Etats de bords et profils d'aimantation de l'échelle de spin-1/2 et de la chaîne de spin-1

E. Orignac avec P. Lecheminant*

*cond-mat/0111177

Le gap de Haldane
Chaîne de spin-S *Antiferromagnétique*

$$H = J \sum_n \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1}$$

$S \to \infty \Rightarrow$ Modèle σ-non linéaire O(3) + terme topologique

$$\begin{aligned} \mathcal{S} &= \int dx d\tau \left[(\partial_\tau \vec{n})^2 + (\partial_x \vec{n})^2 \right] \\ &+ i\frac{S}{2} \int dx d\tau \vec{n} \cdot (\partial_\tau \vec{n} \times \partial_x \vec{n}) \end{aligned}$$

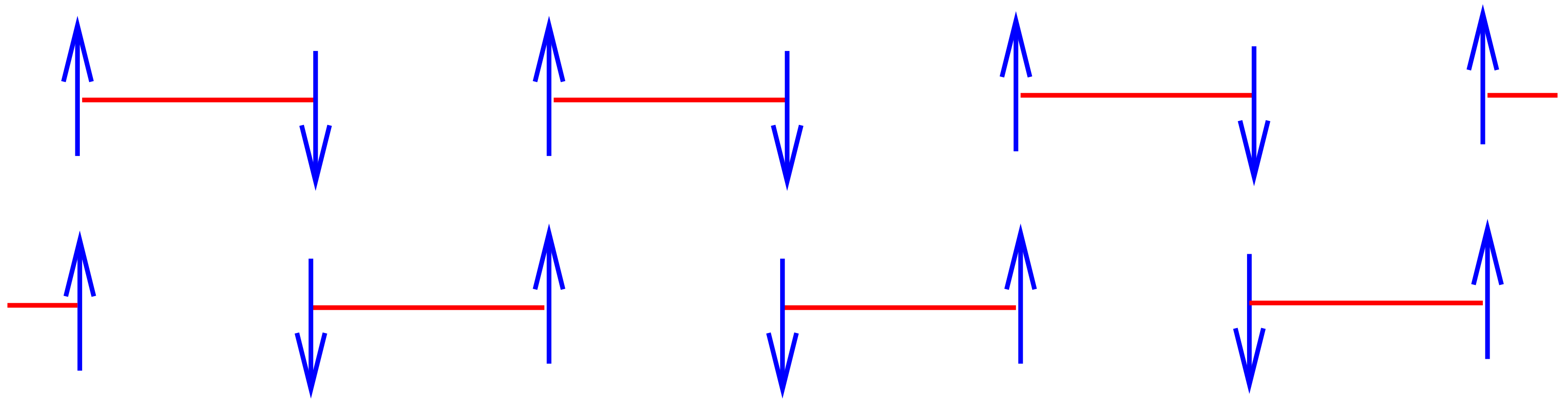
$$\vec{S}_n \sim \vec{n} \times \partial_\tau \vec{n}(na) + (-)^n S \vec{n}(na)$$

- $S \in \mathbb{N} \Rightarrow$ pas d'effet du terme topologique $\Rightarrow$ gap de spin
- $S \in \mathbb{N} + 1/2 \Rightarrow$ topological term prevents the formation of a gap.

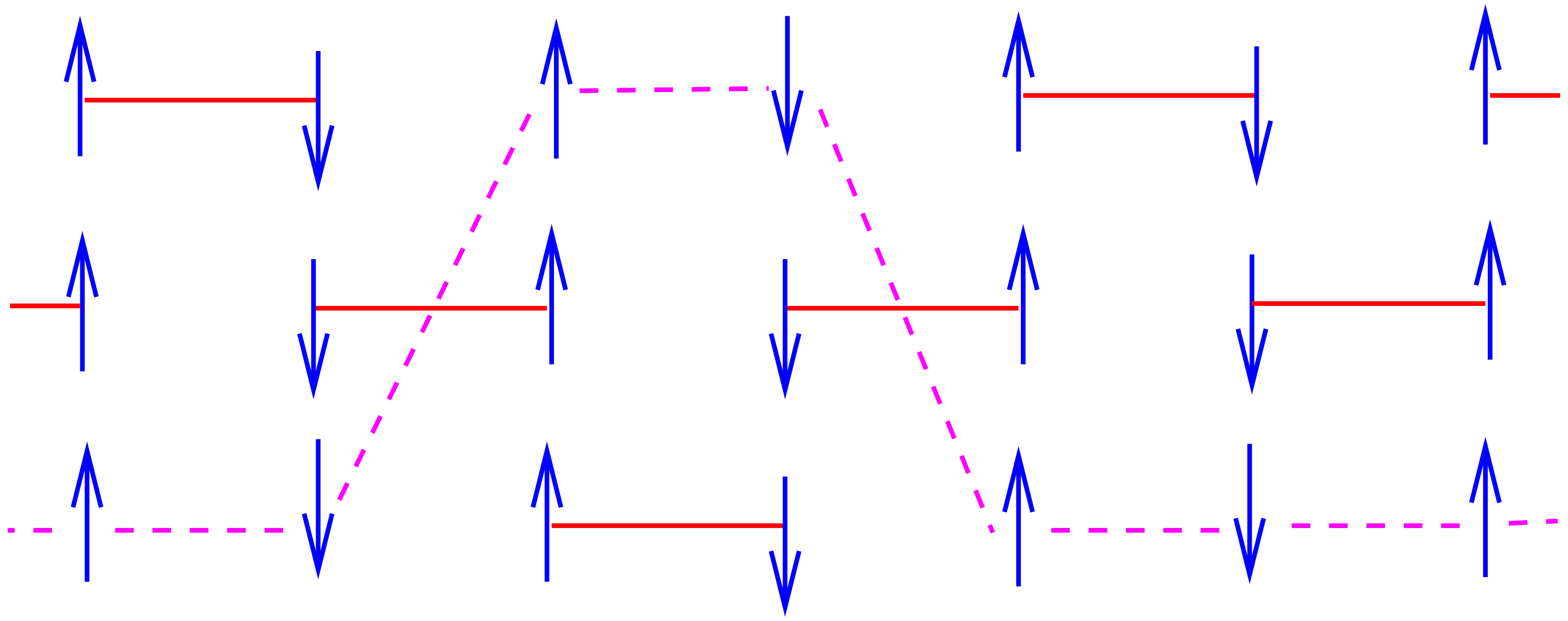
L'état Valence Bond Solid (VBS)

spin S $\rightarrow$ 2S spins 1/2

S=1

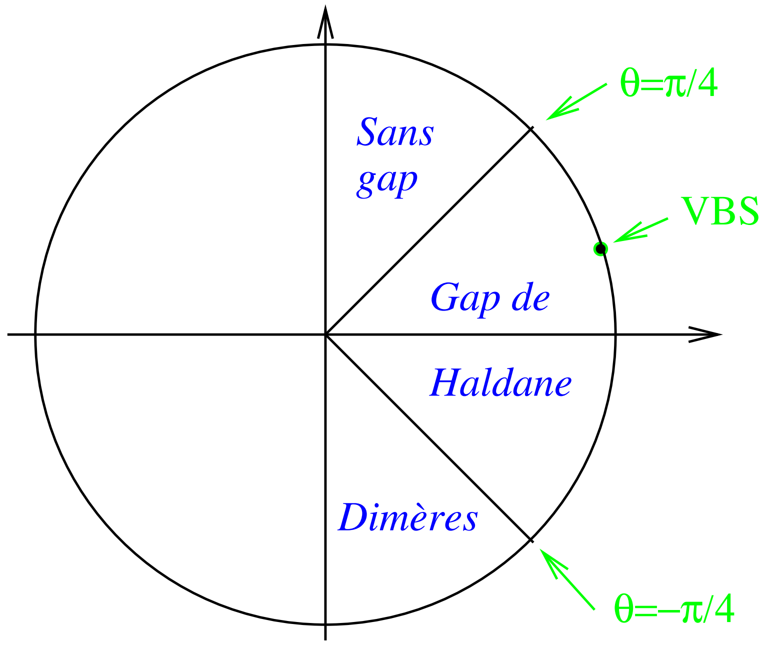


S=3/2



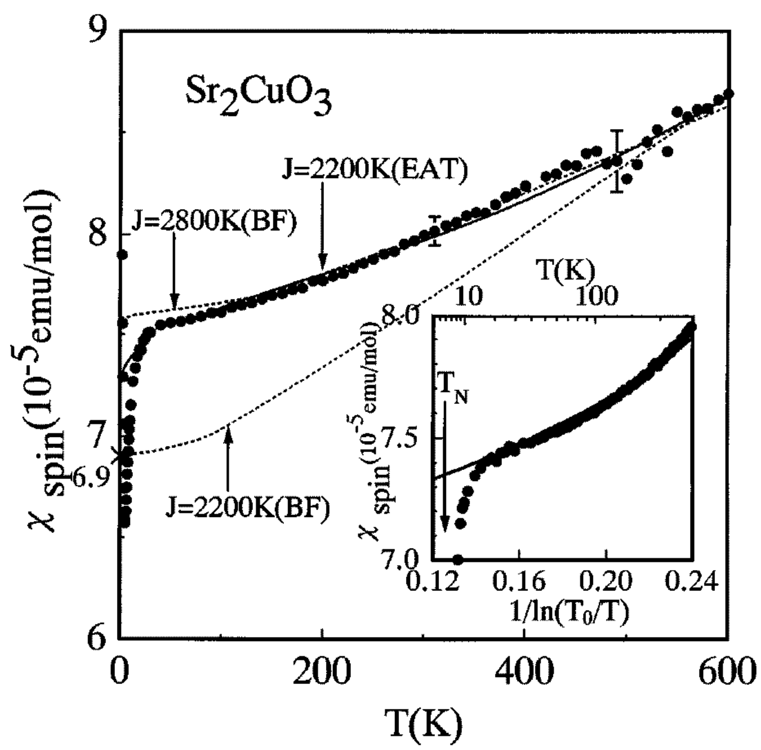
$S = 1$: Approche numérique

$$H = J \sum_n \left[\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} + \tan\theta (\vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1})^2 \right]$$



$$\begin{cases} \theta = \frac{\pi}{4} & \text{Point critique } SU(3)_1 \text{ Uimin-Lai-Sutherland} \\ \theta = -\frac{\pi}{4} & \text{Point critique } SU(2)_2 \text{ Takhtajan-Babujian} \end{cases}$$

Susceptibilité magnétique du composé
Sr_2CuO_3
$\simeq$ Chaîne de spin-1/2

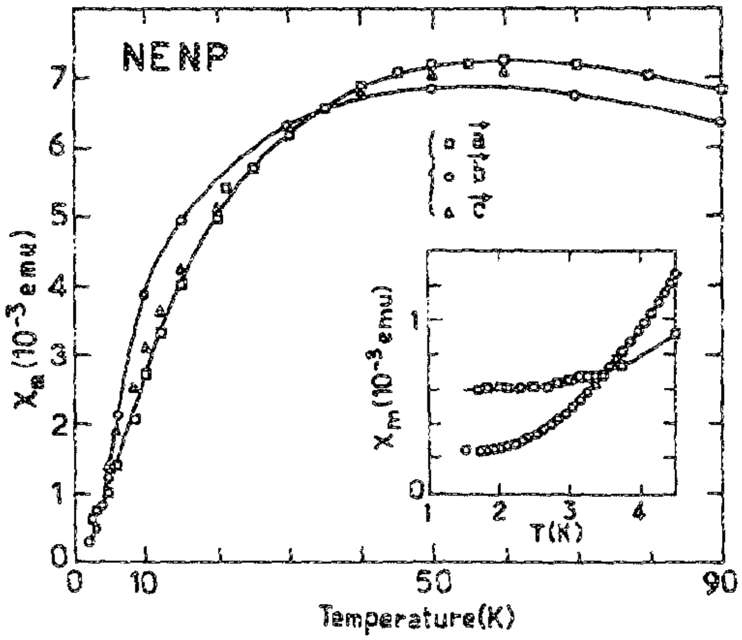


D'après N. Motoyama *et coll.*
Phys. Rev. Lett. **76** 3212 (1996)

Susceptibilité magnétique du composé

$Ni(C_2H_8N_2)_2NO_2(ClO_4)$

$\simeq$ Chaîne de spin-1



D'après J. P. Renard *et coll.*

J. Appl. Phys. **63** 3538 (1988)

Échelle de spin

$$H = J \sum_{\substack{i \\ p=1,\ldots,N}} \vec{S}_{i,p} \cdot \vec{S}_{i+1,p} + J_\perp \sum_{\substack{i \\ p=1,\ldots,N-1}} S_{i,p} \cdot S_{i,p+1}$$

$$\vec{S}_{i,p}^2 = \frac{1}{2}\left(\frac{1}{2}+1\right)$$

$J_\perp/J \to -\infty \Rightarrow$ chaîne de spin $\frac{N}{2}$

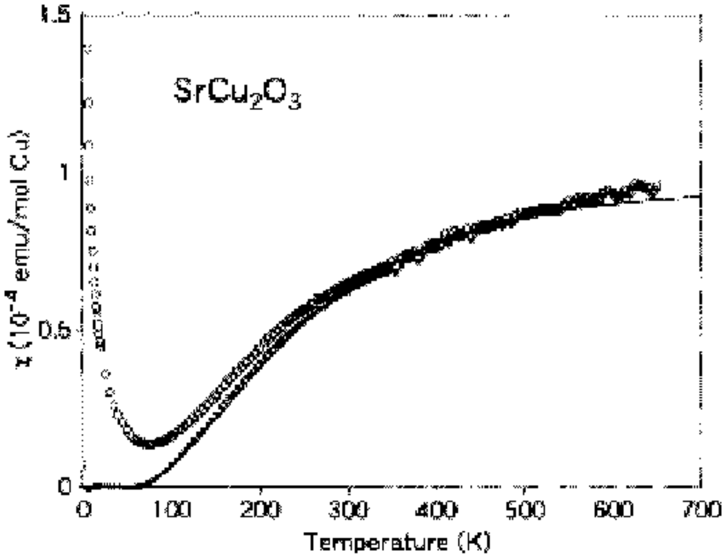
$J_\perp/J \to +\infty \Rightarrow$

- $N \in 2\mathbb{N} \Rightarrow$ chaîne de singulets $\Rightarrow$ gap de spin.

- $N \in 2\mathbb{N}+1 \Rightarrow$ chaîne de spin $1/2 \Rightarrow$ pas de gap de spin.

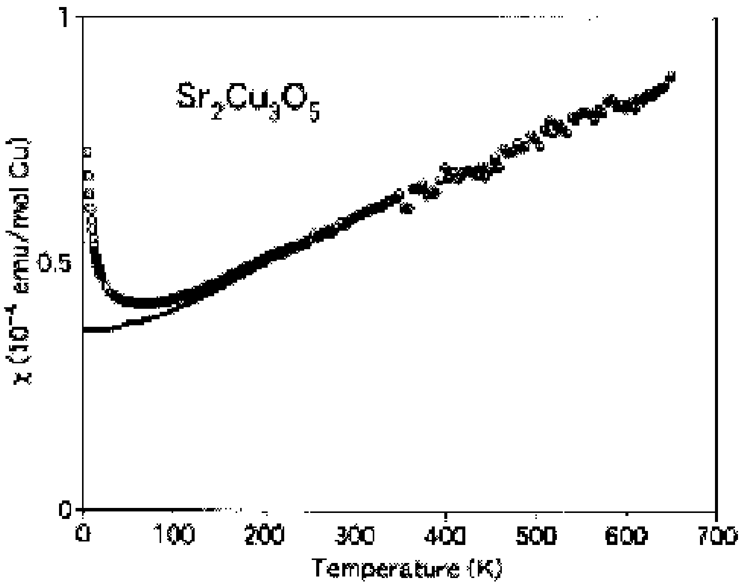
Analogie Échelles – Chaînes de spin.

Susceptibilité magnétique du composé
$SrCu_2O_3$
$\simeq$ Échelle de spin-1/2 à 2 montants



D'après M. Azuma *et coll.*
Phys. Rev. Lett. **73** 3463 (1994)

Susceptibilité magnétique du composé
$Sr_2Cu_3O_5$
$\simeq$ Échelle de spin-1/2 à 3 montants



D'après M. Azuma *et coll.*
Phys. Rev. Lett. **73** 3463 (1994)

Expériences

- $KCuF_3, SrCuO_2, Sr_2CuO_3 \ldots \longrightarrow$ ions Cu^{2+} spin-1/2

- YBa_2NiO_5, NENP, NINO, NDMAZ, ... $\longrightarrow$ ions Ni^{2+} spin-1

- $CsVBr_3, CsVCl_3 \longrightarrow (V^{2+})$ chaîne de spin 3/2

- $MnCl_3(2,2'$bipyridine$) \longrightarrow$ spin 2

- Sr_2CuO_3, CuHpCl, ... $\longrightarrow$ échelles à 2 montants

- $Sr_2Cu_3O_5 \longrightarrow$ échelles à 3 montants

- La2Cu2O5 $\longrightarrow$ échelles à 4 montants

Chaînes de spin S de longueur L finie

Terme topologique:

$$\frac{S}{2}\int_0^L dx \int_0^\beta d\tau \vec{n}\cdot(\partial_x\vec{n}\cdot\partial_\tau\vec{n})$$
$$= \frac{S}{2}\left[\Omega(L)-\Omega(0)+4n\pi\right]$$

$\Omega(x)$=aire découpée sur la sphére S^2 par $n(x,\tau)$ pour $\tau\in[0,\beta]$

$S\in\mathbb{N}$

$\frac{S}{2}\Omega(L)$ = action d'un spin $\frac{S}{2}$ en $x=L$.

$\rightarrow$ spins $\frac{S}{2}$ en bouts de chaîne

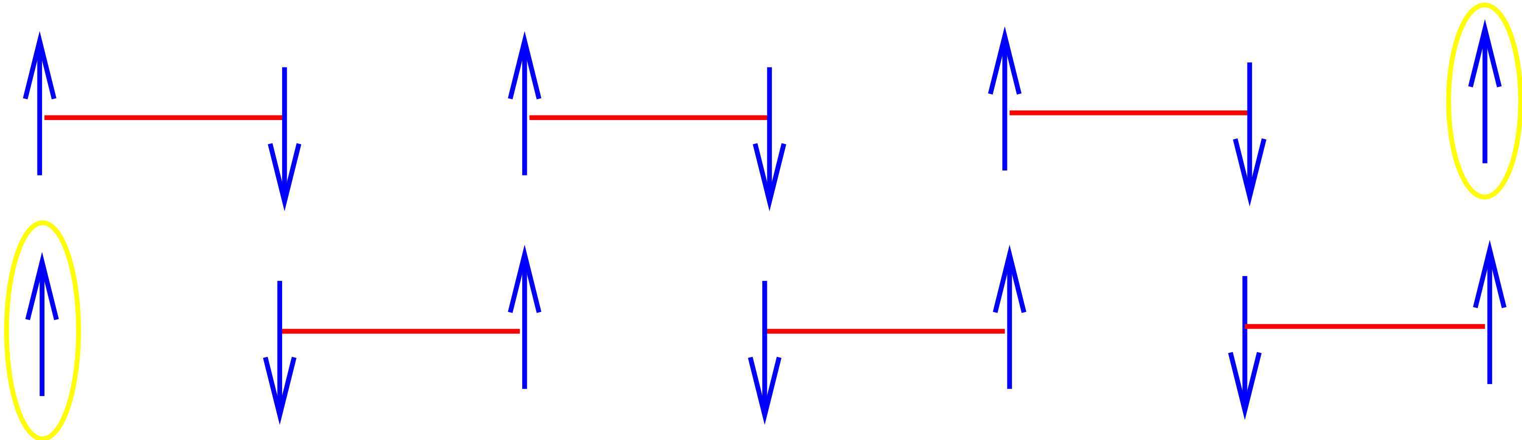
$S\in\mathbb{N}+\frac{1}{2}$

$$\begin{aligned}\frac{S}{2}\left[\Omega(L)-\Omega(0)+4n\pi\right] &= \frac{1}{2}\left(S-\frac{1}{2}\right)\left[\Omega(L)-\Omega(0)+4n\pi\right]\\ (\text{chaineS}=1/2) &+ \frac{1}{2}\times\frac{1}{2}\left[\Omega(L)-\Omega(0)+4n\pi\right]\end{aligned}$$

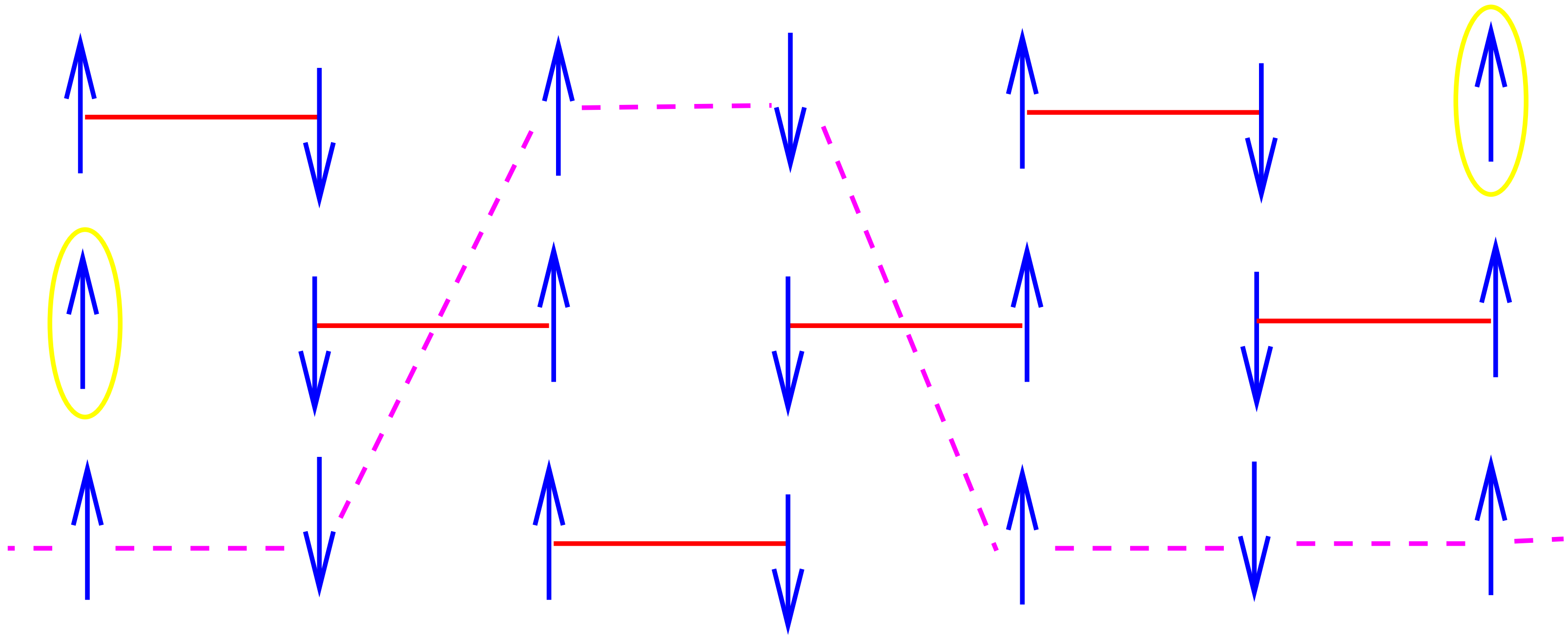
$\rightarrow$ spins $\frac{(S-1/2)}{2}$ en bouts de chaîne

Point de vue Valence Bond Solid

$S = 1$



$S = \frac{3}{2}$



Problèmes

1. Trouver une théorie des champs décrivant la chaîne de spin-1 semi-infinie.

2. Décrire les profils d'aimantation et de dim'erisation.

3. Analogie échelles/chaînes de spin S ?

Chaîne de spin-1/2:

Bosonisation

$$H = u \int \frac{dx}{2\pi} \left[(\pi \Pi)^2 + (\partial_x \phi)^2 \right]$$

$$\vec{S}_n = (\vec{J}_+ + \vec{J}_-)(na) + (-)^n \vec{n}(x)$$

$$\pi \Pi(x) = \partial_x \theta$$

$$J_r^+ \sim e^{i\sqrt{2}(r\theta - \phi)}$$

$$J_r^z = \frac{1}{2\pi\sqrt{2}} \partial_x (r\theta - \phi)$$

$$n_x = \cos \sqrt{2}\theta \; n_y = \sin \sqrt{2}\theta$$

$$n_z = \sin \sqrt{2}\phi$$

Échelle à 2 montants:
Bosonisation

$$
\begin{aligned}
H &= H_1 + H_2 \text{((Libre))} \\
&+ J_\perp \int dx (\vec{J}_{1+} + \vec{J}_{1-})(x) \cdot (\vec{J}_{2+} + \vec{J}_{2-})(x) \text{(Marginal)} \\
&+ J_\perp \int dx \vec{n}_1(x) \cdot \vec{n}_2(x) \text{(pertinent)}
\end{aligned}
$$

Fermionisation du terme pertinent
(Nersesyan, Shelton, Tsvelik 1996)

$$
\begin{aligned}
H &= -\frac{iv}{2} \sum_{\substack{\alpha=0 \\ r=\pm}}^{3} \int dx r \xi_r^\alpha \partial_x \xi_r^\alpha \\
&+ im \int dx \left[\sum_{\alpha=1}^{3} \xi_+^\alpha \xi_-^\alpha - 3\xi_+^0 \xi_-^0 \right]
\end{aligned}
$$

$$
m = -\frac{J_\perp}{2\pi}
$$

$$
J_r^{1,a}(x) + J_r^{2,a}(x) = \frac{i}{2} \epsilon_{abc} \xi_r^b \xi_r^c
$$

Equivalence avec 4 Modèles d'Ising 2D non-critiques

$$\begin{aligned} n_1^x + n_2^x &= \mu_1\sigma_2\sigma_3\mu_0 \\ n_1^y + n_2^y &= \sigma_1\mu_2\sigma_3\mu_0 \\ n_1^z + n_2^z &= \sigma_1\sigma_2\mu_3\mu_0 \end{aligned}$$

$$\begin{cases} m > 0 & : \langle\mu_0\rangle \neq 0, \langle\sigma_i\rangle \neq 0 (i = 1, 2, 3) \\ m < 0 & : \langle\sigma_0\rangle \neq 0, \langle\mu_i\rangle \neq 0 (i = 1, 2, 3) \end{cases}$$

Chaîne de spin-1

(A. M. Tsvelik, 1990)

Chaîne de spin-1 près du point intégrable Takhtajan-Babujian:

$$H = J\sum_i [\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - (1-\delta)(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})^2]$$

$\delta = 0$:

$$H = H_0 = -\frac{iv}{2}\sum_{\substack{\alpha=1\\ r=\pm}}^{3} \int dx r \xi_r^\alpha \partial_x \xi_r^\alpha$$

$\delta \neq 0$:

$$H = H_0 + im \int dx \sum_{\alpha=1}^{3} \xi_+^\alpha \xi_-^\alpha$$

$$\begin{aligned} S^a &= \frac{i}{2}\sum_{r=\pm} \epsilon^{abc}\xi_r^b \xi_r^c + (-)^n n^a(x) \\ n^x &= \mu_1\sigma_2\sigma_3 \\ n^y &= \sigma_1\mu_2\sigma_3 \\ n^z &= \sigma_1\sigma_2\mu_3 \end{aligned}$$

$$\begin{cases} \delta > 0: & \langle \sigma_i \rangle \neq 0 \text{gap de Haldane} \\ \delta < 0: & \langle \mu_i \rangle \neq 0 \text{dimères} \end{cases}$$

Chaîne de spin-1/2 semi-infinie:

Bosonisation

(Eggert, Affleck 1992) Condition:

$$\vec{n}(0,t) = 0 \Rightarrow \phi(0,t) = 0$$

Composantes chirales:

$$\Phi_r(x,t) = \frac{1}{2}(\phi(x,t) - r\theta(x,t)) = \Phi_r(x - rvt)$$

$$\Rightarrow \Phi_+(0,t) = -\Phi_-(0,t)$$

$$\Rightarrow \Phi_+(x,t) = \Phi_+(0,t-x/v) =$$

$$-\Phi_-(0,t-x/v) = -\Phi_-(-x,t)$$

$$\Rightarrow \phi(x,t) = \Phi_+(x,t) - \Phi_+(-x,t)$$

Conséquences:

$$\Delta(x = na) = (-)^n \vec{S}_n \cdot \vec{S}_{n+1} \sim \cos\sqrt{2}\phi$$

$$\langle \Delta(x) \rangle \sim \frac{1}{x^{1/2}}$$

Échelle avec conditions aux limites ouvertes

$$J_\perp \int_0^\infty dx \vec{n}_1(x) \cdot \vec{n}_2(x)$$
$$\sim \quad J_\perp \int_0^\infty dx \left[\cos\sqrt{2}(\theta_1 - \theta_2) + \frac{1}{2}\cos\sqrt{2}(\phi_1 - \phi_2) - \frac{1}{2}\cos(\phi_1 + \phi_2) \right]$$

$$\phi_1(0) = \phi_2(0) = 0$$

Changement de variables:

$$\phi^{(\pm)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(\phi_1 \pm \phi_2)$$

$$J_\perp \int_0^\infty dx \vec{n}_1(x) \cdot \vec{n}_2(x)$$
$$\sim J_\perp \int_0^\infty dx \left[\cos 2\theta_- + \frac{1}{2}\cos 2\phi_- - \frac{1}{2}\cos 2\phi_+ \right]$$

$$\phi^{(r)}(0) = 0$$

Fermionisation

$$\xi_r^1 \sim \cos(\theta^{(+)} - r\phi^{(+)}) \; \xi_r^3 \sim \cos(\theta^{(-)} - r\phi^{(-)})$$
$$\xi_r^2 \sim \sin(\theta^{(+)} - r\phi^{(+)}) \; \xi_r^0 \sim \sin(\theta^{(-)} - r\phi^{(-)})$$

Conditions aux limites $\phi^{(\pm)}(0) = 0$:
$\Rightarrow \xi_+^\alpha(0) = \xi_-^\alpha(0)$
Avec:

$$\begin{aligned} H &= -\frac{iv}{2} \sum_{\substack{\alpha=0 \\ r=\pm}}^{3} \int dx r \xi_r^\alpha \partial_x \xi_r^\alpha \\ &+ im \int dx \left[\sum_{\alpha=1}^{3} \xi_+^\alpha \xi_-^\alpha - 3\xi_+^0 \xi_-^0 \right] \end{aligned}$$

Solutions localisées

Pour $m > 0$, il existe des solutions localisées dans le secteur triplet:

$$\xi_r^\alpha = \sqrt{\frac{m}{v}} e^{-mx/v} \eta^\alpha + \dots$$

$\Rightarrow M^\alpha = \int dx S^\alpha(x) = \frac{i}{2}\epsilon_{\alpha\beta\gamma}\eta^\beta\eta^\gamma + \dots$

Etats de bords de spin 1/2 localisés en bout de chaîne

Existent dans:

- la phase gap de Haldane de la chaine de spin 1 ($|\theta| < \frac{\pi}{4}$)
- L'échelle avec $J_\perp < 0$

Absents si $m < 0$

Calcul des profils d'aimantation

Fermions de Majorana massifs $\Leftrightarrow$ Ising 2D non critique

Conditions aux limites sur les fermions $\rightarrow$ Quelles conditions aux limites pour les spins d'Ising ?

(Ghoshal, Zamolodchikov 1994) $\Rightarrow$

Pour $m = (T_c - T)$:

- $\xi_+(0) = \xi_-(0)$: C. L. libres sur le paramètre d'ordre σ en $x = 0$

- $\xi_+(0) = \xi_-(0)$: C. L. fixes sur le paramètre d'ordre σ en $x = 0$ $(\sigma(0) = 1)$

$\Rightarrow$ calcul de l'aimantation d'un modèle d'Ising 2D non critique sur un demi-plan avec C. L. libres ou fixes à l'origine

(R. Z. Bariev, 1980)

Le modèle d'Ising non critique sur un demi-plan

$\diamond \langle\sigma\rangle_{\text{libre}}(x, T > T_c) = 0$

$\diamond \langle\sigma\rangle_{\substack{\text{libre}\\\text{fixe}}}(x, T) = \langle\mu\rangle_{\substack{\text{fixe}\\\text{libre}}}(x, 2T_c - T)$ dualité

$\diamond \langle\sigma\rangle_{\text{fixe}}(x, T < T_c) = \langle\sigma(x = \infty, T < T_c)\rangle G(x/\xi)$

$\diamond \langle\sigma\rangle_{\text{fixe}}(x, T > T_c) = \langle\mu(x = \infty, T > T_c)\rangle e^{-x/\xi} G(x/\xi)$

$\diamond \langle\sigma\rangle_{\text{fixe}}(x, T > T_c) = \langle\sigma(x = \infty, T < T_c)\rangle H(x/\xi)$

$$u \to 0 \begin{cases} G(u) \sim u^{-1/8} \\ H(u) \sim u^{3/8} \end{cases}$$

$$u \to \infty \begin{cases} G(u) \sim 1 + \frac{e^{-2u}}{16\sqrt{\pi}u^{3/2}} \\ H(u) \sim 1 - \frac{e^{-2u}}{2\sqrt{\pi}u^{1/2}} \end{cases}$$

Profil d'aimantation de l'échelle avec $J_\perp < 0$

$T < T_c$ pour i=1,2,3 $T > T_c$ pour $i = 0$

$$\begin{aligned} \langle n_1^a + n_2^a \rangle(x) &= \langle \mu_1 \rangle_{\text{libre}} \langle \sigma_2 \rangle_{\text{libre}} \langle \sigma_3 \rangle_{\text{libre}} \langle \mu_0 \rangle_{\text{libre}} \\ &= m^{1/2} e^{-mx/v} G(\frac{mx}{v}) H(\frac{mx}{v}) H(\frac{mx}{v}) G(3\frac{mx}{v}) \end{aligned}$$

$mx/v \to 0 \Rightarrow \langle n_1^a + n_2^a \rangle(x) \sim mx^1/2$

$\to$ pour $m \to 0$ on retrouve les 2 chaînes découplées.

$mx/v \to \infty \Rightarrow \langle n_1^a + n_2^a \rangle(x) \sim e^{-mx/v}$

Sans préfacteur loi de puissance pour l'exponentielle

$\neq$ Bosons avec masse: $n^a(x) \sim K_0(mx) \Rightarrow$

En accord avec les calculs de DMRG

Profil d'aimantation de l'échelle avec $J_\perp > 0$

$T > T_c$ pour i=1,2,3 $T < T_c$ pour $i = 0$

$$\begin{aligned}\langle n_1^a + n_2^a \rangle (x) &= \langle \mu_1 \rangle_{\text{libre}} \langle \sigma_2 \rangle_{\text{libre}} \langle \sigma_3 \rangle_{\text{libre}} \langle \mu_0 \rangle_{\text{libre}} \\ &= 0.\end{aligned}$$

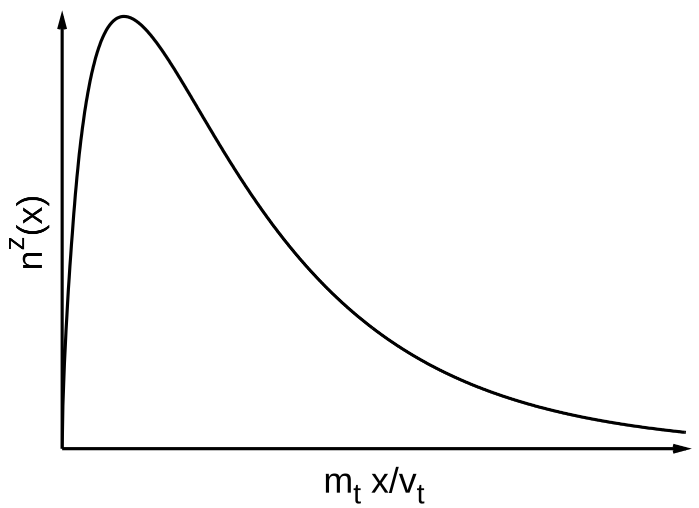
Profil d'aimantation de la chaîne de spin-1

Se déduit de celui de l'échelle par $\mu_0 \to 1$

Phase Gap de Haldane

$$\langle n^a(x)\rangle \sim m^{3/8} e^{-mx/v} G(\tfrac{mx}{v}) H^2(\tfrac{mx}{v})$$

$$\begin{cases} x \to 0 & \Rightarrow \langle n^a(x)\rangle \sim m x^{5/8} \\ x \to \infty & \Rightarrow \langle n^a(x)\rangle \sim m^{3/8} e^{-mx/v} \end{cases}$$



Phase dimérisée

$$\langle n^a(x)\rangle = 0$$

Profils de dimérisation de l'échelle

Opérateur de dimérisation:

$$\Delta_n = (-)^n(\vec{S}_{n,1} \cdot \vec{S}_{n+1,1} + \vec{S}_{n,2} \cdot \vec{S}_{n+1,2})$$

Continu:

$$\Delta(x) \sim \mu_1 \mu_2 \mu_3 \mu_0$$

- $|m|x/v \ll 1 \Rightarrow \langle \Delta(x) \rangle \sim \frac{1}{x^{1/2}}$ 2 chaînes découplées

- $|m|x/v \gg 1 \Rightarrow \langle \Delta(x) \rangle \sim m^{1/2} e^{-|m|x/v}$

Indépendant du signe de $J_\perp$!

Profils de dimérisation de la chaîne de spin-1

Phase de Haldane

- $mx/v \ll 1 \Rightarrow \langle \Delta(x) \rangle \sim \frac{1}{x^{3/8}}$ (Marston, Tsai 2000)

- $|m|x/v \gg 1 \Rightarrow \langle \Delta(x) \rangle \sim m^{3/8} e^{-mx/v}$

Phase dimérisée

- $mx/v \ll 1 \Rightarrow \langle \Delta(x) \rangle \sim \frac{1}{x^{3/8}}$

- $|m|x/v \gg 1 \Rightarrow \langle \Delta(x) \rangle \to \Delta(x = \infty)$

$\Rightarrow$ Le bord induit une dimérisation supplémentaire !