi a)^2}\int dx \cos 2\phi_{\rho-} \cos 2\theta_{\sigma-}
\end{aligned} \tag{4}
$$

$$\theta_\nu(x) = \int dx' \pi\Pi_\nu(x') \Rightarrow [\theta_{\sigma-}(x), \phi_{\sigma-}(x')] \neq 0$$

$\theta_{\sigma-}$ and $\phi_{\sigma-}$ ne peuvent pas s'ordonner simultanément.

Hamiltonien de phase (III)

$$
\begin{aligned}
K_{\sigma+} &= \left(1+\frac{J_\perp a}{2\pi v_F}\right)^{-1/2}, && (5)\\
K_{\sigma-} &= \left(1-\frac{J_\perp a}{2\pi v_F}\right)^{-1/2}, && (6)\\
g_1 &= 0\ g_2 = J_\perp a, && (7)\\
g_3 &= 2C^2 V_\perp a, && (8)\\
g_4 &= (2V_\perp - \frac{J_\perp}{2})a, && (9)\\
g_5 &= (2V_\perp + \frac{J_\perp}{2})a, && (10)\\
g_6 &= J_\perp a && (11)
\end{aligned}
$$

Paramètres d'ordre (I)

$$O_{ODC(\pi,q_y)}(n) = (-)^n (n_{n,1} + \cos(q_y) n_{n,2}) \quad (12)$$

$$O_{OML(\pi,q_y)}(n) = (-)^n \sum_\sigma (c^\dagger_{n+1,1,\sigma} c^\dagger_{n+1,1,\sigma} + \cos(q_y) c^\dagger_{n+1,2,\sigma} c^\dagger_{n+1,2,\sigma}) \quad (13)$$

$$O_{ODC(\frac{\pi}{2},q_y)}(n) = e^{-i\frac{\pi}{2}n} (e^{iq_y/2} n_{n,1} + e^{-iq_y/2} n_{n,2}) \quad (14)$$

ODC = Onde de Densité de Charge (sur les sites)

OML = Onde de Modulation de Liens (à la Peierls)

En termes des variables de phases:

Paramètres d'ordre (II)

$$O_{ODC(\pi,0)} \sim \frac{1}{2\pi\alpha} \cos 2\phi_{\rho+} \cos 2\phi_{\rho-} \quad (15)$$

$$O_{ODC(\pi,\pi)} \sim \frac{1}{2\pi\alpha} \sin 2\phi_{\rho+} \sin 2\phi_{\rho-} \quad (16)$$

$$O_{OML(\pi,0)} \sim \frac{1}{2\pi\alpha} \sin 2\phi_{\rho+} \cos 2\phi_{\rho-} \quad (17)$$

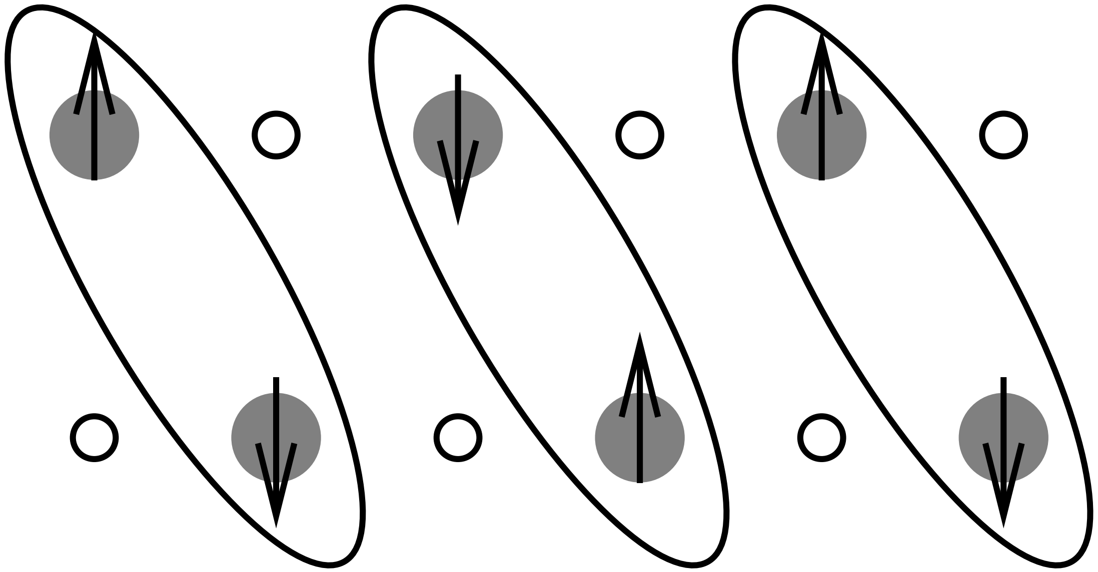
$$O_{OML(\pi,\pi)} \sim \frac{1}{2\pi\alpha} \cos 2\phi_{\rho+} \sin 2\phi_{\rho-} \quad (18)$$

$$O_{ODC(\frac{\pi}{2},0)} \sim \frac{1}{2\pi\alpha} e^{i\phi_{\rho+}} \cos \phi_{\rho-} \quad (19)$$

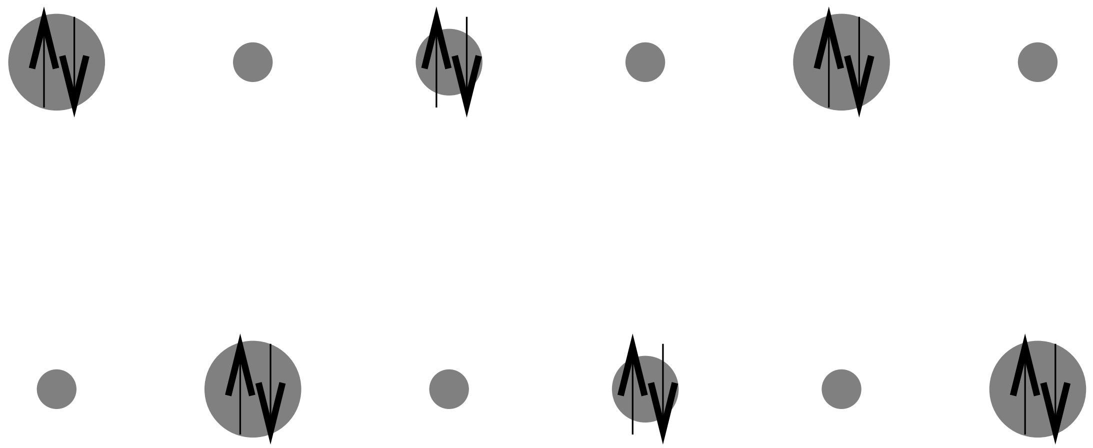
$$O_{ODC(\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2})} \sim \frac{1}{2\pi\alpha} e^{i\phi_{\rho+}} \cos(\phi_{\rho-} - \frac{\pi}{4}) \quad (20)$$

$$O_{ODC(\frac{\pi}{2},\pi)} \sim \frac{1}{2\pi\alpha} e^{i\phi_{\rho+}} \sin \phi_{\rho-} \quad (21)$$

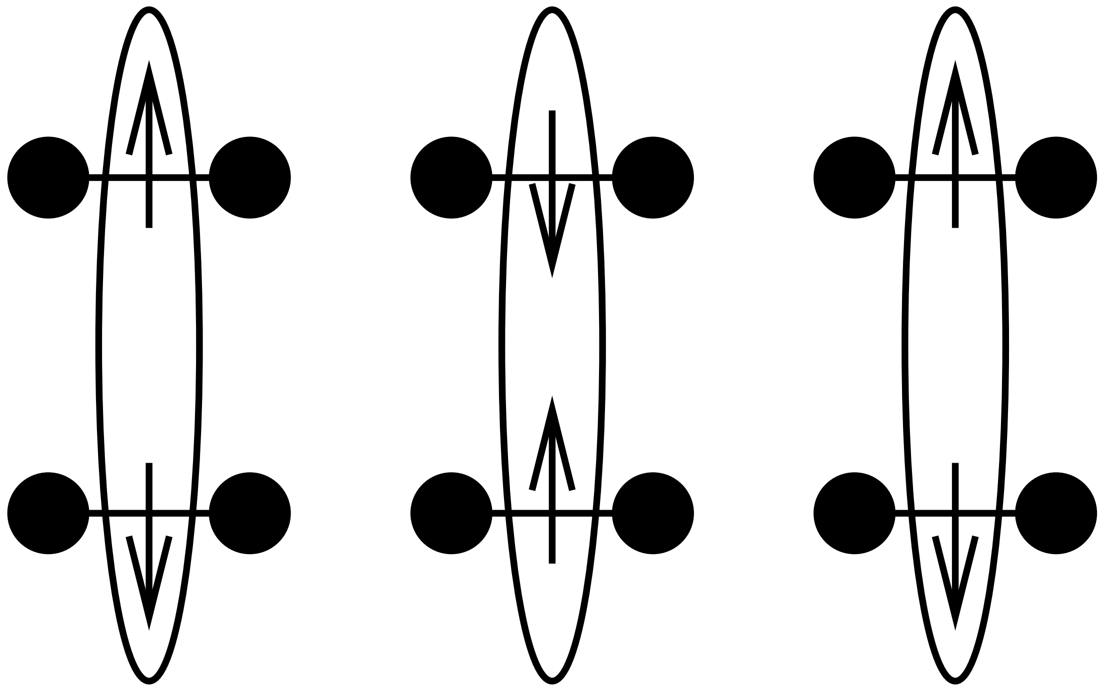
$$O_{ODC(\frac{\pi}{2},-\frac{\pi}{2})} \sim \frac{1}{2\pi\alpha} e^{i\phi_{\rho+}} \cos(\phi_{\rho-} + \frac{\pi}{4}) \quad (22)$$



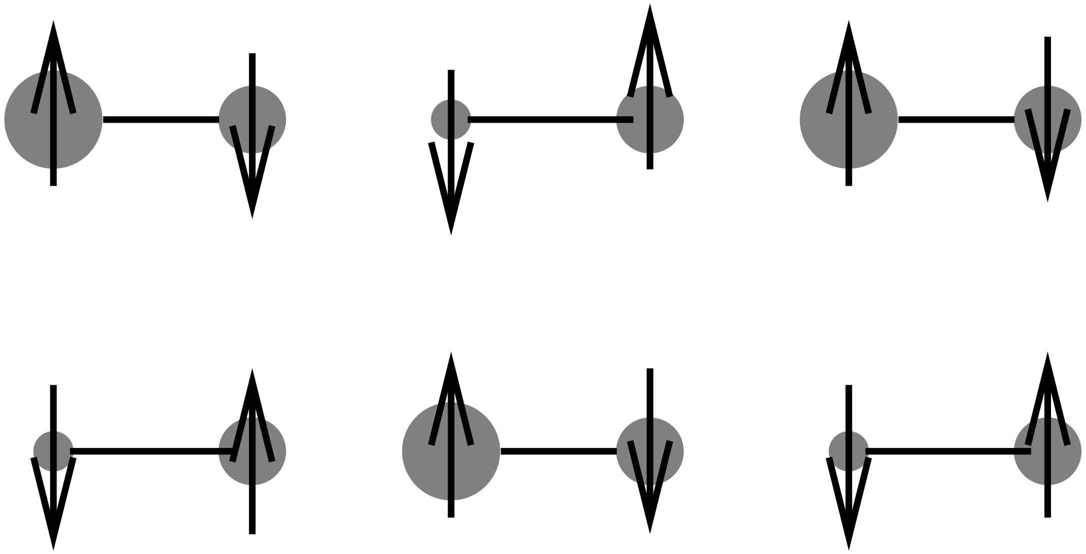
L'ODC(π,π) ou ordre de charge zig-zag. Cette phase correspond à $\langle\phi_{\rho-}\rangle = \frac{\pi}{4}$, $\langle\phi_{\sigma+}\rangle = \frac{\pi}{2}$, $\langle\theta_{\sigma-}\rangle = 0$. Un gap de spin se forme sous l'effet de léchange interchaîne $J_\perp$. Les modes "orbitaux" se découplent des modes de spin. Cette phase est obtenue pour une répulsion forte $1/4 < K_\rho < 1/3$.



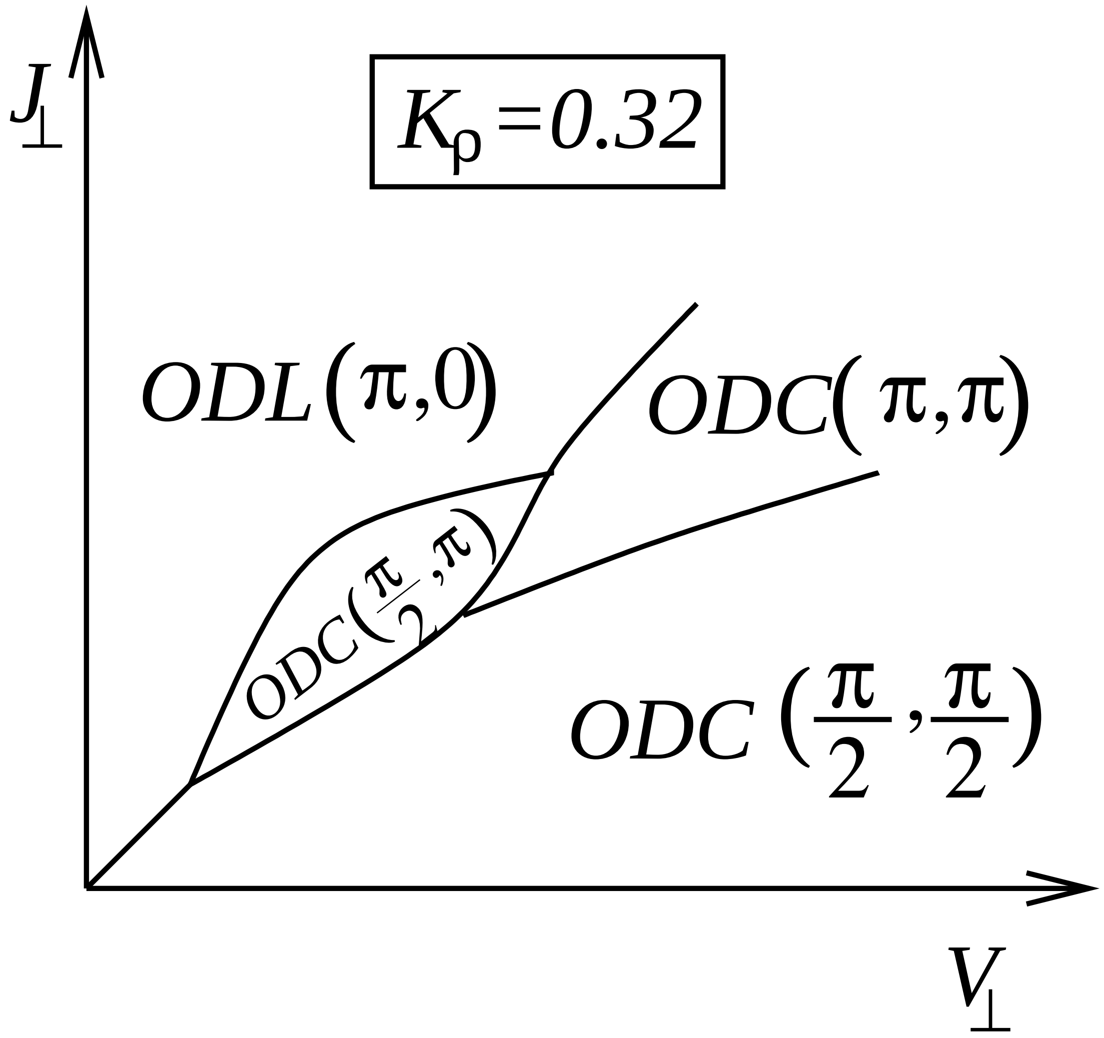
L'ODC($\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}$) + (π, π). Cette phase correspond à $\langle\phi_{\rho-}\rangle = \frac{\pi}{4}$, $\langle\phi_{\sigma+}\rangle = \frac{\pi}{2}$, $\langle\phi_{\sigma-}\rangle = 0$. Chaque chaîne forme sa propre onde de densité de charge, et les phases de ces ODC sont verrouillées entre elles par la répulsion interchaîne $V_\perp$. Le couplage se fait principalement par la composante $4k_F = \pi$ de la densité. Les modes "orbitaux" se découplent des modes de spin. Cette phase est obtenue pour une répulsion forte $1/4 < K_\rho < 1/3$.



L'OML$(\pi, 0)$. Cette phase correspond à $\langle \phi_{\rho -} \rangle = \frac{\pi}{2}$, $\langle \phi_{\sigma +} \rangle = 0$ $\langle \theta_{\sigma -} \rangle = 0$. Des singulets de spin interchaîne sont formés par $J_\perp$ et sont localisés au milieu des liens par la répulsion $V_\parallel$. Cette phase est obtenue pour une répulsion intermédiaire $1/3 < K_\rho < 1/2$. Les modes "orbitaux" ne se découplent pas des modes de spin.



L'ODC($\frac{\pi}{2},\pi$). Cette phase correspond à $\langle\phi_{\rho-}\rangle = \frac{\pi}{2}$, $\langle\phi_{\sigma+}\rangle = 0$, $\langle\phi_{\sigma-}\rangle = 0$. Des singulets de spin sont formés à l'intérieur des chaînes. Chaque chaîne forme sa propre onde de densité de charge, et les phases de ces ODC sont verrouillées entre elles par la répulsion interchaîne $V_\perp$. Le couplage se fait principlalement par la composante $2k_F = \frac{\pi}{2}$ de la densité. Cette phase est obtenue pour une répulsion intermédiaire $1/3 < K_\rho < 1/2$. Les modes "orbitaux" ne se découplent pas des modes de spin.



$K_\rho = 0.32$
$J_\perp$
$ODL(\pi,0)$
$ODC(\pi,\pi)$
$ODC(\frac{\pi}{2},\pi)$
$ODC(\frac{\pi}{2},\frac{\pi}{2})$
$V_\perp$

Diagramme de phase produit par la frustration $J_\perp/V$.
Differents régime selon la répulsion intrachaîne $U, V_\parallel$

Problèmes:

Échelles zig-zag 1/4 remplies: $PrBa_2Cu_4O_8$ (Amasaki, Shibata, Ohta 2000)
Faible répulsion: rôle du saut interchaîne $t_\perp$