



Habilitation à Diriger des Recherches

Sylvain Capponi

► To cite this version:

Sylvain Capponi. Habilitation à Diriger des Recherches. Matière Condensée [cond-mat]. Université Paul Sabatier - Toulouse III, 2005. tel-00011628

HAL Id: tel-00011628

<https://theses.hal.science/tel-00011628>

Submitted on 16 Feb 2006

HAL is a multi-disciplinary open access archive for the deposit and dissemination of scientific research documents, whether they are published or not. The documents may come from teaching and research institutions in France or abroad, or from public or private research centers.

L'archive ouverte pluridisciplinaire **HAL**, est destinée au dépôt et à la diffusion de documents scientifiques de niveau recherche, publiés ou non, émanant des établissements d'enseignement et de recherche français ou étrangers, des laboratoires publics ou privés.

Université Paul Sabatier – Toulouse III

MÉMOIRE

présenté en vue de l'obtention de

l'habilitation à diriger des recherches

par

SYLVAIN CAPPONI

soutenue le 13 décembre 2005 devant la commission d'examen composée de

M. Jean LÉOTIN

Mme. Claire LHUILLIER

M. George BATROUNI

M. Daniel CABRA

M. Fakher ASSAAD

M. Didier POILBLANC

Président

Rapporteur

Rapporteur

Rapporteur

Examineur

Directeur des recherches

Remerciements

Je souhaite vivement remercier tous les membres du jury pour avoir accepté d'en faire partie et avoir consacré un peu de leur temps à la lecture de ce mémoire.

Je voudrais également remercier mes principaux collaborateurs sur les travaux de recherche présentés dans ce mémoire.

En premier lieu, je pense bien sûr au Laboratoire de Physique Théorique de Toulouse, dirigé par Didier POILBLANC. L'atmosphère qui y règne a rendu mon travail bien agréable au quotidien. Je remercie les membres du groupe « Fermions Fortement Corrélés » côtoyés durant ces dernières années : Fabien ALET, Cyril JAUDET, Nicolas LAFLORENCIE, Andreas LÄUCHLI, Matthieu MAMBRINI, Benjamin PIAUD, Guillaume ROUX etc. Je remercie tout particulièrement Didier POILBLANC qui a su me conseiller au cours de ces recherches tout en me laissant une réelle autonomie dans mes choix thématiques. Parmi mes collègues toulousains, je remercie aussi Jean-Paul MALRIEU pour son enthousiasme communicatif envers les techniques de modèles effectifs.

Je remercie chaleureusement Shoucheng ZHANG qui a eu la gentillesse de m'accueillir à de nombreuses reprises à Stanford. Ces séjours ont été à la fois enrichissants, ensoleillés et productifs. Je n'oublie pas les étudiants avec qui j'ai pu interagir : Handong CHEN, Jianping HU et Congjun WU.

Une grande partie de ce mémoire discute de la possibilité d'appliquer une technique récente de renormalisation dans l'espace réel à des problèmes de corrélations électroniques. C'est en discutant avec Assa AUERBACH que j'ai découvert cette méthode, qui s'est ensuite avérée très performante. Je remercie donc Assa pour son soutien, sa bonne humeur et son intérêt pour ces travaux.

Je remercie Fakher ASSAAD pour m'avoir initié aux joies (et déceptions parfois !) des méthodes Monte-Carlo pour des problèmes fermioniques. Après toutes nos discussions, je me demande bien quand ce problème de signe sera enfin résolu. . . J'espère que nous pourrons continuer notre collaboration franco-bavaroise dans la gaieté qui te caractérise.

J'adresse une pensée à Andreas ABENDSCHEIN qui a bravé les difficultés administratives afin de pouvoir effectuer un travail de thèse sous ma direction. Je le remercie pour sa confiance et sa ténacité.

Enfin, je remercie tous les autres, scientifiques ou non, qui font que ce travail a pu voir le jour.

Table des matières

Curriculum Vitæ	1
Production scientifique	5
Avant-propos	11
I Introduction	13
I Hamiltonien effectif pour l'étude de systèmes corrélés	17
I.1 Problématique dans les systèmes corrélés	17
1.1 Isolants magnétiques et frustration géométrique	17
1.2 Isolants de Mott dopés	18
1.3 Quelle approche pour les systèmes complexes?	18
I.2 Renormalisation dans l'espace réel	20
2.1 Historique et algorithme	20
2.2 Échec de l'approche naïve	20
2.3 Méthode CORE	21
2.4 Algorithme CORE et implémentation numérique	22
2.5 De l'utilité des méthodes numériques	23
I.3 Étude de systèmes magnétiques isolants	24
3.1 Chaîne de spin $1/2$	24
3.2 Échelles de spin	25
3.3 Plateaux d'aimantation dans les échelles	28
3.4 Projet: Plateaux d'aimantation dans des réseaux bidimensionnels	32
3.5 Transition de phase quantique pour un réseau plaquette	32
3.6 Physique de basse énergie du réseau <i>kagomé</i>	38
I.4 Étude des systèmes dopés	42
4.1 Fermions libres en une dimension	42
4.2 Échelles de spin dopées	43
4.3 Projet : Solide de liens de valence dans des réseaux frustrés dopés	48
II Étude des supraconducteurs à haute température critique	49
II.1 Motivations expérimentales	50
1.1 Observation d'un régime pseudogap	51
1.2 Observations expérimentales de modulations de charge	51
II.2 Modèle effectif pour les supraconducteurs à haute température critique	54
2.1 Description d'un plan supraconducteur	54
2.2 Dérivation d'un modèle effectif	55
II.3 Application à la phase vortex	56
3.1 Propriétés du cœur	57
3.2 Existence d'un cristal de Wigner	57
3.3 Résultats numériques	58
3.4 Conséquences expérimentales	58
II.4 Diagramme de phase global	59
4.1 Arguments qualitatifs sur l'existence de phases solides	60
4.2 Analyse en champ moyen	62

4.3	Simulations par Monte-Carlo quantique	63
4.4	Conséquences expérimentales	66
II.5	Projet : Étude des dopages magiques et des effets de température	67
5.1	Projet : Existence de dopages magiques	67
5.2	Projet : Étude à température finie	68
II.6	Projet : Effet des degrés de liberté fermioniques	69
II.7	Projet : Conséquence pour les expériences de transport	70
7.1	Projet : Effet du désordre sur la localisation de charge	70
7.2	Projet : Effet des excitations fermioniques et mesures d'effet Nernst	70
III Développements pour le Monte-Carlo quantique fermionique		73
III.1	Introduction	73
III.2	Monte-Carlo quantique	74
2.1	Monte-Carlo classique	74
2.2	Algorithme quantique	74
2.3	Algorithme de champ auxiliaire pour les problèmes fermioniques	75
2.4	Méthode d'entropie maximale	76
2.5	Problème de signe	76
III.3	Application aux isolants de Kondo	78
3.1	Réseau Kondo	78
3.2	Propriétés à $T = 0$	79
3.3	Propriétés à température finie	80
3.4	Propriétés thermodynamiques	81
3.5	Lien avec les expériences	82
3.6	Projet : Étude du réseau Kondo avec des impuretés dilués	82
III.4	Phase brisant la symétrie par renversement du temps	83
4.1	Phase de flux dans les échelles	83
4.2	Courants spontanés dans des bicouches fermioniques	84
III.5	Projet : Modèle de Hubbard pour des spins $S = 3/2$	88
5.1	Projet : Diagramme de phase en deux dimensions	89
5.2	Projet : Diagramme de phase en une dimension	89
Conclusion et perspectives		93
Bibliographie		95
Sélection de publications		105
	Article [10]	105
	Article [16]	127
	Article [19]	133
	Article [21]	153
	Article [22]	169

Curriculum Vitæ

Sylvain Capponi

Né le 23/06/1972 à Monaco.

Laboratoire de Physique Théorique UMR 5152

IRSAMC

Université Paul Sabatier

118 Route de Narbonne

31062 Toulouse Cedex

France

Tel : 33 5 61 55 68 40

Fax : 33 5 61 55 60 65

e-mail: sylvain.capponi@irsamc.ups-tlse.fr

Études et formation

1992–1995 : Magistère des sciences de la matière, ENS Lyon.

1994–1995 : DEA Physique Théorique, ENS Lyon.

1990–1992 : Classes Préparatoires aux Grandes Écoles, Nice.

Thèse de doctorat

Titre : *Étude théorique du rôle des processus interchaînes dans des liquides de Luttinger couplés*

Directeur : D. Poilblanc

Années : 1995–1999. Université Paul Sabatier, Toulouse

(N.B. Cette thèse a été interrompue un an par mon service national)

Expériences professionnelles

09/2000- : maître de conférences (29^{ème} section) à l'Université Paul Sabatier de Toulouse (Laboratoire de Physique Théorique).

09/2002–02/2004 : délégué auprès du CNRS (section 06) au Laboratoire de Physique Théorique, Université Paul Sabatier de Toulouse.

01/2000–09/2000 : stage post-doctoral à l'Institut de Physique Théorique de l'Université de Stuttgart (Allemagne). Directeur : F. Assaad.

09/1996–12/1999 : allocataire-moniteur normalien, Université Paul Sabatier, Toulouse.

(Enseignement équivalent à 192 heures TD)

09/1997–06/1998: service national au titre de scientifique du contingent, Commissariat à l'Énergie Atomique, Bordeaux.

Arbitre de revues internationales

Régulier : Physical Review (B, Letters), European Physical Journal B.

Occasionnel : Solid State Communications, Europhysics Letters.

Participation à l'organisation de rencontres scientifiques

Co-organisateur de Mini-colloque « Méthodes Monte-Carlo en matière condensée » durant les 9^e Journées de la Matière Condensée de la SFP à Nancy, 2004.

Membre du comité local d'organisation des 10^e Journées de la Matière Condensée de la SFP à Toulouse, 2006.

Production scientifique (détails page suivante)

23 publications dans des revues à comité de lecture.

6 publications dans des actes de colloques.

7 communications orales à des conférences internationales.

13 communications orales à des conférences nationales ou séminaires dans les laboratoires.

12 affiches présentées dans des réunions scientifiques.

2 ouvrages de diffusion scientifique.

Enseignements

Tous ces enseignements ont eu lieu à l'Université Paul Sabatier de Toulouse.

[1] Cours de Physique Statistique en Licence de Physique (2003-2005).

[2] Cours sur le problème à N corps, DEA Physique de la matière (2002-2005).

[3] Travaux dirigés de physique numérique, Maîtrise de Physique (2004-2005).

[4] Travaux dirigés de physique du solide, Maîtrise de Physique (2004-2005).

[5] Travaux dirigés de mécanique des milieux continus, Licence de Physique, (2003-2005).

[6] Travaux dirigés de mécanique analytique, Licence de Physique, (2004-2005).

[7] Travaux pratiques d'électrocinétique en DEUG (1995-1999).

[8] Travaux pratiques d'optique en DEUG (2003-2005).

Encadrements

[1] Direction de la thèse de doctorat de Andreas Abendschein, *Modèles effectifs pour des systèmes magnétiques sous champ*, commencée en Novembre 2005.

[2] Co-direction (avec D. Poilblanc) de la thèse de doctorat de Guillaume Roux, *Dynamique des trous dans divers liquides de spins*, commencée en 2004.

[3] Direction du stage de DEA de B. Piaud, *Étude de plateaux d'aimantation à l'aide de modèles effectifs*, 2003.

[4] Co-direction (avec D. Poilblanc) du stage de maîtrise de C. Jaudet, *Étude théorique des phases modulées observées par STM dans les cuprates supraconducteurs*, 2005.

[5] Co-direction (avec D. Poilblanc) du stage de licence de M. Dufour, *Électrons bidimensionnels en champ magnétique*, 2005.

Participation à des jurys de thèse

[1] Membre du jury de la thèse de Mohamad Al Hajj . Thèse soutenue le 8 juillet 2005 à Toulouse et dirigée par Jean-Paul Malrieu.

Activités administratives

Membre du Conseil National des Universités (29^e section).

Membre de la commission de spécialistes 29^e section de l'Université Paul Sabatier, Toulouse.

Membre de la commission informatique du Laboratoire de Physique Théorique.

Responsable du groupe Fermions Fortement Corrélés pour le projet de calcul scientifique à l'IDRIS.

Principaux thèmes de recherche

Fermions fortement corrélés en basse dimension.

Magnétisme quantique.

Méthodes de simulation : diagonalisation exacte, Monte-Carlo quantique.

Hamiltonien effectif.

Supraconducteurs à haute température critique.

Échelles dopées supraconductrices.

Isolants de Kondo.

Projets de recherche

Plateaux d'aimantation dans des réseaux bidimensionnels et couplage au réseau (avec D. Poilblanc).

Simulations classiques des modèles effectifs du réseau *kagomé* .

Solide de liens de valence dans des réseaux frustrés dopés (avec M. Sigrist (Zürich) et A. Läuchli (Lausanne)).

Thermodynamique du diagramme de phase global des supraconducteurs pour un modèle effectif bosonique (avec S. C. Zhang (Stanford) et W. Hanke (Würzburg)).

Effet des degrés de liberté fermioniques dans les cuprates (avec D. Poilblanc) et application à des mesures de transport (avec C. Proust).

Étude du réseau Kondo avec des impuretés dilués (avec F. Assaad, Würzburg).

Modèle de Hubbard pour des spins $S = 3/2$: Application aux gaz de fermions ultra-froids (avec C. Wu et S. C. Zhang (Stanford), P. Lecheminant (LPTM, Cergy-Pontoise) et P. Azaria (LPTL, Paris)).

Production scientifique

Liste des publications dans des revues à comité de lecture

- [1] D. Poilblanc, H. Endres, F. Mila, M. Zacher, S. Capponi et W. Hanke, *One particle interchain hopping in coupled Luttinger liquids*, Phys. Rev. B **54**, 10 261 (1996).
- [2] S. Capponi, D. Poilblanc et F. Mila, *Confinement and transverse conductivity in coupled Luttinger liquids*, Phys. Rev. B **54**, 17 547 (1996).
- [3] S. Capponi, N. Guihéry, J.P. Malrieu, B. Miguel et D. Poilblanc, *Bond alternation of polyacetylene as a spin-Peierls distortion*, Chem. Phys. Letter **255**, 238 (1996).
- [4] F. Mila, C. Stafford et S. Capponi, *Persistent currents in a Moebius ladder: a test of interchain coherence of interacting electrons*, Phys. Rev. B **57**, 1457 (1998).
- [5] S. Capponi, D. Poilblanc et E. Arrigoni, *Universal scaling behavior of coupled chains of interacting fermions*, Phys. Rev. B **57**, 6360 (1998).
- [6] A. W. Sandvik, S. Capponi, D. Poilblanc et E. Dagotto, *Numerical calculations of the B_{1g} Raman spectrum of the 2D Heisenberg model*, Phys. Rev. B **57**, 8478 (1998).
- [7] E. Dagotto, S. Yunoki, A. L. Malvezzi, A. Moreo, J. Hu, S. Capponi, D. Poilblanc et N. Furukawa, *Ferromagnetic Kondo model for manganites: Phase diagram, charge segregation, and influence of quantum localized spins*, Phys. Rev. B **58**, 6414 (1998).
- [8] S. Capponi, D. Poilblanc et T. Giamarchi, *Effects of long-range electronic interactions on a one-dimensional electron system*, Phys. Rev. B **61**, 13 410 (2000).
- [9] O. Chiappa, S. Capponi et D. Poilblanc, *Truncated Lanczos method: Application to hole-doped spin ladders*, Phys. Rev. B **63**, 115 120 (2001).
- [10] S. Capponi et F. F. Assaad, *Spin and charge dynamics of ferromagnetic and antiferromagnetic two-dimensional half-filled Kondo lattice model*, Phys. Rev. B **63**, 155114 (2001).
- [11] M. Brunner, S. Capponi, F. F. Assaad et A. Muramatsu, *Single hole dynamics in the t - J model on two- and three-leg ladders*, Phys. Rev. B **63**, 180511(R) (2001).
- [12] N. Laflorencie, S. Capponi et E. Sørensen, *Finite size scaling of the spin stiffness of the antiferromagnetic quantum $s=1/2$ XXZ chain*, Eur. Phys. J. B **24**, 77 (2001).
- [13] K. Tsutsui, D. Poilblanc et S. Capponi, *Low-frequency current fluctuations in doped ladders*, Phys. Rev. B **65**, 020406(R) (2002).
- [14] D. J. Garcia, K. Hallberg, C. D. Batista, S. Capponi, D. Poilblanc, M. Avignon et B. Alascio, *Charge and spin inhomogeneous phases in the ferromagnetic Kondo lattice model*, Phys. Rev. B **65**, 134444 (2002).
- [15] H. D. Chen, J. P. Hu, S. Capponi, E. Arrigoni et S. C. Zhang, *Antiferromagnetism and hole pair checkerboard in the vortex state of high T_c superconductors*, Phys. Rev. Lett. **89**, 137004 (2002).
- [16] S. Capponi et D. Poilblanc, *Charge density correlations in t - J ladders investigated by the contractor-renormalization method*, Phys. Rev. B **66**, 180503(R) (2002).
- [17] C. Lavalley, M. Arikawa, S. Capponi, F. F. Assaad et A. Muramatsu, *Antiholons in one-dimensional t - J models*, Phys. Rev. Lett. **90**, 216 401 (2003).
- [18] D. Poilblanc, D. J. Scalapino et S. Capponi, *Superconducting gap for a 2-leg t - J ladder*, Phys. Rev. Lett. **91**, 137 203 (2003).
- [19] H. D. Chen, S. Capponi, F. Alet et S.C. Zhang, *Global Phase Diagram of the High T_c Cuprates*, Phys. Rev. B **70**, 024516 (2004).
- [20] D. Poilblanc, E. Orignac, S.R. White et S. Capponi, *Resonant magnetic mode in superconducting two-leg ladders*, Phys. Rev. B **69**, 220406(R) (2004).

- [21] S. Capponi, A. Läuchli et M. Mambrini, *Numerical Contractor Renormalization Method for Quantum Spin Models*, Phys. Rev. B **70**, 104424 (2004).
- [22] S. Capponi, C.J. Wu et S.C. Zhang, *Current carrying ground state in a bilayer model of strongly correlated systems*, Phys. Rev. B **70**, 220505(R) (2004).
- [23] G. Roux, S. R. White, S. Capponi, A. Läuchli et D. Poilblanc, *Doped two-leg ladder with ring exchange: Exact diagonalization and density matrix renormalization group computations*, Phys. Rev. B **72**, 014523 (2005).

Liste des actes de colloques publiés dans des revues à comité de lecture

- [24] S. Capponi et D. Poilblanc, *Transverse transport in coupled Luttinger liquids*, Z. Phys. B **103**, 173 (1997).
- [25] S. Capponi, D. Poilblanc et T. Giamarchi, *Effects of long range electronic interactions on a one-dimensional electron system*, J. Phys. IV France **10**, 119 (2000).
- [26] C. Lavalley, M. Arikawa, S. Capponi et A. Muramatsu, *Quantum Monte Carlo Studies of Correlated Systems, Proceedings of NIC Symposium 2004*, NIC Series, Vol. **20**, ISBN 3-00-012372-5, 281 (2003).
- [27] S. Capponi, H.D. Chen, F. Alet et S.C. Zhang, *Effective Hamiltonian for cuprates: Global phase diagram*, Condensed Matter Theories, Volume 19, (éditeurs: M. Belkacem et P.M. Dinh), Nova Science Publishers (2005).
- [28] S. Capponi, *Effective Hamiltonian Approach for Strongly Correlated Systems*, Theoretical Chemistry Accounts, à paraître.
- [29] S. Capponi, *Numerical Contractor Renormalization applied to strongly correlated systems*, American Institute of Physics, Peyresq Conference Proceedings, à paraître .

Autres publications

- [30] M. Brunner, C. Lavalley, S. Capponi, M. Feldbacher, F.F. Assaad et A. Muramatsu, *Single hole dynamics in correlated insulators*, *High Performance Computing in Science and Engineering '01*, édité par E. Krause et W. Jäger, Springer-Verlag, pp. 145-156 (2001).

Communications orales dans des réunions internationales

- [1] S. Capponi et D. Poilblanc, *Transverse transport in coupled Luttinger liquids*, Euroconference on correlations in unconventional quantum liquids, Évora, Portugal (octobre 1996).
- [2] S. Capponi, H.D. Chen, F. Alet et S.C. Zhang, *Effective Hamiltonian for cuprates: global phase diagram*, Conférence CMT27 (Condensed Matter Theory), Toulouse (septembre 2003). Présentation invitée.
- [3] C. Lavalley, J. Hub, M. Arikawa, S. Capponi et A. Muramatsu, *New form of charge-spin separation from quantum Monte-Carlo simulations*, Congreso Latinoamericano de Ciencias de Superficies y sus Aplicaciones (CLACSA 2003), Pucón (décembre 2003).
- [4] S. Capponi, *Effective Hamiltonian Approach for Strongly Correlated Systems*, Symposium en l'honneur de Jean-Paul Malrieu, Lagrasse (mai 2004). Présentation invitée.
- [5] S. Capponi, A. Läuchli et M. Mambrini, *Numerical Contractor Renormalization Method for Quantum Spin Models*, Conférence «March meeting» de la Société Américaine de Physique, Los Angeles (mars 2005).
- [6] S. Capponi, *Numerical Contractor Renormalization applied to strongly correlated systems*, International Workshop on Effective Models for Low-Dimensional Strongly Correlated Systems, Peyresq (septembre 2005). Présentation invitée.
- [7] S. Capponi, *Effective Hamiltonian approach for quantum magnets*, Conférence «Highly Frustrated Magnets», La Londe les Maures, France (novembre 2005).

Communications orales nationales et séminaires

- [1] *Confinement et conductivité transverse dans des liquides de Luttinger couplés*, laboratoire de Physique Quantique de Toulouse (juin 1996).
- [2] *Confinement à une et deux particules dans des chaînes couplées de fermions corrélés*, réunion du GDR Supraconducteurs, Saint-Hugues de Biviers (décembre 1996).
- [3] *Effects of long range electronic interactions on a one-dimensional electron system*, Institut de Physique Théorique de Stuttgart (novembre 1999).
- [4] *Effets d'une interaction électronique à longue portée sur le gaz d'électrons unidimensionnel*, réunion du GDR Matériaux Moléculaires, Gif-sur-Yvette (décembre 1999).
- [5] *Effets d'une interaction électronique à longue portée sur le gaz d'électrons unidimensionnel*, Laboratoire de Physique Théorique des Liquides, Paris (avril 2000).
- [6] *Dynamique de spin et de charge dans le réseau Kondo bidimensionnel demi-rempli*, Laboratoire de Physique Quantique, Toulouse (octobre 2000).
- [7] *Numerical Methods for Fermions in $D > 1$* , Geballe Laboratory for Advanced Materials, Stanford (août 2001).
- [8] *Antiferromagnétisme et cristal de paires dans la phase vortex des supraconducteurs haut T_c* , réunion du GDR Oxydes à propriétés remarquables, Paris, (novembre 2002).
- [9] *Hamiltoniens Effectifs pour des systèmes corrélés : Application aux échelles dopées et à la phase vortex des cuprates 2D*, Laboratoire de Physique Théorique, Toulouse (mai 2003).
- [10] *Current carrying ground-states in bilayer models*, Laboratoire de Physique Théorique, Würzburg (juin 2004).
- [11] *Effective Hamiltonian approach for strongly correlated systems*, Geballe Laboratory for Advanced Materials, Stanford (juillet 2004).
- [12] *Diagramme de phase global des cuprates*, Laboratoire National des Champs Magnétiques Pulsés, Toulouse (avril 2005).
- [13] *Effective Hamiltonian approach for strongly correlated systems*, Laboratoire de Physique Théorique, Würzburg (juillet 2005).

Affiches présentées dans des réunions scientifiques

- [1] S. Capponi et D. Poilblanc, Euroconférence sur le «Rôle de la dimensionnalité dans les systèmes électroniques corrélés», Turin (mai 1996).
- [2] S. Capponi et D. Poilblanc, réunion du GDR Fermions fortement corrélés, La Londe les Maures, (septembre 1996).
- [3] S. Capponi et D. Poilblanc, réunion du GDR Fermions fortement corrélés, Aussois, (juin 1997).
- [4] S. Capponi et D. Poilblanc, Journée des Théoriciens organisée par la Société Française de Physique à Orsay (mai 1997).
- [5] S. Capponi et D. Poilblanc, réunion du GDR Fermions fortement corrélés, Aussois (mai 1998).
- [6] S. Capponi et D. Poilblanc, *Cohérence dans des liquides de Luttinger couplés*, réunion du GDR Fermions fortement corrélés, La Londe les Maures (mai 1999).
- [7] S. Capponi, D. Poilblanc et T. Giamarchi, *Effects of long range electronic interactions on a one-dimensional electron system*, Conférence Générale de la Division de Matière Condensée de la Société Européenne de Physique, Montreux (mars 2000).
- [7] S. Capponi, O. Chiappa et D. Poilblanc, *Effective Hamiltonian with CORE method*, Conférence Générale de la Division de Matière Condensée de la Société Européenne de Physique, Brighton (avril 2002).
- [8] S. Capponi et D. Poilblanc, *Étude des échelles de spin dopées à l'aide de la méthode CORE*, réunion du GDR Oxydes à propriétés remarquables, Paris, (novembre 2002).
- [9] S. Capponi, *Effective Hamiltonian approach for quantum magnets*, symposium franco-japonais *Quantum magnetism in spin, charge and orbital systems*, Paris (octobre 2003).
- [10] S. Capponi, A. Läuchli et M. Mambrini, *Effective Hamiltonian approach for quantum magnets*, réunion du GDR Nouveaux États Électroniques de la Matière, Aspet (juin 2004).
- [11] G. Roux, S.R. White, D. Poilblanc, S. Capponi et A. Läuchli, *Role of cyclic four-spin exchange in doped two-leg ladders*, March Meeting, Los Angeles (mars 2005).
- [12] S. Capponi, E. Boulat, P. Lecheminant et P. Azaria, *Phase diagram of $S=3/2$ Hubbard model in one-dimension*, conférence «Theory of Quantum Gases and Quantum Coherence», Cortona, Italie (octobre 2005).

Ouvrages divers

- [1] F. Calvo et S. Capponi, *Best of Deug 1ere Année*, Edisciences (2003).
- [2] S. Capponi et F. Calvo, *Best of Deug 2eme Année*, Edisciences (2004).

Collaborations

Locales :

D. Poilblanc, M. Mambrini, F. Alet (LPT)

J.-P. Malrieu, N. Guihéry, M. Caffarel (LPQ)

C. Proust (LNCMP)

Nationales :

P. Azaria (LPTMC, Paris)

P. Lecheminant, (LPTM Cergy-Pontoise)

Internationales :

F. Assaad, Würzburg, Allemagne, (incluant un financement du Centre de Coopération Universitaire Franco-Bavarois)

W. Hanke, Würzburg, Allemagne
A. Läuchli, Lausanne, Suisse
A. Muramatsu, Stuttgart, Allemagne
M. Sigrist, Zürich, Suisse
S. C. Zhang, Stanford, USA

Avant-propos

Ce mémoire retrace les principales étapes de la recherche menée depuis 1999. Ces études ont pour point commun le développement et l'utilisation de méthodes originales permettant de mieux comprendre les systèmes fortement corrélés, dans lesquels la compétition entre plusieurs interactions est responsable de la complexité et la richesse des diagrammes de phase.

Nous avons toujours privilégié des approches numériques afin de pouvoir obtenir des informations fiables et non biaisées, permettant de valider ou non certaines approches plus analytiques. Malgré tout, ces techniques possèdent toutes des limitations propres et, ces dernières années, nous avons développé de nouvelles techniques prometteuses, auxquelles ce mémoire est essentiellement consacré.

Les deux premiers chapitres traitent de l'application du groupe de renormalisation dans l'espace réel aux modèles sur réseaux décrivant les systèmes fortement corrélés. Ces méthodes ont une longue histoire mais seule une formulation récente permet de les rendre performantes. Après de nombreux exemples illustrant son efficacité, nous détaillons plusieurs projets en cours et futurs où l'application de cette technique serait utile.

Le dernier chapitre mentionne des développements possibles autour de la technique de Monte-Carlo quantique. Il est en effet possible de simuler *exactement*, avec seulement une erreur systématique contrôlable et sans problème de signe, plusieurs types de modèles fermioniques. Enfin, nous mentionnons des applications aux systèmes de gaz atomiques fermioniques refroidis sur réseau qui sont un nouveau terrain d'expérimentation pour les physiciens du solide. L'avantage est de pouvoir travailler avec des réalisations de modèles de fermions fortement corrélés dans des conditions quasi idéales : absence de désordre chimique, choix des paramètres d'interaction etc.

Depuis la thèse, nous poursuivons également une activité scientifique autour de la problématique des systèmes quasi unidimensionnels, qui a donné lieu à plusieurs publications. Pour ces travaux, nous avons combiné la plupart des techniques numériques existantes, qui sont très performantes du fait de la dimension réduite. Cependant, nous souhaitons axer ce mémoire autour des nouvelles méthodes originales que nous avons développées, aussi la thématique des systèmes quasi unidimensionnels sera peu abordée dans ce manuscrit et le lecteur intéressé lira plutôt les articles correspondants.

Ce mémoire est basé sur quelques uns des articles, publiés entre 2000 et 2005, dont la liste se trouve au début. Par rapport au mémoire, ces publications contiennent des discussions plus approfondies des résultats, des données supplémentaires, ainsi qu'une liste de références plus complète. Par comparaison, le but de ce mémoire est de donner une idée générale du programme de recherche, des méthodes utilisées et développées, ainsi que des résultats qui peuvent être obtenus dans cette approche. Pour plus de détails, on se référera donc aux publications citées.

Note : les références citées en exposant et entre parenthèses renvoient à la bibliographie générale, page 95. Les références personnelles de l'auteur sont citées entre crochets.

Chapitre premier

INTRODUCTION

Les propriétés physiques de systèmes de *Fermions Fortement Corrélés*, essentiellement des oxydes à base de métaux de transition, révèlent l'existence de diagrammes de phases très complexes, qui sont à l'origine d'une activité très forte aussi bien expérimentale que théorique.

Une des manifestations les plus frappantes des corrélations fortes est par exemple la *supraconductivité non conventionnelle* qui a été découverte en 1986 dans des oxydes de cuivre et dont la compréhension constitue depuis un défi majeur pour la communauté des physiciens du solide. En effet, malgré l'effort important déjà investi, des questions simples, comme l'origine et le mécanisme de cette supraconductivité, restent encore sans réponses définitives. Ceci dit, parallèlement au phénomène de la supraconductivité, les corrélations fortes sont aussi à l'origine de nombreux comportements exotiques, comme par exemple les phases *liquides de spin*, les phases de flux, les phases avec modulations de charge comme les *stripes* (rubans de charges), l'existence de magnéto-résistance colossale etc. Par exemple, la phase *isolant de Mott*, dont dérivent les supraconducteurs à haute température critique, exhibe des propriétés surprenantes et pose à elle seule des problèmes passionnants à basse température. Dans ces matériaux, la proximité entre une phase isolante antiferromagnétique, un état métallique anormal (dit pseudogap) et une poche supraconductrice illustre la variété des phases possibles.

Ainsi, une définition possible d'un système corrélé est de posséder un diagramme de phase où plusieurs phases très différentes sont en compétition. Cette propriété est liée à la fois à la présence de fortes corrélations électroniques et à la basse dimensionnalité de ces composés.

De la même manière, les systèmes magnétiques possédant de la frustration sont caractérisés, au niveau classique, par une prolifération d'états de basse énergie. L'introduction d'une perturbation, telle que les effets quantiques, est alors susceptible de conduire le système vers différents états fondamentaux, qui peuvent posséder des corrélations très distinctes.

Le point commun de ces systèmes est donc de posséder une physique de basse énergie très riche et la difficulté de leur étude est similaire à la problématique bien connue de la théorie des perturbations dégénérées : un faible effet peut avoir des conséquences dramatiques.

Nous proposons d'aborder ces divers modèles à l'aide de méthodes numériques performantes et ce mémoire est axé autour du développement de certaines de ces techniques.

Dans le premier chapitre, nous décrivons les techniques de *renormalisation dans l'espace réel* qui, après avoir été très à la mode, ont été peu à peu abandonnées au profit, par exemple, de l'algorithme de renormalisation de la matrice densité (DMRG). Cet algorithme DMRG connaît un succès grandissant mais reste cependant limité aux systèmes unidimensionnels avec des conditions aux limites ouvertes; cette limitation est très sévère pour étudier par exemple les phases exotiques *liquide de spins* bi-dimensionnelles ou encore la dynamique des charges dans les systèmes dopés. L'idée centrale des techniques de renormalisation dans l'espace réel est de construire une théorie effective, valable à basse énergie, en oubliant certains détails microscopiques. Rappelons en effet que les échelles d'énergie et de distance sont inversement reliées; ainsi, les détails microscopiques n'ont d'influence qu'à grande énergie, ou encore à haute température, ce qui n'est pas pertinent dans la description des phases de basse température.

Nous reviendrons sur l'échec d'une approche naïve de ces idées lors des premières applications pratiques. Depuis, une nouvelle méthode appelée CORE (*Contractor Renormalization*) a été proposée dans le contexte des théories de jauge sur réseaux et nous montrerons comment elle permet de construire des hamiltoniens effectifs de systèmes magnétiques isolants ou dopés à partir de la décomposition du réseau en cellules élémentaires. Dans de nombreux cas, le modèle effectif reproduit qualitativement et quantitativement la physique de basse énergie.

Une application naturelle de cette méthode concerne l'étude des phases possédant des plateaux d'aimantation fractionnaire, qui correspondent à des phases où des excitations de spin locales (triplet) peuvent cristalliser sur le réseau. En dérivant un modèle effectif pour ces excitations, il est possible d'identifier ces phases comme des phases isolantes des excitations. Nous présentons des résultats encourageants, non publiés, pour des systèmes en échelles.

Nous sommes également capables de reproduire, à partir de modèles effectifs, une transition de phase quantique pour un réseau formé de plaquettes couplées. Cette transition a lieu pour une valeur finie du couplage entre les plaquettes, ce qui démontre le caractère non perturbatif de cette méthode. Il s'agit d'une propriété essentielle : la technique CORE proposée est un peu plus coûteuse qu'une simple théorie des perturbations, mais elle fournit des résultats bien meilleurs dans de nombreux cas.

Enfin, cette approche peut s'étendre aux systèmes plus complexes tels que les réseaux de spin frustrés qui semblent se prêter particulièrement bien à cette méthode en raison de la décomposition naturelle en petites cellules. Nous discutons l'exemple du réseau *kagomé* qui possède une physique de basse énergie exotique, très bien décrite par un modèle effectif.

Quant aux systèmes dopés, nous pouvons simuler, grâce au modèle effectif, des échelles dopées de plus grandes tailles qu'il n'est possible de le faire exactement. Nous avons obtenu un excellent accord avec les approches analytiques et numériques existantes pour l'échelle à deux montants en ce qui concerne les observables physiques comme l'énergie de liaison des paires de trous ou bien la valeur du gap de spin. En outre, pour les échelles à deux et quatre montants, nous trouvons un appariement entre les paires de trous et les triplets magnétiques, ce qui est un ingrédient important à comparer directement aux théories phénoménologiques ou aux expériences. Puisque nous travaillons avec des conditions aux bords périodiques, nous avons également accès de manière non biaisée aux fonctions de corrélation de densité : alors que des corrélations de type « onde de densité de charge » pour un vecteur d'onde de $4k_F$ sont observées dans une échelle à deux montants, notre calcul indique une tendance à former des structures diagonales (*stripes*) dans des échelles à quatre montants.

Cet algorithme permet donc apporter des informations cruciales sur la physique de basse énergie des systèmes magnétiques frustrés, dopés ou non.

Dans le chapitre II, nous appliquons cette méthode aux cuprates supraconducteurs afin de dériver un hamiltonien de basse énergie en gardant uniquement les degrés de liberté bosoniques décrivant soit l'antiferromagnétisme de la phase isolante, soit la phase supraconductrice qui apparaît avec le dopage. Il se trouve que ce type de modèle peut être simulé efficacement par une méthode de Monte-Carlo Quantique puisqu'il ne présente pas de problème de signe; ceci nous a permis d'obtenir un diagramme de phase global en deux dimensions permettant d'expliquer de nombreuses propriétés, communes ou distinctes, des différentes familles de composés. De manière remarquable, nous retrouvons à partir de notre modèle plusieurs propriétés mesurées expérimentalement, dont les modulations de charge observées par microscopie tunnel. Ainsi, notre modèle constitue un excellent point de départ pour des études futures.

La plupart des modèles électroniques corrélés bi- ou tri-dimensionnels ne peuvent pas être simulés exactement sur de grands systèmes. En effet, la seule méthode envisageable à l'heure actuelle est le Monte-Carlo quantique fermionique mais il souffre du problème de signe dans de nombreux cas physiques (comme le modèle de Hubbard dopé par exemple), ce qui limite son utilisation. Dans le chapitre III, nous présentons nos contributions dans ce domaine qui permettent l'étude sans problème de signe de certains

modèles fermioniques.

Le premier exemple concerne le réseau Kondo au demi-remplissage décrivant les isolants de Kondo. Les simulations Monte-Carlo permettent de calculer toutes les observables afin d'obtenir le diagramme de phase, ainsi que les propriétés dynamiques à température nulle, ou encore la thermodynamique à température finie. L'ensemble de ces données peuvent être comparées aux différentes approximations qui sont plus ou moins pertinentes selon que l'on veut décrire la phase ordonnée magnétiquement ou bien la phase Kondo formée de singulets magnétiques. Enfin, bien qu'il ne soit pas possible de doper ce système sans problème de signe, cette étude nous renseigne sur la physique des composés à fermions lourds et donne des arguments quant à la nature et au volume de la surface de Fermi, qui sont des problèmes soulevés expérimentalement dans ce domaine. Ces simulations pourraient également être étendues à d'autres réalisations expérimentales de réseaux Kondo formées à partir d'un nombre fini d'impuretés magnétiques placées sur un sous-réseau arbitraire.

Le deuxième exemple exhibe une nouvelle classe de modèles fermioniques, possédant des interactions répulsives, et toutefois pouvant être simulée sans problème de signe pour toute géométrie et pour un remplissage quelconque. Nous avons ainsi montré l'apparition d'une nouvelle phase dans des bicouches électroniques. Il s'agit d'une phase possédant des courants alternés sur les liens et brisant la symétrie par renversement du temps. Il est important de proposer des modèles microscopiques présentant des états fondamentaux exotiques afin de valider certains scénarios théoriques qui proposent de telles phases pour expliquer certaines propriétés des supraconducteurs à haute température critique, ou bien des composés fermions lourds URu_2Si_2 . L'étude numérique par une méthode non biaisée est donc un outil de choix pour caractériser ce genre de phases électroniques. Ceci ouvre la voie à une étude numérique efficace des propriétés physiques de ces modèles et des possibles réalisations expérimentales.

Enfin, nous mentionnons des études récentes que nous avons débutées sur le modèle de Hubbard pour des fermions de spins $S = 3/2$. Par rapport au cas plus étudié et mieux connu du spin $S = 1/2$, il existe de nouvelles phases, comme la possibilité d'avoir deux types de supraconductivité distinctes, construites à partir d'objets de charge 2 ou 4. La transition entre ces phases nécessite des paramètres d'interaction spécifiques et nous pensons pour cela que les applications expérimentales concernent plutôt les gaz de fermions ultra-froids.

Chapitre premier

HAMILTONIEN EFFECTIF POUR L'ÉTUDE DE SYSTÈMES CORRÉLÉS

1.1 Problématique dans les systèmes corrélés

Lorsque plusieurs interactions sont en compétition et de même grandeur, ce qui est le cas dans la plupart des oxydes à base de métaux de transitions, il s'agit d'une situation dite fortement corrélée. L'état fondamental résultant peut présenter différents types d'ordre distincts comme antiferromagnétisme, supraconductivité, cristal de Wigner etc. Il est très difficile de traiter ce type de problème où, généralement, la théorie de perturbations est en échec. Nous verrons que, par exemple, la présence de plusieurs états de basse énergie en compétition engendre des difficultés bien connues pour la théorie des perturbations dégénérées.

Nous allons montrer qu'il est possible de résoudre certains de ces problèmes en construisant de nouveaux degrés de liberté qui vont avoir des interactions effectives. À travers plusieurs exemples concernant des isolants magnétiques et des échelles dopées, nous montrerons comment cette approche réussit à construire un modèle effectif plus simple mais possédant la même physique de basse énergie.

1.1 Isolants magnétiques et frustration géométrique

Le modèle minimal permettant de décrire un système de spins en interaction sur un réseau est le modèle de Heisenberg :

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (\text{I.1})$$

où les interactions seront choisies antiferromagnétiques ($J > 0$), c'est-à-dire tendant à anti-aligner les spins $\vec{S}$ sur des sites proches voisins.

Dans de nombreux cas, en particulier pour des réseaux bipartites, le fondamental de cet hamiltonien possède un ordre magnétique à longue portée : il s'agit de l'état de Néel. Mentionnons que les spins sont des opérateurs quantiques ce qui rend l'étude de ce modèle non triviale. Toutefois, l'état de Néel peut être compris comme un état classique, où chaque spin est anti-aligné avec ses voisins, auquel s'ajoutent des fluctuations quantiques.

Un intérêt supplémentaire apparaît lorsqu'on considère des systèmes géométriquement frustrés. Par définition, cela signifie que toutes les interactions ne peuvent pas être satisfaites simultanément : en présence d'un triangle par exemple, lorsque deux spins pointent dans des directions opposées, le troisième ne peut pas être anti-parallèle à ces deux spins simultanément. La différence essentielle causée par la frustration est la présence d'une très grande dégénérescence de l'état fondamental au niveau classique. Ainsi, le point départ est très mal défini et on retrouve les difficultés inhérentes à la théorie des perturbations dégénérées. En fait, l'ajout d'une perturbation sur cet ensemble d'états de basse énergie peut avoir des effets gigantesques et entraîner le système vers de nouveaux états (et donc de nouvelles corrélations)

très différents : c'est l'origine de la richesse du diagramme de phase de ces modèles mais également de la difficulté de leur étude.

Cette propriété est à l'origine d'une physique particulièrement exotique avec l'apparition de phases non magnétiques mais brisant spontanément les symétries du réseau, ou bien des phases non magnétiques sans aucune brisure de symétrie (*liquide de spin*) comme cela semble être le cas du réseau *kagomé* que nous étudierons.

Enfin, rappelons que les effets quantiques sont d'autant plus importants que la dimension du réseau est faible et le spin petit. C'est dans ces directions que l'activité de synthèse particulièrement prolifique produit des matériaux exhibant une physique très variée, ce qui maintient une activité importante dans cette thématique.

1.2 Isolants de Mott dopés

Lorsqu'on ajoute des porteurs de charge en dopant le système, la physique devient encore plus riche avec la possibilité d'avoir, outre une phase métallique habituelle du type *liquide de Fermi*, toutes sortes de phases exotiques : supraconductivité, cristal de Wigner électronique, phases de flux brisant la symétrie par renversement du temps etc.

Le modèle minimal permettant de décrire à la fois des états délocalisés pour le caractère métallique et une interaction forte est le modèle de de Hubbard à une bande :

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (\text{I.2})$$

où le premier terme décrit la délocalisation des trous (la somme porte sur les sites proches voisins et les deux états de spin) et le deuxième terme décrit la répulsion coulombienne écrantée.

Dans la limite de couplage fort, $U \gg t$, la double occupation d'un site est interdite et la théorie de perturbations conduit à un hamiltonien plus simple dit t-J :

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \mathcal{P} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) \mathcal{P} + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right) \quad (\text{I.3})$$

où $\mathcal{P}$ est l'opérateur de projection de Gutzwiller qui interdit la double occupation des sites et le couplage antiferromagnétique qui apparaît est $J = 4t^2/U$. Notons qu'au demi-remplissage, ce modèle se réduit à l'hamiltonien de Heisenberg (Eq. I.1).

Le modèle de Hubbard est censé décrire la physique des supraconducteurs à haute température critique (voir le chapitre II) dont un diagramme de phase générique est montré sur la Fig. I.1. On voit que les propriétés intéressantes sont à basse énergie, c'est-à-dire existent sur de grandes échelles de distance, ce qui limite les prédictions faites par des techniques numériques sur des systèmes finis. Le but de notre étude est de pouvoir proposer un modèle effectif décrivant ces propriétés de basse énergie.

1.3 Quelle approche pour les systèmes complexes ?

Comme l'a fait remarqué P.W. Anderson dans un célèbre article¹ de 1972, *More is different*. La compréhension des systèmes complexes ne passe pas seulement par l'étude de ses composantes. Ainsi, la connaissance des lois physiques microscopiques n'est pas suffisante pour expliquer certains phénomènes macroscopiques. Par exemple, la question de la supraconductivité d'un atome de fer n'a aucun sens alors qu'elle est observée dans le métal; de même, l'existence des modes collectifs (phonons, magnons etc.) n'est par définition valable que dans un système formé de nombreux constituants. Ainsi, l'étude des

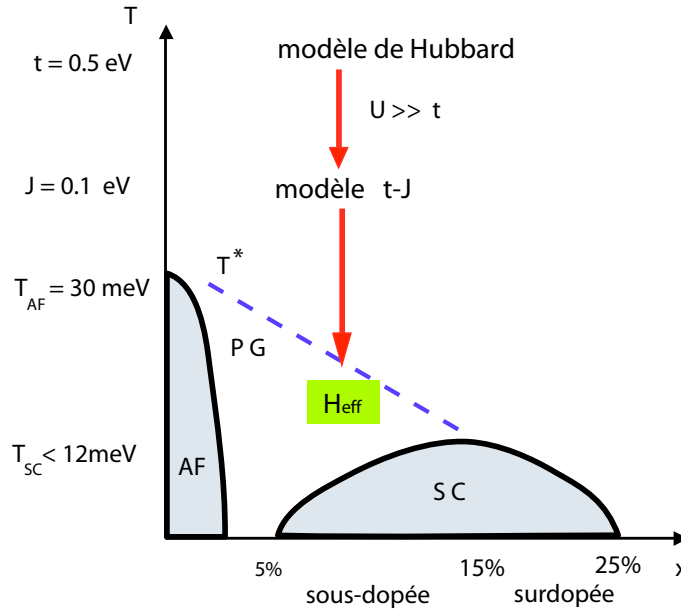


FIG. I.1 – : Schéma d'un diagramme de phase température (T)-dopage (x), typique d'un supraconducteur à haute température critique. Nous exprimons les températures en énergie ($1 \text{ eV} \sim 11\,605 \text{ K}$). La physique à haute énergie est décrite par le modèle de Hubbard (I.2) avec une intégrale de saut $t \sim 0.5 \text{ eV}$ et une interaction Coulombienne $U \sim 10 \text{ eV}$. En diminuant l'échelle d'énergie, ce modèle se réduit à un modèle t - J (I.3) avec un échange magnétique $J = 4t^2/U \sim 0.1 \text{ eV}$. Nous souhaitons poursuivre ce processus afin d'obtenir un hamiltonien effectif H_{eff} décrivant les propriétés à très basse énergie (quelques dizaines de meV) où apparaissent les phases antiferromagnétiques (AF), supraconductrices (SC) et pseudogap (PG).

systèmes complexes, qui constitue la plus grande partie de la physique actuelle, nécessite de nouvelles approches.

Comme illustré sur la Fig. I.2, la matière regardée à diverses échelles, ou de manière inverse à diverses énergies, apparaît très différente. Des plus petites échelles aux plus grandes, on considère comme «brique» élémentaire les quarks et les leptons, les nucléons, les atomes, les molécules, puis les modes collectifs dans les solides etc. Chacun de ces objets n'est pas une réalité en soi mais un objet composite résultant des interactions microscopiques. Par contre, lorsque les interactions résiduelles entre ces objets sont faibles (ce qui dépend de l'énergie caractéristique qui nous intéresse), alors leur utilisation prend tout son sens et permet une description appropriée de la matière.

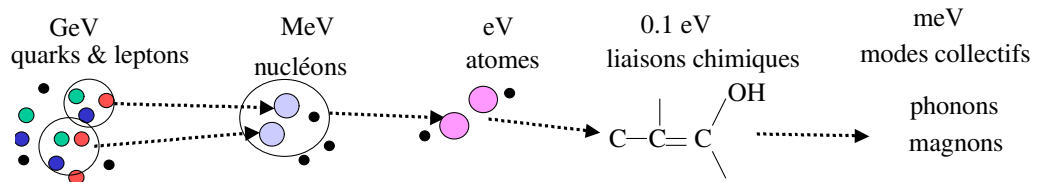


FIG. I.2 – : Degrés de liberté émergents qui sont pertinents pour décrire la matière à une échelle donnée.

Le concept de degré de liberté pertinent à une échelle donnée est très profond puisqu'il permet

d'oublier les détails non pertinents et de dériver une théorie effective. Par exemple, un chimiste utilise quotidiennement la notion d'atome ou de molécule alors qu'il sait bien que ce ne sont pas des particules fondamentales.

Cette discussion sur l'intérêt du réductionnisme pour décrire les systèmes complexes est très présente en théorie de la matière condensée et nous renvoyons le lecteur intéressé à des articles plus récents^{2,3}.

En conclusion, nous avons soulevé l'importance des degrés de liberté de basse énergie dans les systèmes magnétiques frustrés ou dopés. Ces variables sont appelées *émergentes* car elles diffèrent des degrés de liberté originaux. Nous avons démarré un programme de recherche permettant de dériver systématiquement, à partir d'un modèle microscopique, un hamiltonien effectif incluant les «atomes» effectifs et leurs interactions résiduelles effectives. Cette approche se fait à l'aide d'une méthode de renormalisation dans l'espace réel. L'intérêt est que cette physique de basse énergie est insensible aux détails microscopiques qui ne sont pas importants pour caractériser la nature des phases ordonnées qui apparaissent à basse température.

I.2 Renormalisation dans l'espace réel

2.1 Historique et algorithme

Les techniques de renormalisation ont été introduites afin de réaliser la réduction de complexité que nous décrivions précédemment. Puisque nous sommes intéressés par les propriétés de basse énergie, il n'est pas nécessaire de conserver les degrés de liberté de haute énergie qui contiennent une information inutile. Il s'agit alors de les intégrer afin de ne plus les considérer. Les travaux fondateurs dans ce domaine sont dus à Wilson et nous renvoyons à une de ses revues (référence (4) pour plus d'informations. Dans la suite, nous considérons le cas particulier des techniques qui travaillent directement dans l'espace réel, en suivant la proposition de Kadanoff et Wilson.

En pratique, toute méthode de renormalisation dans l'espace réel consiste en trois étapes.

1. Diviser le réseau en blocs.
2. Résoudre le modèle en se restreignant à un seul bloc et ne conserver qu'un certain nombre d'états propres de basse énergie, qui constitueront l'espace réduit.
3. Construire un hamiltonien renormalisé agissant dans l'espace réduit et possédant la même physique de basse énergie que le modèle initial.

Il reste à trouver un algorithme pratique permettant d'obtenir ce modèle effectif.

2.2 Échec de l'approche naïve

Lors du choix des plus bas états gardés par bloc, il arrive que le gap les séparant des états plus hauts en énergie soit relativement grand. Ceci peut conduire à l'idée que la fonction d'onde exacte d'un grand système peut être raisonnablement approximée par le produit tensoriel des fonctions d'onde de blocs. Cette idée est malheureusement fausse comme le prouve le plus simple exemple d'une chaîne de fermions libres⁵. En effet, pour un modèle de liaisons fortes avec des conditions aux bords ouvertes, l'état fondamental d'une chaîne de L sites s'annule uniquement sur les bords alors que le produit tensoriel des fondamentaux de p blocs possède $p + 1$ nœuds (voir la figure I.3).

C'est cet échec qui a conduit White à développer l'algorithme du groupe de renormalisation de la matrice densité (DMRG)⁶ qui est devenu une méthode de choix pour l'étude des systèmes unidimensionnels⁷. Le développement de cet algorithme est toujours un domaine très actif, grâce aux apports des techniques de l'information quantique, mais il n'est toujours pas possible d'étendre son application au-delà d'une dimension.

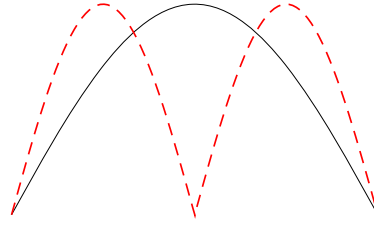


FIG. I.3 – : Fonction d'onde de l'état fondamental d'une chaîne de longueur L (ligne pleine) et le produit tensoriel des fondamentaux de deux chaînes de longueur $L/2$ (ligne pointillée) pour un modèle de liaison forte avec conditions de bord ouvertes (d'après la référence (5)).

2.3 Méthode CORE

La méthode CORE (*Contractor Renormalization*) a été proposée à partir de 1994 par Morningstar et Weinstein dans le contexte des théories de jauge sur réseau^{8,9}. Il s'agit d'une technique de groupe de renormalisation dans l'espace réel travaillant directement en terme d'Hamiltonien, par opposition avec l'approche originale de Wilson qui considère plutôt la fonction d'onde. Nous allons présenter rapidement l'algorithme avant de discuter quelques résultats obtenus dans la littérature. Nous mettrons également l'accent sur quelques détails techniques que nous avons rencontrés lors de l'implémentation numérique de cette méthode.

L'approche CORE diffère de l'approche naïve et résout le problème mentionné plus haut en modifiant l'hamiltonien afin de garantir que la physique de basse énergie reste inchangée. Le prix à payer est d'introduire de nouvelles interactions, à portée arbitraire. Ainsi, bien qu'étant une méthode générale, son applicabilité en pratique dépend essentiellement de la vitesse de décroissance de ces interactions effectives, qui peut être estimée au cas par cas. Dans notre étude, nous avons également introduit d'autres estimateurs qui permettent de connaître la fiabilité de cette méthode pour un problème posé.

Il s'agit d'un algorithme très flexible dans le sens où il y a une liberté de choix dans la cellule élémentaire utilisée pour la décomposition du réseau, dans le nombre d'états locaux qui sont gardés ainsi que dans la troncation des interactions effectives. Cette liberté permet d'une part de valider la méthode lorsque le modèle effectif dépend peu de ces choix. Ceci peut également permettre d'obtenir des informations complémentaires sur la physique de basse énergie : par exemple, dans le cas du réseau damier en deux dimensions, les deux découpages possibles conduisent respectivement à la physique de basse énergie des triplets ou des singulets¹⁰. Cette souplesse d'utilisation permet d'implémenter relativement facilement cet algorithme à tout type de problème sur réseau et en fait une méthode exploratoire très utile.

Puisque le modèle effectif obtenu par la procédure CORE est un hamiltonien, il est très facile de le stocker et de le manipuler éventuellement par d'autres techniques. Ceci contraste avec des méthodes telles que le DMRG, qui nécessite une approche numérique. Par contre, la méthode CORE produit généralement un hamiltonien effectif non trivial et il reste à savoir comment l'étudier. Heureusement, on montrera par des exemples qu'on peut soit le résoudre numériquement sur des petits systèmes (de taille sensiblement plus grande que si l'on travaillait avec le modèle initial), soit obtenir une solution analytique dans certains cas, soit encore aboutir à un modèle effectif bosonique sans problème de signe qui peut être traité efficacement par Monte-Carlo quantique. Là encore, l'intérêt pratique d'un tel hamiltonien effectif doit être discuté au cas par cas.

Enfin, il faut mentionner que, dans l'esprit du groupe de renormalisation, il est possible d'itérer cette construction d'hamiltonien effectif afin de voir si ils convergent vers un point fixe simple, ce qui permet de conclure sur les propriétés de très basse énergie.

Nous montrerons dans les exemples suivants que la méthode CORE donne des résultats très accep-

tables pour des modèles non triviaux, même en ne gardant que peu d'états par bloc et en ne conservant que les interactions effectives à plus courte portée. Ceci valide cette approche pour de nombreux systèmes d'intérêt et nous permet d'envisager des applications à des systèmes plus complexes, en dimension deux ou plus.

2.4 Algorithme CORE et implémentation numérique

Voici l'algorithme CORE, illustré sur la Fig. I.4, pour un modèle sur réseau :

- Définir un blocs élémentaire (site, barreau pour une échelle, plaquette, triangle etc.). Diagonaliser le hamiltonien $\mathcal{H}$ qui correspond au bloc élémentaire choisi. Ensuite, pour définir un espace de Hilbert réduit, ne conserver que les M états de plus basses énergies.
- Diagonaliser le hamiltonien complet sur un réseau constitué de N_c blocs connexes et en déduire ses états propres $|n\rangle$ de (basse) énergie ε_n .
- Projeter les états propres $|n\rangle$ sur l'espace de Hilbert réduit, produit tensoriel des M états par bloc, et les rendre orthonormaux par une procédure de Gram-Schmidt en commençant par l'état fondamental :

$$|\psi_n\rangle = \frac{1}{Z_n} \left(|n\rangle - \sum_{m < n} |\psi_m\rangle \langle \psi_m | n \rangle \right)$$

où Z_n est un facteur de normalisation. On obtient ainsi une base orthonormale $\{|\psi_n\rangle\}$ de dimension M^{N_c} . Il peut arriver que la projection de certains états propres s'annule, ce qui peut rendre nécessaire de calculer plus que les M^{N_c} plus bas états propres $|n\rangle$.

- Le hamiltonien effectif de ce super-bloc est alors construit comme

$$h_{N_c} = \sum_{n=1}^{M^{N_c}} \varepsilon_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|$$

- Les interactions effectives jusqu'à une portée de N_c blocs sont obtenues en ôtant les contributions connexes dues aux constituants du super-bloc : ceci définit $h_{N_c}^{\text{connexe}}$.
- Enfin, le hamiltonien effectif est donné comme un développement en termes agissant sur tous les super-blocs possibles :

$$H^{\text{CORE}} = \sum_i h_i + \sum_{\langle ij \rangle} h_{ij}^{\text{connexe}} + \sum_{\langle ijk \rangle} h_{ijk}^{\text{connexe}} + \dots \quad (\text{I.4})$$

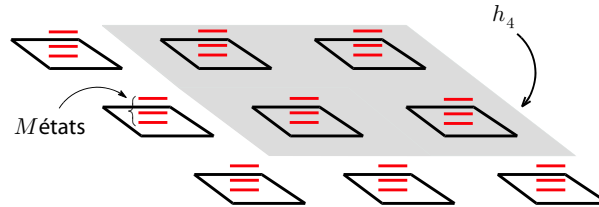


FIG. I.4 – : Représentation de l'algorithme CORE pour un réseau carré divisé en plaquettes (d'après la référence (11)). L'espace de Hilbert réduit est le produit tensoriel de M états par plaquette et les interactions effectives (ici h_4) nécessitent la diagonalisation exacte de plusieurs plaquettes (ici en grisé).

Par construction, cet hamiltonien effectif reproduit *exactement* la physique de basse énergie, lorsqu'on inclut une infinité de termes. La raison en est simple : les termes d'ordre très élevés contiennent

les énergies propres *exactes* et de bonnes approximations des fonctions d'onde *exactes* sur de grands systèmes. Par contre, du point de vue pratique, l'obtention de ces termes nécessite de résoudre exactement le modèle initial sur de grands blocs, ce qui devient rapidement impossible.

En pratique, il va donc falloir tronquer ce développement à un certain ordre, ce qui correspond à une troncation dans la portée r des interactions effectives. Cependant, si les interactions de départ sont à courte portée, nous nous attendons à ce que les interactions effectives décroissent suffisamment rapidement. Il faudra vérifier cette convergence explicitement en fonction du problème étudié; par exemple en définissant une norme pour les opérateurs, les interactions de portées d'ordre r et plus seront négligées lorsque : $\|h_r\| \ll \|h_{r-1}\|$. Notons que la vitesse de convergence des interactions effectives dépend essentiellement du nombre d'états conservés par bloc M . Ainsi, bien que cette troncation puisse modifier quantitativement les paramètres du modèle effectif, elle peut conduire à un hamiltonien effectif possédant qualitativement la même physique de basse énergie.

Faisons une parenthèse technique sur l'implémentation de la diagonalisation de N_c blocs. Idéalement, il suffit de faire une diagonalisation complète du modèle mais ceci peut devenir limitant et nous sommes seulement intéressés par avoir un certain nombre (au moins M^{N_c}) d'états propres exacts de basse énergie. Dans ce cas, il est possible d'utiliser un algorithme de Lanczos pour obtenir exactement les états du bas du spectre. Toutefois, dans cette approche, il est difficile et coûteux de traiter les dégénérescences, ce qui peut amener à un hamiltonien effectif incorrect, par exemple qui brise la symétrie de spin SU(2).

Une fois qu'un tel hamiltonien effectif est obtenu, il reste encore à comprendre ses propriétés. Parmi les groupes utilisant cette approche, on distingue plusieurs stratégies :

- Morningstar et Weinstein proposent d'itérer la méthode jusqu'à convergence vers un point fixe;
- le groupe d'Auerbach décide de stopper la procédure après une ou deux itérations, puis d'analyser le modèle effectif par champ moyen ou numériquement. Nous avons également suivi cette approche dans le chapitre II.
- dans ce chapitre, nous nous sommes limités à une itération CORE et nous avons systématiquement étudié les modèles effectifs par diagonalisation exacte (algorithme de Lanczos).

L'étude numérique exacte du hamiltonien effectif obtenu après une seule itération CORE a été initiée par Piekarewicz et Shepard pour l'étude d'une échelle de spins¹². Malheureusement, la diagonalisation exacte d'un tel problème limite beaucoup la taille des systèmes accessibles (la taille des matrices reste inférieure à $\sim 50\,000$). Nous avons ainsi proposé d'appliquer l'algorithme de Lanczos, ce qui permet d'accéder exactement aux états de basse énergie. En outre, l'utilisation des symétries et des nombres quantiques conservés permet de traiter des matrices de taille ~ 50 millions. Pour une revue sur l'utilisation de l'algorithme de Lanczos à ce type de problème, on pourra lire la référence (13).

Nous allons présenter nos applications de cette méthode à la fois pour des systèmes et isolants et dopés. Il faut mentionner que d'autres équipes ont appliqué cette technique à des problèmes similaires : chaînes de spin^{14,15}, échelles de spins¹², réseaux de spins frustrés en 2 et 3 dimensions^{10,16–18}, chaîne SU(N)¹⁹, modèle de Hubbard bidimensionnel¹¹.

2.5 De l'utilité des méthodes numériques

Dans cette étude des systèmes complexes, nous avons mis l'accent sur l'émergence de propriétés nouvelles sur des échelles de longueur variées. Comme nous l'avons discuté brièvement, cette physique ne peut pas se déduire simplement des lois microscopiques et l'approche phénoménologique peut paraître inévitable dans certains cas. En effet, les études numériques des modèles microscopiques sont souvent limitées dans la taille des systèmes accessibles et ne peuvent donc pas toujours fournir des réponses quant aux propriétés de basse énergie. Faut-il alors encore croire dans les techniques numériques ? Nous pensons que la réponse est oui et ce mémoire propose différentes pistes dans cette direction.

Ainsi, bien que la résolution complète d'un modèle microscopique soit actuellement hors de portée dans de nombreux cas, il est possible d'utiliser les techniques numériques afin d'extraire les degrés de liberté émergents ainsi que leurs interactions effectives. C'est exactement le but de la méthode CORE.

I.3 Étude de systèmes magnétiques isolants

Nous commençons par les applications de la méthode CORE aux systèmes magnétiques, à partir des modèles les plus simples quasi unidimensionnels jusqu'à des exemples non triviaux en deux dimensions présentant soit une transition de phase quantique, soit une physique de basse énergie exotique. Certains des résultats de cette partie proviennent de la publication [21] à laquelle on se référera pour plus de détails.

3.1 Chaîne de spin 1/2

La première application à un modèle de magnétisme quantique a été proposé par Weinstein¹⁴ et concerne la chaîne de Heisenberg de spin 1/2. Il s'agit d'un test pour la méthode CORE puisque la solution est connue exactement par *ansatz* de Bethe et l'énergie par site vaut :

$$e_0 = -\ln(2) + 1/4 = -0.4431472.$$

Toutefois, ce système est loin d'être trivial puisqu'il constitue un système critique avec des corrélations en loi de puissance, caractéristique d'un quasi-ordre à longue portée.

Weinstein propose de choisir comme bloc élémentaire un dimère et de ne conserver que le fondamental singulet. Ainsi, l'espace de Hilbert est trivial (de dimension 1) mais les interactions effectives sont maintenant à longue portée (voir Fig. I.5). Il n'est pas évident *a priori* de pouvoir décrire le fondamental dans cette base réduite correspondant au produit tensoriel des singulets sur des liens proches voisins. Au contraire, nous avons discuté cet exemple qui montre l'échec de l'approche naïve, car la fonction d'onde exacte du fondamental ne correspond pas du tout au produit tensoriel des singulets sur les dimères.



FIG. I.5 – : Découpage en blocs de 2 sites pour une chaîne de spins 1/2. On ne garde qu'un seul état (dimère singulet) par bloc. À droite, le modèle effectif agit dans un espace de Hilbert trivial avec un seul état mais contient des interactions effectives à toute distance.

Il est alors très facile de calculer l'énergie par site du fondamental en fonction de la portée des interactions effectives que l'on considère :

Portée	1	2	3	4	5	6	∞
e_0	-0.375	-0.433013	-0.438776	-0.440678	-0.441551	-0.442028	-0.4431412

La convergence des résultats est très rapide bien que ce modèle possède une longueur de corrélation infinie, et le résultat extrapolé est à une précision remarquable.

Une approche similaire a été entreprise par le groupe de Malrieu¹⁵. Dans ce cas, on choisit un bloc de taille impaire et on ne conserve que le fondamental doublet et l'interaction effective entre proches voisins. Ainsi, on retrouve un modèle effectif qui a la forme d'un modèle de Heisenberg avec une constante d'échange renormalisée (voir la Fig. I.6). Il est alors immédiat d'itérer la procédure, dans l'esprit du groupe



FIG. I.6 – : Découpage en blocs de tailles impaires pour une chaîne de spins $1/2$. On ne garde qu'un seul état (doublet $S = 1/2$) par bloc. À droite, le modèle effectif est à nouveau une chaîne de Heisenberg de spins $1/2$ mais avec une intégrale d'échange renormalisée J' (on se restreint aux interactions effectives entre proches voisins).

de renormalisation, afin d'obtenir l'énergie par site dans la limite thermodynamique. Voici les résultats obtenus en fonction de la taille du bloc de départ :

Taille du bloc	5	7	9	11	∞
e_0	-0.446135	-0.445057	-0.444475	-0.444126	-0.4431025

À nouveau, les résultats convergent rapidement vers une valeur très proche de l'énergie exacte.

Ces auteurs ont donc montré qu'il est possible d'appliquer les techniques de renormalisation en espace réel à un système non trivial et ils obtiennent une excellente précision sur l'énergie du système.

3.2 Échelles de spin

L'étude théorique des échelles de spins présente un grand intérêt car de tels systèmes ont un comportement intermédiaire entre les systèmes en une et deux dimensions²⁰. En outre, il existe une activité expérimentale sur ces matériaux qui présentent une structure en échelle. Par exemple depuis le début des années 90, sont synthétisés des matériaux composés de strontium et d'oxyde de cuivre de formule générale $\text{Sr}_n\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n+1}$ qui présentent des structures en échelles à n montants.

En particulier, le comportement avec le nombre de montants n est non trivial puisque, dans le cas de conditions aux bords ouvertes le long des barreaux et pour des spins $S = 1/2$, on a une alternance entre un fondamental ayant un gap de spin fini (n pair) ou nul (n impair).

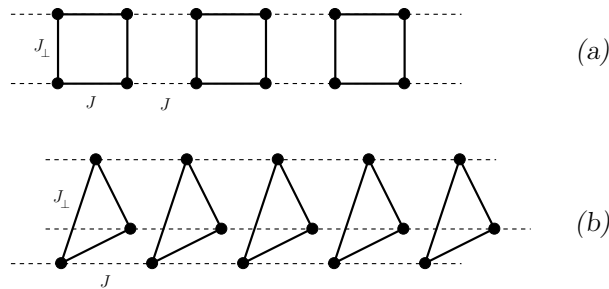


FIG. I.7 – : (a) Échelle à deux montants divisée en blocs 2×2 . (b) Tore à trois montants dont le bloc élémentaire est un triangle. Les couplages selon les barreaux et les montants sont respectivement $J_\perp$ et J .

Nous allons considérer des échelles à deux et trois montants représentées sur la Fig. I.7, pour un modèle de Heisenberg (Eq. I.1) dans la limite des couplages isotropes ($J_\perp = J$).

3.2.1 Échelle à deux montants

Ce système a été très étudié et possède un gap de spin²¹. L'état fondamental peut être compris à partir de la limite de couplage fort ($J_{\perp} \gg J$) comme un produit d'états singulets sur les barreaux. Ainsi, une excitation magnétique nécessite de briser un singulet, ce qui coûte une énergie finie.

Nous choisissons comme bloc élémentaire une plaquette (voir la Fig. I.7 (a)) et nous ne conservons que le fondamental singulet et la première excitation triplet (voir la Fig. I.8).

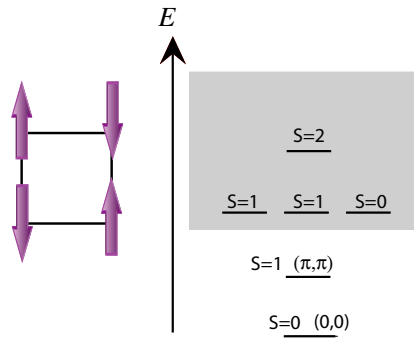


FIG. I.8 – : Spectre exact du modèle de Heisenberg pour une plaquette. La région grisée indique les états qui ne sont pas conservés dans l'approche CORE.

Ce système étant relativement simple, nous pouvons calculer les interactions effectives jusqu'à une portée $r = 4$, ce qui est nécessaire pour étudier la convergence des hamiltoniens effectifs.

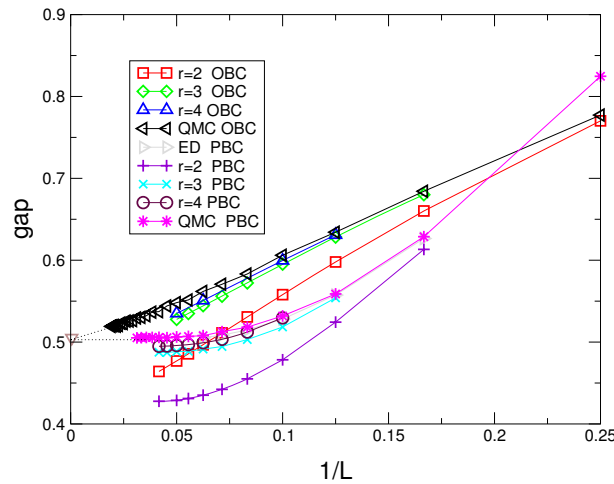


FIG. I.9 – : Gap de spin d'une échelle de Heisenberg $2 \times L$ obtenus à partir d'un hamiltonien effectif incluant des interactions jusqu'à une portée r variable. Ces modèles effectifs sont résolus exactement sur des systèmes de taille finie avec des conditions aux bords ouvertes (OBC) ou périodiques (PBC) le long des chaînes. Pour comparaison, nous traçons également des données obtenues par Diagonalisation Exacte (ED) et Monte-Carlo quantique (QMC), fournies par F. Alet, ainsi que la valeur extrapolée dans la limite thermodynamique²¹.

Pour chacun de ces modèles effectifs, nous faisons une diagonalisation exacte sur des systèmes de taille finie jusqu'à $N_c = 12$ blocs, soit $N = 48$ sites pour le modèle initial. Les résultats obtenus pour

le gap de spin sont montrés sur la Fig. I.9 et comparés aux valeurs obtenues par Monte-Carlo quantique^a ainsi qu'à la valeur extrapolée thermodynamique 0.504 obtenue par DMRG²¹.

La première remarque est que l'utilisation des conditions aux bords périodiques accélère nettement la convergence en fonction de la taille. En effet, dans un système possédant un gap Δ fini, les effets de taille donnent des corrections :

- en $\exp(-L\Delta)$ avec des conditions aux bords périodiques,
- en a/L avec des conditions aux bords ouvertes.

Or, on sait que le DMRG est surtout adapté au deuxième cas, ce qui oblige donc à simuler de plus grands systèmes pour avoir une précision équivalente.

Le deuxième point concerne la convergence en fonction de la portée des interactions effectives. Nous observons une amélioration constante des résultats et, dans le cas $r = 4$, l'erreur relative est de 10^{-4} pour l'énergie et inférieure à 1% pour le gap de spin. Cette convergence rapide est due à la faible longueur de corrélation de ce système (typiquement 3 ou 4 pas de réseau) et permet de valider l'approche utilisant un hamiltonien effectif.

3.2.2 Tore à trois montants

Nous considérons maintenant une échelle de spin à trois montants possédant des conditions aux bords périodiques selon les barreaux (voir Fig. I.7(b)). La frustration est à l'origine de l'existence d'un gap de spin pour tous les couplages $J_{\perp}$ ^{22,23}. D'après le théorème de Lieb-Schultz-Mattis²⁴, cela signifie que le système doit briser la symétrie du réseau et effectivement, une dimérisation spontanée apparaît. Ce comportement diffère fortement du cas avec conditions aux bords ouvertes selon les barreaux, dont la physique est similaire à la chaîne de spins 1/2 et qui donc ne possède pas de gap de spin. En théorie des perturbations, valable lorsque $J_{\perp} \gg J$, il existe un gap de spin fini $\Delta_S = 0.28 J$ et un état fondamental dimérisé^{22,23}.

Afin de tester l'approche CORE, nous allons nous concentrer sur le cas isotrope $J = J_{\perp}$ qui est très difficile à traiter par la théorie des perturbations. Le bloc élémentaire consiste en un triangle (voir la Fig. I.7 (b)) et les états que nous conservons sont les deux doublets dégénérés, états fondamentaux d'un triangle, qui peuvent être représentés par un pseudo-spin $\vec{\tau}$ associé à leur chiralité ainsi qu'un vrai spin 1/2 noté $\vec{\sigma}$. Avec des états, nous calculons les interactions effectives à plusieurs portées afin de tester la convergence de la méthode.

Sur la Fig. I.10, nous voyons que les valeurs du gap de spin convergent en oscillant vers les valeurs exactes. Cet effet provient d'une propriété de parité : afin de calculer les interactions de portée r , on doit résoudre alternativement des réseaux avec un nombre pair ou impair de sites, ce qui frustre le système. Toutefois, les valeurs sont relativement précises même avec des interactions à courte portée et nous retrouvons que la frustration induit un gap de spin de $\simeq 0.11 J$ dans ce système. Il s'agit d'une borne inférieure car nous n'avons pas atteint le régime de convergence exponentielle avec la taille, et ce résultat est compatible avec les études par DMRG²².

Afin de décrire cette phase gappée, nous calculons le gap avec la première excitation singulet $S = 0$. Il s'agit d'un état d'impulsion π qui tombe sur le fondamental avec une loi en $1/L^2$. Dans la limite thermodynamique, le système va combiner ces deux états singulets, ce qui résulte en une dimérisation spontanée et un fondamental doublement dégénéré, en accord avec le théorème de Lieb-Schultz-Mattis et les études antérieures faites dans la limite perturbative²³.

En conclusion, la méthode CORE permet de travailler dans le même sous-espace que celui de la théorie des perturbations, mais, grâce aux interactions effectives, il est possible de calculer un hamiltonien effectif fiable dans la limite isotrope. Cette amélioration majeure par rapport au calcul perturbatif

^a Ce modèle n'ayant pas de frustration magnétique, il peut être simulé par cette technique sans problème de signe.

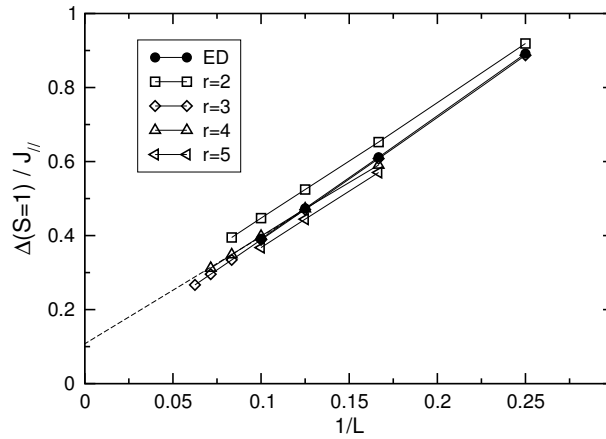


FIG. I.10 – : *Gap de spin pour un tore de Heisenberg à trois montants avec des interactions isotropes $J = J_{\perp}$. Ces valeurs sont obtenues à partir des hamiltoniens effectifs de portée variable r et comparées aux résultats obtenus par diagonalisation exacte (ED). Cette figure est extraite de la publication [21].*

ne nécessite qu'un effort minime (diagonalisation de quelques sites) pour un résultat bien meilleur (les énergies sont obtenues à 1% près). Dans le cadre de cette technique, il est également très facile d'améliorer les modèles effectifs en incluant des interactions à plus longue portée et nous avons observé une rapide convergence en fonction de cette portée.

3.3 Plateaux d'aimantation dans les échelles

L'application d'un champ magnétique sur des composés magnétiques, souvent frustrés, a mis en évidence la possibilité d'avoir des plateaux d'aimantation constante en fonction du champ appliqué. La compréhension de ce phénomène fait l'objet de nombreux travaux, tant expérimentaux que théoriques.

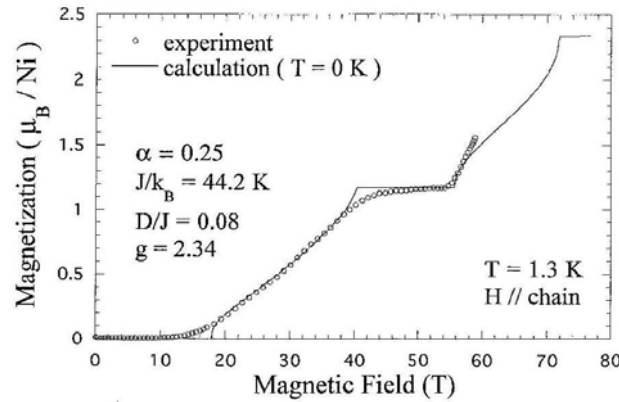


FIG. I.11 – : *Exemple de courbe d'aimantation expérimentale présentant un plateau à la moitié de la valeur à saturation. Figure extraite de la référence (25).*

Par exemple, la figure I.11 représente la courbe d'aimantation expérimentale, obtenue par Narumi *et coll.*²⁵ pour le composé $[\text{Ni}_2(\text{Medpt})_2(\mu\text{-ox})(\mu\text{-N}_3)]\text{ClO}_4 \cdot 0.5 \text{ H}_2\text{O}$. Ce composé est décrit comme une chaîne antiferromagnétique de spins $S = 1$.

À nouveau, la situation est bien plus claire en une dimension où il a été montré que la présence d'un plateau pour une aimantation m dans un système de spins S n'est possible que si $n(S - m)$ est un entier²⁶ (n correspond au nombre de spins par cellule élémentaire). En fait, ce critère pourrait être valable en toute dimension²⁷, mais dans ce cas, il peut exister d'autres plateaux «exceptionnels». Il faut souligner que des plateaux sont également possibles pour d'autres valeurs de l'aimantation mais le fondamental doit alors briser la symétrie de translation du réseau. Quoi qu'il en soit, ce théorème fournit une condition nécessaire mais il ne prouve pas l'existence de plateaux; pour cela, il faut recourir à la résolution des modèles proposés, ce qui reste un problème souvent difficile. Dans cette partie, l'aimantation est toujours normalisée par sa valeur à saturation.

Le stage de DEA de B. Piaud que j'ai encadré a porté sur l'application de la méthode CORE à la détection des plateaux d'aimantation dans des échelles de spins frustrées (voir la figure I.12) décrites par un hamiltonien de Heisenberg antiferromagnétiques de spins $S = 1/2$:

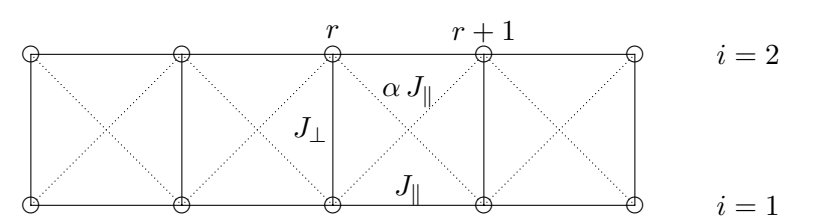
$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{ech} = & J_{\perp} \sum_{r=1}^N \vec{S}_{r,1} \cdot \vec{S}_{r,2} + J_{\parallel} \sum_{r=1}^N \sum_{i=1}^2 \vec{S}_{r,i} \cdot \vec{S}_{r+1,i} \\ & + \alpha J_{\parallel} \sum_{r=1}^N \vec{S}_{r,1} \cdot \vec{S}_{r+1,2} + \vec{S}_{r,2} \cdot \vec{S}_{r+1,1} - h \sum_{r=1}^N \sum_{i=1}^2 S_{r,i}^z \end{aligned}$$


FIG. I.12 – : Échelle de spins $S = 1/2$ avec diverses interactions d'échange.

Pour résoudre cet hamiltonien nous allons utiliser la méthode CORE. L'intérêt de cette technique est que c'est une méthode d'approximation non perturbative qui ne s'applique pas seulement pour des faibles valeurs de paramètres. Nous verrons que, pour un effort de calcul comparable, la méthode CORE donne de bien meilleurs résultats que la perturbation.

3.3.1 Approche perturbative

Cette approche a été utilisée par Mila²⁸ en considérant l'échange magnétique sur un barreau, $J_{\perp}$, très supérieur devant les deux autres couplages inter-barreaux $J_{\parallel}$ et $\alpha J_{\parallel}$. Le hamiltonien à l'ordre 0 correspond donc aux barreaux découplés. Pour un barreau donné, il y a 4 états propres, 1 singulet $|S\rangle$ et 3 triplets $|T_{S_z}\rangle$ (avec $S_z = -1, 0, +1$) dont les énergies sont représentées sur la Fig. I.13.

Comme le montre cette figure, en présence d'un champ magnétique, les niveaux d'énergie d'un barreau se séparent à cause du terme Zeeman, et nous gardons uniquement les deux états de plus basses énergies ($|S\rangle$ et $|T_{+1}\rangle$) pour construire l'espace de Hilbert réduit. Ces deux états définissent un pseudo spin $\vec{\sigma}_r$.

La perturbation au premier ordre conduit au Hamiltonien effectif suivant :

$$\mathcal{H}_{ech}^{pert} = \sum_{r=1}^N J_{xy}^{eff} (\sigma_r^x \sigma_{r+1}^x + \sigma_r^y \sigma_{r+1}^y) + J_z^{eff} \sigma_r^z \sigma_{r+1}^z - h^{eff} \sum_{r=1}^N \sigma_r^z$$

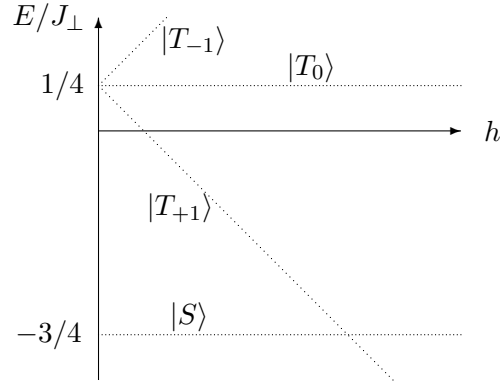


FIG. I.13 – : Énergies des états propres d'un barreau en fonction du champ magnétique h .

où les paramètres sont :

$$\begin{aligned} J_{xy}^{eff} &= J_{\parallel}(1 - \alpha) \\ J_z^{eff} &= J_{\parallel}(1 + \alpha)/2 \\ h^{eff} &= h - J_{\perp} - J_{\parallel}(1 + \alpha)/2 \end{aligned}$$

Il s'agit donc d'un modèle de type XXZ qui, après la transformation de Jordan-Wigner, devient un Hamiltonien t-V de fermions sans spin en interaction :

$$\mathcal{H}_{ech}^{pert} = t \sum_r^N \left(c_r^\dagger c_{r+1} + c_{r+1}^\dagger c_r \right) + V \sum_r^N n_r n_{r+1} + \mu \sum_r^N n_r \quad (\text{I.5})$$

avec t le terme de saut, V le terme d'interaction et μ le potentiel chimique tels que

$$\begin{aligned} t &= J_{xy}^{eff}/2 \\ V &= J_z^{eff} \\ \mu &= -h^{eff} - J_z^{eff} \end{aligned}$$

Cette transformation signifie que les triplets $|T_{+1}\rangle$ sont équivalents à des particules ($\bullet$) alors que les singulets $|S\rangle$ correspondent à des sites vides ($\circ$). L'aimantation $\langle M \rangle$ est reliée au nombre de particules N_e et le potentiel chimique μ est équivalent au champ magnétique. L'existence d'un plateau d'aimantation est donc équivalente à la présence d'une phase isolante dans le langage des particules et il existe ainsi une analogie avec la transition métal-isolant²⁹.

Ici, puisque le modèle t-V est intégrable, on connaît le critère d'existence d'un gap au demi-remplissage³⁰, et donc d'un plateau d'aimantation à $\langle M \rangle = 1/2$, qui est : $V/|t| > 2$, ce qui correspond à $3 > \alpha > 1/3$ en termes du modèle initial.

3.3.2 Utilisation de la méthode CORE

Le bloc élémentaire choisi est le barreau et, comme pour la théorie des perturbations, nous ne conservons que le singulet $|S\rangle$ et le triplet $|T_{+1}\rangle$. À titre d'exemple, nous nous restreignons ici aux interactions effectives allant jusqu'à une portée 2, ce qui nécessite la résolution de deux barreaux couplés, qui peut se faire analytiquement sans difficulté.

Une fois faite la diagonalisation de $\mathcal{H}_{ech}$ pour deux barreaux, il est immédiat d'appliquer l'algorithme CORE afin d'obtenir un hamiltonien effectif. Dans le langage fermionique, cet hamiltonien effectif est de la forme t-V (voir Eq. I.5) avec :

$$\begin{aligned} t &= J_{\parallel}(1 - \alpha)/2 \\ V &= E_{SS} + \frac{3}{2}J_{\perp} + J_{\parallel}(1 + \alpha)/2 \\ \mu &= -E_{SS} - h - J_{\perp}/2 \end{aligned}$$

où E_{SS} est l'énergie exacte du fondamental pour 2 barreaux. On remarque alors que le paramètre de saut t a la même valeur qu'en théorie de perturbation mais le terme d'interaction V et le potentiel chimique μ subissent une correction.

Maintenant le critère d'existence de plateau à $\langle M \rangle = 1/2$ conduit aux relations suivantes :

$$\frac{3J_{\perp}}{J_{\perp} + J_{\parallel}} > \alpha > \frac{J_{\perp}}{3J_{\perp} - J_{\parallel}}$$

3.3.3 Courbe d'aimantation et diagramme de phase

Nous avons montré que, à la fois la théorie de perturbation et la méthode CORE fournissent un modèle effectif de la forme t-V ou XXZ en langage de spin. Ainsi, la présence d'un plateau pour une valeur égale à la moitié de l'aimantation à saturation, correspond à la phase isolante au demi-remplissage qui existe dans ce modèle lorsque $V/t > 2$.

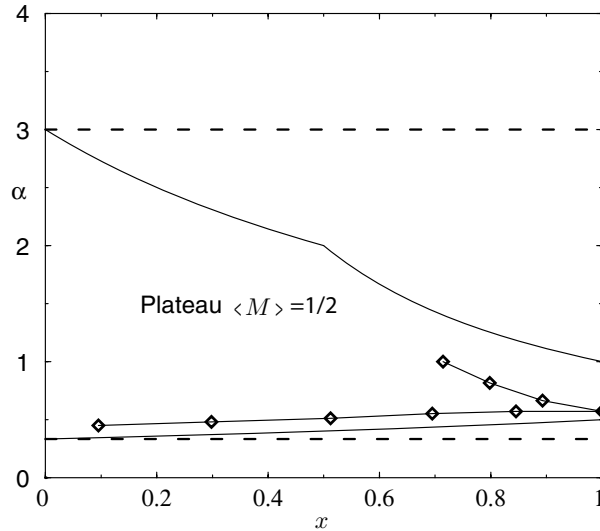


FIG. I.14 – : Diagramme de phase dans le plan $x = J_{\parallel}/J_{\perp}$ et α montrant l'existence d'un plateau pour $\langle M \rangle = 1/2$. Les lignes pointillées représentent les frontières du plateau obtenues en perturbation. Les lignes pleines sont celles obtenues par la méthode CORE. La ligne du haut est la réunion des conditions $\alpha < \frac{3}{1+x}$ et $\alpha < 1/x$ qui limite la région de validité de notre approche. Les diamants sont les résultats de diagonalisation exacte³¹.

Comme nous connaissons les paramètres t , V et μ , nous pouvons indiquer la région où est attendu un plateau pour $\langle M \rangle = 1/2$ dans le diagramme de phase (Fig. I.14). Nous traçons également les limites

de cette phase obtenues par la théorie de perturbation. En outre, nous incluons des résultats numériques obtenus par diagonalisation exacte et extrapolation des résultats de tailles finies³¹.

En regardant cette figure, et sachant que l'effort de calcul est à peine supérieur, l'intérêt de la méthode CORE par rapport à la perturbation est évident : nous trouvons un accord semi-quantitatif là où la perturbation échoue complètement. En outre, l'approche CORE peut facilement inclure les termes de portée supérieures et il serait intéressant de voir comment le diagramme de phase se modifie.

Nous avons montré qu'il est possible d'appliquer, analytiquement, la méthode CORE à des systèmes quasi unidimensionnels comme des échelles de spins, afin d'obtenir un hamiltonien effectif plus simple à traiter. Ce hamiltonien, ici de portée $r = 2$, nous permet de déterminer les conditions d'existence d'un plateau d'aimantation à $\langle M \rangle = 1/2$.

3.4 Projet: Plateaux d'aimantation dans des réseaux bidimensionnels

Nous avons montré que l'approche CORE reproduit correctement la présence de plateaux d'aimantation dans le cas d'échelles de spins frustrés. En faisant une analogie avec une transition métal-isolant, la formation d'un plateau peut être comprise comme la cristallisation de certaines excitations triplet. Ce succès nous motive pour aborder des composés bidimensionnels, tel $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ qui est une réalisation expérimentale du réseau de Shastry-Sutherland. Expérimentalement, des plateaux ont été observés pour $1/8$, $1/4$ et $1/3$ de l'aimantation à saturation^{32,33}. Grâce à l'analogie d'un gaz de particules pour les excitations triplets, on s'attend à ce que ces plateaux proviennent d'une phase à symétrie brisée, ce qui a été confirmé expérimentalement par des mesures locales en RMN³⁴.

Dans ce composé, le fondamental est un produit de dimères. En outre, à cause de la frustration magnétique, les excitations triplets (qui constituent les particules effectives) ont une mobilité réduite, qui renforce la tendance à former des phases isolantes pour des remplissages commensurables, du fait des interactions coulombiennes. De nombreuses explications théoriques ont vues le jour mais il n'existe pas d'explication microscopique satisfaisante pour le plateau à $1/8$, en particulier qui prédise la cellule de la superstructure. Une application de la méthode CORE devrait permettre de calculer les interactions effectives à suffisamment longue portée, puis ensuite de déduire l'existence de phases isolantes ou non, ainsi que la maille élémentaire de la modulation.

Comme nous l'avons mentionné dans le cas unidimensionnel, la présence d'un plateau d'aimantation peut provenir d'un état fondamental qui brise spontanément les symétries du réseau. Dans les composés réels, le couplage entre magnétisme et réseau existe bel et bien et, en collaboration avec Didier Poilblanc, nous projetons d'étudier l'influence du couplage magnéto-élastique sur la stabilité des phases de plateaux. Nous proposons de considérer la possibilité d'un couplage magnétoélastique des spins ($S = 1/2$) du type $(1 + \delta_{ij})\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ où δ_{ij} est lié à la déformation du lien (i,j) du réseau. Dans le cas d'une échelle de spins, l'existence de structure modulée a déjà été prouvée³⁵. Cette étude, couplée à une approche par hamiltonien effectif, permettra d'étendre les résultats existant³⁶.

3.5 Transition de phase quantique pour un réseau plaquette

Nous considérons dans cette partie le réseau plaquette de spins $1/2$ (voir Fig. I.15). Il s'agit d'un réseau formé de plaquettes ayant un échange antiferromagnétique $J = 1$ et le couplage entre les plaquettes J' peut varier. Lorsque le couplage J' est nul, le système se réduit à un ensemble de plaquettes découplées, c'est-à-dire un système désordonné du point de vue magnétique. Au contraire, lorsque $J' = J$, on retrouve le réseau carré de spins $1/2$ en deux dimensions qui possède un ordre de Néel à $T = 0$. Ainsi, il existe une transition de phase quantique en fonction de J' entre une phase magnétique désordonnée et ordonnée.

S'agissant d'un réseau non frustré, cette transition de phase a pu être étudiée précisément par Monte-Carlo quantique, mais également par Diagonalisation Exacte³⁷ et par développements en série³⁸. Ces

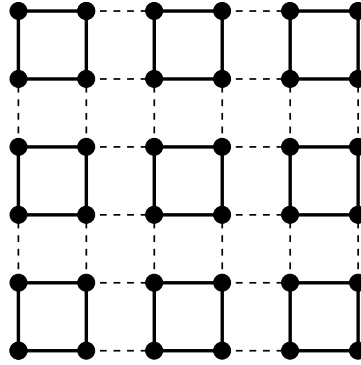


FIG. I.15 – : Réseau 2D de spins $S=1/2$ avec des interactions antiferromagnétiques J sur des plaquettes (traits pleins) et J' entre les plaquettes (traits pointillés).

études établissent qu'il existe bien une transition de phase pour une valeur critique de $J'_c = 0.55$. L'étude de cette transition constitue un test important pour notre méthode puisqu'elle a lieu pour une valeur finie J'_c , ce qui nécessite d'avoir une méthode non perturbative.

3.5.1 Choix du bloc élémentaire

Le point de départ de l'approche CORE est le découpage du réseau. Ici, la cellule élémentaire la plus naturelle consiste en une plaquette de 4 sites. Parmi tous les états sur chaque plaquette, nous ne conservons que le fondamental singulet et le plus bas état triplet, qui correspondent aux états de plus basses énergies (voir la Fig. I.8).

Dans la dérivation du modèle effectif, nous choisissons de ne considérer que les interactions effectives entre plaquettes proches voisines. Afin d'estimer si cette troncation dans la portée des interactions est raisonnable, nous proposons deux idées.

Le premier contrôle de la méthode consiste à visualiser les états retenus dans la procédure CORE parmi le spectre complet de deux plaquettes couplées. Ceci est représenté pour ce modèle sur la Fig. I.16. Il apparaît clairement que les 16 états retenus pour l'espace de Hilbert réduit couvrent une très grande partie des états de basse énergie.

La deuxième technique de contrôle utilise la matrice densité d'un bloc. Cet objet est fondamental dans l'algorithme DMRG de White⁶ et est la clé de son succès. Nous avons proposé de suivre l'évolution de la matrice densité du bloc choisi dans la méthode CORE en fonction du couplage inter-blocs. En pratique, nous calculons le fondamental *exact* de notre modèle sur un système fini et en déduisons la matrice densité d'un bloc élémentaire. Il s'agit d'une grandeur locale et nous avons vérifié qu'il existe peu d'effets de taille.

Les résultats obtenus pour le réseau plaquette sont montrés sur la Fig. I.17. On note que, même à la limite $J' = J$, le poids de la matrice densité sur l'espace de Hilbert réduit dépasse les 90%, ce qui est très satisfaisant et signifie que ces états de basse énergie sont capables de décrire le fondamental exact. Ainsi, nous pouvons nous limiter à des interactions effectives à courte portée.

3.5.2 Étude de la transition de phase quantique

Afin de pouvoir estimer le paramètre d'ordre pour la transition de phase, il est nécessaire de calculer la valeur moyenne d'un opérateur. Celle-ci peut être évaluée dans le cadre de la méthode CORE^{8,11}. Il faut se souvenir en effet que, de manière générale, lors d'une procédure de renormalisation, les opérateurs

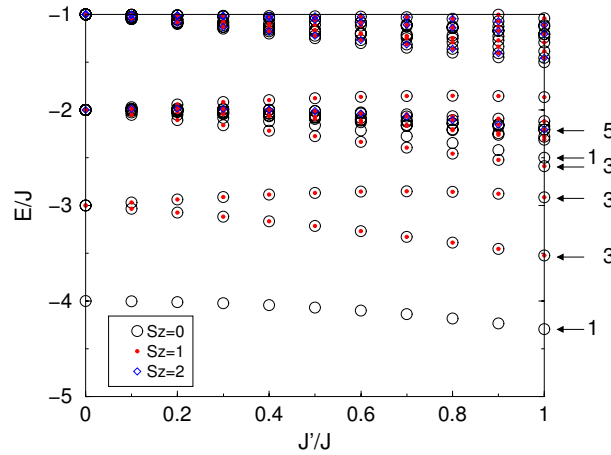


FIG. I.16 – : Spectre exact de basse énergie pour deux plaquettes couplées en fonction de J'/J . Les états retenus par la procédure CORE sont indiqués par des flèches avec leur dégénérescence de spin. Figure extraite de la publication [21].

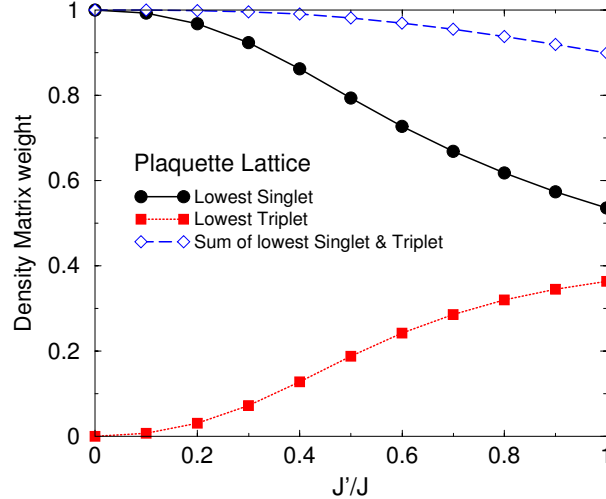


FIG. I.17 – : Contribution des états de l'espace de Hilbert réduit aux poids de la matrice densité exacte d'un système 4×4 en fonction de J'/J . Figure extraite de la publication [21].

doivent également être renormalisés. De manière équivalente, nous pouvons estimer la valeur du paramètre d'ordre en ajoutant explicitement un champs couplé à cet opérateur³⁹.

Soit $\mathcal{O}$ un opérateur brisant une symétrie, tel que le paramètre d'ordre est relié à la valeur moyenne de cet opérateur dans l'état fondamental :

$$m = \frac{1}{N} \langle \psi_0 | \mathcal{O} | \psi_0 \rangle.$$

La présence ou non d'une phase brisant cette symétrie peut être étudiée en ajoutant un champ couplé à cet opérateur dans l'hamiltonien :

$$\mathcal{H}(\delta) = \mathcal{H} - \delta \mathcal{O}$$

Il faut alors suivre la procédure habituelle : prendre d'abord la limite thermodynamique, puis faire tendre le champ δ vers 0. La réponse obtenue correspond au paramètre d'ordre. Il faut bien faire attention à

l'ordre de ces limites car, si on les inverse, on trouve nécessairement 0 pour tout système de taille finie, ce qui conduit à une réponse erronée.

Ainsi, nous pouvons calculer le paramètre d'ordre pour un système de taille finie soumis à un champ δ fini grâce au théorème de Hellmann-Feynman :

$$m(\delta) = \langle \Psi_\delta | \mathcal{O} | \Psi_\delta \rangle = d e(\delta) / d \delta,$$

qui ne nécessite que le calcul de l'énergie. Cette propriété explique la popularité de cette technique pour les méthodes donnant accès facilement à l'énergie, comme le Monte-Carlo de diffusion par exemple.

Dans notre cas, nous sommes intéressés par l'aimantation alternée, qui est le paramètre d'ordre de la phase Néel attendue pour $J' = J$. L'opérateur correspondant est un champ alterné sur les deux sous-réseaux et le hamiltonien devient dans ce cas :

$$\mathcal{H} = J \sum \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \sum_i (-1)^i h S_i^z.$$

L'algorithme de calcul est alors le suivant. Pour chaque valeur de h , il faut dériver le modèle effectif par la méthode CORE. Puis, ces modèles effectifs sont résolus exactement pour plusieurs tailles de système. Enfin, une analyse de taille finie permet de conclure sur la nature de l'état fondamental. Les résultats sont résumés sur la Fig. I.18.

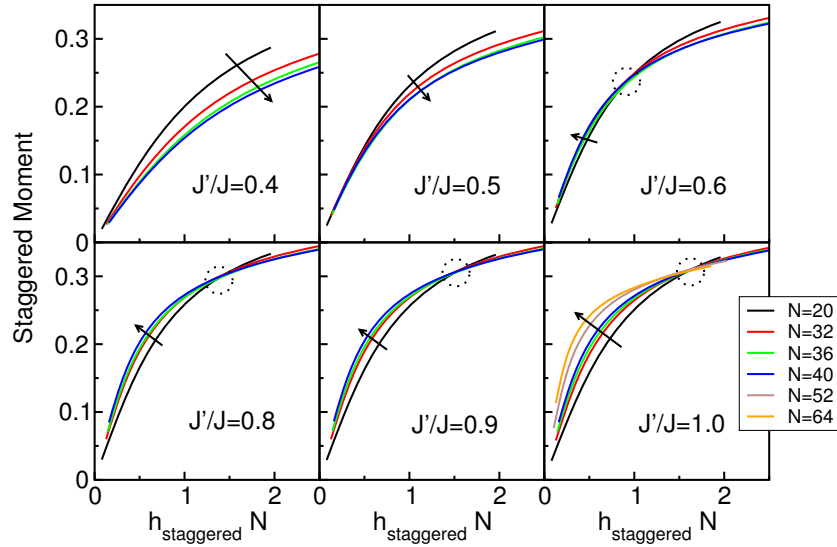


FIG. I.18 – : Aimantation alternée par site en fonction du champ magnétique alterné h multiplié par le nombre de sites N , pour plusieurs valeurs de J'/J . La présence d'un croisement des courbes (cercles) indique la possibilité d'un ordre Néel à longue portée. Nous estimons ainsi la valeur critique entre $0.5 < J'_c/J < 0.6$, en accord avec les résultats connus. Les flèches vont dans le sens des tailles croissantes. Figure extraite de la publication [21].

Ces résultats montrent l'évolution de l'aimantation alternée en fonction du champ appliqué. Nous avons relié l'existence d'un croisement dans ces courbes à la divergence de la pente à l'origine, c'est-à-dire la susceptibilité, ce qui signale une phase ordonnée³⁹. Ce critère indique une transition de phase autour de $J_c/J = 0.55 \pm 0.05$ en excellent accord avec les données existantes.

3.5.3 Tour d'états du modèle de Heisenberg

Afin de vérifier si notre modèle effectif reproduit une grande partie de la physique de basse énergie, nous regardons la tours d'états dans le cas du réseau carré isotrope ($J' = J$) qui possède un ordre de Néel.

L'intérêt de la tour d'états pour une phase avec brisure spontanée de symétrie a été mis en avant par Anderson⁴⁰. Pour n'importe quel système de taille finie, le fondamental a un spin total nul et donc ne possède pas de paramètre d'ordre. Dans la limite thermodynamique, l'état de Néel ordonné magnétiquement se construit comme une superposition d'une infinité d'états quasi dégénérés de spin total S différents (appelés *Quasi Degenerate Joint States* ou QDJS). Sur un système de taille finie de N sites, ces états s'effondrent sur le fondamental avec une énergie caractéristique $JS(S+1)/N$.

Une autre propriété de l'état de Néel, qui brise la symétrie continue de spin $SU(2)$, est l'apparition d'un mode de Goldstone de basse énergie. Il s'agit dans notre exemple des *magnons*. Ce mode a une dispersion linéaire et donc, pour un système de $\sqrt{N} \times \sqrt{N}$ sites, une énergie typique de $J/\sqrt{N}$.

Ces propriétés permettent une comparaison directe avec les résultats numériques de simulations^{41,42}. Nous retrouvons ces deux ensembles d'états de basse énergie sur la Fig. I.19 obtenue en résolvant *exactement* le modèle de Heisenberg sur un système de taille finie ($N = 16$ sites).

Un résultat remarquable est que l'approche CORE, bien que tronquant l'espace de Hilbert, reproduit également ces mêmes caractéristiques. En simulant exactement notre modèle effectif sur un système de taille finie ($N = 36$), nous obtenons la Fig. I.20. Ce résultat pourrait sembler étonnant puisque, comme nous venons de le rappeler, l'état de Néel se construit à partir d'états de spin S variant de 0 à sa valeur maximale ($N/2$); or, notre espace de Hilbert étant réduit, nous avons négligé tous les états de spin total $S > N/4$. En fait, il est connu que l'état de Néel peut être construit avec une très bonne précision à partir seulement des états $S < \sqrt{N}$.

Dans l'étude numérique des tours d'états, il est également crucial de caractériser les nombres quantiques. Puisque nous avons effectué une renormalisation dans l'espace réel avec une cellule 2×2 , nous n'avons plus accès à toutes les impulsions $\vec{k}$ mais nous travaillons avec une zone de Brillouin réduite repliée. Toutefois, nous pouvons fixer les impulsions $\vec{K}$ dans cette zone et nous trouvons des données en accord avec ce qui est attendu pour un ordre de Néel colinéaire : les états QDJS ont une impulsion $\vec{K} = (0,0)$ puisque ce secteur contient entre autres les vecteurs d'onde $\vec{k} = (0,0)$ et $\vec{k} = (\pi,\pi)$.

3.5.4 Conclusion

L'approche utilisant un hamiltonien effectif s'est montrée très précise pour l'étude du réseau plaquette. En se limitant aux plus bas états singulet et triplet sur une plaquette, et à des interactions effectives limitées aux proches voisins, nous sommes capables de décrire à la fois une phase désordonnée magnétiquement et une phase ordonnée de type Néel, ainsi que la transition entre les deux. En outre, pour le réseau isotrope en deux dimensions, nous montrons que notre approche reproduit correctement la physique de basse énergie, contenue dans la tour des états, puisque nous observons à la fois les états quasi dégénérés qui forment l'état de Néel dans la limite thermodynamique, ainsi que les magnons.

Il s'agit d'un résultat hautement non trivial puisqu'il n'est pas évident *a priori* de pouvoir décrire une phase ordonnée magnétiquement à longue portée à l'aide de triplets localisés sur des plaquettes. C'est par conséquent un résultat encourageant pour d'autres études de ce type.

Nous abordons maintenant un système plus complexe, exhibant de la frustration magnétique.

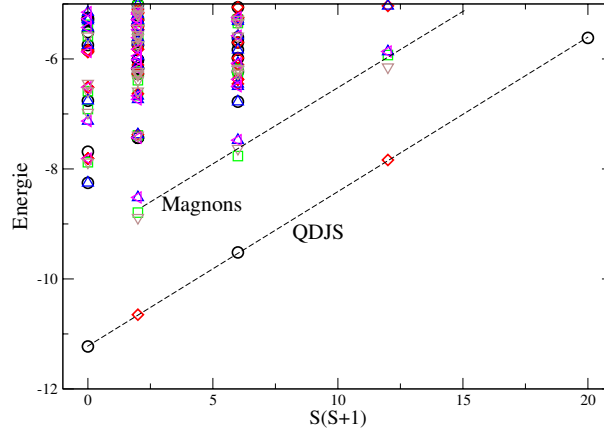


FIG. I.19 – : Tour des états du modèle de Heisenberg pour un réseau carré de 16 sites. On remarque la présence d'états quasi dégénérés (QDJS) ainsi qu'un ensemble d'états magnons clairement séparés du reste du spectre. Les couleurs correspondent à différentes impulsions. Par exemple, les états QDJS ont une impulsion alternativement $(0,0)$ et (π,π) .

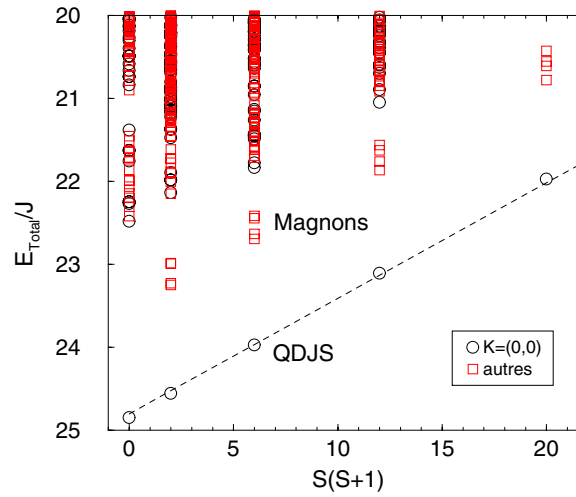


FIG. I.20 – : Tour des états obtenu avec un modèle effectif pour un réseau carré de 36 sites. On remarque la présence d'états quasi dégénérés (QDJS) d'impulsion nulle (dans la zone de Brillouin repliée) ainsi qu'un ensemble d'états magnons clairement séparés du reste du spectre. Figure extraite de la publication [21].

3.6 Physique de basse énergie du réseau *kagomé*

Depuis une dizaine d'années, de nombreux travaux ont contribué à clarifier la physique de basse énergie du réseau *kagomé*^{43–45,28,46} (voir Fig. I.21) pour des spins $1/2$. Pour une revue, on pourra lire les références (42, 47).

Du point de vue théorique, la motivation essentielle est qu'il s'agit, à l'heure actuelle, du seul système pour un modèle de Heisenberg en deux dimensions ayant probablement un état fondamental liquide de spin.

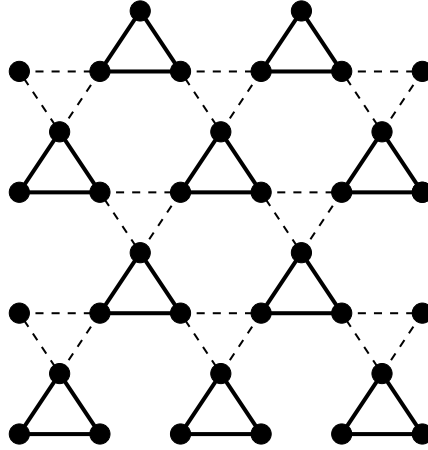


FIG. I.21 – : Réseau *kagomé* de spins $S=1/2$ avec des interactions antiferromagnétiques J sur les triangles pointant vers le haut (en traits pleins) et J' sur les triangles pointant vers le bas (en traits pointillés).

Bien qu'il reste beaucoup de zones d'ombre, voici un rappel de ses propriétés :

- Le fondamental est un singulet ($S = 0$) sans ordre magnétique. En outre, aucun ordre, même exotique, n'a pu être détecté;
- La première excitation magnétique est un triplet ($S = 1$) séparé par un gap d'ordre $J/20$;
- Le spectre présente un continuum d'états dans les tous les secteurs de spin. En particulier, il existe un nombre exponentiel d'excitations singulet sous le gap de spin : $\mathcal{N}_{\text{singulets}} \sim 1.15^N$;
- Ces états singulets peuvent être compris en considérant les états *Resonating Valence Bond* (RVB) à courte portée.

Au point de vue expérimental, il existe surtout des composés de plus hauts spins $S = 3/2, 5/2 \dots$ exhibant une physique très anormale à basse température : des composés de la famille $\text{SrCr}_{9-x}\text{Ga}_{3+x}\text{O}_{19}$ exhibent une chaleur spécifique en T^2 à basse température, insensible à un champ magnétique⁴⁸; des mesures de dynamique de spin montrent un signal résiduel à très basse température dans des jarossites⁴⁹ etc. Récemment, des composés volborthites $S = 1/2$ ont pu être étudiés et montrent des caractéristique d'un liquide de spin⁵⁰. Ainsi, il serait souhaitable de pouvoir étudier plus en détails ces modèles en fonction de la valeur du spin.

Nous avons donc utilisé l'approche CORE pour des réseaux *kagomé* de spin $1/2$ et $3/2$, éventuellement anisotropes avec un rapport des couplages $\alpha = J'/J$ selon le type de triangle (voir Fig.I.21). Pour plus de détails, on lira la publication [21].

3.6.1 Choix de la base réduite

De même que dans la théorie des perturbations, nous choisissons comme bloc élémentaire un des types de triangle (pointant vers le haut par exemple, voir Fig. I.21) et nous ne conservons que les deux

doublets dégénérés fondamentaux, décrits par une variable de spin $\vec{\sigma}$ et un pseudospin $\vec{\tau}$.

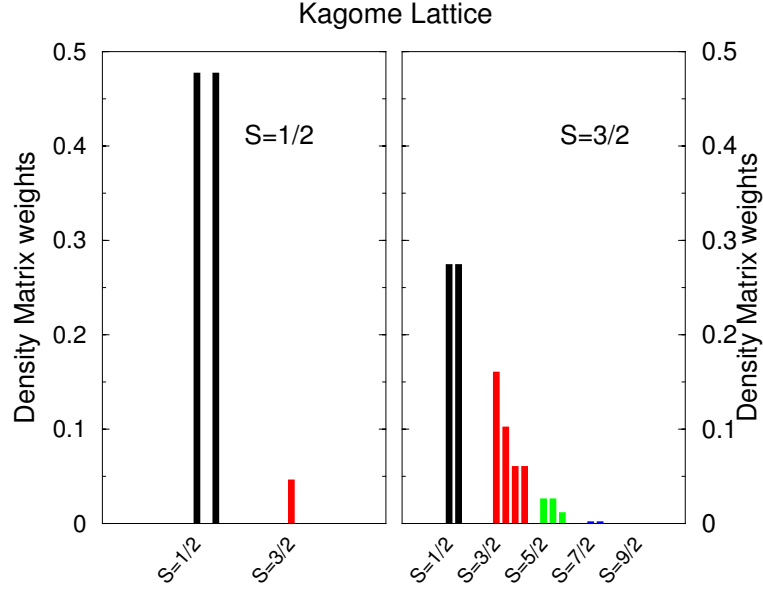


FIG. I.22 – : Contribution des états de l'espace de Hilbert réduit sur un triangle aux poids de la matrice densité exacte d'un système de 12 sites kagomé pour des spins $S = 1/2$ et $S = 3/2$. Figure extraite de la publication [21].

L'intérêt de comparer les différents modèles de spin demi-entiers est que la théorie de perturbation en α est similaire. En généralisant le calcul de Mila²⁸, qui a considéré le cas $S = 1/2$, on peut dériver le premier ordre en perturbation en α pour des spins demi-entiers avec S quelconque :

$$\mathcal{H}^{\text{pert.}} = \frac{\alpha}{9} \vec{\sigma}_i \cdot \vec{\sigma}_j (1 - 2(2S + 1) \vec{\tau}_i \cdot \vec{e}_a) (1 - 2(2S + 1) \vec{\tau}_j \cdot \vec{e}_b)$$

où les vecteurs $\vec{e}$ correspondent à un des trois vecteurs unités $\vec{e}_1 = (1, 0)$, $\vec{e}_2 = (-1/2, \sqrt{3}/2)$ ou $\vec{e}_3 = (-1/2, -\sqrt{3}/2)$, selon le type de lien.

Afin de vérifier la pertinence de cette base pour l'approche CORE, nous utilisons la matrice de densité réduite d'un triangle dans un plus grand système (cf. Fig. fig:PlaquetteDensityMatrix de la partie précédente et la discussion associée). Sur la Fig. I.22, nous montrons les résultats : dans le cas $S = 1/2$, le poids total du fondamental sur les états de l'espace de Hilbert réduit dépasse 95% mais il n'est que de 55% lorsque $S = 3/2$. Nous en déduisons qu'on peut raisonnablement se limiter à des interactions effectives à courte portée pour le cas $S = 1/2$ et ceci valide l'approche perturbative²⁸; par contre, lorsque $S = 3/2$, il faut soit augmenter le nombre d'états par blocs, soit augmenter la portée des interactions effectives, ce qui rend ce calcul plus coûteux.

3.6.2 Simulations du modèle effectif pour $S = 1/2$

À nouveau, nous décidons d'étudier les modèles effectifs obtenus par Diagonalisation Exacte. L'espace de Hilbert réduit nous permet d'avoir accès à de plus grands systèmes et nous nous concentrons ici sur le cas des couplages isotropes $\alpha = 1$.

Afin de valider les propriétés de basse énergie de notre modèle effectif, nous calculons la tour d'états pour un système de $N = 27$ sites. Une discussion de l'importance de cet objet est donnée dans la partie

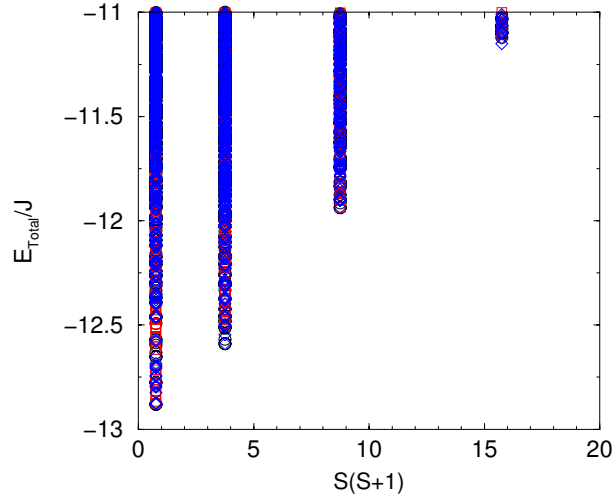


FIG. I.23 – : Tour des états du réseau kagomé de spin $1/2$ obtenu pour le modèle effectif sur un système de $N = 27$ sites. On observe un très grand nombre d'états de basse énergie dans chaque secteur de spin total S . Les symboles correspondent à différentes impulsions. Figure extraite de la publication [21].

correspondant au réseau plaquette (voir Fig. I.20). La comparaison de nos résultats (Fig. I.23) avec la tour d'états d'un système ordonné magnétiquement (Fig. I.20 ou Fig. I.19) illustre clairement la différence :

- Il n'existe pas d'ensemble d'états quasi dégénérés de basse énergie (QDJS), ce qui exclut *tout* ordre magnétique dans la limite thermodynamique.
- Il existe au contraire une prolifération d'états de basse énergie dans tous les secteurs de spin total S , ce qui est en excellent accord avec des données antérieures obtenues sur de plus petits systèmes⁴⁴.

Nous avons également calculé le gap de spin pour plusieurs systèmes de taille finie. À présent, il est «admis» la présence d'un gap d'ordre $0.05 J$ (voir la référence (45)). Quand on voit le comportement des résultats exacts (obtenus jusqu'à une taille de $N = 36$ et rappelés sur la Fig. I.24) et la faible valeur de ce gap, il convient quand même d'être prudent sur cette extrapolation. Nous avons considéré deux troncations différentes sur la portée des interactions effectives, incluant jusqu'à des interactions à 3 corps. Hormis les résultats obtenus sur de petits systèmes (ce qui cause toujours une difficulté dans l'approche CORE), nos données semblent systématiquement encadrer les résultats exacts. La précision de ces données reste tout de même insuffisante; toutefois, nous n'observons aucun changement sur les deux plus grandes tailles de système ($N = 36$ et $N = 48$), ce qui semble indiquer une saturation exponentielle du gap. En effet, une extrapolation linéaire en $1/N$ sous-estime systématiquement le gap puisque, à cause des conditions aux bords périodiques, celui-ci a un comportement $\exp(-L/\xi)$. Ainsi, il est possible que le gap soit plutôt compris entre $0.1 J$ et $0.2J$ et la longueur de corrélation associée soit d'ordre 6 à 7. En tous les cas, ces résultats sont compatibles avec un gap de spin fini.

Enfin, nous déterminons le nombre d'états non magnétiques d'énergie inférieure au gap de spin. Des études par diagonalisation exacte ont montré que ce nombre augmentait exponentiellement avec le nombre de sites^{44,45}. Sur la Fig. I.25, nous comparons nos résultats à ces données. À l'aide d'un simple hamiltonien effectif limité aux interactions proches voisines, nous reproduisons correctement la croissance exponentielle de ces états, à la fois sur des systèmes de taille paire et impaire. Par exemple, pour le système avec $N = 39$ sites, nous trouvons 506 états sous la première excitation magnétique.

En conclusion, nos résultats valident la pertinence de la base réduite, qui consiste à ne conserver que deux doublets dégénéré par triangle *up*. En particulier, la prolifération d'états singulets de basse énergie est en accord avec les données expérimentales et numériques sur ce modèle.

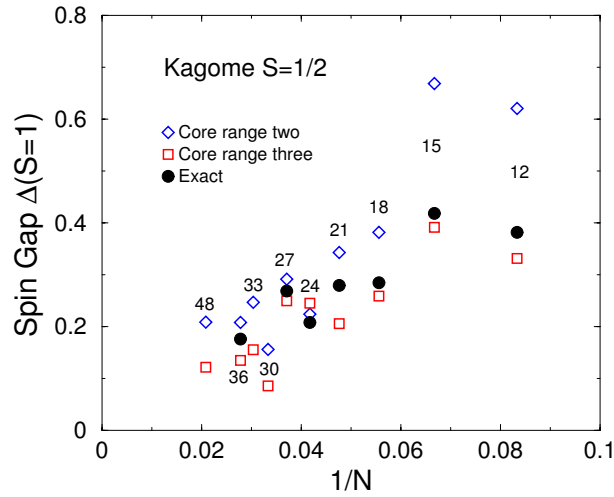


FIG. I.24 – : Gap de spin du réseau kagomé de spin $S = 1/2$ pour plusieurs échantillons, obtenus par diagonalisation exacte soit du modèle de Heisenberg (exact), soit à partir d'un modèle effectif incluant des interactions jusqu'à une portée de 2 ou 3 triangles (range two et three respectivement). Figure extraite de la publication [21].

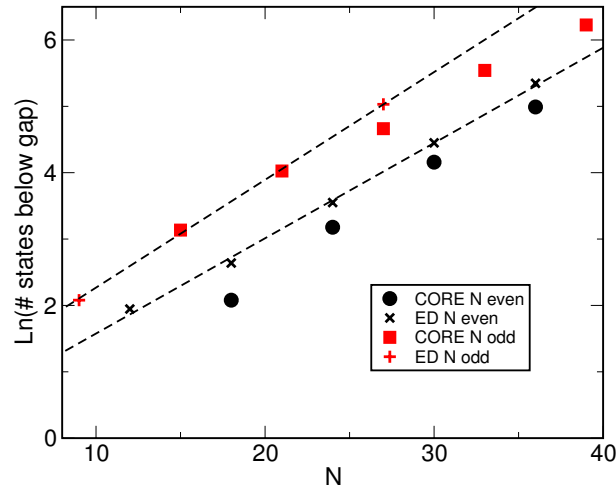


FIG. I.25 – : Nombre d'états de basse énergie sous la première excitation magnétique en échelle semi-logarithmique. Ces résultats sont obtenus avec notre hamiltonien effectif et comparés aux résultats exacts des références (44, 45). Figure extraite de la publication [21].

Enfin, nous mentionnons une étude complémentaire utilisant également l'approche CORE pour ce même modèle¹⁶. À l'aide d'un argument variationnel, Budnik et Auerbach concluent à un fondamental avec un ordre colonnaire de dimères, possédant un très faible gap singulet.

3.6.3 Projet : Simulations du modèle effectif

Notre modèle effectif semble un meilleur point de départ, par rapport au calcul perturbatif, pour d'autres approches. Par exemple, il est possible de faire une approximation classique pour les variables de spin et pseudo-spin, ce qui permet de simuler le modèle par Monte-Carlo classique. Une telle étude

réalisée à partir du résultat perturbatif a fourni des renseignements intéressants sur la dynamique lente à très basse température qui est similaire à celle observée dans des verres de spins⁵¹. Il serait envisageable d'effectuer un calcul similaire à partir de notre modèle effectif.

3.6.4 Projet : Simulations pour $S = 3/2$

Nous avons simulé le modèle effectif obtenu pour des spins $S = 3/2$, avec la même approximation que dans le cas précédent. Malheureusement, le fondamental obtenu est un état polarisé, ce qui ne correspond pas à la physique attendue pour un état antiferromagnétique. Nous avons relié cette pathologie aux mauvais résultats obtenus pour la matrice densité réduite dans cette base (voir la Fig. I.22) ainsi qu'au mélange des états de basse énergie observé dès que l'on couple deux triangles. En fait, nos outils de diagnostic quant à la fiabilité de la méthode CORE nous indiquent clairement l'échec d'une approximation consistant à négliger les interactions effectives de plus longues portées.

Afin de pallier ce problème, il semble nécessaire d'inclure plus d'états par blocs, ce qui va rendre l'hamiltonien effectif plus difficile à résoudre mais cela semble actuellement la seule méthode alternative aux Diagonalisations Exactes capable de permettre l'étude de ce système, dont il existe des réalisations expérimentales.

I.4 Étude des systèmes dopés

Le succès de l'approche CORE pour les systèmes magnétiques isolants nous a conduits à l'appliquer également au cas d'un dopage fini. Dans ce chapitre plus méthodologique, nous discuterons le cas des échelles de spin dopées ainsi que les projets futurs; dans le chapitre suivant, nous présenterons notre contribution, à l'aide de cette technique entre autres, au problème du diagramme de phase des supraconducteurs à haute température critique.

4.1 Fermions libres en une dimension

Nous commençons par un exemple proposé par Altman et Auerbach¹¹ et qui illustre les qualités de l'approche CORE. Il s'agit d'une chaîne de fermions libres :

$$H = - \sum_i c_i^\dagger c_{i+1} + c_{i+1}^\dagger c_i$$

Ce modèle de liaison forte possède une solution élémentaire et la dispersion pour une particule est simplement $-2 \cos(k)$.

Afin d'appliquer l'algorithme CORE, le bloc élémentaire est formé de 2 sites et nous ne retenons, outre l'état vide, qu'un seul état à un électron :

$$f_i^\dagger = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c_{2i}^\dagger + c_{2i+1}^\dagger \right).$$

À partir de là, nous pouvons calculer l'hamiltonien effectif en incluant plusieurs portées r d'interaction. Dans le secteur à une particule, ces hamiltoniens ont une forme de modèle de liaison fortes avec des sauts à plusieurs distances et il est très facile de tracer les dispersions correspondantes (voir la Fig. I.26).

Ayant réduit l'espace de Hilbert, nous ne pouvons au mieux que reproduire la moitié des énergies et nous travaillons donc dans la zone de Brillouin réduite $[-\pi/2, \pi/2]$. Les différentes approximations convergent très rapidement vers le résultat exact, sauf en bord de zone où il n'est pas possible d'obtenir la bonne pente. Cette limitation n'est pas gênante dans la plupart des cas et ce succès de la méthode CORE contraste avec l'échec de l'approche naïve dans ce cas.

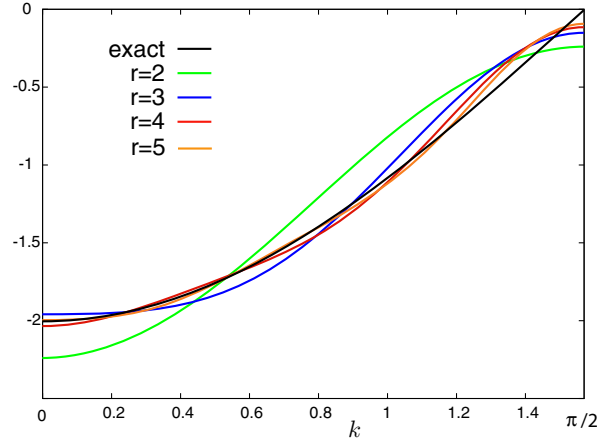


FIG. I.26 – : *Dispersions obtenues par la méthode CORE pour le modèle de liaisons fortes. Les courbes correspondent à différentes troncations des interactions effectives et convergent rapidement vers la solution exacte, exceptée en bord de zone (d'après la référence (11)).*

4.2 Échelles de spin dopées

L'étude théorique d'échelles de spins présente un grand intérêt car de tels systèmes ont un comportement intermédiaire entre les systèmes uni- et bi-dimensionnels²⁰. La différence est que les systèmes métalliques de dimension $D > 2$ sont décrits par la théorie du *liquide de Fermi*, alors que les systèmes en $D = 1$ font appel à la théorie du *liquide de Luttinger*.

Ces systèmes sont également intéressants car leur dimensionnalité réduite permet d'utiliser à la fois des techniques analytiques et numériques performantes. Toutefois, les systèmes d'électrons fortement corrélés dont le mouvement est contraint selon une seule dimension ne constituent pas une vue de l'esprit. Il existe de nombreuses réalisations expérimentales de systèmes possédant des chaînes faiblement couplées entre elles. L'anisotropie des couplages permet alors de considérer, avec une bonne approximation, que les processus d'échange magnétique ou bien de saut électroniques sont restreints en une seule dimension.

Au demi-remplissage, l'état fondamental d'une échelle à deux montants peut être compris comme un produit de liens singulets sur les barreaux. Ainsi, l'excitation d'un triplet nécessite de briser un de ces singulets et il existe un gap de spin fini. Pour la même raison, si deux trous sont introduits dans ce système, ils vont avoir intérêt à s'apparier, ce qui suggère une tendance à la supraconductivité. Expérimentalement, une phase supraconductrice sous pression a été découverte⁵² pour le composé $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$. Cet oxyde de cuivre étant plus simple que ses cousins bidimensionnels, son étude pourrait apporter des informations précieuses sur la physique de ces modèles.

Notre groupe s'est particulièrement investi dans l'étude des échelles dopées et je co-encadre actuellement la thèse de Guillaume Roux qui travaille sur cette thématique.

4.2.1 Approche CORE

Notre équipe ayant beaucoup d'expérience sur la physique de ces échelles, nous avons choisi ces systèmes afin d'étudier la pertinence de l'approche CORE pour les systèmes dopés.

Le modèle t-J pour une échelle s'écrit :

$$\mathcal{H} = J_{\text{leg}} \sum_{i,a} \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i+1,a} + J_{\text{rung}} \sum_{i,a} \vec{S}_{i,a} \cdot \vec{S}_{i,a+1}$$

$$+ t_{\text{leg}} \sum_{i,a} (c_{i,a}^\dagger c_{i+1,a} + h.c.) + t_{\text{rung}} \sum_{i,a} (c_{i,a}^\dagger c_{i,a+1} + h.c.),$$

où $c_{i,a}$ sont les opérateurs fermioniques projetés. Afin de considérer un régime loin de la validité de la théorie de perturbations, nous choisissons de travailler avec des valeurs de couplage identiques suivant les barreaux et les montants : $t_{\text{leg}} = t_{\text{rung}} = 1$ et $J_{\text{leg}} = J_{\text{rung}} = J$.

Nous choisissons comme cellule élémentaire une plaquette de 4 sites (voir la Fig. I.27). Parmi le spectre complet, nous ne conservons que les plus bas états en énergie. Au demi-remplissage, nous ne gardons que l'état fondamental singulet et la première excitation triplet (t_α). Comme cela a été vu plus haut, ces états donnent une très bonne description de la phase isolante. Hors du demi-remplissage, nous considérons deux approximations :

- Approximation *B*: on ne garde que l'état singulet le plus bas possédant une paire de trous (noté b et qui possède la symétrie d sur une plaquette).
- Approximation *BF*: on conserve en plus 4 états fermioniques correspondant aux états fondamentaux dégénérés ($S_z = \pm 1/2$ et chiralité) d'une plaquette possédant un seul trou.

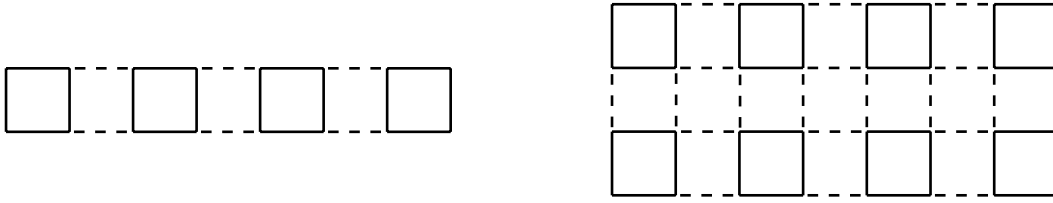


FIG. I.27 – : Décomposition en blocs (plaquettes 2×2) utilisée dans la méthode CORE pour une échelle à deux montants (à gauche) ou à quatre montants (à droite).

En appliquant l'algorithme CORE, nous pouvons déduire les interactions effectives entre ces degrés de liberté en nous limitant aux interactions proches voisines. Dans l'approximation *B*, nous obtenons l'hamiltonien effectif suivant, composé de plusieurs termes :

$$\mathcal{H}^b = \epsilon_0 + \epsilon_b \sum_i b_i^\dagger b_i - J_c \sum_{\langle ij \rangle} (b_i^\dagger b_j + \text{H.c.}) \quad (\text{I.6})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^t &= \epsilon_t \sum_{i\alpha} t_{\alpha i}^\dagger t_{\alpha i} - \frac{J_s}{2} \sum_{\alpha \langle ij \rangle} (t_{\alpha i}^\dagger t_{\alpha j} + \text{H.c.}) - \frac{J'_s}{2} \sum_{\alpha \langle ij \rangle} (t_{\alpha i}^\dagger t_{\alpha j}^\dagger + \text{H.c.}) \\ \mathcal{H}^{\text{int}} &= V_b \sum_{\langle ij \rangle} n_{bi} n_{bj} + \sum_{\langle ij \rangle} [V_0 (t_i t_j)_0^\dagger (t_i t_j)_0 + V_1 (t_i t_j)_1^\dagger (t_i t_j)_1 + V_2 (t_i t_j)_2^\dagger (t_i t_j)_2] \\ &\quad - J_{bt} \sum_{\langle ij \rangle \alpha} (b_i^\dagger b_j t_{\alpha j}^\dagger t_{\alpha i} + \text{h.c.}) + V_{bt} \sum_{\langle ij \rangle \alpha} (b_i^\dagger b_i t_{\alpha j}^\dagger t_{\alpha j} + b_j^\dagger b_j t_{\alpha i}^\dagger t_{\alpha i}), \end{aligned} \quad (\text{I.7})$$

où le terme $(t_i t_j)_S^\dagger$ crée deux triplets sur des plaquettes voisines i et j , dans un état de spin total S .

Cet hamiltonien effectif comprend de nombreuses interactions et il peut servir de point de départ pour d'autres approches, analytiques ou numériques. Les valeurs des paramètres sont données dans la table I.1 et elles sont compatibles avec celles obtenues pour le modèle de Hubbard¹¹.

4.2.2 Modèle de basse énergie pour des échelles dopées à deux montants

Avec D. Poilblanc (Toulouse), nous avons voulu vérifier si ce modèle effectif était capable de reproduire la physique de basse énergie d'une échelle t-J, à deux ou quatre montants. Ces résultats sont détaillés dans la publication [16].

J	ϵ_0	ϵ_b	ϵ_t	J_s	J'_s	J_c
0.35	-3.8895	-3.5340	0.1379	0.2128	0.2319	0.2139
0.5	-5.5564	-3.0919	0.1970	0.304	0.3112	0.2174

J	J_{bt}	V_b	V_0	V_1	V_2	V_{bt}
0.35	-0.0709	1.0345	-0.1244	-0.0928	0.0412	-0.3298
0.5	-0.1044	0.8326	-0.1777	-0.1326	0.0588	-0.3325

TAB. I.1 – : Paramètres de $\mathcal{H}^B$ (en unités de t) calculés à partir de deux plaquettes 2×2 , pour le modèle t - J .

Afin de valider la méthode CORE pour des systèmes dopés, nous avons considéré d'abord le cas le plus simple d'une échelle de spins à deux montants dopée. Proche du demi-remplissage, ce système montre un gap de spin robuste et la formation de paires de trous^{53,54}. En une dimension, il n'est pas possible d'avoir un ordre à longue portée mais les corrélations de paires (de symétrie $d_{x^2-y^2}$) sont dominantes et décroissent en loi de puissances, ce qui est caractéristique d'une phase critique. En outre, les corrélations de charge dominantes ont pour vecteur d'onde $4k_F$. Cette phase est appelée un *liquide de Luther-Emery*.

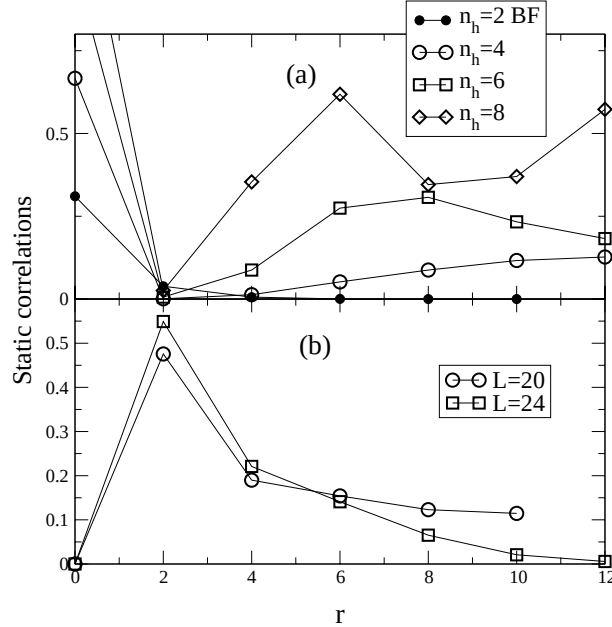


FIG. I.28 – : Corrélations en fonction de la distance r dans des échelles t - J $2 \times L$ avec $J = 0.5$. (a) Corrélations de charge sur les plaquettes pour $L = 24$. L'approximation BF (resp. B) est utilisée pour 2 trous (resp. 4, 6 et 8 trous). (b) Corrélation densité de trous- S_z dans le premier état triplet pour des échelles 2×20 and 2×24 dopées avec 2 trous (approximation B).

Nous avons montré que le modèle effectif bosonique ainsi obtenu est capable de reproduire semi-quantitativement les propriétés physiques de ce système telles que la valeur du gap de spin en fonction du dopage. Sur la Fig. I.28, nous montrons les corrélations de charge qui montrent à la fois la présence de paires dans le système (pour 2 trous) et la tendance à former une onde de densité de charge pour plusieurs paires. En outre, pour un dopage de 2 trous et en forçant à avoir un triplet dans le système, nous observons un appariement de ces deux entités, qui représente un état lié. La présence d'un état lié paire-magnon dans ce système est un ingrédient important⁵⁵ qui a des conséquences expérimentales et qui peut être comparé à d'autres approches plus phénoménologiques. Le succès de notre hamiltonien effectif est due à

la prise en compte de ces corrélations à courte distance dans la déduction des interactions effectives.

L'étude de la dynamique de spin dans une échelle dopée (publication [20]) montrent que l'état lié paire-magnon qui existe à faible dopage évolue en une excitation magnétique bien définie à dopage fini (voir la Fig. I.29). Ces résultats ont été obtenues en combinant l'approche CORE avec les diagonalisations exactes et le DMRG. Cette excitation pourrait donner des indications sur le mystérieux mode magnétique observé et discuté dans le contexte des supraconducteurs à haute température critique⁵⁶. Nous pouvons également calculer la dépendance en impulsion et en fréquence de ce gap supraconducteur (publication [18]), ce qui nous renseigne sur la structure interne d'une paire élémentaire ainsi que sur sa dynamique. Cette approche pourrait être systématiquement appliquée à d'autres modèles censés décrire la supraconductivité non conventionnelle.

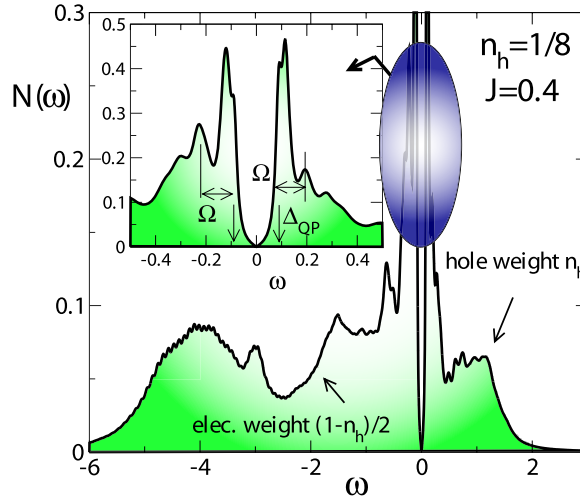


FIG. I.29 – : Densité d'états pour une échelle t - J avec un dopage $1/8$. L'agrandissement à basse énergie montre des structures pour une énergie Ω comparable à celle de l'excitation magnétique. Ceci pourrait signaler la diffusion d'une quasi-particule par cette excitation. Figure extraite de la publication [20].

S'agissant d'une phase Luther-Emery, ses fonctions de corrélations critiques ne dépendent que d'un seul exposant K_ρ (un seul mode de charge critique). Il est généralement difficile d'estimer l'exposant d'une loi de puissance à partir de données obtenues sur de petits systèmes. Cependant, l'utilisation de la théorie conforme permet de relier cet exposant à des quantités thermodynamiques qui sont plus facilement accessibles au calcul numérique⁵⁷. Nous montrons dans la table I.2 quelques valeurs de K_ρ obtenues à partir du calcul du poids de Drude et de la compressibilité, en utilisant l'hamiltonien effectif $\mathcal{H}^B$. Ces valeurs sont tout à fait comparables aux résultats déjà connus dans la littérature (diagonalisations exactes^{58,59} et DMRG⁶⁰). Ce paramètre gouverne la loi de décroissance des corrélations supraconductrices et onde de densité de charge, qui sont les seules à avoir un comportement en lois de puissance. Enfin, il faut mentionner que la compétition entre supraconductivité et mise en ordre de charge est observée expérimentalement⁶¹ dans le composé $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$.

dopage	14.3% ^b	12.5% ^a	10.7% ^b	8.3% ^a	7.1% ^b	4.2% ^a	3.6% ^b
K_ρ	0.559	0.602	0.668	0.753	0.798	0.914	0.920

TAB. I.2 – : Paramètre K_ρ caractérisant la théorie effective Luther-Emery en fonction du dopage calculé sur des systèmes 2×24 (^a) et 2×28 (^b) dans l'approximation B avec $J/t = 0.5$.

4.2.3 Modèle de basse énergie pour des échelles à quatre montants

Nous avons également considéré le cas de l'échelle à quatre montants. En effet, bien que la physique demeure qualitativement la même, les échelles d'énergie sont réduites par rapport au cas précédent : le gap de spin au demi-remplissage passe de $0.50 J$ pour l'échelle à deux montants à $0.190 J$ dans le cas de quatre montants²¹. L'augmentation de la longueur de corrélation va limiter la précision des méthodes exactes et des études faites par DMRG qui sont limitées par l'utilisation de conditions aux bords ouvertes. Notre nouvelle approche utilisant un modèle effectif permet de simuler des systèmes avec conditions aux bords périodiques, ce qui réduit les effets de taille finie et élimine les effets de bords.

En simulant notre modèle effectif dans cette géométrie, nous trouvons qualitativement la même physique que pour l'échelle à deux montants. En particulier, il semble exister un état lié paire-magnon dans la limite de faible dopage.

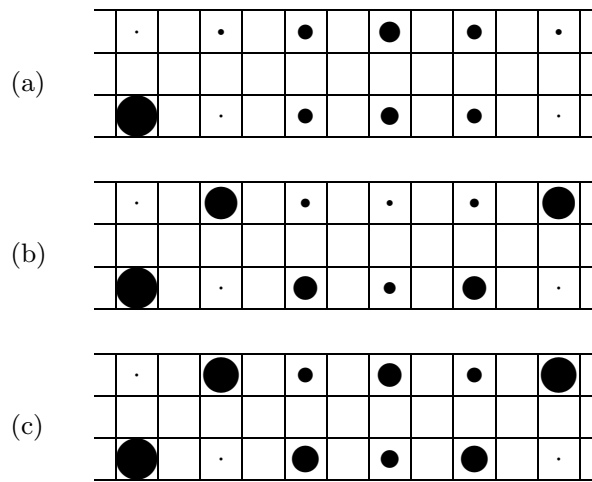


FIG. I.30 – : Fonctions de corrélation densité-densité pour les paires de trous sur une échelle 4×12 avec $J/t = 0.35$. Les conditions aux bords périodiques sont utilisées le long des chaînes et les corrélations sont mesurées par rapport à la plaquette de référence en bas à gauche. De haut en bas, le nombre de trous vaut $n_h = 4, 6, 8$. La surface des disques est proportionnelle à la valeur des corrélations. (Figure extraite de la publication [16]).

À dopage plus élevé, les corrélations de densité indiquent une tendance pour les paires de trous à former des structures diagonales, avec une périodicité de une paire de trous pour deux plaquettes (voir la Fig. I.30). Ce comportement a effectivement déjà été observée dans des simulations DMRG^{62,63} et évoque la formation de *stripes* diagonales.

4.2.4 Conclusion

L'approche CORE s'est révélée efficace pour la détermination des paramètres de modèles effectifs à partir d'un hamiltonien microscopique t-J. Il a été proposé dans le passé d'utiliser des modèles effectifs bosoniques^{60,63} afin de décrire ces systèmes mais les paramètres devaient être déduits à partir de simulations DMRG. L'approche CORE a l'avantage de pouvoir fournir ces valeurs à partir de la résolution exacte du modèle microscopique sur de petits amas et donne un accord qualitatif avec les approches alternatives. Un tel modèle effectif permet déjà des simulations sur des systèmes plus grands que pour le modèle initial. En nous limitant aux excitations bosoniques, nous sommes capables de retrouver la phase Luther-Emery qui existe à faible dopage, ainsi qu'une propriété majeure des échelles dopées : l'existence d'un état lié

paire de trous-magnon, qui doit avoir des signature expérimentales.

Pour une échelle à quatre montants, nous confirmons la tendance à la formation de *stripes* diagonales, sans introduire de biais via les conditions aux limites puisque nous conservons des conditions périodiques. Enfin, ces modèles bosoniques, bien que très satisfaisants, peuvent être améliorés en incluant des degrés de liberté fermioniques.

Ainsi, la compétition entre supraconductivité et mise en ordre de charge dans les échelles dopées peut être décrite à partir de modèles effectifs fiables.

4.3 Projet : Solide de liens de valence dans des réseaux frustrés dopés

En collaboration avec M. Indergand et M. Sigrist (Zürich) et A. Läuchli, nous étudions la possibilité d'observer une transition de Peierls dans certains systèmes frustrés et dopés. Il est possible d'avoir une brisure spontanée de la symétrie du réseau, uniquement due aux corrélations électroniques et sans faire intervenir les degrés de liberté du réseau. Les réseaux en question sont constituées d'unités où tous les sites interagissent entre eux (triangles ou tétraèdres) et ces blocs partagent des sommets en commun (voir la Fig. I.31).



FIG. I.31 – : Les réseaux kagomé et pyrochlore sont formés d'unités (triangle ou tétraèdre) partageant leurs sommets.

En considérant la limite où ces blocs sont découplés, il est possible de construire un état fondamental non dégénéré obtenu en plaçant 2 électrons par cellule. Dans le cas d'un modèle t-J, cet état permet de gagner à la fois de l'énergie cinétique et de l'énergie d'échange, ce qui le rend très stable et crée un gap fini vers toutes les excitations possibles. La question pertinente est de savoir si ces gaps vont persister dans la limite des couplages isotropes.

Puisqu'il s'agit de considérer la limite isotrope, loin du domaine de validité de la théorie de perturbation, nous avons utilisé l'algorithme CORE afin d'obtenir un modèle effectif plus simple. Les simulations numériques de cet hamiltonien, couplées à des arguments analytiques et des simulations numériques exactes, suggèrent que le scénario de la transition de Peierls à dopage fini se produit dans ces réseaux, pour des valeurs réalistes des couplages.

Chapitre II

ÉTUDE DES SUPRACONDUCTEURS À HAUTE TEMPÉRATURE CRITIQUE

Un sujet majeur de la physique des solides est l'étude des composés à base d'oxydes de cuivre présentant une phase supraconductrice jusqu'à une température relativement élevée (le record actuel à pression ambiante est de 138 K). La compréhension du mécanisme sous-jacent reste un enjeu actuel à la fois du point de vue théorique et expérimental, et ce domaine demeure un vaste sujet d'investigation.

Le point commun de ces matériaux, découverts en 1986, est la présence de couches bidimensionnelles de plans CuO_2 séparés par des réservoirs de charge (voir la Fig. II.1), qui fournissent des porteurs de charge dans les plans, généralement des trous. Dès 1989, il a cependant été possible de doper ces oxydes en électrons ($\text{Pr}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$ et $\text{Nd}_{2-x}\text{Ce}_x\text{CuO}_4$) et là encore, une poche supraconductrice a été observée⁶⁴.

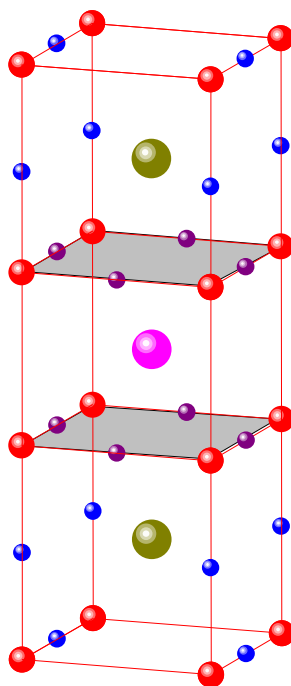


FIG. II.1 – : Maille du composé $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_7$ contenant deux plans CuO_2 en gris.

L'intérêt de ces matériaux est qu'ils constituent une illustration de la physique des corrélations fortes. Par exemple, à dopage nul, un calcul de bandes négligeant les corrélations prédit un comportement *métallique*; expérimentalement, une phase antiferromagnétique *isolante* est observée. Le caractère isolant est donc dû à la présence de corrélations fortes et il s'agit d'un isolant de Mott.

II.1 Motivations expérimentales

L'introduction de porteurs de charge dans les plans s'effectue soit par substitution, soit par ajout d'oxygène, et peut conduire à une supraconductivité non conventionnelle⁶⁵, de symétrie d . Nous rappelons le diagramme de phase générique sur la Fig. II.2.

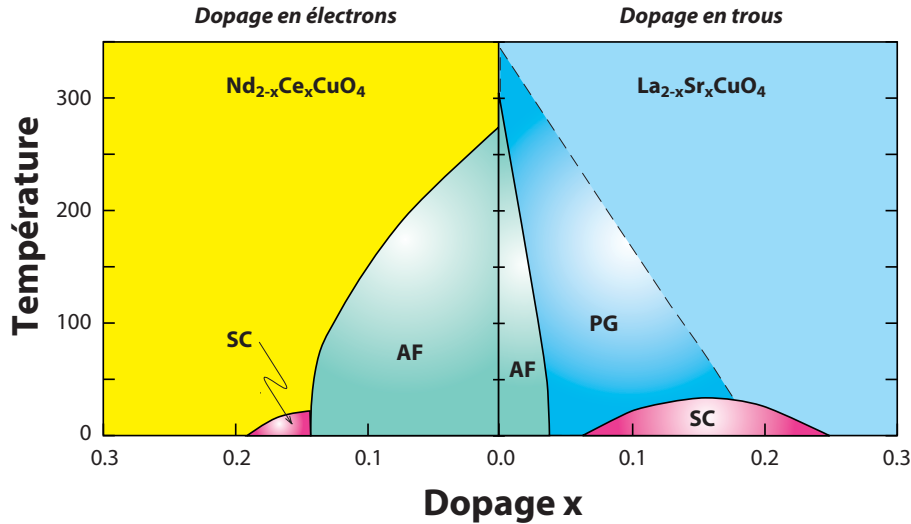


FIG. II.2 – : Diagramme de phase typique température-dopage des oxydes de cuivre supraconducteurs dopés n ou p . Les phases remarquables sont : antiferromagnétisme (AF), supraconductivité (SC) et pseudo-gap (PG).

Enfin, bien que nous considérons exclusivement le cas des oxydes de cuivre supraconducteurs dans ce chapitre, des approches similaires pourraient s'appliquer à d'autres composés dont le diagramme de phase possède des caractéristiques semblables. Par exemple, la proximité, voire la coexistence, des phases antiferromagnétiques et supraconductrices a été observé dans de nombreux composés fermions lourds⁶⁶ ou bien dans des sels organiques⁶⁷. Dans ce cas, la supraconductivité est non conventionnelle puisque son origine est probablement liée aux propriétés magnétiques, c'est-à-dire purement électronique et différente d'un mécanisme BCS standard.

S'agissant d'un domaine extrêmement vaste, nous renvoyons le lecteur à quelques revues : par exemple, voir les références (68–73), mais il en existe beaucoup d'autres. Dans la suite, nous présenterons les expériences de microscopie tunnel qui ont motivé nos travaux, puis nous discuterons quelques uns des résultats obtenus dans les publications [15] et [19], ainsi que les projets en cours.

II.1 Motivations expérimentales

Afin de mieux comprendre l'origine de la supraconductivité, il peut être intéressant de la détruire. Cette approche *a priori* paradoxale se justifie par le fait que la phase supraconductrice est en soi bien comprise, et peut très bien être décrite par une approche traditionnelle; par contre, le mécanisme sous-jacent reste inconnu. Aussi, afin de pouvoir trouver un modèle minimal permettant de décrire l'ensemble du diagramme de phase, il faudrait savoir quelles sont les phases en compétition et quelle est l'origine de cette supraconductivité. Cette approche est également motivée par la volonté de comprendre la mystérieuse phase dite pseudogap existant dans la phase sous-dopée.

1.1 Observation d'un régime pseudogap

La difficulté de la compréhension de la phase supraconductrice provient d'un manque de connaissance de la phase dont elle est issue. Comme schématisé sur le diagramme de phase (Fig. II.2), il existe une mystérieuse phase dite pseudogap pour des composés sous-dopés. Expérimentalement, il s'agit d'une perte de poids spectral à basse énergie observée en RMN, par mesure de conductivité selon l'axe c , par photoémission résolue en angle, par microscopie tunnel... Ainsi, la phase non supraconductrice ne correspond pas du tout à une phase métallique habituelle, et elle n'est pas décrite par la théorie du liquide de Fermi. Pour une revue récente sur ce sujet, on lira la référence (73).

Ces phénomènes sont attendus dans la phase supraconductrice mais, dans ces expériences, le pseudogap persiste jusqu'à une température T^* bien supérieure à la température critique T_c .

Typiquement, il existe deux classes d'explication toujours fortement débattues :

- Existence de paires de Cooper, dites préformées, au-dessous de T^* . À cause de fortes fluctuations de la phase du paramètre d'ordre, la cohérence de phase globale, nécessaire pour la supraconductivité, n'apparaît qu'à plus basse température⁷⁴.
- Il existe une vraie transition de phase vers une phase exotique, en compétition avec la supraconductivité. Cette phase hypothétique pourrait correspondre à une phase fractionnaire où les électrons se décomposent en excitations de spin et de charges disjointes⁶⁹, ou bien une phase possédant un ordre de courants et brisant la symétrie par renversement du temps^{75,76}. Les signatures expérimentales d'une telle phase sont encore très controversées mais elle pourrait se révéler lorsque la supraconductivité est détruite, par exemple autour d'un cœur de vortex.

Ainsi, afin de mieux comprendre l'origine de la supraconductivité, il faut comprendre si ces phases en compétition favorisent ou non la supraconductivité, et si il existe un ordre caché sous-jacent. Expérimentalement, ces idées peuvent être testées en détruisant la supraconductivité.

1.2 Observations expérimentales de modulations de charge

Les méthodes expérimentales permettant de supprimer la supraconductivité sont les suivantes :

- appliquer un champ magnétique qui va créer des vortex,
- chauffer l'échantillon au-delà de sa température critique,
- fabriquer un composé très fortement sous-dopé.

Nous présentons maintenant les données expérimentales obtenues par microscopie à effet tunnel (STM) dans ces différentes configurations. Il s'agit d'une technique très sensible à la surface et qui peut mesurer directement la densité électronique avec une résolution *atomique*.

1.2.1 Autour d'un cœur de vortex

Historiquement, la première observation d'une modulation de charge a été observée autour d'un vortex, en présence d'un champ magnétique, pour le composé $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$ proche du dopage optimal⁷⁷.

Rappelons que les cuprates sont des supraconducteurs de type II, c'est-à-dire qu'un faible champ magnétique va être complètement écranté (effet Meissner) mais, à plus fort champ, il va exister des vortex, ou lignes de flux, possédant deux distances caractéristiques :

- Le cœur du vortex est dans la phase normale et a pour taille caractéristique la longueur de cohérence ξ , c'est-à-dire la taille des paires de Cooper à $T = 0$. Dans les cuprates, ξ est de l'ordre de quelques dizaines d'Å.

II.1 Motivations expérimentales

- À l'extérieur de ce cœur, le paramètre d'ordre supraconducteur prend une valeur finie mais le champ magnétique pénètre dans cette région, sur une longueur typique égale à la longueur de pénétration de London λ . Dans les cuprates, $\lambda \gg \xi$.

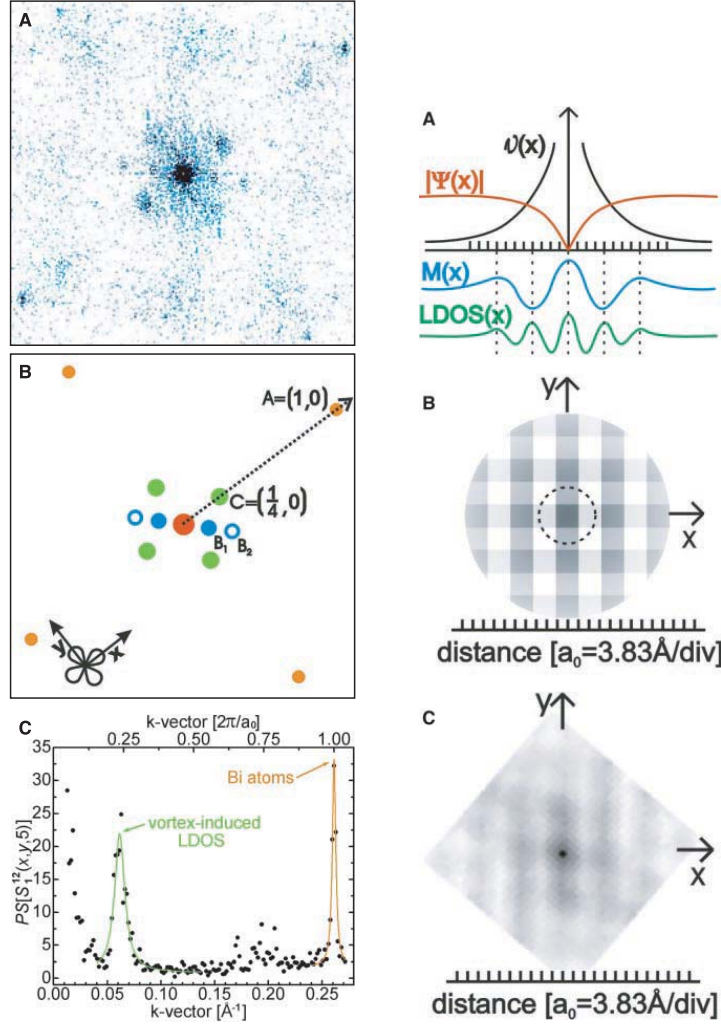


FIG. II.3 – : À gauche : Transformée de Fourier de la densité d'états locale induite autour d'un vortex. Le schéma B montre les nouveaux pics (C) qui n'existent qu'en présence du champ et qui sont situés en $(0, \pm 1/4)2\pi/a$ et $(\pm 1/4, 0)2\pi/a$. Les points B_1 et B_2 correspondent aux pics de surstructure. À droite : représentation et mesures en espace réel de cette modulation. Figure extraite de la référence (77).

Comme rappelé sur la Fig. II.3, cette modulation de charge possède une période $4a \times 4a$ (où a correspond à la dimension d'une maille élémentaire CuO) et n'existe que dans une région finie autour d'un vortex non supraconducteur, avec une décroissance exponentielle sur une longueur caractéristique de $10a$. En outre, il s'agit d'une modulation bidimensionnelle, ce qui contredit les approches de *stripes* qui considèrent des rubans de charge unidimensionnels.

1.2.2 Dans la phase pseudogap

En 2004, Yazdani *et coll.* ont caractérisé la région dite pseudogap de ce même composé. Ils trouvent également que les états électroniques de basse énergie ont une modulation avec approximativement la même période⁷⁸ (voir la Fig. II.4). En outre, cette période ne dépend pas de l'énergie (tension) à laquelle l'expérience est faite, ce qui contredit les interprétations en termes d'interférences quantiques électroniques.

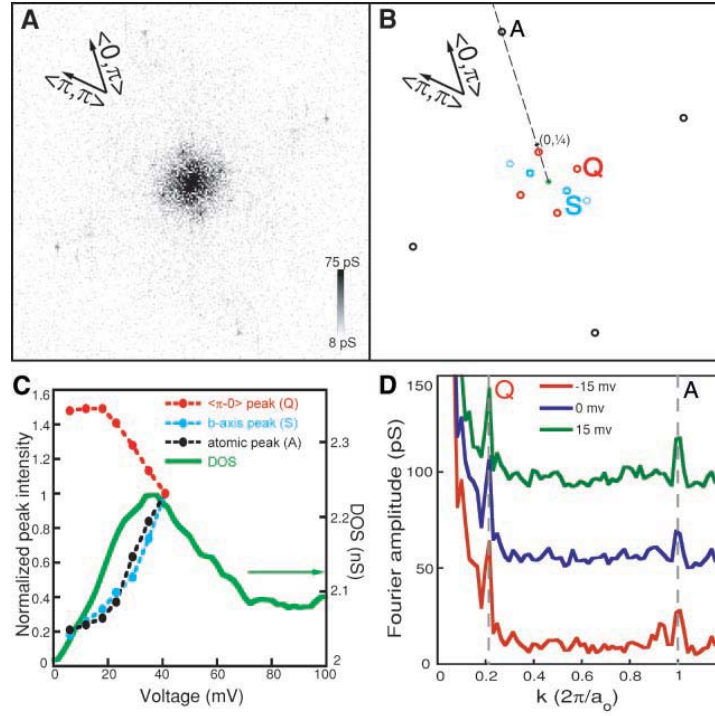


FIG. II.4 – : Transformée de Fourier de la densité locale montrant un pic à $\sim 2\pi/4.7a$ le long des directions $(0,\pi)$ et $(\pi,0)$. En outre, ce pic ne disperse pas en fonction de la tension appliquée. Figure extraite de la référence (78).

1.2.3 Dans la région très sous-dopée

Également en 2004, le groupe de J. C. Davis a effectué le même type d'expériences sur des composés supposés plus purs de $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$, qui se situent dans la région très sous-dopée, à gauche du dôme supraconducteur. À nouveau, ils mesurent une modulation de charge très intense avec la même périodicité et indépendante de l'énergie. Sur la figure II.5, on aperçoit très clairement le signal dans les données brutes en espace réel.

1.2.4 Conclusion sur les expériences

Dans le domaine très controversé de la supraconductivité à haute température critique, la découverte d'une propriété robuste de la phase pseudogap représente un net progrès. Le paramètre d'ordre de la phase pseudogap ne semble plus caché ou inconnu mais consisterait en un ordre électronique brisant la symétrie de translation, c'est-à-dire un cristal électronique. Pour le théoricien, il s'agit d'un ordre moins exotique,

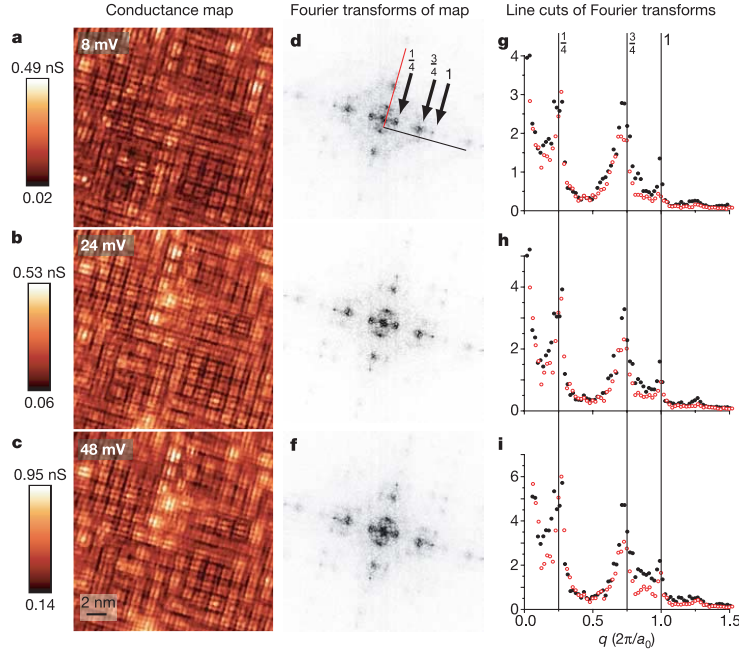


FIG. II.5 – : Dépendance en tension de la modulation de charge observé en espace réel (à gauche) et par transformée de Fourier (à droite). On voit très nettement les modulations de charge. Dans les données en espace de Fourier, on voit des pics supplémentaires pour $\vec{q} = (\pm 1/4, 0); (0, \pm 1/4)2\pi/a$. En outre, ces pics ne dispersent pas lorsque l'énergie augmente. Figure extraite de la référence (79).

par comparaison avec des phases où les électrons se fractionnalisent, ou bien des phases brisant la symétrie par renversement du temps; toutefois, il reste à déterminer son origine.

Dans la suite de ce chapitre, nous nous restreignons à la région sous-dopée et nous allons présenter notre approche qui vise à comprendre cette phase à partir d'un modèle microscopique.

II.2 Modèle effectif pour les supraconducteurs à haute température critique

2.1 Description d'un plan supraconducteur

A priori, le modèle minimal permettant de comprendre la physique de ces oxydes de cuivre est un modèle de Hubbard à 3 bandes, décrivant la physique dans un plan CuO_2 , obtenu en considérant les orbitales d du cuivre et p de l'oxygène. Zhang et Rice ont montré que, de manière effective, un trou se délocalise sur les orbitales de l'oxygène adjacent au cuivre, ce qui permet de considérer un *modèle effectif* de Hubbard à une seule bande⁸⁰:

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$$

où le premier terme décrit la délocalisation des trous et le deuxième décrit la répulsion coulombienne écrantée.

Dans la limite de couplage fort $U \gg t$, la théorie de perturbations conduit à un hamiltonien plus

simple dit t-J :

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \mathcal{P} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) \mathcal{P} + J \sum_{\langle ij \rangle} \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \frac{n_i n_j}{4} \right)$$

où la double occupation d'un site est interdite par le projecteur de Gutzwiller $\mathcal{P}$ et le couplage antiferromagnétique qui apparaît est $J = 4t^2/U$. Au demi-remplissage, ce modèle se réduit à l'hamiltonien de Heisenberg qui décrit correctement la phase isolante antiferromagnétique.

Malgré tout, la résolution de ce modèle reste un problème particulièrement difficile et toujours d'actualité. En utilisant diverses techniques, plusieurs groupes pensent toutefois que ces modèles peuvent posséder un état fondamental supraconducteur^{81–83} mais ces résultats sont encore très largement discutés.

En gardant une approche plus phénoménologique, S.C. Zhang a proposé un modèle possédant la symétrie $SO(5)$ permettant de décrire simultanément et sur un pied d'égalité les paramètres d'ordre antiferromagnétique et supraconducteur⁸⁴. Puis, il a fallu considérer l'effet de la répulsion de Hubbard qui, en défavorisant la double occupation sur sites, brise cette symétrie entre les modes de charge et de spin : il s'agit alors du modèle $SO(5)$ avec projection (*projected $SO(5)$* ou $pSO(5)$) qui a été étudié en détails (voir la revue (85)). Il s'agit d'une théorie avec 4 bosons: une paire de trous et un triplet, dont la condensation conduit aux phases attendues. À basse température, les fluctuations de phase des paires empêchent la supraconductivité et expliquent la divergence entre la densité superfluide, proportionnelle au dopage et correspondant à la température critique dans un système tridimensionnel, et la valeur du gap supraconducteur. Dans la phase supraconductrice, les triplets peuvent coexister ou bien avoir un gap, ce qui expliquerait l'apparition d'un mode magnétique observé par diffusion de neutrons (pour une synthèse des mesures récentes par diffusion inélastique de neutrons, on lira la revue (56)).

2.2 Dérivation d'un modèle effectif

En utilisant l'approche CORE, décrite dans le chapitre I, à partir du modèle de Hubbard¹¹ ou t-J (publication [16]), et en ne gardant que les plus bas degrés de liberté bosonique par plaquette, il est possible de dériver un hamiltonien effectif (voir Fig. II.6 et l'équation I.7). Ces degrés de liberté correspondent aux plus bas états sur les plaquettes : au demi-remplissage, le singulet $|\Omega\rangle$ et les trois états triplets $t_\alpha^\dagger |\Omega\rangle$, et le fondamental pour 2 trous $t_h^\dagger |\Omega\rangle$. Par construction, ces bosons sont des bosons de cœur dur.

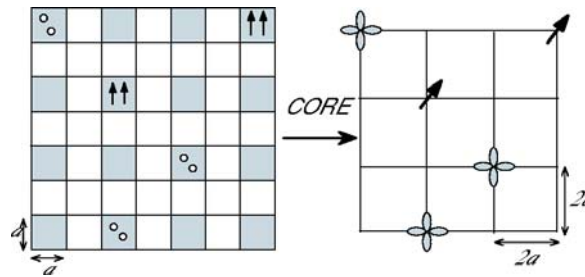


FIG. II.6 – : Illustration de la méthode CORE appliquée à un réseau carré dopé. Le réseau est découpé en plaquettes et on tronque l'espace de Hilbert en ne conservant que les plus bas états en énergie : au demi-remplissage, le singulet $|\Omega\rangle$, les trois états triplets $t_\alpha^\dagger |\Omega\rangle$ et le fondamental pour 2 trous $t_h^\dagger |\Omega\rangle$. Ensuite, un hamiltonien effectif est dérivé. À gauche : degrés de liberté bosoniques sur le réseau initial; les rectangles grisés indiquent le «vide» singulet, les cercles indiquent les trous et les spins parallèles un état triplet. À droite : chaque plaquette est remplacée par un site effectif où vivent les bosons. La structure de la paire de trous est rappelée, et correspond à une symétrie $d_{x^2-y^2}$.

II.3 Application à la phase vortex

On retrouve par conséquent un hamiltonien très similaire à celui du modèle pSO(5), ce qui confirme ainsi l'approche phénoménologique, bien que notre démarche soit relativement distincte. En particulier, une lacune du modèle pSO(5) est de faire l'hypothèse que les paires de trous et les triplets magnétiques ont des énergies cinétiques (termes de saut) similaires. En comparant ces paramètres (J_s et J_c) sur la table I.1 (page 45), nous voyons que cette hypothèse est vérifiée pour des valeurs réalistes des couplages J/t .

Nous avons montré dans le chapitre I que ce modèle effectif décrit parfaitement la phase antiferromagnétique bien que nous ne conservions qu'un seul état singulet et triplet par plaquette (voir la partie 3.5 du chapitre I); en outre, il décrit également très bien la physique des échelles dopées. Cependant, bien qu'étant bosonique, ce modèle ne peut pas être simulé facilement car ses éléments de matrice ne sont pas tous négatifs, ce qui cause un problème de signe dans une approche par Monte-Carlo quantique.

Ainsi, afin de pouvoir étudier plus avant notre modèle, nous proposons de négliger les termes les moins importants. L'argument est que d'une part, nous négligeons déjà les termes à plus longue portée, et d'autre part, nous attendons des résultats qualitatifs sur la présence ou non de certaines phases dans le diagramme de phase. En effet, il ne s'agit pas d'une étude fine des transitions de phase mais d'une prédiction semi-quantitative des phases possibles. Pour la même raison, nous considérons également le terme coulombien entre les plaquettes diagonales comme un paramètre variable afin de pouvoir décrire différentes phases.

L'hamiltonien effectif ainsi obtenu ressemble fortement au modèle pSO(5) auquel s'ajoutent des interactions coulombiennes effectives entre plaquettes proches et secondes voisines :

$$\begin{aligned}
H = & \Delta_s \sum_x t_\alpha^\dagger t_\alpha(x) + \Delta_c \sum_x t_h^\dagger t_h(x) \\
& - \frac{J_s}{2} \sum_{\langle xx' \rangle} (t_\alpha^\dagger + t_\alpha)(x)(t_\alpha^\dagger + t_\alpha)(x') \\
& - J_c \sum_{\langle xx' \rangle} t_h^\dagger(x) t_h(x') + h.c. \\
& + V_1 \sum_{\langle xx' \rangle} \rho(x) \rho(x') + V_2 \sum_{\langle\langle xx' \rangle\rangle} \rho(x) \rho(x'), \tag{II.1}
\end{aligned}$$

avec $\rho(x) = t_h^\dagger t_h(x)$ la densité locale de paires de trous. Les termes de cet hamiltonien ont une signification simple : Δ_s correspond au gap de spin à fournir pour créer un triplet sur une plaquette, Δ_c est le potentiel chimique effectif pour les paires de trous, J_s et J_c décrivent les couplages Josephson et V_1 et V_2 sont les interactions coulombiennes entre plaquettes proches voisines et secondes proches voisines.

Notre étude suppose que les paires de trous sont formées à une énergie supérieure et que ce sont les degrés de liberté pertinents à basse énergie. C'est une des interprétations du pseudogap qui trouve sa justification dans des études numériques montrant la tendance à l'appariement^{86–88}, ainsi que les mesures expérimentales montrant une très faible longueur de cohérence ξ pour les paires.

II.3 Application à la phase vortex

La première application de notre modèle effectif bosonique concerne l'étude de la phase de vortex où a été détectée l'existence de modulations de la densité locale. Cette partie reprend la publication [15] effectuée en collaboration avec le groupe de S.C. Zhang (Stanford) et E. Arrigoni (Graz).

3.1 Propriétés du cœur

La première remarque concerne la phase dans le cœur de vortex. Il s'agit de la phase normale, au sens où la supraconductivité est totalement absente et on attendrait donc un état métallique. Cependant, un premier succès de la théorie SO(5) de S.C. Zhang^{84,85} a été la confirmation expérimentale de la présence d'antiferromagnétisme dans le cœur des vortex. Cet effet prédit théoriquement^{84,89} a été vérifié par toutes sortes de techniques expérimentales^{90–93,77,94}.

Notre approche est en accord avec cette image puisque, au cœur du vortex, les paires sont interdites, et il ne reste que les triplets magnétiques qui peuvent, en condensant, donner un ordre antiferromagnétique (à courte portée).

Nous proposons donc de tester à partir de notre modèle l'influence d'un vortex sur la phase supraconductrice. Nous choisissons des paramètres tels que, en l'absence de champ magnétique, nous trouvons une phase supraconductrice (superfluide pour les bosons chargés) homogène. L'introduction d'un vortex va avoir deux effets :

- L'effet orbital va moduler les termes de saut J_c via une phase mais nous avons vérifié qu'il n'était pas crucial;
- l'effet dominant est le caractère antiferromagnétique du cœur que nous modélisons en empêchant les paires d'occuper ce site effectif.

Il s'agit alors de voir si, dans ces conditions, cette phase possède de l'ordre de charge comme cela est observé expérimentalement.

3.2 Existence d'un cristal de Wigner

La présence d'un ordre de charge est bien sûr reliée à l'idée de *cristal de Wigner*. Dans un système où domine l'énergie potentielle, Wigner a proposé l'existence d'une phase électronique cristalline. En l'absence de défauts qui peuvent accrocher ce cristal, une telle phase isolante n'est possible que pour des remplissages commensurables. Dans l'expérience effectuée proche du dopage optimal, le dopage est $\delta = 1/8$, soit un trou tous les 8 sites. Dans ce cas, le cristal de Wigner aurait une maille $\sqrt{8}a \times \sqrt{8}a$ (en l'absence d'anisotropie) où a correspond à la taille d'une maille élémentaire. Cet état ne brise pas la symétrie de rotation, en accord avec les résultats expérimentaux. Par contre, la cellule élémentaire diffère de la modulation $4a \times 4a$ observée par STM.

Dans notre approche, il est plus naturel de considérer les paires de trous vivant sur les plaquettes comme les particules chargées élémentaires. Or, le dopage de $\delta = 1/8$ correspond à un dopage en paires de $n_h = 1/4$, c'est-à-dire une paire pour 4 plaquettes. Ainsi, la période observée $4a \times 4a$ se comprend très naturellement comme étant due à un cristal de Wigner de paires, baptisé PDW (*Pair Density Wave*) et schématisé sur la Fig. II.7.

Chacune des paires possède une symétrie d et est située au centre d'une plaquette sur quatre du réseau initial. Cet état possède ainsi une symétrie $4a \times 4a$ comme observée expérimentalement. L'état cristallin isolant correspond à un dopage de $\delta = 1/8$ qui est relativement proche du dopage expérimental.

Ainsi, en formant un cristal de Wigner de paires de trous et non des trous eux-mêmes, la périodicité obtenue pour la cellule élémentaire est compatible avec le dopage expérimental. L'idée sous-jacente à cette étude est que le champ magnétique détruit la cohérence de phase des paires en les localisant, sans toutefois briser les paires.

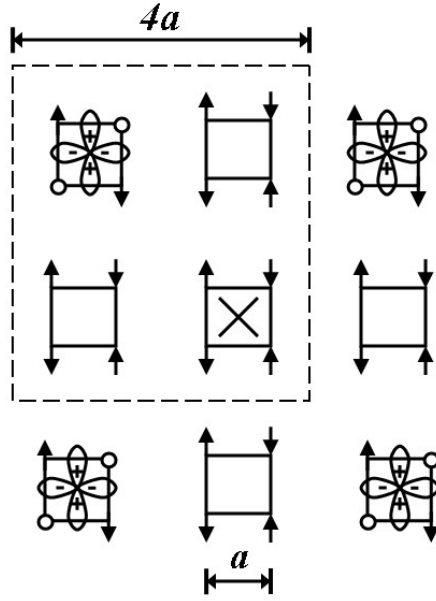


FIG. II.7 – : Illustration schématique du cristal de paires (PDW) pour un dopage $\delta = 1/8$. Les paires de symétrie d forment un réseau de cellule unité $4a \times 4a$. Cette phase est favorisée autour d'un cœur de vortex, schématisé ici par une croix. Figure extraite de la publication [15].

3.3 Résultats numériques

Dans cette étude, nous avons considéré une fonction d'onde variationnelle,

$$|\Psi\rangle = \prod_x (\cos \theta + \sin \theta (\cos \alpha t_\alpha^\dagger + \sin \alpha e^{i\phi} t_h^\dagger))(x) |\Omega\rangle$$

et nous avons minimisé l'énergie $E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$ en fonction des paramètres variationnels $\theta(x), \alpha(x)$ et $\phi(x)$. Au quart-remplissage pour les paires de trous (c'est-à-dire un dopage réel de $\delta = 1/8$), le champ moyen prédit une transition de phase quantique à $V_1 + V_2 = V_c \equiv 6J$ pour $J_c = 2J_s \equiv 2J$. Lorsque $V_1 + V_2 < V_c$, le système est dans une phase superfluide uniforme. Au-delà, les paires de trous forment un ordre de charge en damier (voir Fig. II.7). Aussi, nous avons choisi des paramètres dans la phase uniforme mais proches de la transition.

Rappelons que le champ magnétique varie suivant la longueur de pénétration de London qui est très grande ($\lambda \sim 30a$), et nous le supposons donc uniforme. Les conditions aux limites correspondent à retrouver la phase supraconductrice uniforme à densité fixée sur les bords de l'échantillon. Enfin, le centre du réseau correspond au cœur du vortex supposé complètement antiferromagnétique.

Le résultat principal est la figure donnant la distribution de charge (Fig. II.8) et montrant un signal très clair de modulation en damier. L'amplitude de cette modulation décroît très rapidement sur une distance typique de $10a$, ce qui est en accord qualitatif avec les données expérimentales.

3.4 Conséquences expérimentales

Discutons à présent quelques prédictions de ce modèle qui pourraient être validées ou non par des expériences futures.

Tout d'abord, si le champ magnétique dépasse le champ magnétique critique supérieur H_{c2} pour lequel la supraconductivité disparaît totalement, alors ce cristal de Wigner isolant pourrait être observé

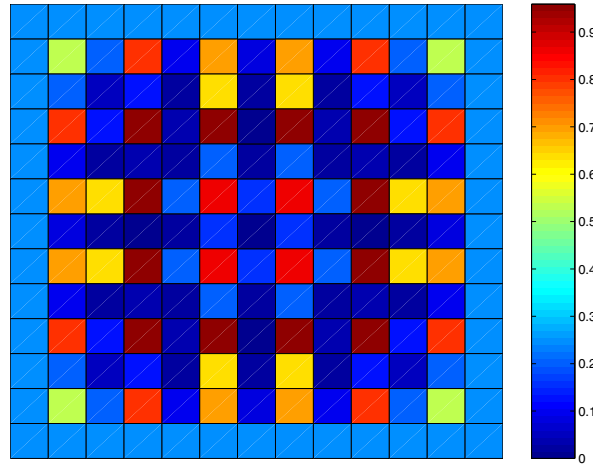


FIG. II.8 – : *Distribution de charge autour du cœur de vortex (situé au centre de la figure). Les paramètres du modèle sont : $V_1/J = 3$, $V_2/J = 2.2$, $\Delta_S/J = 1.2$ et $\Delta_c/J = -0.12$. La taille de la grille est en unités $2a$.*

dans tout l'échantillon. Ceci est attendu pour les composés YBCO et BSCO qui sont moins anisotropes. Les champs accessibles expérimentalement ne permettent malheureusement pas encore d'atteindre H_{c2} pour les composés optimalement dopés.

Une autre caractéristique de cette phase a trait à ses propriétés magnétiques. Si l'on imagine que les paires de trous sont complètement localisées, alors il subsiste un modèle magnétique sur un réseau bipartite et nous attendons donc un ordre antiferromagnétique au vecteur d'onde (π, π) . Ceci diffère des théories de *stripes* où la présence de lignes de trous génère une paroi dite d'antiphase, ce qui conduit à des corrélations incommensurables.

Ainsi, nous pensons qu'il est probable que différentes familles de composés se comportent différemment. Alors que les composés à base de Lanthane (LSCO) semblent vérifier l'image des *stripes*, les composés à base de Bismuth (BSCO) ou d'Yttrium (YBCO) possèderaient un ordre antiferromagnétique commensurable. Cette conclusion est compatible avec les mesures de relaxation de spin du muon (μSR) et de RMN dans la phase de vortex^{92,94}. Cette possible différence entre les diverses familles de supraconducteurs fait l'objet de la partie suivante.

Enfin, notre étude concerne l'effet d'un vortex sur la phase supraconductrice mais il est possible que certaines conclusions restent les mêmes dans le cas d'une impureté. La seule condition est que l'impureté ne brise pas la structure des paires.

Pour conclure, nous mentionnons que d'autres auteurs ont proposé depuis des explications analogues à cette modulation de charge^{95,96}.

II.4 Diagramme de phase global

Nous venons de montrer qu'un modèle effectif bosonique décrit correctement l'apparition d'une modulation de charge lorsqu'on place un échantillon sous-dopé dans un champ magnétique. Nous avons généralisé ce résultat et proposé un diagramme de phase global regroupant les différentes propriétés de quelques familles de supraconducteurs à haute température critique. Ce diagramme de phase est obtenu grâce à une approche champ moyen et confirmé par des simulations Monte-Carlo quantique. Ces résultats nous permettent d'éclairer des expériences récentes et de faire des prédictions. Une discussion

plus détaillée se trouve dans la publication [19] effectuée en collaboration avec H.D. Chen et S.C. Zhang (Stanford) et F. Alet (Toulouse).

Au premier abord, le diagramme de phase des supraconducteurs à haute température critique peut paraître relativement simple avec la présence de phases antiferromagnétique (AF), supraconductrice (SC) et métallique, toutes ces phases étant homogènes. Cependant, il est apparu la possibilité de nouvelles phases en compétition qui peuvent exister pour certains composés. Par exemple, il est possible d'observer des phases avec des modulations de charge comme discutée dans les parties précédentes.

Le modèle effectif (II.1), décrivant la propagation et les interactions entre les degrés de liberté magnétiques et les paires de trous, est un modèle bosonique sans problème de signe pour le Monte-Carlo quantique, ce qui permet des simulations très précises. En négligeant les termes coulombiens V_1 et V_2 , il s'agit du modèle *projected SO(5)* (pSO(5)) qui a été étudié en détails dans le passé par cette même technique^{97,98}. Ceci a permis de retrouver les grands traits du diagramme de phase ainsi que prédire les lois d'échelle au voisinage des points critiques quantiques.

Le modèle pSO(5) incluant des interactions étendues, que nous considérons, permet d'obtenir un diagramme de phase plus complexe avec en outre des phases isolantes pour des remplissages commensurables. En accord avec notre analyse précédente, toutes les phases isolantes correspondent à des cristaux de Wigner de paires de trous (PDW) et non des trous eux-mêmes.

Comme dans la partie précédente, notre étude est basée sur un modèle effectif à partir de degrés de liberté locaux bosoniques, ce qui peut se justifier dans la partie sous-dopée où existe la phase pseudogap. Dans cette image, la température de pseudogap correspond à la formation des paires⁷⁴.

4.1 Arguments qualitatifs sur l'existence de phases solides

Si nous négligeons les degrés de liberté magnétiques, nous obtenons un modèle avec une seule espèce de boson de cœur dur, avec des interactions étendues.

En se limitant aux interactions proches voisines, le diagramme de phase est connu⁹⁹ et présente une phase superfluide et trois phases isolant de Mott pour les remplissages $n_h = 0, 1/2$ et 1 , représentés sur la Fig. II.9. En particulier, l'état isolant au demi-remplissage possède un ordre en damier. Dans le langage des spins, cet ordre correspond à un ordre de type Ising et la phase superfluide est équivalente à un ordre XY.

Si l'on inclut également des interactions entre seconds proches voisins, il est alors possible d'obtenir de nouvelles phases isolantes¹⁰⁰ aux remplissages $1/4$ et $3/4$ (voir Fig. II.9). En outre, la phase isolante pour $n_h = 1/2$ peut être soit de type damier avec des corrélations à (π, π) , soit de type *stripes* avec des corrélations suivant $(0, \pi)$ et $(\pi, 0)$ ¹⁰¹.

Cette hiérarchie peut être poursuivie et ainsi, on peut obtenir des phases isolantes pour une famille de remplissages commensurables, à condition d'avoir des interactions à suffisamment longue portée pour les stabiliser. Comme représenté sur la Fig. II.9, la hauteur des lobes isolants va décroître pour les commensurabilités élevées.

Enfin, il faut mentionner la possibilité d'avoir des phases où les paramètres d'ordre superfluide et solide coexistent, appelée *phase supersolide*^{100,102,103,101}.

À partir de ces simples considérations, on peut déjà comprendre l'allure du diagramme de phase général des supraconducteurs : il existe de multiples phases isolantes (PDW) pour les remplissages commensurables, en dehors desquelles la supraconductivité domine. La hauteur de ces lobes isolants va dépendre de la force et la portée des interactions effectives répulsives. Ce schéma est représenté sur la Fig. II.10. Nous pensons que les différents composés ont des paramètres microscopiques légèrement différents, ce qui correspond à différentes régions de ce diagramme de phase global. Comme indiqué sur cette figure, il est possible expérimentalement de parcourir des lignes horizontales ou verticales de ce diagramme de phase, ce qui permettrait de le valider ou non.

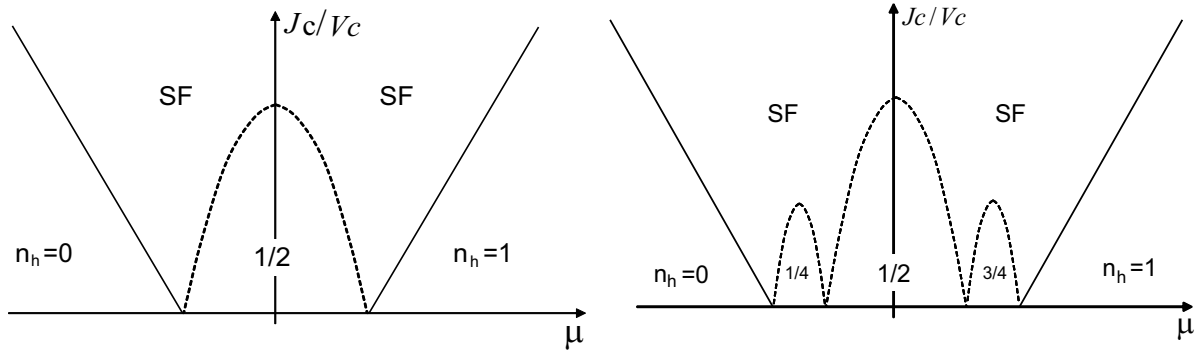


FIG. II.9 – : À gauche : diagramme de phase d'un modèle de boson de cœur dur avec une intégrale de saut J_c et une répulsion coulombienne proche voisine V_c . Il existe une phase superfluide (SF) et trois phases isolantes pour les remplissages $n_h = 0, 1/2$ et 1 . À droite : idem avec des interactions entre proches et seconds proches voisins. Outre la phase superfluide (SF), il existe des phases isolantes pour des dopages : $0/4, 1/4, 2/4, 3/4$ et $4/4$.

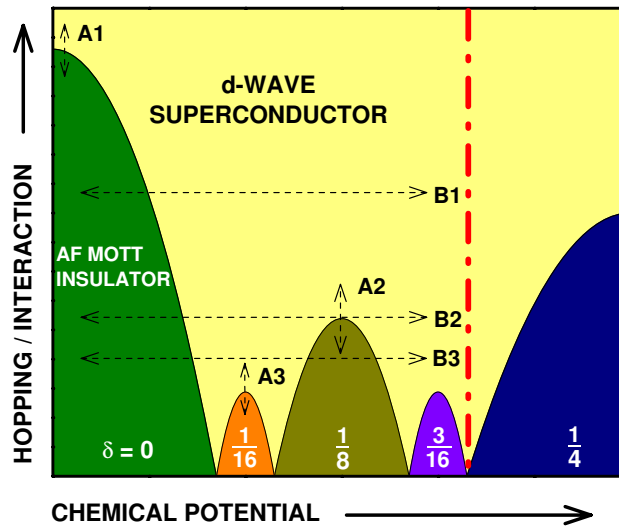


FIG. II.10 – : Diagramme de phase global pour les oxydes de cuivre supraconducteurs en fonction du potentiel chimique et du rapport entre énergie cinétique et énergie coulombienne pour les paires de trous. Il existe plusieurs phases isolantes correspondant à des cristaux de Wigner de paires de trous (PDW) pour des remplissages commensurables. Il existe deux types de transitions supraconducteur-isolant : type A en variant l'intégrale de saut à l'aide d'un champ magnétique ou d'un changement de pression, et type B en modifiant le dopage. Les différents tracés correspondraient aux diverses familles de composés : YBCO (B1), BSCO (B2) et LSCO (B3). Enfin la ligne rouge vertical montre la limite de la région sous-dopée au-delà de laquelle notre approche n'est plus valable. Figure extraite de la publication [19].

4.2 Analyse en champ moyen

Puisque notre modèle inclut des interactions entre seconds proches voisins, nous avons proposé de le résoudre en champ moyen en incluant une maille élémentaire de quatre plaquettes. Nous proposons la fonction d'onde variationnelle :

$$|\Psi\rangle = \prod_{r,m} \left[e_m + h_m t_h^\dagger(m,r) + x_m t_x^\dagger(m,r) \right] |\Omega\rangle$$

où $|\Omega\rangle$ représente le fondamental singulet, et e_m , x_m et h_m sont les paramètres variationnels. L'indice $m = A, B, C, D$ correspond aux 4 sites de la maille choisie, et r est la coordonnée dans le super-réseau.

En minimisant l'énergie, tout en respectant les contraintes de cœur dur, nous obtenons alors l'état fondamental en fonction des paramètres. À partir de cette fonction d'onde, nous déduisons les différents paramètres d'ordre (voir la publication [19] pour plus de détails) et nous obtenons le diagramme de phase montré sur la Fig. II.11.

Comme prévu, nous retrouvons trois phases isolantes : une phase antiferromagnétique (AF) non dopée, un cristal de paires antiferromagnétique pour $n_h = 1/4$ ($\delta = 1/8$) et également pour $n_h = 1/2$ ($\delta = 1/4$). Outre ces phases isolantes, nous trouvons une phase supraconductrice, qui peut coexister avec les ordres antiferromagnétiques et solides.

Il existe également une propriété remarquable lorsque les paramètres du modèle sont ajustés précisément : en se plaçant au sommet du lobe existant pour $n_h = 1/4$, il est possible d'observer deux modes de charge et deux modes de spin possédant exactement les mêmes vitesses. Cette image correspond exactement au scénario d'une brisure spontanée d'une symétrie $SO(5)$ en une symétrie $SO(4)$, ce qui engendre quatre bosons de Goldstone. Ainsi, l'analyse en champ moyen prédit la possibilité d'une symétrie $SO(5)$ émergente (ou restaurée dynamiquement) autour de ce point. Cette prédiction pourrait être confirmée par des études numériques précises.

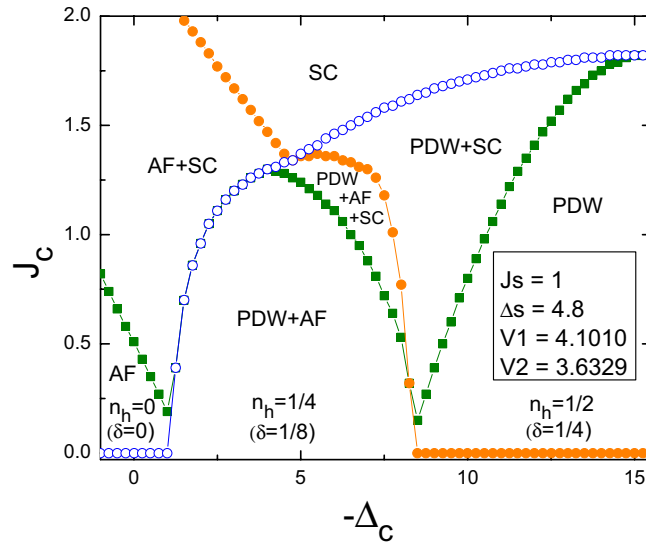


FIG. II.11 – : Diagramme de phase en fonction du potentiel chimique, obtenu en champ moyen. Les phases sont: antiferromagnétique (AF), cristal de paires (PDW) et superfluide (SF), avec de possibles coexistences. Figure extraite de la publication [19].

4.3 Simulations par Monte-Carlo quantique

Le modèle pSO(5) a déjà été largement étudié par ce type de techniques numériques et nous renvoyons le lecteur à la revue (85) pour une liste des résultats et références. Nous avons utilisé l'algorithme de développement en séries stochastique (SSE)¹⁰⁴ avec des mises à jour non locales¹⁰⁵. Ce type d'algorithme s'est montré très efficace dans la simulations de modèles de bosons de cœur dur^{101,106,97} et nous rappelons brièvement son principe.

4.3.1 Algorithme SSE

Le point de départ de cet algorithme consiste en un développement de haute température pour la fonction de partition¹⁰⁵ :

$$Z = \text{Tr } e^{-\beta H} = \sum_{\alpha} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-\beta)^n}{n!} \langle \alpha | H^n | \alpha \rangle,$$

dans une base $|\alpha\rangle$ orthogonale.

La convergence de ce développement est assurée pour tout système fini à température finie, ce qui permet d'effectuer une troncation contrôlée à un ordre suffisamment grand. Ainsi, la somme résultante peut être estimée par une procédure Monte-Carlo qui va échantillonner les différents termes en fonction de leur poids. Afin d'éviter le problème de signe, il faut absolument que les poids soient positifs, ce qui nécessite d'avoir des éléments de matrice tous négatifs. En pratique, les éléments diagonaux peuvent toujours être rendus négatifs en ajoutant une constante suffisante à l'hamiltonien et ce sont donc les signes de termes hors-diagonaux qui vont permettre ou non l'utilisation de cet algorithme. Cette condition est bien vérifiée pour notre modèle II.1.

Dans chaque simulation, le nombre de boucles (ou plutôt de «vers»)¹⁰⁵ est calculé de manière auto-cohérente durant l'étape de thermalisation, afin d'assurer que le nombre de vertex visités par ces vers soit égal à $C\langle n \rangle$, où $\langle n \rangle$ est le nombre moyen apparaissant dans le développement et C est une constante de proportionnalité choisie entre 1 et 5.

Bien qu'étant un algorithme très efficace, nous avons rencontré des difficultés pour la simulation de certaines phases ou bien au voisinage des transitions de phases. En effet, les phases isolantes présentant des structures en *stripes* donnent des temps d'autocorrélation qui divergent car il est très difficile à basse température, de passer de l'état $(\pi, 0)$ à $(0, \pi)$. Ce ralentissement critique est connu pour ce type de systèmes et nous a limités à des tailles de systèmes de longueur linéaire $L \leq 10$ et à des températures $T \geq 0.1$. Toutefois, en dehors de ces points difficiles, nous pouvons clairement identifier les phases en présence.

Ainsi, grâce à sa nature bosonique et à ses éléments de matrice hors-diagonaux tous négatifs^a, ce modèle peut être simulé par Monte-Carlo quantique sans problème de signe. Ceci contraste naturellement par rapport au modèle fermionique qui reste très difficile à simuler dans la région intéressante.

4.3.2 Paramètres d'ordre et diagramme de phase

Afin de tracer le diagramme de phase numérique, nous devons calculer les paramètres d'ordre des phases antiferromagnétique (AF), cristal de paires (PDW) et superfluide (SF). Les paramètres sont $\Delta_s = 4.8$, $V_1 = 4.1010$ et $V_2 = 3.6329$ et nous autorisons J_c à varier afin de décrire les différents composés.

Pour la phase superfluide, il suffit de calculer la densité superfluide ρ_c qui est reliée simplement à l'enroulement des *world-line* lors de la simulation Monte-Carlo^{107,108}. Les résultats sont montrés sur la

^a Sur un réseau bipartite, il est possible de changer le signe de certaines interactions entre proches voisins grâce à une transformation unitaire sur l'un des sous-réseaux. Pour la même raison, le modèle de Heisenberg antiferromagnétique peut être simulé bien que ses éléments de matrice hors-diagonaux soient positifs.

II.4 Diagramme de phase global

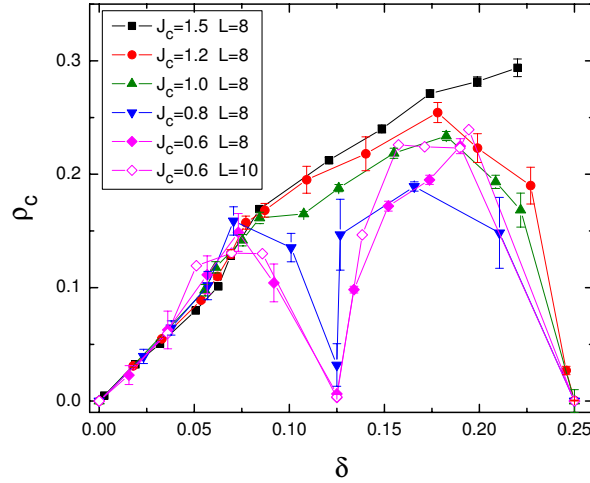


FIG. II.12 – : Densité superfluide ρ_c en fonction du dopage pour plusieurs valeurs de J_c . La courbe obtenue pour $J_c = 1.0$ ressemble beaucoup à la forme en dôme mesurée dans les supraconducteurs. Quant à $J_c \leq 0.8$, ρ_c présente une dépression autour de $\delta = 1/8$ comme cela est observé dans la famille LSCO. Figure extraite de la publication [19].

Fig. II.12. Or, comme la densité superfluide contrôle les fluctuations de phase, qui sont très importantes dans la région sous-dopée, nous pouvons relier son comportement à celui de la température critique T_c qui existerait dans un système tridimensionnel⁷⁴.

À faible dopage, on trouve que ρ_c suit le dopage, ce qui correspond à une observation expérimentale due à Uemura¹⁰⁹ et qui constitue une signature de la physique de Mott sous-jacente. En diminuant J_c , on voit d'abord apparaître la structure en dôme mesurée dans les supraconducteurs, puis on observe une diminution de ρ_c pour un dopage de $n_h = 1/4$ (soit $\delta = 1/8$) qui est due à la phase isolante.

De même, les phases solides sont caractérisées par leurs facteurs de structure $PDW(q_x, q_y)$, qui sont les transformées de Fourier des corrélations densité-densité :

$$PDW(\vec{q}) = \frac{1}{L^2} \sum_{i, \vec{r}} \exp(i\vec{q} \cdot \vec{r}) \langle n_h(i) n_h(i + \vec{r}) \rangle$$

Dans une phase ordonnée, le facteur de structure doit diverger comme le volume du système, c'est-à-dire que $PDW(q_x, q_y)/L^2$ doit tendre vers une valeur finie (L est la taille linéaire du système).

La Fig. II.13 montre des données typiques pour $PDW(\pi, 0)/L^2$ obtenues pour différentes tailles. Pour ces valeurs de paramètres et dans la limite thermodynamique, il semble qu'il persiste un paramètre d'ordre fini pour tous les dopages $n_h \geq 0.25$. Ceci suggère à la fois la présence de phases isolantes pour $n_h = 0.25$ et $n_h = 0.5$, mais aussi de phases supersolides pour les remplissages intermédiaires.

Ainsi, nous obtenons le diagramme de phase générale de la Fig. II.14. Les caractéristiques en sont les mêmes que celui obtenu dans l'approximation de champ moyen (Fig. II.11) mais en regardant précisément, on voit que les valeurs numériques exactes sont fortement diminuées, ce qui se comprend par l'effet des fluctuations, qui sont négligées dans le calcul en champ moyen.

Nous retrouvons en particulier la possibilité d'une phase cristalline constituée de paires pour $n_h = 0.25$ ($\delta = 0.125$) lorsque $J_c \leq 0.7$. Cette phase est caractérisée par un facteur de structure non nul pour $(\pi, 0)$, $(0, \pi)$ et (π, π) (ordre solide) ainsi qu'une absence de superfluidité ($\rho_c = 0$). Cet état correspond à la localisation d'une paire de trous tous les 4 sites.

Une autre prédiction de notre modèle concerne la possibilité d'observer des phases supersolides pour $0.25 < n_h < 0.5$ ($0.125 < \delta < 0.25$) à faible J_c . Par définition, de telles phases possèdent à

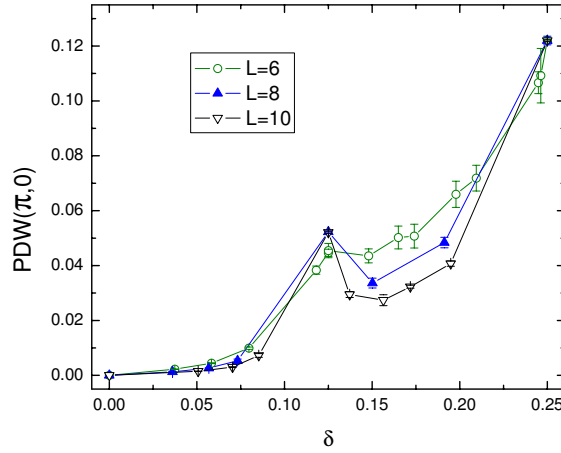


FIG. II.13 – : $PDW(\pi,0)$ en fonction du dopage δ pour plusieurs tailles ($L = 6, 8$ et 10) pour $J_c = 0.6$. Dans la limite thermodynamique, il existe un paramètre d'ordre fini pour $n_h \geq 0.25$ ($\delta \geq 0.125$). Figure extraite de la publication [19].

la fois des paramètres d'ordre solide et superfluide non nuls et ont déjà été observées dans des modèles bosoniques sur réseaux^{102,103}. Nous avons vérifié que ces phases sont stables par rapport à une séparation de phases, en accord avec le modèle à une seule espèce de bosons lorsque V_2 est suffisamment grand (phase $(\pi,0)$ au demi-remplissage) et proche du demi-remplissage¹⁰¹. Cependant, il est très difficile de situer précisément la frontière d'une telle phase à cause de difficultés numériques. Il serait d'ailleurs intéressant d'étudier l'existence et la stabilité d'une telle phase autour de $n_h = 1/4$ ($\delta = 1/8$) pour le modèle plus simple à une seule espèce de boson.

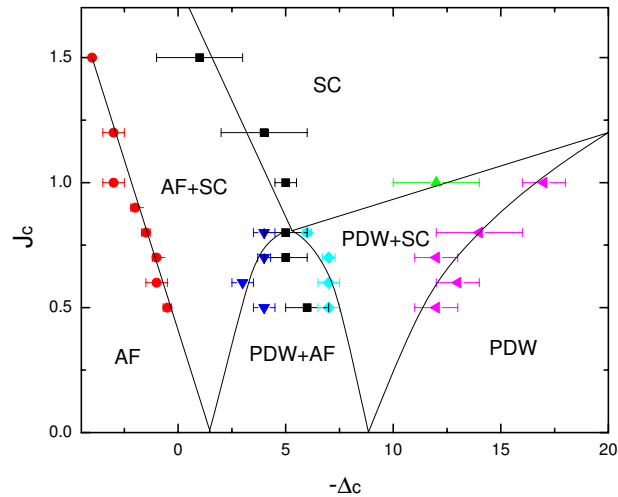


FIG. II.14 – : Diagramme de phase global obtenu par simulations Monte-Carlo quantiques. Les lignes sont indicatives. La topologie générale est en accord avec les résultats obtenus en champ moyen (Fig. II.11), bien que les valeurs numériques soient renormalisées. Figure extraite de la publication [19].

4.4 Conséquences expérimentales

L'étude de notre modèle effectif, par champ moyen ou par simulations Monte-Carlo quantique, a conduit à un diagramme de phase général décrivant quelques aspects des cuprates comme la structure en dôme de T_c , l'anomalie pour un dopage de 1/8 due à un ordre de charge, ainsi que la possible coexistence des diverses phases. Ces divers aspects ont été discutés souvent séparément et il est remarquable de tous les observer à partir d'un seul modèle.

Dans notre publication [19], nous discutons en détails plusieurs comparaisons avec les expériences dont voici les principales.

4.4.1 Relation entre la densité superfluide et le dopage

Une caractéristique remarquable de ces composés est la dépendance en forme de dôme de T_c en fonction du dopage. En particulier, dans la région sous-dopée, T_c et la densité superfluide ρ_c varient linéairement avec le dopage x : ceci constitue la loi d'Uemura¹⁰⁹. Le fait que T_c ne soit pas du tout proportionnel au gap montre une violation des résultats de la théorie BCS (valable pour les supraconducteurs usuels). C'est au contraire un argument en faveur des scénarios qui considèrent que la région pseudogap est constituée de paires préformées⁷⁴; ces paires possédant une faible densité, et donc une faible densité superfluide, n'acquèrent une cohérence de phase qu'au-dessous de T_c proportionnel à ρ_c .

Nos résultats pour la densité superfluide sont montrés sur la Fig. II.12 et montrent effectivement à la fois un comportement linéaire à faible dopage, et une allure en dôme au-delà pour des valeurs intermédiaires de J_c . Le maximum se situe autour de $\delta \sim 18\%$ pour $J_c = 1.2$. La raison physique de cette diminution est la proximité d'une phase avec ordre de charge pour des dopages de 3/16 ou 1/4. Ainsi, dans la région surdopée, l'ajout de trous supplémentaire va créer une phase avec ordre de charge (qui va coexister ou non avec la supraconductivité) qui est en compétition avec la supraconductivité. Le résultat est une diminution de ρ_c .

Nous prédisons par conséquent l'existence d'une phase avec ordre de charge dans la région surdopée. Mentionnons que cette phase ne possède pas de magnétisme et ne peut pas être observée par diffusion de neutrons. Toutefois, nous avons déjà souligné que notre modèle effectif devient moins pertinent dans la région surdopée et il faudrait inclure les états fermioniques pour obtenir une théorie complète et quantitative.

4.4.2 Anomalie à 1/8 et mesures sous pression

La dépression prononcée de la densité superfluide pour le dopage $\delta = 1/8$ ressemble fortement à celle observée¹¹¹ dans les composés LSCO. Récemment, il a été montré que la compétition entre cette phase 1/8 et la phase supraconductrice pouvait être modifiée par la pression^{110,112}. Par exemple, dans le cas de films de LSCO, le désaccord de maille avec le substrat va jouer le rôle de la pression et modifier les paramètres de saut (correspondant à J_c dans notre modèle); ainsi, on attend respectivement une suppression de cette anomalie ou bien un renforcement de la phase isolante, selon qu'on applique une compression ou une expansion respectivement, ce qui a été mesuré expérimentalement (voir la Fig. II.15).

Notre modèle explique naturellement ces données comme observée sur la Fig. II.12. La dépression est causée par la proximité de la phase isolante PDW pour ce dopage. L'ajout d'une pression peut modifier le paramètre de saut J_c et ainsi stabiliser à nouveau la phase superfluide, ou au contraire renforcer la phase isolante.

Il serait intéressant de pouvoir tester expérimentalement la possibilité de stabiliser les phases isolantes PDW correspondant aux autres dopages, 1/16 ou 3/16 par exemple.

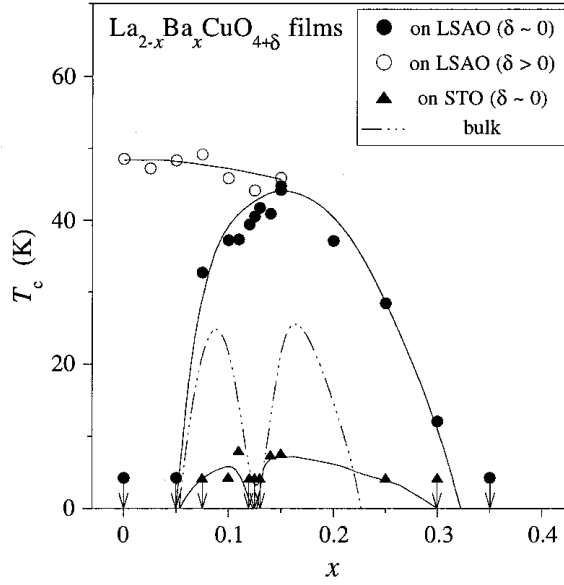


FIG. II.15 – : Mesures de T_c dans des films LSCO (les données obtenues sur le solide sont en ligne pointillée). Selon les conditions expérimentales, il est possible d'annuler l'anomalie pour un dopage 1/8 (cercles) ou bien de la renforcer (triangles). Figure extraite de la référence (110).

II.5 Projet : Étude des dopages magiques et des effets de température

En collaboration avec M. Jöstingmeier et W. Hanke (Würzburg) et S.C. Zhang (Stanford), nous avons entrepris de compléter l'étude de notre modèle bosonique effectif dans plusieurs directions.

5.1 Projet : Existence de dopages magiques

D'après notre modèle bosonique, il est possible de construire des cristaux de Wigner de paires de trous (PDW) pour une hiérarchie de dopages correspondant à $(2m + 1)/2^n$. Expérimentalement, des anomalies de résistivité sont observées pour ces dopages «magique»¹¹³. Sur la Fig. II.16, nous reportons les mesures de résistivité qui montrent des augmentations pour ces dopages où les paires de trous ont tendance à cristalliser. Il faut souligner que dans les théories de type *stripes*, le dopage des *stripes* reste fixé mais leur distance peut varier, ce qui conduirait à des phases moins conductrices pour des dopages $1/2n$, en désaccord avec ces mesures.

Bien que nous ayons prédit la possibilité d'avoir des phases isolantes pour ces dopages, la portée et la force des interactions répulsives nécessaires n'est pas connue et des phases isolantes moins commensurables ($\delta = 1/16$ par exemple) pourraient nécessiter des interactions coulombiennes à plus longue portée. Toutefois, en considérant notre modèle bosonique limité à des interactions entre proches et seconds voisins, nous avons tout de même pu observer numériquement les phases isolantes correspondant à des dopages $1/16$ et $3/16$. Les données sont présentées sur la Fig. II.17.

Ces phases solides peuvent être isolantes ou bien coexister avec un ordre superfluide, formant des phases supersolides^{102,103}. Il serait intéressant d'étudier la possibilité de phases supersolides pour des dopages peu commensurables.

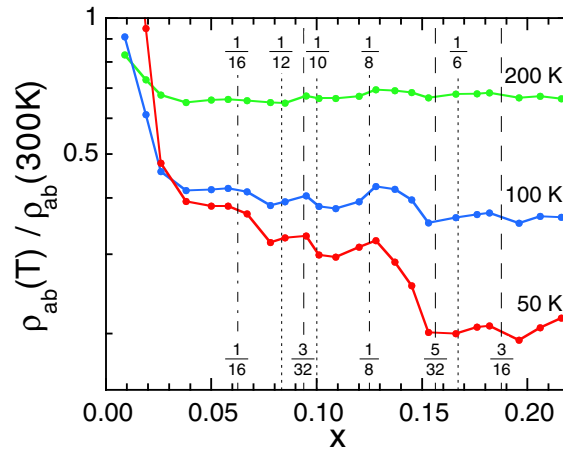


FIG. II.16 – : Variation de la résistivité en fonction du dopage pour une famille de cristaux LSCO et plusieurs températures. Les dopages magiques attendues pour les phases PDW et stripes sont indiquées avec des tirets et en pointillés respectivement. Figure extraite de la référence (113).

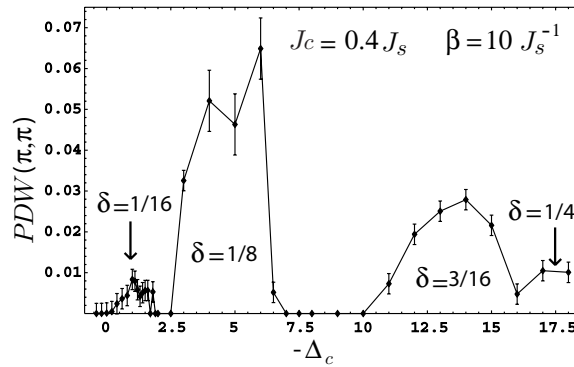


FIG. II.17 – : Facteur de structure de charge à (π, π) en fonction du potentiel chimique obtenu à partir du modèle effectif bosonique par Monte-Carlo quantique. Il s'agit du paramètre d'ordre pour les phases solides que nous avons extrapolé à la limite thermodynamique. Il existe donc des phases solides (PDW) pour les dopages indiqués.

5.2 Projet : Étude à température finie

Une autre extension de notre modèle consiste à regarder les effets de la température sur le diagramme de phase.

Habituellement, on considère que, en chauffant une phase liquide, on ne peut pas obtenir une phase solide. En effet, à température finie, il faut comparer les énergies libres et non plus les énergies. Généralement, l'entropie du liquide est plus importante que celle du solide; par conséquent, si l'énergie de la phase liquide est plus basse que celle du solide, il va en être de même pour l'énergie libre (en supposant que l'énergie interne varie peu avec la température). Par conséquent, il n'est pas possible dans ces conditions de stabiliser la phase solide à température finie. Toutefois, dans le cas où le solide possède des degrés de liberté supplémentaires (magnétiques par exemple), son entropie peut devenir supérieure à celle du liquide, stabilisant ainsi la phase solide à température finie : il s'agit d'une réentrée de la phase solide, similaire à l'effet Pomeranchuk observé dans ^3He .

Puisque la phase cristalline peut posséder un ordre magnétique, il est possible d'observer ce phénomène de réentrance de la phase solide à température finie. Nous faisons une simulation en partant d'un point du diagramme de phase dans la phase superfluide, juste au-dessus du lobe PDW correspondant à $\delta = 1/8$. Afin de fixer le dopage précisément en fonction de la température, nous avons fait une simulation canonique. Nous mesurons le facteur de structure de charge à (π, π) qui doit être fini dans la phase solide. Effectivement, comme montré sur la Fig. II.18, en chauffant la phase liquide superfluide (c'est-à-dire en diminuant β) depuis les basses températures, on retrouve la phase solide au-delà d'une température critique. On observe bien sûr qu'à plus haute température, le solide fond.

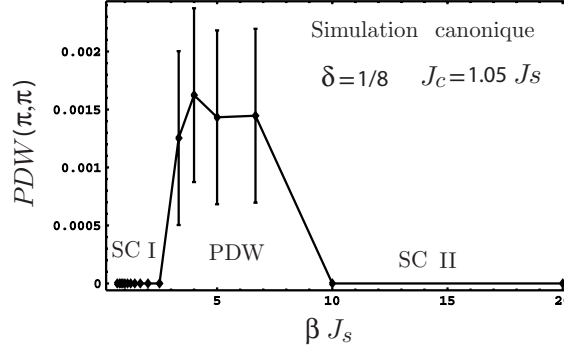


FIG. II.18 – : Réentrance de la phase solide à température finie causée par une entropie plus importante pour le solide magnétique que dans la phase liquide superfluide.

Notre modèle exhibe de nombreuses propriétés remarquables qui peuvent en principe être comparées aux mesures et permettent de proposer de nouvelles expériences.

II.6 Projet : Effet des degrés de liberté fermioniques

Notre proposition d'un modèle effectif bosonique permettant de décrire le diagramme de phase à température nulle a permis de mettre en évidence et de prédire des phases où les paires de trous cristallisent.

Nous avons pour l'instant négligé la présence d'excitations fermioniques. Cette approximation peut se justifier lorsqu'on s'intéresse au régime sous-dopé à très basse température puisque expérimentalement, dans la phase normale très sous-dopée, il semble exister un (faible) gap sur toute la surface de Fermi¹¹⁴. Cependant, dans la phase supraconductrice, la présence de nœuds dans le gap est synonyme d'excitations fermioniques de basse énergie.

Le modèle effectif incluant les fermions étant très difficile à étudier, une autre approche a été proposée par D. Poilblanc¹¹⁵. Il s'agit de traiter le modèle t-J dans l'approximation de Gutzwiller, puis en champ moyen.

Dans l'étude du modèle t-J, l'opérateur de projection sur les états physiques $\mathcal{P}$ est difficile à traiter analytiquement, et souvent, on a recours à l'approximation de Gutzwiller qui consiste en une simple renormalisation statistique des coefficients :

$$\begin{aligned} \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle &= g_t \langle c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} \rangle_0 \\ \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle &= g_J \langle \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle_0 \end{aligned}$$

et les facteurs de Gutzwiller valent $g_t = 2x/(1+x)$ et $g_J = 4/(1+x)^2$ (x est le dopage en trous). Ainsi, la projection peut être supprimée à la seule condition de renormaliser les coefficients de l'hamiltonien.

Le problème reste encore difficile et l'approximation suivante consiste à faire un découplage champ moyen dans les canaux particule-particule ou particule-trou afin de rendre l'hamiltonien quadratique et soluble.

En résolvant les équations auto-cohérentes ainsi obtenues, D. Poilblanc a montré que la phase supraconductrice homogène était plus stable mais, si l'on considère une interaction coulombienne à plus longue portée, alors la phase modulée peut être stabilisée avec une modulation compatible avec les expériences¹¹⁵.

Le stage de C. Jaudet, que j'ai co-encadré avec D. Poilblanc, a consisté à reproduire ses résultats en utilisant l'espace de Fourier au lieu de l'espace réel. En effet, nous supposons une maille élémentaire 4×4 afin de réduire le nombre d'inconnues et, pour un système de taille $4L \times 4L$, il est beaucoup plus efficace de résoudre les équations auto-cohérentes pour un secteur d'impulsion $\vec{K}$ donné, puis de sommer sur tous les secteurs, plutôt que résoudre directement le problème en espace réel. Nous avons retrouvé les résultats précédents tout en ayant la possibilité de considérer des systèmes beaucoup plus grands.

Ce modèle permet donc de retrouver à la fois une phase supraconductrice homogène et une phase avec modulation de charges en fonction des paramètres. En outre, il donne accès aux propriétés fermioniques, cruciales pour la comparaison à l'expérience. Nous proposons donc de poursuivre cette étude, par exemple en considérant la situation expérimentale autour du cœur de vortex. Par la suite, nous pourrions étendre de formalisme au cas de réseaux frustrés dans lesquels la supraconductivité pourrait être exotique.

II.7 Projet : Conséquence pour les expériences de transport

7.1 Projet : Effet du désordre sur la localisation de charge

Nous avons proposé que la compétition entre les phases supraconductrices et cristallines est pilotée par l'intégrale de saut J_c , qui peut être modulée soit par la pression, soit par l'application d'un champ magnétique. En particulier, la phase isolante PDW est préférée au voisinage d'un vortex. Les particules ainsi piégées ne doivent pas contribuer au transport thermique et on prévoit ainsi une suppression de la conductivité thermique en appliquant un champ magnétique selon l'axe c . Ce scénario est compatible avec les expériences effectuées récemment sur des composés sous-dopés LSCO^{116–119} tandis que la situation reste controversée pour le composé YBCO^{120,121}.

La différence essentielle entre ces composés est le taux de désordre, beaucoup plus faible dans les cristaux YBCO. Dans l'hypothèse où les impuretés ne détruisent pas les paires, il paraît raisonnable de penser qu'elles vont favoriser la phase normale au détriment de la supraconductivité. Expérimentalement, les mesures de modulations de charge sont observées dans des composés relativement inhomogènes. Une preuve directe de la corrélation entre la présence d'impuretés et les inhomogénéités électroniques à l'échelle microscopique vient d'être fournie par des mesures STM récentes¹²². Ainsi, une étude quantitative des différentes familles de cuprates doit faire intervenir le désordre. De telles simulations sont envisageables à partir de notre modèle effectif et pourront fournir de nouvelles prédictions à confronter aux mesures.

7.2 Projet : Effet des excitations fermioniques et mesures d'effet Nernst

Afin de comprendre les expériences de transport, il semble toutefois nécessaire d'inclure les degrés de liberté fermioniques. Pour cela, il est toujours possible d'écrire un hamiltonien effectif mais sa complexité nécessite de mettre en œuvre de nouvelles techniques pour l'étudier. Puisqu'il s'agit d'un hamiltonien possédant à la fois des variables bosoniques et fermioniques, nous pensons pouvoir traiter d'abord les variables bosoniques en champ moyen, ce qui résulte en un potentiel effectif pour les fermions. Ainsi, le problème fermionique devient quadratique et peut être résolu exactement. Nous pouvons

ensuite en déduire les coefficients de transport. Il est également possible d'utiliser une relation de dispersion phénoménologique pour les fermions et observer l'effet d'un couplage entre les fermions et les bosons¹¹.

Parmi les expériences de transport pertinentes, nous souhaitons également collaborer avec Cyril Proust (LNCMP, Toulouse) qui monte actuellement une expérience de mesure d'effet Nernst. Cet effet représente le transport électrique transverse en réponse à un gradient thermique, en présence d'un champ magnétique. Dans des métaux usuels, cette réponse est très faible, mais dans les supraconducteurs, la présence de vortex induit un fort effet Nernst. L'intérêt pour ces mesures fait suite aux travaux récents de l'équipe de Ong, qui a mesuré un fort effet Nernst dans des cuprates sous-dopés^{123,124}. En outre, le signal Nernst persiste au-delà de T_c , ce qui suggère l'existence de vortex dans la phase pseudogap, en accord avec le scénario de paires préformées. Cependant, le signal Nernst ne suit pas exactement T^* et il pourrait s'agir d'un simple précurseur de la phase supraconductrice.

Ainsi, ces expériences de transport permettent de mieux comprendre la physique du pseudogap, en particulier afin de comprendre l'origine de la supraconductivité. Elles représentent un défi pour une modélisation microscopique mais, puisque notre modèle effectif représente qualitativement le diagramme de phases à basse température, il pourrait servir de point de départ pour de nouvelles approches originales.

Chapitre III

DÉVELOPPEMENTS POUR LE MONTE-CARLO QUANTIQUE FERMIONIQUE

III.1 Introduction

Après avoir motivé l'utilisation de méthodes effectives dans l'étude des systèmes de fermions fortement corrélés, nous souhaitons revenir sur la nécessité de développer des méthodes *non biaisées* afin d'obtenir des informations précises pour certains modèles. À l'image des solutions exactes des modèles intégrables, qui fournissent des points de repère pour toutes les méthodes, les certitudes numériques obtenues ces dernières années permettent de valider ou non les autres approches.

Les méthodes numériques que l'on peut qualifier d'exactes sont de trois types :

- Diagonalisation exacte. Par principe, cette technique donne accès à toute l'information à température nulle (énergie, symétrie, corrélations statiques et dynamiques). La seule limitation est la taille des systèmes accessibles puisque le nombre d'états dans l'espace de Hilbert croît exponentiellement avec le nombre de sites. L'utilisation exhaustive des symétries du système (groupe ponctuel, translation, inversion de spin etc.) et des nombres quantiques (S_z , remplissage etc.) permet malgré tout de réduire la taille de l'espace de Hilbert tout en fournissant de précieuses informations sur les symétries des états. Pour une revue récente de cette technique, voir la référence (13).

Durant mon travail de thèse, j'ai essentiellement utilisé cette technique. Depuis, je développe des méthodes alternatives mais je conserve toujours cette expertise qui permet les comparaisons nécessaires à la validation de nouveaux algorithmes. Mentionnons également que l'étude des modèles effectifs a très souvent été faite par diagonalisation exacte.

- Groupe de renormalisation de la matrice densité (DMRG). Nous avons déjà mentionné cette technique à plusieurs reprises. C'est une méthode qui se développe toujours actuellement et qui permet de simuler efficacement les systèmes unidimensionnels. Pour une revue récente, on lira la référence (7).
- Monte-Carlo quantique (QMC). Sous ce nom se cachent en fait plusieurs algorithmes très différents permettant de traiter soit les modèles bosoniques (ou de spin) sur réseaux, soit des modèles continus, soit des modèles fermioniques sur réseau. Ce sont des méthodes exactes ou quasi exactes au sens où les barres erreurs sur les résultats sont dues à la statistique et éventuellement à des erreurs systématiques. Il est également possible de calculer les observables, les fonctions de corrélation (voire la dynamique en temps imaginaire) etc. La limitation principale de ces techniques est l'existence du problème de signe, pour la plupart des modèles fermioniques et pour les modèles de spin frustrés, qui rend impossible la simulation à basse température de grands systèmes.

Dans le chapitre précédent, nous avons mentionné l'algorithme SSE qui est très utile pour les problèmes de spin ou de bosons, et que nous avons utilisé dans l'étude de notre modèle effectif bosonique. Dans ce chapitre, nous allons traiter exclusivement de l'algorithme de Monte-Carlo quantique pour les problèmes fermioniques et nous résumerons nos contributions dans ce domaine (publications [10] et [22]) ainsi que les projets envisagés.

III.2 Monte-Carlo quantique

Nous rappelons ici le lien entre les méthodes Monte-Carlo, bien connues en physique statistique classique ou bien comme méthode d'intégration, et la formulation en intégrale de chemin de la mécanique quantique. En particulier, nous détaillons l'algorithme de champ auxiliaire utilisé pour les problèmes fermioniques et sur lequel nous avons travaillé. Pour plus de détails, on se référera aux revues (125, 108, 126).

2.1 Monte-Carlo classique

Une méthode Monte-Carlo typique consiste à estimer une intégrale ou une somme sur un espace de grande dimension

$$\int \pi(x) f(x) dx / \int \pi(x) dx$$

où $\pi(x)$ est une probabilité.

Il est souvent impossible d'échantillonner directement l'espace de phase suivant la probabilité $\pi(x)$, ce qui conduit à construire une chaîne de Markov. Cette procédure démarre en un point a et conduit aléatoirement à un nouveau point b avec une probabilité p . On montre alors que pour assurer la convergence vers la distribution d'équilibre, une condition suffisante est d'avoir un algorithme ergodique (tout point peut être atteint) et vérifiant le bilan détaillé :

$$\pi(a)p(a \rightarrow b) = \pi(b)p(b \rightarrow a).$$

Par exemple, le célèbre algorithme de Metropolis consiste à prendre : $p(a \rightarrow b) = \min(1, \pi(b)/\pi(a))$. Dans le cas de la statistique de Boltzmann, on obtient : $\pi(a) = \exp(-\beta E(a))$.

Cette marche aléatoire dans l'espace des phases procure une estimation de l'intégrale recherchée avec une erreur se comportant en $1/\sqrt{N}$ pour une marche de longueur N . Cette méthode converge donc relativement lentement et c'est grâce à l'emploi de techniques numériques intensives (parallèles) que l'on peut obtenir des résultats acceptables.

2.2 Algorithme quantique

À température nulle, les propriétés d'un système s'obtiennent à partir de son état fondamental exact et de ses corrélations. Pour l'obtenir, il suffit en principe de résoudre l'équation de Schrödinger. L'évolution temporelle en temps imaginaire s'écrit :

$$|\psi(t)\rangle = \exp(-Ht)|\psi_T\rangle$$

à partir d'un état initial quelconque $|\psi_T\rangle$. Après un temps suffisamment long (devant l'inverse du gap d'énergie de ce système), l'état obtenu $|\psi(t)\rangle$ devient proportionnel au fondamental exact de l'hamiltonien H (à condition que $|\psi_T\rangle$ ait un recouvrement non nul avec le fondamental). Les autres composantes de la fonction d'onde décroissent comme $\exp(-(E_1 - E_0)t)$, où E_1 est l'énergie de la première excitation.

À température finie, la quantité intéressante est la fonction de partition

$$Z = \text{Tr} \exp(-\beta H).$$

En appliquant le formalisme des intégrales de chemin, on peut voir la température inverse β comme un temps imaginaire que l'on va discrétiser en tranches de Trotter : $N_\tau \Delta\tau = \beta$. Cette discrétisation peut être nécessaire lorsqu'on ne sait pas évaluer $\langle a | \exp(-\beta H) | b \rangle$ pour des opérateurs. En temps imaginaire, les chemins importants de grande amplitude peuvent être échantillonnés efficacement.

Ainsi, en insérant plusieurs fois la résolution de l'identité, on obtient :

$$Z = \sum_{i's} \langle \phi_i | e^{-\Delta\tau H} | \phi_{i1} \rangle \langle \phi_{i1} | e^{-\Delta\tau H} | \phi_{i2} \rangle \langle \phi_{i2} | e^{-\Delta\tau H} | \phi_{i3} \rangle \dots \langle \phi_{i_{N_\tau-1}} | e^{-\Delta\tau H} | \phi_i \rangle$$

Notons que jusqu'ici, le résultat est exact. À partir de maintenant, on va considérer un hamiltonien de la forme $H = K + V$ et on cherche à séparer les deux contributions dans l'exponentielle :

$$\exp(-\Delta\tau H) = \exp(-\Delta\tau V) \exp(-\Delta\tau K) + O((\Delta\tau)^2).$$

Il s'agit de la décomposition de Trotter-Suzuki qui introduit une erreur $(\Delta\tau)^2$ par tranche de temps lorsque les opérateurs ne commutent pas. L'erreur globale serait donc d'ordre $\beta\Delta\tau$ mais on peut montrer¹²⁷ que, si K et V possèdent des représentations réelles, alors cette erreur globale devient $(\Delta\tau)^2$. Cette astuce permet d'appliquer l'algorithme en ne connaissant que les éléments de matrice.

2.3 Algorithme de champ auxiliaire pour les problèmes fermioniques

Cette méthode a été introduite en 1981 pour un modèle mixte de bosons et fermions¹²⁸. Après avoir rappelé cet algorithme et son implémentation numérique, nous verrons des applications à des modèles ne présentant pas de problème de signe. Il s'agit de la technique de choix pour l'étude de modèles fermioniques en deux dimensions, tout en restant limité par le problème de signe que nous discuterons plus loin. Pour des revues très complètes, nous renvoyons le lecteur à^{129,125,126}.

En résumé, l'algorithme de champ auxiliaire est le suivant :

1. Approximation de Trotter pour la matrice densité.
2. Introduire un champ bosonique auxiliaire de Hubbard-Stratonovitch permettant de découpler les interactions entre fermions.
3. Calculer exactement la trace sur les fermions puisque le modèle est quadratique dans les variables fermioniques. La fonction de partition devient alors une somme sur les variables bosoniques.
4. Échantillonner cette somme par une méthode Monte-Carlo.

Afin d'être plus spécifique, considérons le modèle de Hubbard en dimension d :

$$H = -t \sum_{\langle \vec{i}, \vec{j} \rangle, \sigma} c_{\vec{i}, \sigma}^\dagger c_{\vec{j}, \sigma} + U \sum_i \left(n_{\vec{i}, \uparrow} - 1/2 \right) \left(n_{\vec{i}, \downarrow} - 1/2 \right) + \mu \sum_i n_i$$

Après la décomposition de Trotter, il faut pouvoir évaluer les exponentielles des opérateurs. Dans le cas du terme d'interaction, il faut d'abord introduire un champ de Hubbard-Stratonovitch afin de le rendre quadratique. Plutôt que d'utiliser un champ continu difficile à échantillonner, Hirsch a proposé une décomposition avec un champ discret¹³⁰, ici de type Ising :

$$e^{-\Delta\tau U(n_\uparrow - 1/2)(n_\downarrow - 1/2)} = C \sum_{s=\pm 1} e^{i\alpha s(n_\uparrow + n_\downarrow - 1)}, \quad (\text{III.1})$$

avec $\cos(\alpha) = e^{-\Delta\tau U/2}$ et $C = \exp(\Delta\tau U/4)/2$ dans le cas répulsif. Il existe plusieurs découplages possibles. Celui-ci a l'avantage de conserver la symétrie $SU(2)$ mais nécessite de travailler avec des nombres complexes.

Il faut donc introduire un champ auxiliaire par site et par tranche de Trotter, ce qui permet alors d'exprimer la fonction de partition comme : $Z \simeq \sum_{\{s\}} W_\uparrow\{s\} W_\downarrow\{s\}$ avec

$$W_\sigma\{s\} = \text{Tr} \prod_{l=1}^n \left(e^{-\Delta\tau V_\sigma} e^{-\Delta\tau K_\sigma\{s\}} \right)$$

où le potentiel vaut $V_\sigma\{s\} = -\sum_i (i \alpha s_{il} + \mu) n_{i\sigma}$.

Ayant obtenu une expression bilinéaire pour les fermions, la trace peut être calculée *exactement* à l'aide de la relation :

$$W = \text{Tr} e^{c_i^\dagger H_{ij} c_j} = \det(1_N + e^H)$$

Ainsi, la fonction de partition est exprimée comme une somme classique sur des configurations de variables (de type Ising ici) d'une certaine quantité. Il s'agit d'un problème classique en dimensions $d + 1$. Par conséquent, on peut alors appliquer un algorithme standard (Metropolis) de Monte-Carlo afin d'évaluer cette somme :

$$Z = \sum_{\{s\}} \prod_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \det(1 + B^\sigma(\beta, 0))$$

où $B^\sigma(\beta, 0) = B^\sigma(\beta, \beta - \Delta\tau) \cdots B^\sigma(\Delta\tau, 0)$ et

$$B^\sigma(\tau + \Delta\tau, \tau) \simeq \exp(-\Delta\tau V_\sigma(\tau)) \exp(-\Delta\tau K).$$

Un avantage de ce formalisme est qu'il autorise le calcul des fonctions de corrélations. En effet, pour une configuration des champs auxiliaires donnée, nous avons un problème de fermions quadratique et nous pouvons donc appliquer le théorème de Wick afin d'estimer toute fonction de corrélation et observable. De la même manière, nous avons accès aux fonctions de corrélation en temps imaginaire^{131,132}; afin d'obtenir des données en temps réel, il faut par exemple utiliser une méthode d'Entropie Maximale¹³³.

Bien que cet algorithme semble pouvoir être programmé simplement, il reste toutefois à résoudre de nombreux problèmes numériques de stabilité¹²⁹.

Pour finir, nous mentionnons qu'il existe également un algorithme spécifique pour le cas de la température nulle. Un avantage de cet algorithme, appelé projecteur, est d'avoir une convergence plus rapide vers l'état fondamental et de pouvoir travailler dans l'ensemble canonique.

2.4 Méthode d'entropie maximale

À partir des données en temps imaginaire d'une fonction de corrélation $G(\tau)$, il faut pouvoir remonter à la fonction spectrale dynamique $A(\omega)$ qui est la quantité mesurée expérimentalement. Il faut pour cela inverser la relation :

$$G(\tau) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{A(\omega) e^{-\tau\omega}}{1 + e^{-\beta\omega}}.$$

Malheureusement, lorsque les données sont bruitées à cause des barres d'erreur, il s'agit d'un problème mal posé qui admet une infinité de solutions. Une résolution possible de cette difficulté consiste à rechercher la fonction spectrale la plus probable, ce qui se fait en maximisant une entropie¹³³.

Un avantage de cette méthode est de pouvoir imposer les règles de somme connues pour les différentes fonctions spectrales dynamiques.

2.5 Problème de signe

La simulation du modèle quantique se ramène donc à celle d'un problème classique. Cependant, le poids associé à chaque configuration des champs auxiliaires n'est pas toujours positif, ou même réel, et ceci conduit au tristement célèbre problème de signe ou de phase.

Lorsque c'est le cas, on peut montrer que le signe moyen varie comme

$$\langle s \rangle \sim \exp(-\beta N c)$$

pour un système de N sites. On en déduit facilement que les barres d'erreur relatives sur les observables divergent exponentiellement avec la taille du système et/ou β . Cette limitation empêche de conclure avec certitude sur le diagramme de phase de la plupart des modèles fermioniques.

Heureusement, il existe certains modèles pour lesquels le problème de signe disparaît et, dans mes travaux, je me suis concentré sur ces classes de problèmes. On peut classer l'origine de la positivité dans plusieurs catégories :

1. Intégration des fermions. Le fait de pouvoir calculer exactement la trace sur les degrés de liberté fermioniques prend déjà en compte certains effets de la statistique quantique. Par exemple, un modèle de fermions libres ne possède pas de problème de signe, contrairement au cas d'un algorithme *world-line*.
2. Symétrie particule-trou
 - modèle de Hubbard répulsif $U > 0$ au demi-remplissage. En utilisant un découplage de Hubbard-Stratonovitch réel avec $n_{\uparrow} - n_{\downarrow}$ puis en appliquant une transformation particule-trou pour une espèce de spin, on montre que $K_{\uparrow} = K_{\downarrow}$ si le réseau est bipartite et $V_{\uparrow} = V_{\downarrow}$ si $\mu = 0$. Le problème de signe est donc absent *uniquement* au demi-remplissage pour un réseau bipartite. Ce résultat est encore vrai dans une généralisation à une symétrie $SU(N)$ pour ce modèle¹³⁴.
 - réseau Kondo avec une bande de conduction demi-remplie. Ce résultat est loin d'être trivial puisque la première étude effectuée sur ce modèle a montré la présence d'un problème de signe^{135,136}. Plus tard, Assaad a montré comment formuler un algorithme sans problème de signe à température nulle¹³⁷ et, en collaboration avec lui, nous avons étendu cette formulation à température finie afin d'étudier la dynamique et la thermodynamique des isolants de Kondo (publication [10]).
3. Factorisation du déterminant,
 - modèle de Hubbard attractif $U < 0$: à l'aide d'un découplage réel avec $n_{\uparrow} + n_{\downarrow}$, on peut montrer que les poids associés à chaque composante du spin sont égaux et réels ($W_{\uparrow} = W_{\downarrow}$) et, par conséquent, le poids total $W = W_{\uparrow}W_{\downarrow} \geq 0$. Le problème de signe est absent pour tout remplissage et tout réseau.
 - modèle de Hubbard pour des fermions avec $N = 4p$ couleurs. Pour une certaine forme de l'interaction, le problème de signe disparaît pour tout remplissage et tout réseau grâce à la factorisation du déterminant¹³⁸.
4. Symétrie par renversement du temps.

Récemment, Wu et Zhang ont proposé des conditions plus générales suffisantes pour éliminer le problème de signe¹³⁹. Il s'agit de s'assurer que le modèle fermionique, après découplage de Hubbard-Stratonovitch, est symétrique par renversement du temps. Plus généralement si il existe un opérateur anti-unitaire T tel que

$$TKT^{-1} = K, \quad TVT^{-1} = V, \quad T^2 = -1$$

alors les poids W sont positifs et le problème de signe disparaît. En collaboration avec ces auteurs, nous avons montré que ceci permet d'étudier un modèle de bicouche électronique présentant des courants alternés ou bien encore le modèle de Hubbard pour des spins $S = 3/2$ dans certains régimes de paramètres. Ces études sont détaillées dans ce chapitre et constituent la publication [22] ainsi que des projets en cours.

III.3 Application aux isolants de Kondo

Notre première application de cet algorithme de Monte-Carlo quantique a permis, en collaboration avec F. Assaad, de déterminer le diagramme de phase, la thermodynamique et les propriétés dynamiques de spin et de charge d'un modèle illustrant un isolant de Kondo (publication [10]).

3.1 Réseau Kondo

Le réseau Kondo, ainsi que le modèle d'Anderson périodique, sont les hamiltoniens typiques pour décrire la physique des composés à fermions lourds et des isolants de Kondo¹⁴⁰. Il s'agit de considérer un réseau d'impuretés magnétiques interagissant avec des électrons itinérants. Le modèle minimal sur réseau contient donc deux paramètres, un échange magnétique J et une intégrale de saut t , soit :

$$H_{KLM} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c.) + J \sum_i \vec{S}_i^c \cdot \vec{S}_i^f,$$

où $\vec{S}_i^c = \frac{1}{2} \sum_{s,s'} c_{i,s}^\dagger \vec{\sigma}_{s,s'} c_{i,s'}$ avec $\vec{\sigma}$ les matrices de Pauli. Ce modèle est représenté sur la Fig. III.1.

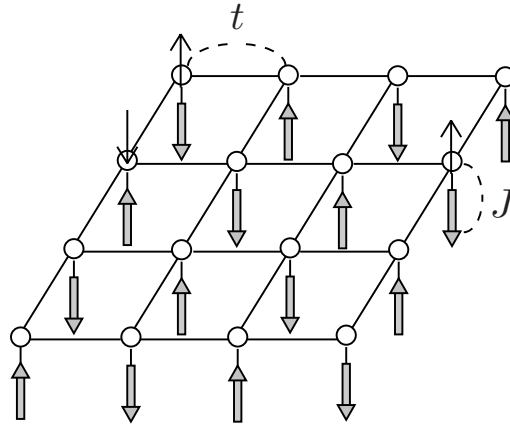


FIG. III.1 – : Schéma du réseau Kondo en deux dimensions. Les électrons itinérants ont une intégrale de saut t et interagissent par un échange magnétique J avec les spins localisés.

Lorsqu'on considère ce modèle comme la limite du modèle d'Anderson dans la limite d'une grande répulsion sur site, on obtient un couplage $J > 0$ antiferromagnétique. Cependant, en l'absence de fluctuations de charge, l'interaction d'échange provient de la règle de Hund et est ferromagnétique. Cette limite peut être pertinente pour la description des oxydes de manganèse. Dans ce mémoire, nous considérons surtout le cas $J > 0$.

La physique de ce modèle lorsqu'on considère une seule impureté est bien connue et correspond à l'effet Kondo^{141,140}. Au-dessous de la température de Kondo $T_K \propto \varepsilon_f e^{-1/JN(\varepsilon_f)}$ (ε_f est le niveau de Fermi et $N(\varepsilon_f)$ la densité d'états au niveau de Fermi), le spin de l'impureté est écranté par les électrons de conduction. Physiquement, cela se traduit par le célèbre minimum de résistivité et la catastrophe d'orthogonalité¹⁴⁰. On sait également que T_K est la seule énergie caractéristique à basse température.

Lorsqu'on introduit plusieurs impuretés magnétiques, il apparaît de nouvelles échelles d'énergie : l'interaction d'échange RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) qui couple les spins des impuretés via la polarisation des électrons de conduction. Cet échange est de la forme $J_{eff}(\vec{q}) \propto -J^2 \text{Re} \chi(\vec{q}, \omega = 0)$ où $\chi(\vec{q}, \omega)$ est la susceptibilité de spin des électrons de conduction. Puisqu'il s'agit d'une interaction

d'échange, elle va avoir tendance à ordonner magnétiquement les spins, ce qui est en compétition avec l'effet Kondo.

Une simple comparaison des échelles d'énergie suggère que l'interaction RKKY va dominer à faible couplage J/t alors que l'effet Kondo sera dominant à fort couplage. Ainsi, Doniach a suggéré la possibilité d'une transition de phase quantique entre une phase ordonnée et une phase désordonnée du point de vue magnétique¹⁴². Cette compétition est représentée sur la Fig. III.2.

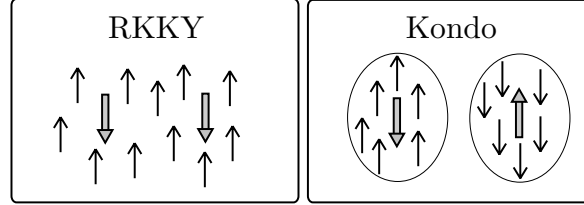


FIG. III.2 – : À gauche : la polarisation des électrons de conduction engendre une interaction effective magnétique RKKY entre les spins localisés, ce qui peut conduire à un ordre magnétique. À droite, lorsque J domine, l'effet Kondo va former un singulet à partir d'un spin localisé et d'un nuage d'électrons de conduction; cet état ne possède donc pas d'ordre magnétique.

Ainsi, nous avons décidé d'étudier le cas du demi-remplissage qui ne présente pas de problème de signe. Quant à la dimension, nous choisissons $d = 2$ qui permet d'avoir une transition de phase quantique à $T = 0$ tout en ayant accès à de grandes tailles de systèmes (la longueur linéaire des réseaux varie de 4 à 12).

Les premières études par Monte-Carlo quantique fermionique ont été effectuées par Fye et Scalapino^{135,136}. Ces auteurs ont remarqué que, bien que possédant la symétrie particule-trou, l'algorithme présentait un problème de signe, ce qui empêchait les simulations à basse température. En fait, le lien entre symétrie particule-trou et absence ou non du problème de signe n'est pas du tout évident. Toutefois, nous avons proposé une formulation légèrement différente de l'algorithme de Monte-Carlo qui ne possède plus le problème de signe au demi-remplissage. La preuve est donnée dans la publication [10].

3.2 Propriétés à $T = 0$

Le comportement de l'état fondamental a été étudié par Assaad¹³⁷. Dans le cas d'un couplage antiferromagnétique, $J > 0$, le scénario de Doniach est vérifié : la compétition entre l'effet Kondo et l'interaction RKKY engendre une transition de phase quantique pour $J_c/t = 1.45 \pm 0.05$. L'aimantation alternée, qui est le paramètre d'ordre antiferromagnétique, s'annule et un gap de spin fini apparaît. Quant aux propriétés de charge, le système reste isolant pour tous les couplages et le gap de quasiparticule varie comme J .

Dans notre étude, nous avons complété cette image en étudiant en détails les propriétés dynamiques. Afin de calculer la susceptibilité dynamique de spin,

$$S(\vec{q}, \omega) = \pi \sum_n |\langle n | \vec{S}(\vec{q}) | 0 \rangle|^2 \delta(\omega - (E_n - E_0)),$$

où la somme porte sur une base complète d'états propres et $|0\rangle$ correspond au fondamental, on utilise la fonction de corrélation spin-spin en temps imaginaire :

$$\langle 0 | \vec{S}(\vec{q}, \tau) \cdot \vec{S}(-\vec{q}) | 0 \rangle = \frac{1}{\pi} \int d\omega e^{-\tau\omega} S(\vec{q}, \omega).$$

Ici, nous utilisons la représentation de Matsubara : $\vec{S}(\vec{q}, \tau) = e^{\tau H} \vec{S}(\vec{q}) e^{-\tau H}$. Cette fonction de corrélation est calculable en Monte-Carlo quantique^{131,132}. Malheureusement, la transformée de Laplace nécessaire pour passer des données en temps imaginaire aux données en fréquence, est un problème numériquement mal posé. Nous utilisons par conséquent la méthode d'Entropie Maximale¹³³.

Nos résultats montrent que ce facteur de structure dynamique de spin, $S(\vec{q}, \omega)$, évolue depuis la limite de couplage fort avec un gap à $\vec{q} = (\pi, \pi)$ vers une forme typique d'onde de spin dans la phase ordonnée.

Pour l'étude des propriétés de charge, nous calculons la fonction spectrale à une particule $A(\vec{k}, \omega)$ qui est reliée à la fonction de Green en temps imaginaire par :

$$\langle c_{\vec{k}}^{\dagger}(\tau) c_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^{\infty} d\omega e^{-\tau\omega} A(\vec{k}, -\omega).$$

À nouveau, la méthode d'Entropie Maximale est utilisée pour extraire $A(\vec{k}, \omega)$. Cette fonction spectrale montre une dispersion en accord avec l'hybridation attendue dans le modèle de Anderson sans interaction. En outre, dans la phase ordonnée, il existe des répliques de bandes (*shadow bands*) que nous avons interprétées par la coexistence d'un écrantage Kondo avec l'ordre magnétique. En effet, dans la phase antiferromagnétique, les électrons vont ressentir les fluctuations de spin au vecteur d'onde $\vec{Q} = (\pi, \pi)$. On peut alors comprendre que si la fonction de Green possède un pôle pour un vecteur $\vec{k}$, alors elle aura également un pôle au vecteur $\vec{k} + \vec{Q}$.

Ainsi, dans la phase ordonnée, l'écrantage Kondo est incomplet et les moments restants peuvent s'ordonner magnétiquement.

Concernant le dopage dans ce modèle, la question concernant une surface de Fermi grande (dont le volume inclut les électrons itinérants et localisés) ou petite (incluant seulement les électrons de conduction) est cruciale dans la physique des fermions lourds. En effet, certaines expériences mesurent une surface de Fermi très petite, qui ne correspond donc qu'aux électrons de conduction. Or, théoriquement, le théorème de Luttinger assure que le volume de la surface de Fermi ne change pas en présence d'interactions¹⁴³.

Bien qu'il ne soit pas possible de doper notre système à cause du problème de signe, nous pouvons supposer que la structure de bandes va rester la même. En faisant cette hypothèse, nous pouvons prédire que, en dopant, le volume de la surface de Fermi va dépendre du signe de J : il apparaît une grande (petite) surface de Fermi pour $J > 0$ ($J < 0$). Ces résultats sont en accord avec ceux obtenus en dimension infinie¹⁴⁴. En outre, nous attendons une masse effective très grande, en accord avec la physique des composés fermions lourds.

3.3 Propriétés à température finie

À température finie, l'étude du maximum des susceptibilités de charge χ_C et de spin χ_S permet de définir des températures caractéristiques T_C et T_S respectivement.

La température de charge varie comme J pour tous les couplages. Quant à celle de spin, on voit sur la Fig. III.3, qu'il existe un changement de régime entre une loi en J^2 (en accord avec l'interaction RKKY) et une variation en J en couplage fort (ce qui suit le comportement du gap de spin). Nous avons relié ces échelles caractéristiques aux différentes observables physiques. Ici, nous voulons juste les illustrer avec le comportement de la densité d'états locale en fonction de la température.

Dans la limite de couplage fort, la formation des singulets Kondo résulte en l'ouverture d'un gap dans les excitations à une particule. Par contre, en couplage faible, la situation est moins claire et de nombreuses méthodes prédisent un gap exponentiellement faible :

- L'analyse champ moyen ne prenant en compte que l'écrantage Kondo¹⁴⁵.

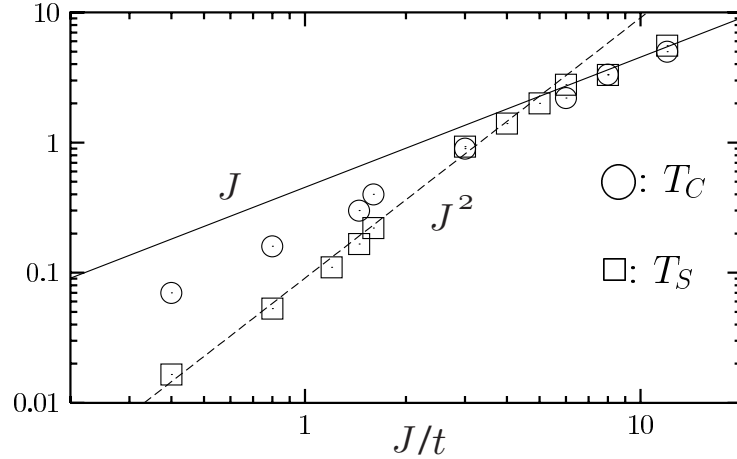


FIG. III.3 – : Températures caractéristiques de spin (T_S) et de charge (T_C), définies par le maximum des susceptibilités χ_S et χ_C , en fonction de J . Pour J/t élevé, le comportement asymptotique, obtenu pour des sites découplés, est $T_S = 0.453J$ (représenté par une ligne pleine); à faible J , T_S suit un comportement en J^2 (ligne pointillée) en accord avec l'interaction RKKY. Figure extraite de la publication [10].

- L'approximation de Gutzwiller¹⁴⁶.
- la théorie du champ moyen dynamique¹⁴⁷.
- Les développements en $1/N$ ¹⁴⁸.

Au contraire, une théorie champ moyen prenant en compte l'ordre magnétique conduit à un gap de $J/4$ en bon accord avec les données numériques.

Nous avons clarifié ces différences en soulignant les deux mécanismes présents : au-dessous de T_C , un faible gap s'ouvre, compatible avec une valeur exponentiellement faible; ensuite, le gap d'ordre J ne se forme qu'au-dessous de T_S . Ce sont donc les fluctuations de l'ordre magnétique qui sont responsables de cette valeur élevée du gap. Ainsi, les approches mentionnées ci-dessus qui négligent l'ordre magnétique n'obtiennent qu'un gap exponentiellement faible.

Ce scénario est validé par exemple par le comportement de la densité d'états intégrée en fonction de la température, $N(\omega)$, obtenue par Entropie Maximale (voir Fig. III.4). Au voisinage de $T_C = 0.16t$ ($\beta t = 6$), on observe une réduction de poids spectral au niveau de Fermi, due à la présence d'un écrantage Kondo. Par contre, le gap d'ordre J n'apparaît qu'au-dessous de la température magnétique $T_S = 0.05t$ ($\beta t = 20$), qui est beaucoup plus basse et qui correspond aux fluctuations de la mise en ordre des spins.

3.4 Propriétés thermodynamiques

Outre les diverses observables, nous avons souhaité calculé le comportement de la chaleur spécifique $C_v(T)$ car elle contient des informations à la fois sur les degrés de liberté de charge et de spin. En principe, il est facile d'obtenir $C_v(T)$ à partir de sa définition :

$$C_v(T) = \frac{1}{N} dE/dT = \frac{1}{N} (\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2) / T^2,$$

c'est-à-dire à partir des fluctuations de l'énergie interne. Cependant, cette technique est inapplicable à basse température et nous avons utilisé un algorithme d'entropie maximale, proposé dans ce contexte¹⁴⁹.

En l'absence de couplage ($J/t = 0$), la chaleur spécifique est donnée par la somme d'un pic delta correspondant aux spins localisés libres et à la contribution des fermions libres. Pour J non nul, ces

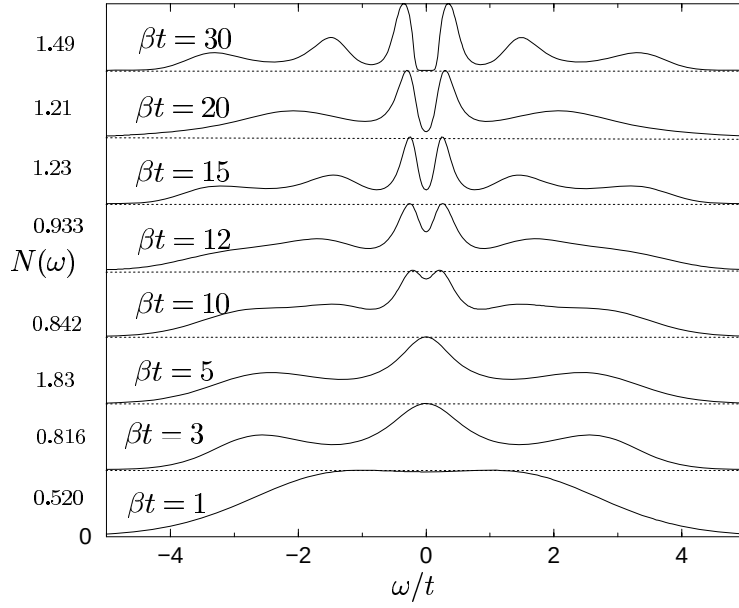


FIG. III.4 – : Densité d'états intégrée sur $\vec{k}$ pour $J/t = 0.8$ et $L = 8$ pour plusieurs températures. Le facteur de normalisation des courbes est indiqué sur la gauche. (Figure extraite de la publication [10]).

structures vont être couplées et nous avons été capables de les résoudre : la partie électronique varie peu mais le pic suit le comportement de T_S , ce qui indique bien son origine magnétique.

3.5 Lien avec les expériences

Le scénario que nous obtenons à partir de nos simulations du réseau Kondo peut être confronté aux résultats expérimentaux (voir par exemple la revue (150)). Dans le cas du composé $\text{Ce}_3\text{Bi}_4\text{Pt}_3$, l'ouverture d'un gap est relié à la diminution du moment effectif des impuretés. Nous avons également calculé la conductivité optique en fonction de la température afin de la comparer directement aux mesures optiques et nous observons un transfert de poids spectral des basses énergies vers les hautes pour une température $T \simeq T_C$ où nous avons également observé l'écrantage des moments.

Ce composé constitue un exemple se situant dans la phase Kondo du diagramme de phase. Il existe également des composés isolants possédant un ordre antiferromagnétique comme CeNiSn . Expérimentalement, ce composé montre un pic à 12 K dans la susceptibilité magnétique et une anomalie dans la chaleur spécifique¹⁵¹. À nouveau, ces caractéristiques sont compatibles avec nos simulations faites dans la phase magnétique.

Il faut également mentionner le développement actuel des systèmes Kondo «artificiels» à base de boîtes quantiques¹⁵², éventuellement avec deux canaux¹⁵³, ou bien en arrangeant selon une géométrie quelconque un nombre fini arbitraire d'impuretés magnétiques¹⁵⁴. Ces réalisations expérimentales permettront sans doute des modélisations similaires que nous pourrions étudier.

3.6 Projet : Étude du réseau Kondo avec des impuretés dilués

Dans notre approche, l'absence du problème de signe n'est pas limité au seul réseau Kondo mais est seulement reliée au demi-remplissage de la bande de conduction. Par conséquent, le nombre d'impuretés magnétiques et leurs positions peuvent être variables. Il est possible par exemple de considérer un

sous-réseau régulier d'impuretés¹⁵⁵, ou bien d'appliquer un champ magnétique afin de supprimer le gap de spin^{156,157} etc. Avec F. Assaad (Würzburg), nous aimerions regarder le cas d'un réseau aléatoire d'impuretés. Dans ce régime, bien que la phase soit isolante à température nulle, nous attendons un régime étendu de température où les effets de remplissage ne jouent pas et où la physique corresponde donc à une phase métallique de fermions lourds.

Il est également envisageable d'augmenter le nombre de canaux des électrons de conduction, par exemple en considérant deux plans découplés interagissant chacun avec les mêmes impuretés magnétiques. Il s'agit d'un réseau Kondo à deux canaux dont la physique est encore plus riche. Par exemple, le cas d'une impureté conduit à une phase qui n'est pas un liquide de Fermi¹⁴⁰. Il serait intéressant d'étudier l'évolution en fonction du nombre d'impuretés et de la température, ce qui est tout à fait possible avec un algorithme analogue.

III.4 Phase brisant la symétrie par renversement du temps

Les systèmes fortement corrélés sont intéressants car ils peuvent présenter des phases exotiques, comme par exemple des phases avec l'apparition spontanée de courants de charge à température nulle. Il s'agit d'un exemple de brisure spontanée d'une symétrie microscopique, ici la symétrie par renversement du temps. Selon le contexte, une telle phase est appelée antiferromagnétisme orbital, phase de flux, ou encore onde de densité de symétrie d (DDW). Par exemple, dans le contexte des supraconducteurs à haute température critique, cet état a été proposé pour expliquer la phase dite pseudogap^{158,76} mais cela pourrait également s'appliquer à la phase pseudogap d'oxydes de métaux de transition tridimensionnels¹⁵⁹ (comme SrRuO_3). Par ailleurs, une phase de flux incommensurable a été proposée pour expliquer l'ordre caché dans URu_2Si_2 , qui est un fermion lourd¹⁶⁰.

Dans le cas des supraconducteurs, l'argument est le suivant : au demi-remplissage, on peut montrer que la phase de flux est équivalente à une phase BCS de symétrie d projetée sur les états non doublement occupés. À dopage fini, cette équivalence disparaît et il existe donc une compétition entre ces deux phases. Ainsi, la phase pseudogap pourrait correspondre à une phase de flux⁷⁶. Malheureusement, les preuves expérimentales sont encore très controversées.

Quand de telles propositions théoriques sont faites, il nous apparaît important de les établir à partir de modèles microscopiques.

4.1 Phase de flux dans les échelles

Grâce à des méthodes analytiques et numériques performantes, les échelles dopées ont servi de laboratoire théorique pour cette étude. Une phase de flux commensurable a ainsi été prédite au demi-remplissage grâce à des techniques de bosonisation et de renormalisation^{161–163}, cette phase est également possible en dehors du demi-remplissage mais dans ce cas, les fluctuations sont à des vecteurs d'ondes incommensurables^{164,162}.

Ces analyses en couplage faible ne sont pas nécessairement fiables pour des couplages réalistes, et il est important de valider ces prédictions par des études numériques non biaisées.

En collaboration avec K. Tsutsui et D. Poilblanc, nous avons recherché si il était possible de stabiliser la phase de flux (publication [13]). Cette phase présente des courants spontanés circulant sur les plaquettes d'une échelle (voir Fig. III.5).

Dans le cadre du modèle t - J isotrope, des études similaires ont conclu par la négative¹⁶⁵; nous considérons donc un modèle étendu incluant un terme cinétique t' selon les diagonales. L'intérêt du terme t' est que, selon son signe, il va soit stabiliser l'appariement des trous, soit au contraire le diminuer, voire



FIG. III.5 – : Schéma représentant l'apparition de courants spontanés alternés, caractéristiques d'une phase de flux, sur une échelle à deux montants.

l'empêcher en supprimant les paires. Il semble également nécessaire d'introduire ce terme afin de décrire précisément la structure de bandes des composés supraconducteurs bidimensionnels.

La suppression des fluctuations supraconductrices est susceptible de favoriser la phase de flux en compétition. Nos résultats ont montré que ce scénario est qualitativement valable puisque les fluctuations de courant alternés se renforcent lorsque les paires se dissocient. Malheureusement, il n'existe pas d'ordre à longue portée (publication [13]). Ceci a été confirmé depuis par d'autres études numériques¹⁶⁶.

Ainsi, la phase de flux ne paraît pas réalisable dans le cadre du modèle t-J sur une échelle mais elle peut apparaître pour des modèles plus complexes.

Numériquement, cette phase a été trouvée au demi-remplissage¹⁶⁷ et en dehors¹⁶⁶ pour le modèle SZH introduit par Scalapino, Zhang et Hanke¹⁶⁸ :

$$\begin{aligned}
 H = & -t_{\parallel} \sum_{\langle ij \rangle} \{c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + d_{i\sigma}^{\dagger} d_{j,\sigma} + h.c.\} - t_{\perp} \sum_i \{c_{i,\sigma}^{\dagger} d_{i,\sigma} + h.c.\} - \mu \sum_i \{c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma} + d_{i,\sigma}^{\dagger} d_{i,\sigma}\} \\
 & + J \sum_i \vec{S}_{i,c} \cdot \vec{S}_{i,d} + U \sum_i n_{i,\uparrow,c} n_{i,\downarrow,c} + n_{i,\uparrow,d} n_{i,\downarrow,d} + V \sum_i n_{i,c} n_{i,d},
 \end{aligned} \quad (III.2)$$

où c et d représentent les opérateurs fermioniques sur chaque montant de l'échelle et σ correspond aux deux états de spin.

La possibilité d'obtenir des phases portant des courants spontanés dans le cas d'échelles dopées a relancé le débat sur la pertinence de cette phase pour décrire des composés bidimensionnels.

4.2 Courants spontanés dans des bicouches fermioniques

En collaboration avec S.C. Zhang et C.J. Wu (Stanford), nous avons mis en évidence, pour la première fois en dimension plus grande que un, l'existence d'une phase brisant la symétrie par renversement du temps (publication [22]).

Nous avons considéré une généralisation à deux dimensions du modèle SZH introduit dans la section précédente (III.2). On peut montrer que cet hamiltonien ne cause pas de problème de signe dans une certaine gamme de paramètres¹⁶⁹, ce qui nous a permis d'obtenir des résultats précis à partir de simulations Monte-Carlo quantiques. En particulier, nous montrons qu'il peut exister un état fondamental présentant des courants alternés entre les couches (voir Fig. III.6). Vue du dessus, la symétrie des courants est s , ce qui différencie cet état de la phase DDW.

4.2.1 Arguments en couplage fort

Nous résumons d'abord l'analyse faite en couplage fort qui permet d'estimer les limites des différentes phases.

En résolvant un barreau au demi-remplissage, il est possible de représenter les régions où le fondamental est un singulet sur le barreau (Fig.III.7 b), ou bien un état *onde de densité de charge* (Fig.III.7 a et c). Dans le cas d'une échelle, l'apparition d'une phase DDW avec des courants résulte de la compétition entre ces phases^{167,166}. Il est par conséquent naturel d'attendre une phase avec courants lorsque ces états

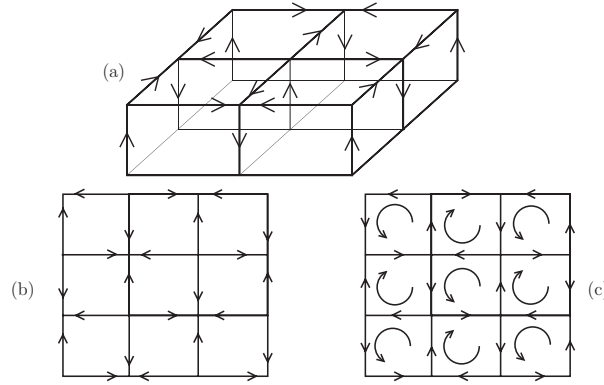


FIG. III.6 – : (a) Schéma d'une phase portant des courants alternés. Par souci de clarté, nous omettons les courants sur le plan inférieur. Par conservation, chaque nœud agit soit comme une source, soit comme un puits de courant entre les deux plans. (b) Vue de dessus du système. (c) Pour comparaison, schéma de ce que serait une phase de flux alternée. (Figure extraite de la publication [22].)

sont dégénérés, ce qui arrive lorsque $U = V - 3J/4$ et cette ligne est représentée sur le diagramme de phase de la Fig. III.8. C'est effectivement au voisinage de cette ligne que des courants ont été observés dans des échelles.

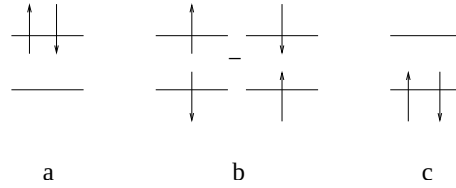


FIG. III.7 – : Schéma des états doublement occupés (a) et (c), et du singulet sur un barreau (b). Ces trois états sont des singulets $SU(2)$ mais forment une représentation triplet de l'algèbre du pseudospin $SU(2)$.

Proche de cette ligne, nous avons construit un modèle effectif ne retenant que ces trois états par barreaux; le couplage entre barreaux voisins est obtenu au deuxième ordre en perturbation. On obtient ainsi un modèle de pseudo-spin 1 en deux dimensions avec un couplage antiferromagnétique, un champ magnétique uniforme $t_{\perp}$, et une anisotropie planaire ou axiale sur site.

L'analyse en champ moyen de ce modèle nous fournit des critères de stabilité pour la phase possédant des courants :

$$V - \frac{3}{4}J < U < \min(V + \frac{J}{4}, 2V), \quad V > 0$$

$$t_{\perp} < \frac{1}{2}zJ_p \sqrt{1 - (\Delta U/zJ_p)^2}, \quad \Delta U < zJ_p,$$

où z est la coordianance du réseau et ΔU correspond à la différence des énergies entre les états (a) et (b) de la Fig. III.7, c'est-à-dire à l'anisotropie. Ces conditions assurent que les trois états retenus soient bien les plus bas en énergie et qu'il puisse exister une superposition cohérente.

Certaines lignes caractéristiques sont représentées sur la Fig. III.8. En particulier, nous indiquons la région où est attendue la possibilité d'une phase possédant des courants. Dans le cas des échelles, un diagramme de phase similaire a été proposé¹⁶³, et les phases DDW ont été obtenues numériquement proche de la ligne $V = U + 3/4J$ où les trois états de basse énergie a , b et c sont dégénérés¹⁶⁶.

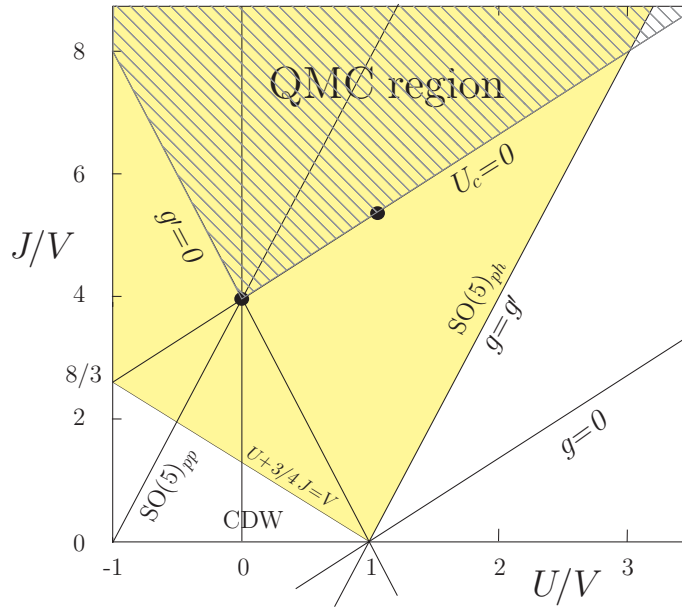


FIG. III.8 – : Diagramme de phase du modèle de bicouche dans la limite de couplage fort. La région hachurée est celle où le problème de signe est absent pour tout remplissage et correspond à : $g > 0$, $g' > 0$ and $U_c > 0$. Dans la région jaune, les états de basse énergie sont les états bosoniques a , b et c de la Fig. III.7 et leur compétition peut produire la phase avec courants ou bien une phase de singulets sur les barreaux. Les points noirs correspondent aux valeurs choisies pour les simulations. Figure extraite de la publication [22].

Le modèle SZH présente également des symétries particulières :

- Une symétrie $SO(5)$ dans le canal particule-particule ($SO(5)_{pp}$) lorsque $J = 4(U + V)$ et $\mu = 0$ (demi-remplissage), qui unifie les paramètres d'ordre supraconducteur et antiferromagnétique¹⁶⁸.
- Une symétrie $SO(5)$ dans le canal particule-trou ($SO(5)_{ph}$) lorsque $J = 4(U - V)$ et $t_{\perp} = 0$, quel que soit le remplissage¹⁶⁹.

Ces relations sont également tracées sur la Fig. III.8.

4.2.2 Simulations numérique

À l'aide des opérateurs fermioniques n_a suivants,

$$\begin{aligned} n_1(i) &= -i(d_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma} - c_{i\sigma}^{\dagger}d_{i\sigma})/2 \\ n_5(i) &= (d_{i\sigma}^{\dagger}c_{i\sigma} + c_{i\sigma}^{\dagger}d_{i\sigma})/2 \\ n_{2,3,4}(i) &= c_{i\alpha}^{\dagger} \left(\frac{\vec{\sigma}}{2} \right)_{\alpha\beta} c_{i\beta} - d_{i\alpha}^{\dagger} \left(\frac{\vec{\sigma}}{2} \right)_{\alpha\beta} d_{i\beta}, \end{aligned} \quad (\text{III.3})$$

il est possible de réécrire les termes d'interaction de l'hamiltonien SZH sous la forme suivante :

$$H_{int} = -\frac{g}{2}(n_1^2 + n_5^2) - \frac{g'}{2}(n_2^2 + n_3^2 + n_4^2) - \frac{U_c}{2}(n - 2)^2, \quad (\text{III.4})$$

avec $4U_c = -U - 3V + 3J/4$, $4g = V - U + 3J/4$ et $4g' = U - V + J/4$. La symétrie $SO(5)_{ph}$ est clairement établie lorsque $g = g'$, c'est-à-dire $U = V + J/4$.

Wu, Hu et Zhang¹⁶⁹ ont montré que le problème de signe est absent lorsque les coefficients g , g' and U_c sont tous positifs. Cette région est hachurée sur la Fig. III.8, et étonnamment, celle-ci inclut le cas d'interactions purement répulsives avec U , V et J positifs.

Comme nous l'avons expliqué dans la partie algorithmique Monte-Carlo, il est nécessaire de découpler chaque interaction à l'aide d'un champ de Hubbard-Stratonovitch. Pour des interactions de cette forme, il est plus efficace pour l'échantillonnage de travailler avec des champs discrets prenant quatre valeurs¹⁷⁰ :

$$e^{\Delta\tau V(n(i,\tau)-2)^2} = \sum_{\ell,s=\pm 1} \frac{\gamma_\ell}{4} e^{s\eta_\ell \sqrt{\Delta\tau V}(n(i,\tau)-2)} + O(\Delta\tau^4),$$

$$e^{\Delta\tau W n_a^2(i,\tau)} = \sum_{\ell,s=\pm 1} \frac{\gamma_\ell}{4} e^{s\eta_\ell \sqrt{\Delta\tau W} n_a(i,\tau)} + O(\Delta\tau^4),$$

où $\gamma_\ell = 1 + \frac{\sqrt{6}}{3}\ell$ et $\eta_\ell = \sqrt{2(3 - \sqrt{6}\ell)}$.

Comme dans le cas du découplage discret mentionné pour le modèle de Hubbard (III.1), l'erreur commise peut être négligée devant l'erreur de Trotter. La différence ici consiste à introduire deux variables d'Ising par site et par tranche de temps, pour chacune des interactions.

Puisque nous sommes intéressés par les propriétés de l'état fondamental, il est plus pratique de travailler avec l'algorithme projecteur qui permet de fixer le nombre de particules et converge plus rapidement vers $T = 0$. Le principe est de calculer :

$$\exp(-\theta H)|\psi_T\rangle$$

à partir d'un état initial quelconque $|\psi_T\rangle$. Lorsque θ augmente, l'état obtenu converge rapidement vers le fondamental exact et permet d'en déduire toutes ses caractéristiques.

Le paramètre d'ordre pour la phase présentant des courants est la fonction de corrélation courant-courant sur les barreaux, qui a pour transformée de Fourier :

$$J(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \sum_i \langle n_1(i) n_1(i + \vec{r}) \rangle. \quad (\text{III.5})$$

La Fig. III.9 montre tout d'abord la convergence de cette observable en fonction du paramètre de projection θ , ce qui nous permet d'estimer sa valeur dans l'état fondamental pour un système de taille finie. Ensuite, nous faisons une analyse de taille finie à partir des données obtenues pour plusieurs systèmes afin d'extrapoler à la limite thermodynamique. Nous voyons sur la figure que les effets de taille sont minimes, ce qui est attendu pour une phase brisant une symétrie discrète. Nous observons également que le paramètre d'ordre est fini et peut être obtenu soit à partir de la transformée de Fourier $J(\vec{Q})/N$, soit directement avec les données en espace réel en prenant la valeur de la fonction de corrélation à la plus grande distance possible, qui est $J(L/2, L/2)$ à cause des conditions aux limites périodiques.

Ainsi, nous avons la preuve de l'existence d'une phase possédant des courants alternés et ordonnée à longue portée telle que présentée dans la Fig. III.6.

Afin de comprendre la stabilité de cette phase, nous pouvons modifier les paramètres soit en augmentant l'intégrale de saut transverse $t_\perp$ soit en augmentant ΔU , ce qui cause la disparition du paramètre d'ordre, en accord avec notre analyse de couplage fort. De même, il est possible de doper le système sans problème de signe, et là encore, l'ordre des courants disparaît. Dans ce cas, l'instabilité est due à l'absence de la propriété d'emboîtement (*nesting*) de la surface de Fermi.

Nous avons donc démontré l'existence d'une phase brisant spontanément la symétrie par renversement du temps à partir de simulations Monte-Carlo quantique non biaisées et sans problème de signe.

III.5 Projet : Modèle de Hubbard pour des spins $S = 3/2$

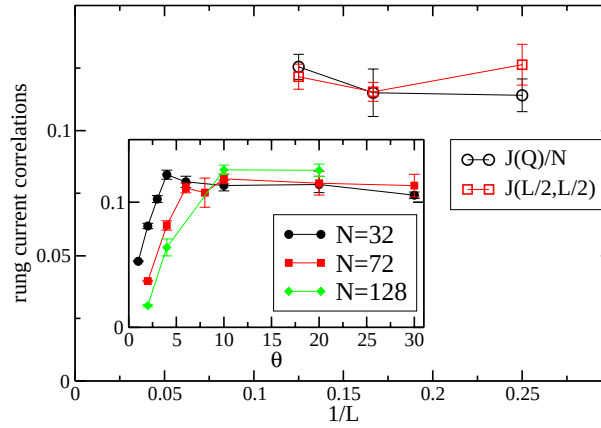


FIG. III.9 – : Les paramètres sont $t_{\perp} = 0.1$, $U = 0$, $V = 0.5$, $J = 2.0$ et nous travaillons au demi-remplissage. Analyse de taille finie de la fonction de corrélation des courants sur les barreaux $J(\vec{Q})/N$ et $J(L/2, L/2)$ vs $1/L$ montrant la quasi-absence d'effets de taille finie et prouvant l'ordre à longue portée dans la limite thermodynamique. En insert, on montre la convergence de $J(\vec{Q})/N$ en fonction du paramètre de projection θ ; typiquement, la valeur à $T = 0$ est obtenue pour $\theta = 20$. Figure extraite de la publication [22].

Cette phase existe pour un modèle de bicouches électroniques au demi-remplissage. Elle peut être très facilement détruite en fonction des paramètres et du dopage ce qui contraint fortement sa pertinence pour des modèles réalistes comme ceux des supraconducteurs.

III.5 Projet : Modèle de Hubbard pour des spins $S = 3/2$

Récemment, des progrès majeurs ont été réalisés dans le domaine des gaz atomiques refroidis, piégés sur des réseaux optiques¹⁷¹. Ces systèmes vont peut être permettre des réalisations expérimentales de modèles théoriques dans des conditions quasi idéales : contrôle des paramètres et des interactions, absence de désordre etc. Ce sera peut-être un nouveau laboratoire pour les physiciens du solide.

En outre, les atomes alcalins utilisés possèdent un spin hyperfin plus élevé; par exemple, un spin $3/2$ pour les atomes ^9Be , ^{132}Cs ou ^{135}Ba . Ceci a motivé l'étude de modèles de Hubbard pour des spins plus élevés.

Le modèle de Hubbard pour des spins $S = 3/2$ s'écrit :

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \{c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + h.c.\} - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{i\sigma} + U_0 \sum_i P_0^{\dagger}(i) P_0(i) + U_2 \sum_{i, m=\pm 2, \pm 1, 0} P_{2m}^{\dagger}(i) P_{2m}(i),$$

où t est l'intégrale de saut, μ le potentiel chimique, et $P_0^{\dagger}, P_{2m}^{\dagger}$ les opérateurs de paires singulet et quintet

$$P_0^{\dagger}(i)(P_0^{\dagger}(i)) = \frac{1}{\sqrt{2}} \{c_{i, \frac{3}{2}}^{\dagger} c_{i, -\frac{3}{2}}^{\dagger} \mp c_{i, \frac{1}{2}}^{\dagger} c_{i, -\frac{1}{2}}^{\dagger}\},$$

$$P_{2,2}^{\dagger}(i) = c_{i, \frac{3}{2}}^{\dagger} c_{i, \frac{1}{2}}^{\dagger}, \quad P_{2,1}^{\dagger}(i) = c_{i, \frac{3}{2}}^{\dagger} c_{i, -\frac{1}{2}}^{\dagger}, \quad P_{2,-2}^{\dagger}(i) = c_{i, -\frac{1}{2}}^{\dagger} c_{i, -\frac{3}{2}}^{\dagger}.$$

Il est évident que le modèle SZH considéré dans la partie précédente (Eq. III.2) peut être vu comme un modèle de Hubbard de spin $3/2$ grâce à l'identification¹⁶⁹: $c_{\uparrow} = c_{3/2}$, $c_{\downarrow} = c_{1/2}$, $d_{\uparrow} = c_{-1/2}$, $d_{\downarrow} = c_{-3/2}$.

Nous pouvons ainsi utiliser les opérateurs n_a définis précédemment (Eq. III.3) :

$$\begin{aligned} n_1(i) + i n_5(i) &= -i (c_{i,-\frac{1}{2}}^\dagger c_{i,\frac{3}{2}} + c_{i,-\frac{3}{2}}^\dagger c_{i,\frac{1}{2}}), \\ n_2(i) + i n_3(i) &= c_{i,\frac{3}{2}}^\dagger c_{i,\frac{1}{2}} - c_{i,-\frac{1}{2}}^\dagger c_{i,-\frac{3}{2}}, \\ n_4(i) &= (c_{i,\frac{3}{2}}^\dagger c_{i,\frac{3}{2}} - c_{i,\frac{1}{2}}^\dagger c_{i,\frac{1}{2}} - c_{i,-\frac{1}{2}}^\dagger c_{i,-\frac{1}{2}} + c_{i,-\frac{3}{2}}^\dagger c_{i,-\frac{3}{2}})/2. \end{aligned}$$

Rappelons la signification de ces 5 composantes : les composantes $a = 2,3,4$ correspondent au spin, $a = 1$ est le courant sur lien et $a = 5$ l'énergie cinétique sur lien. Nous pouvons en outre introduire les composantes $a = 0$ et 6 pour décrire la supraconductivité sur un barreau :

$$n_0 + i n_6(i) = -(c_{i,\frac{3}{2}}^\dagger c_{i,-\frac{3}{2}}^\dagger - c_{i,\frac{1}{2}}^\dagger c_{i,-\frac{1}{2}}^\dagger).$$

Wu *et coll.* ont montré que ce modèle possède une symétrie $SO(5)$ générique pour tous les paramètres et types de réseaux¹⁶⁹.

5.1 Projet : Diagramme de phase en deux dimensions

En collaboration avec C.J. Wu et S.C. Zhang (Stanford), nous étudions analytiquement et numériquement ce modèle de Hubbard en deux dimensions. Les simulations sont restreintes à la région où le problème de signe est absent.

Afin de valider notre algorithme, nous calculons les fonctions de corrélations dynamiques

$$N_a(i, \tau) = \langle n_a(i, \tau) n_a(0, 0) \rangle$$

pour a variant de 0 à 6, en temps imaginaire. Si l'on souhaite obtenir le spectre en fréquences, il faut en faire la transformée de Laplace grâce à un algorithme d'entropie maximale.

Dans tout le diagramme de phase, la symétrie $SO(5)$ impose que les fonctions de corrélations soient toutes identiques pour $a = 1, \dots, 5$. Cependant, notre algorithme brise cette symétrie en introduisant des champs auxiliaires distincts pour chacune des interactions, et cette symétrie n'est rétablie qu'après sommation sur les configurations Hubbard-Stratonovitch. Ceci constitue un bon test de l'algorithme et nous montrons sur la Fig. III.10 un exemple illustrant cette restauration de symétrie.

En outre, Wu *et coll.* ont montré qu'il existe une symétrie plus haute ($SO(7)$) le long de la ligne $U_2 = -U_0/3$ au demi-remplissage¹⁶⁹. On voit effectivement sur la Fig. III.11 l'identité de toutes les fonctions de corrélation en temps imaginaire, modulo un décalage de (π, π) pour les fonctions de corrélations N_0 et N_6 .

5.2 Projet: Diagramme de phase en une dimension

Le cas d'un réseau optique unidimensionnel a été étudié indépendamment par Wu d'une part¹⁷² et Lecheminant, Boulat et Azaria d'autre part¹⁷³. Ils trouvent en particulier la possibilité de deux phases superfluides distinctes : une phase BCS constituée de paires et une autre phase «moléculaire» où les fermions s'associent par 4. La transition entre ces deux instabilités est prédite dans la classe d'universalité d'une transition $\mathbb{Z}_2$ (ou Ising). Soulignons que ces deux phases ne sont possibles que pour des spins $S > 1/2$.

En collaboration avec Azaria, Boulat et Lecheminant, nous proposons de valider numériquement ces idées à l'aide de simulations Monte-Carlo quantiques. En effet, la ligne de transition $\mathbb{Z}_2$ se situe, en couplage faible dans la région attractive à $U_2 = U_0/3$ et cette région est accessible sans problème de signe.

III.5 Projet : Modèle de Hubbard pour des spins $S = 3/2$

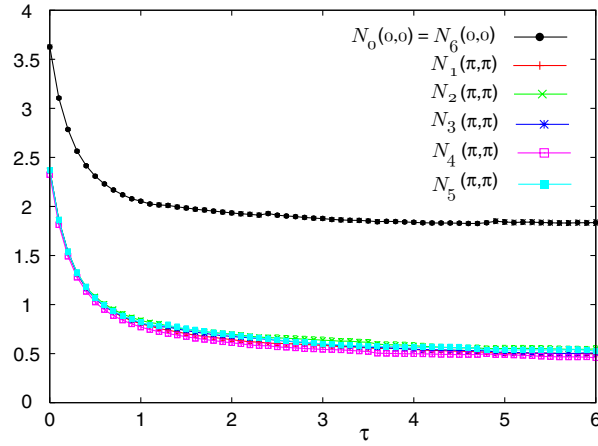


FIG. III.10 – : Fonctions de corrélations $N_a(\tau)$ au vecteur d'onde (π, π) montrant la symétrie $SO(5)$, valable pour tous les paramètres et remplissages. Ici, il s'agit d'une simulation en deux dimensions à température finie avec $U_0/t = -1$ et $U_2 = 0$, la taille linéaire vaut $L = 6$ et la température inverse est $\beta t = 12$.

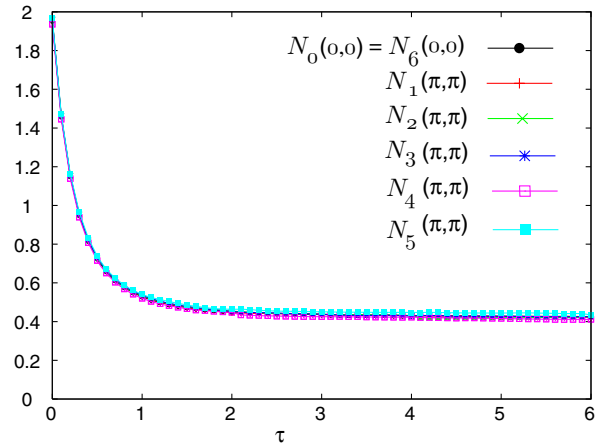


FIG. III.11 – : Fonctions de corrélations $N_a(\tau)$ montrant la symétrie $SO(7)$ au demi-remplissage pour $U_0/t = -0.3$ et $U_2/t = 0.1$. Les autres paramètres sont identiques à ceux de la figure précédente.

Nous choisissons d'abord des paramètres dans la région BCS et nous montrons sur la Fig. III.12 la fonction de corrélation supraconductrice paire-paire :

$$SC_2(x) = -\langle (c_{\frac{3}{2}}^\dagger(x)c_{-\frac{3}{2}}^\dagger(x) - c_{\frac{1}{2}}^\dagger(x)c_{-\frac{1}{2}}^\dagger(x))(c_{\frac{3}{2}}(0)c_{-\frac{3}{2}}(0) - c_{\frac{1}{2}}(0)c_{-\frac{1}{2}}(0)) \rangle \quad (\text{III.6})$$

Comme il s'agit d'un système unidimensionnel, il n'existe pas de vrai ordre mais les corrélations sont critiques, en loi de puissance.

En présence de corrélations de paires, une approche à la Ginzburg-Landau suggère qu'il existe un couplage entre ce paramètre d'ordre et la formation de «molécules» à 4 fermions par site. Ainsi, on attend également des corrélations critiques, mais plus faibles, pour la fonction de corrélation :

$$SC_4(x) = -\langle (c_{\frac{3}{2}}^\dagger(x)c_{\frac{1}{2}}^\dagger(x)c_{-\frac{1}{2}}^\dagger(x)c_{-\frac{3}{2}}^\dagger(x))(c_{\frac{3}{2}}(0)c_{\frac{1}{2}}(0)c_{-\frac{1}{2}}(0)c_{-\frac{3}{2}}(0)) \rangle \quad (\text{III.7})$$

et c'est ce que nous observons sur la Fig. III.13.

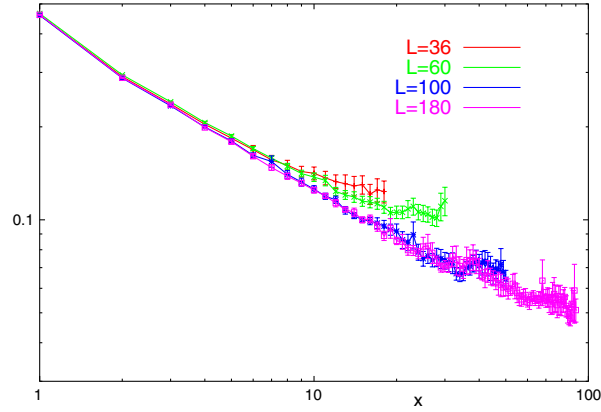


FIG. III.12 – : Corrélations paire-paire SC_2 (Eq. III.6) en fonction de la distance x pour un modèle de Hubbard de spins $S = 3/2$. Les paramètres sont $U_0/t = -3$ et $U_2 = 0$ et les simulations sont au quart-remplissage. Les tailles de systèmes L varient de 36 à 180 mais, à cause des conditions périodiques, x varie de 0 à $L/2$. Les résultats, en échelle logarithmique, indiquent un comportement en loi de puissances.

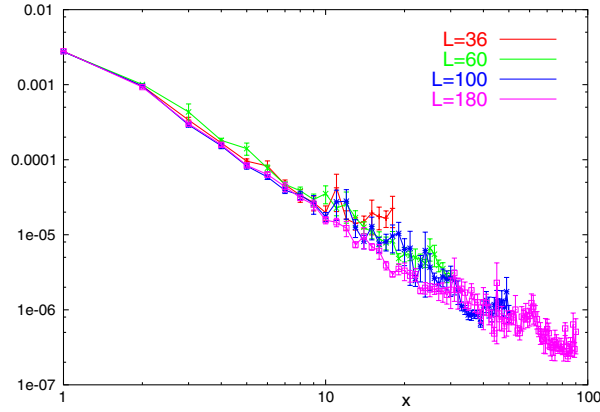


FIG. III.13 – : Corrélations SC_4 (Eq. III.7) en fonction de la distance x . Les paramètres sont identiques à ceux de la figure précédente. À nouveau, nous observons un comportement en loi de puissance.

Il serait maintenant intéressant de pouvoir exhiber une phase ne présentant que des corrélations à quatre particules mais sans corrélations de paires (phase moléculaire). Cependant, sur un réseau et pour des remplissages commensurables, cette phase peut être en compétition avec une onde de densité de charge et nous n'avons pas encore obtenu de résultats convaincants.

Nous projetons de poursuivre l'étude numérique de ce diagramme de phase, incluant également les autres régions, afin de vérifier l'existence de la transition $\mathbb{Z}_2$, ainsi que les effets de commensurabilité.

Enfin, il faut souligner que ces deux phases superfluides sont bien distinctes puisque les objets impliqués portent des charges $2e$ et $4e$ respectivement. Or, cette charge peut être observée expérimentalement, ou numériquement, à partir de la périodicité de l'énergie en fonction d'un flux Aharonov-Bohm.

Il paraît également envisageable d'étendre cette étude à des spins $S = N - 1/2$. Dans ce cas, la transition entre les deux phases superfluides serait de type $\mathbb{Z}_N$ (voir la référence (173)) et ces systèmes pourraient ainsi constituer les seules réalisations expérimentales de ce type de transition.

Conclusion et perspectives

Au cours des problèmes que nous avons rencontrés, le point commun, qui est caractéristique de l'existence de corrélations fortes, est la compétition entre plusieurs phases très différentes. Qu'il s'agisse de systèmes magnétiques ou bien de conducteurs de basse dimension, la physique de basse énergie est la cause de la variété des comportements : ordre magnétique, liquide de spin, supraconductivité, ordre de charge etc.

La difficulté de compréhension de l'origine de ces phases provient de l'absence de méthodes systématiques non biaisées permettant la simulation de systèmes de taille suffisamment grandes pour accéder à ces échelles d'énergie. Ce mémoire s'est essentiellement intéressé aux développements de telles méthodes.

Une idée relativement ancienne consiste à appliquer le groupe de renormalisation. Afin de caractériser les degrés de liberté émergents à basse énergie, il est inutile de conserver tous les détails microscopiques et il suffit en principe d'intégrer sur les petites échelles de longueur. La mise en œuvre de cette procédure a connu de nombreux échecs et ce n'est que récemment qu'un algorithme efficace a vu le jour : il s'agit de la méthode CORE (*Contractor Renormalization*). Il s'agit d'une méthode systématique pour les modèles sur réseaux dont la validité peut en principe être contrôlée. Les méthodes évoquées ici ne sont pas propres à la physique des solides puisque cet algorithme a été proposé dans le contexte des théories de jauge sur réseaux.

Nous avons appliqué cette technique avec succès à la fois à des systèmes magnétiques et dopés. Cette méthode non perturbative est capable de reproduire des transitions de phase quantiques, de décrire correctement les états pertinents de basse énergie d'une phase magnétique, ou bien encore de déduire des modèles effectifs fiables pour les échelles dopées.

Dans le cas plus complexe des supraconducteurs à haute température critique, la proposition d'un modèle effectif bosonique permet des simulations à grandes échelles qui conduisent à de nombreuses prédictions ou vérifications expérimentales. Ces études sont limitées à la région sous-dopée où l'existence de paires préformées permet cette approximation. En particulier, l'importance des phases solides correspondant à des cristaux de Wigner de paires de trous a fourni une explication à de nombreuses mesures expérimentales. Bien évidemment, le développement de cette approche en incluant des degrés de liberté fermioniques a été évoqué et fait partie des projets futurs.

Le dernier chapitre a porté sur quelques développements de la technique de Monte-Carlo quantique pour les problèmes fermioniques. Il s'agit d'une méthode numérique systématique et non biaisée. Malheureusement, sa principale limitation est le problème de signe qui empêche la simulation de la plupart des modèles à basse température et pour de grandes tailles. Nous avons montré que ce problème pouvait disparaître dans certains cas, ce qui permet des études rigoureuses et donne des points de repère aux autres approches.

En conclusion, le développement de méthodes numériques fiables permettant d'étudier précisément l'existence et la compétition des diverses phases de la matière est un domaine toujours très actif, comme en témoignent les résultats et projets présentés dans ce mémoire.

Bibliographie

- (1) P. W. ANDERSON, *More is different*, Science **177**, 393 (1972).
- (2) R. B. LAUGHLIN ET D. PINES, *The theory of everything*, Proceedings of the National Academy of Sciences of the United States of America **97**, 28 (2000).
- (3) E. DAGOTTO, *Complexity in strongly correlated electronic systems*, Science **309**, 257 (2005).
- (4) K. G. WILSON, *The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem*, Rev. Mod. Phys. **47**, 773 (1975).
- (5) S. R. WHITE ET R. M. NOACK, *Real-space quantum renormalization groups*, Physical Review Letters **68**, 3487 (1992).
- (6) S. R. WHITE, *Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups*, Physical Review Letters **69**, 2863 (1992).
- (7) U. SCHOLLWÖCK, *The density-matrix renormalization group*, Rev. Mod. Phys. **77**, 259 (2005).
- (8) C. J. MORNINGSTAR ET M. WEINSTEIN, *Contractor Renormalization Group Method: A New Computational Technique for Lattice Systems*, Physical Review Letters **73**, 1873 (1994).
- (9) C. J. MORNINGSTAR ET M. WEINSTEIN, *Contractor renormalization group technology and exact Hamiltonian real-space renormalization group transformations*, Physical Review D **54**, 4131 (1996).
- (10) E. BERG, E. ALTMAN ET A. AUERBACH, *Singlet excitations in pyrochlore: A study of quantum frustration*, Physical Review Letters **90**, 147204 (2003).
- (11) E. ALTMAN ET A. AUERBACH, *Plaquette boson-fermion model of cuprates*, Physical Review B **65**, 104508 (2002).
- (12) J. PIEKAREWICZ ET J. R. SHEPARD, *Plaquette basis for the study of Heisenberg ladders*, Physical Review B **56**, 5366 (1997).
- (13) N. LAFLORENCIE ET D. POILBLANC, *Simulations of pure and doped low-dimensional spin-1/2 gapped systems*, Springer Lecture Notes in Physics **645**, 227 (2004).
- (14) M. WEINSTEIN, *Contractor renormalization group and the Haldane conjecture*, Physical Review B **63**, 174421 (2001).
- (15) J. P. MALRIEU ET N. GUIHÉRY, *Real-space renormalization group with effective interactions*, Physical Review B **63**, 085110 (2001).
- (16) R. BUDNIK ET A. AUERBACH, *Low-energy singlets in the Heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice.*, Physical Review Letters **93**, 187205 (2004).
- (17) M. AL HAJJ, N. GUIHÉRY, J. P. MALRIEU ET B. BOCQUILLON, *Real space renormalization group with effective interactions: applications to 2-D spin lattices*, European Physical Journal B **41**, 11 (2004).
- (18) M. AL HAJJ, N. GUIHÉRY, J. P. MALRIEU ET P. WIND, *Theoretical studies of the phase transition in the anisotropic two-dimensional square spin lattice*, Physical Review B **70**, 094415 (2004).
- (19) P. LI ET S. Q. SHEN, *Contractor renormalization group theory of $SU(N)$ chains and ladders*, Physical Review B **71**, 212401 (2005).

- (20) E. DAGOTTO ET T. M. RICE, *Surprises on the way from one- to two-dimensional quantum magnets: the ladder materials.*, Science **271**, 618 (1996).
- (21) S. R. WHITE, R. M. NOACK ET D. J. SCALAPINO, *Resonating valence-bond theory of coupled Heisenberg-chains*, Physical Review Letters **73**, 886 (1994).
- (22) K. KAWANO ET M. TAKAHASHI, *Three-leg antiferromagnetic Heisenberg ladder with frustrated boundary condition; Ground state properties*, Journal of the Physical Society of Japan **66**, 4001 (1997).
- (23) D. C. CABRA, A. HONECKER ET P. PUJOL, *Magnetization plateaux in N-leg spin ladders.*, Physical Review B **58**, 6241 (1998).
- (24) E. LIEB, T. SCHULTZ ET D. MATTIS, *2 soluble models of an antiferromagnetic chain*, Annals of Physics **16**, 407 (1961).
- (25) Y. NARUMI, M. HAGIWARA, R. SATO, K. KINDO, H. NAKANO ET M. TAKAHASHI, *High field magnetization in an $S=1$ antiferromagnetic chain with bond alternation*, Physica B **246-247**, 509 (1998).
- (26) M. OSHIKAWA, M. YAMANAKA ET I. AFFLECK, *Magnetization plateaus in spin chains: "Haldane gap" for half-integer spins*, Physical Review Letters **78**, 1984 (1997).
- (27) M. OSHIKAWA, *Commensurability, excitation gap, and topology in quantum many-particle systems on a periodic lattice*, Physical Review Letters **84**, 1535 (2000).
- (28) F. MILA, *Ladders in a magnetic field: a strong coupling approach.*, European Physical Journal B **6**, 201 (1998).
- (29) K. TOTSUKA, *Magnetization plateau in the $S=1/2$ Heisenberg spin chain with next-nearest-neighbor and alternating nearest-neighbor interactions.*, Physical Review B **57**(6), 3454 (1998).
- (30) F. D. M. HALDANE, *General Relation of Correlation Exponents and Spectral Properties of One-Dimensional Fermi Systems: Application to the Anisotropic $S=1/2$ Heisenberg Chain*, Physical Review Letters **45**, 1358 (1980).
- (31) N. OKAZAKI, J. MIYOSHI ET T. SAKAI, *Magnetization plateau in the frustrated spin ladder*, Journal of the Physical Society of Japan **69**, 37 (2000).
- (32) H. KAGEYAMA, K. YOSHIMURA, R. STERN, N. MUSHNIKOV, K. ONIZUKA, M. KATO, K. KOSUGE, C. P. SLICHTER, T. GOTO ET Y. UEDA, *Exact dimer ground state and quantized magnetization plateaus in the two-dimensional spin system $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$* , Physical Review Letters **82**, 3168 (1999).
- (33) K. ONIZUKA, H. KAGEYAMA, Y. NARUMI, K. KINDO, Y. UEDA ET T. GOTO, *$1/3$ magnetization plateau in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$: Stripe order of excited triplets*, Journal of the Physical Society of Japan **69**, 1016 (2000).
- (34) K. KODAMA, M. TAKIGAWA, M. HORVATIC, C. BERTHIER, H. KAGEYAMA, Y. UEDA, S. MIYAHARA, F. BECCA ET F. MILA, *Magnetic superstructure in the two-dimensional quantum antiferromagnet $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$* , Science **298**, 395 (2002).
- (35) R. CALEMCZUK, J. RIERA, D. POILBLANC, J. P. BOUCHER, G. CHABOUSSANT, L. LEVY ET O. PIOVESANA, *Thermodynamic properties of the spin-1/2 antiferromagnetic ladder $\text{Cu}_2(\text{C}_2\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ under magnetic field*, European Physical Journal B **7**, 171 (1999).
- (36) S. MIYAHARA, K. TOTSUKA ET K. UEDA, *Magnetic excitation of orthogonal dimer heisenberg spin system for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$* , International Journal of Modern Physics B **17**, 5047 (2003).
- (37) A. VOIGT, *Quantum disorder due to singlet formation: The Plaquette lattice*, Computer Physics Communications **146**, 125 (2002).

- (38) A. KOGA, S. KUMADA ET N. KAWAKAMI, *Quantum phase transitions in two-dimensional spin systems with ladder, plaquette and mixed-spin structures*, Journal of the Physical Society of Japan **68**, 2373 (1999).
- (39) L. CAPRIOTTI, *Quantum effects and broken symmetries in frustrated antiferromagnets*, International Journal of Modern Physics B **15**, 1799 (2001).
- (40) P. W. ANDERSON, *An Approximate Quantum Theory of the Antiferromagnetic Ground State*, Physical Review **86**, 694 (1952).
- (41) B. BERNU, C. LHUILLIER ET L. PIERRE, *Signature of Neel order in exact spectra of quantum antiferromagnets on finite lattices.*, Physical Review Letters **69**, 2590 (1992).
- (42) C. LHUILLIER, *Frustrated Quantum Magnets*, cond-mat/0502464 (2005).
- (43) P. W. LEUNG ET V. ELSER, *Numerical studies of a 36-site kagome antiferromagnet*, Physical Review B **47**, 5459 (1993).
- (44) P. LECHEMINANT, B. BERNU, C. LHUILLIER, L. PIERRE ET P. SINDZINGRE, *Order versus disorder in the quantum Heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice using exact spectra analysis.*, Physical Review B **56**, 2521 (1997).
- (45) C. WALDTMANN, H. EVERTS, B. BERNU, C. LHUILLIER, P. SINDZINGRE, P. LECHEMINANT ET L. PIERRE, *First excitations of the spin 1/2 Heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice.*, European Physical Journal B **2**, 501 (1998).
- (46) M. MAMBRINI ET F. MILA, *RVB description of the low-energy singlets of the spin 1/2 kagome antiferromagnet.*, European Physical Journal B **17**, 651 (2000).
- (47) G. MISGUICH ET C. LHUILLIER, *Two-dimensional quantum antiferromagnets*, dans *Frustrated spin systems*, édité par H. T. Diep (World-Scientific, 2005).
- (48) A. P. RAMIREZ, G. P. ESPINOS ET A. S. COOPER, *Strong frustration and dilution-enhanced order in a quasi-2D spin glass*, Physical Review Letters **64**, 2070 (1990).
- (49) A. KEREN, K. KOJIMA, L. P. LE, G. M. LUKE, W. D. WU, Y. J. UEMURA, M. TAKANO, H. DABKOWSKA ET M. J. P. GINGRAS, *Muon-spin-rotation measurements in the kagome lattice systems: Cr-jarosite and Fe-jarosite*, Physical Review B **53**, 6451 (1996).
- (50) F. BERT, D. BONO, P. MENDELS, F. LADIEU, F. DUC, J.-C. TROMBE ET P. MILLET, *Ground State of the Kagomé-Like $S=1/2$ Antiferromagnet Volborthite $\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_7(\text{OH})_2 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$* , Physical Review Letters **95**, 087203 (2005).
- (51) M. FERRERO, F. BECCA ET F. MILA, *Freezing and large time scales induced by geometrical frustration*, Physical Review B **68**, 214431 (2003).
- (52) M. UEHARA, T. NAGATA, J. AKIMITSU, H. TAKAHASHI, N. MORI ET K. KINOSHITA, *Superconductivity in the ladder material $\text{Sr}_{0.4}\text{Ca}_{13.6}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41.84}$* , Journal of the Physical Society of Japan **65**, 2764 (1996).
- (53) E. DAGOTTO, J. RIERA ET D. SCALAPINO, *Superconductivity in ladders and coupled planes*, Physical Review B **45**, 5744 (1992).
- (54) C. A. HAYWARD, D. POILBLANC, R. M. NOACK, D. J. SCALAPINO ET W. HANKE, *Evidence for a superfluid density in t - J ladders*, Physical Review Letters **75**(5), 926 (1995).
- (55) D. POILBLANC, O. CHIAPPA, J. RIERA, S. R. WHITE ET D. J. SCALAPINO, *Evolution of the spin gap upon doping a 2-leg ladder*, Physical Review B **62**, 14633 (2000).
- (56) Y. SIDIS, S. PAILHÈS, B. KEIMER, P. BOURGES, C. ULRICH ET L.-P. REGNAULT, *Magnetic Resonant excitations in High- T_c superconductors*, Phys. Stat. Sol. **241**, 1204 (2004).
- (57) J. VOIT, *One-dimensional Fermi liquids*, Rep. Prog. Phys. **58**, 977 (1995).

- (58) M. TROYER, H. TSUNETSUGU ET T. RICE, *Properties of lightly doped t-J two-leg ladders*, Physical Review B **53**, 251 (1996).
- (59) C. A. HAYWARD ET D. POILBLANC, *Luttinger-liquid behavior and superconducting correlations in t-J ladders*, Physical Review B **53**, 11721 (1996).
- (60) T. SILLER, M. TROYER, T. M. RICE ET S. R. WHITE, *Bosonic model of hole pairs*, Physical Review B **63**, 195106 (2001).
- (61) P. ABBAMONTE, G. BLUMBERG, A. RUSYDI, A. GOZAR, P. EVANS, T. SIEGRIST, L. VENEMA, H. EISAKI, E. ISAACS ET G. SAWATZKY, *Crystallization of charge holes in the spin ladder of $\text{Sr}_{14}\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$* , Nature **431**, 1078 (2004).
- (62) S. R. WHITE ET D. J. SCALAPINO, *Ground states of the doped four-leg t-J ladder*, Physical Review B **55**, 14701 (1997).
- (63) T. SILLER, M. TROYER, T. M. RICE ET S. R. WHITE, *Transition between hole pairs and four-hole clusters in four-leg t-J ladders*, Physical Review B **65**, 205109 (2002).
- (64) Y. TOKURA, H. TAKAGI ET S. UCHIDA, *A superconducting copper-oxide compound with electrons as the charge-carriers*, Nature **337**, 345 (1989).
- (65) C. C. TSUEI ET J. R. KIRTLEY, *Pairing symmetry in cuprate superconductors*, Reviews of Modern Physics **72**, 969 (2000).
- (66) P. G. PAGLIUSO, C. PETROVIC, R. MOVSHOVICH, D. HALL, M. F. HUNDLEY, J. L. SARRAO, J. D. THOMPSON ET Z. FISK, *Coexistence of magnetism and superconductivity in $\text{CeRh}_{1-x}\text{Ir}_x\text{In}_5$* , Physical Review B **64**, 100503 (2001).
- (67) S. LEFEBVRE, P. WZIETEK, S. BROWN, C. BOURBONNAIS, D. JEROME, C. MEZIERE, M. FOURMIGUE ET P. BATAIL, *Mott transition, antiferromagnetism, and unconventional superconductivity in layered organic superconductors*, Physical Review Letters **85**, 5420 (2000).
- (68) E. DAGOTTO, *Correlated electrons in high-temperature superconductors*, Reviews of Modern Physics **66**, 763 (1994).
- (69) P. W. ANDERSON, *The Theory of Superconductivity in the High-Tc Cuprate Superconductors* (Princeton University Press, 1997).
- (70) M. R. NORMAN ET C. PEPIN, *The electronic nature of high temperature cuprate superconductors*, Reports on Progress in Physics **66**, 1547 (2003).
- (71) A. DAMASCELLI, Z. HUSSAIN ET Z. X. SHEN, *Angle-resolved photoemission studies of the cuprate superconductors*, Reviews of Modern Physics **75**, 473 (2003).
- (72) P. W. ANDERSON, P. A. LEE, M. RANDEIRA, T. M. RICE, N. TRIVEDI ET F. C. ZHANG, *The physics behind high-temperature superconducting cuprates: the 'plain vanilla' version of RVB.*, Journal of Physics: Condensed Matter **16**, R755 (2004).
- (73) M. R. NORMAN, D. PINES ET C. KALLIN, *The pseudogap: friend or foe of high Tc?*, Advances in Physics **54**, 715 (2005).
- (74) V. J. EMERY ET S. A. KIVELSON, *Importance of phase fluctuations in superconductors with small superfluid density.*, Nature **374**, 434 (1995).
- (75) C. M. VARMA, *Pseudogap Phase and the Quantum-Critical Point in Copper-Oxide Metals*, Physical Review Letters **83**, 3538 (1999).
- (76) S. CHAKRAVARTY, R. B. LAUGHLIN, D. K. MORR ET C. NAYAK, *Hidden order in the cuprates*, Physical Review B **63**, 094503 (2001).
- (77) J. HOFFMAN, E. HUDSON, K. LANG, V. MADHAVAN, H. EISAKI, S. UCHIDA ET J. DAVIS, *A four unit cell periodic pattern of quasi-particle states surrounding vortex cores in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$* , Science **295**, 466 (2002).

- (78) M. VERSHININ, S. MISRA, S. ONO, Y. ABE, Y. ANDO ET A. YAZDANI, *Local ordering in the pseudogap state of the high- T_c superconductor $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$* , Science **303**, 1995 (2004).
- (79) T. HANAGURI, C. LUPIEN, Y. KOHSAKA, D. H. LEE, M. AZUMA, M. TAKANO, H. TAKAGI ET J. C. DAVIS, *A 'checkerboard' electronic crystal state in lightly hole-doped $\text{Ca}_{2-x}\text{Na}_x\text{CuO}_2\text{Cl}_2$* , Nature **430**, 1001 (2004).
- (80) F. C. ZHANG ET T. M. RICE, *Effective Hamiltonian for the superconducting Cu oxides*, Physical Review B **37**, 3759 (1988).
- (81) S. SORELLA, G. MARTINS, F. BECCA, C. GAZZA, L. CAPRIOTTI, A. PAROLA ET E. DAGOTTO, *Superconductivity in the two-dimensional t - J model*, Physical Review Letters **88**, 117002 (2002).
- (82) D. SÉNÉCHAL, P. L. LAVERTU, M. A. MAROIS ET A. M. S. TREMBLAY, *Competition between antiferromagnetism and superconductivity in high- T_c cuprates*, Physical Review Letters **94**, 156404 (2005).
- (83) T. MAIER, M. JARRELL, T. SCHULTHESS, P. KENT ET J. WHITE, *Systematic study of d -wave superconductivity in the 2D repulsive Hubbard model*, Physical Review Letters **95**, 237001 (2005).
- (84) S. C. ZHANG, *A Unified Theory Based on $SO(5)$ Symmetry of Superconductivity and Antiferromagnetism*, Science **275**, 1089 (1997).
- (85) E. DEMLER, W. HANKE ET S. C. ZHANG, *$SO(5)$ theory of antiferromagnetism and superconductivity*, Reviews of Modern Physics **76**, 909 (2004).
- (86) D. POILBLANC, *Binding of holes and the pair spectral function in the t - J model*, Physical Review B **48**, 3368 (1993).
- (87) D. POILBLANC, *Internal structure of the singlet $d_{x^2-y^2}$ hole pair in an antiferromagnet*, Physical Review B **49**, 1477 (1994).
- (88) S. R. WHITE ET D. J. SCALAPINO, *Hole and pair structures in the t - J model*, Physical Review B **55**, 6504 (1997).
- (89) D. P. AROVAS, A. J. BERLINSKY, C. KALLIN ET S. C. ZHANG, *Superconducting Vortex with Antiferromagnetic Core*, Physical Review Letters **79**, 2871 (1997).
- (90) B. LAKE, G. AEPPLI, K. N. CLAUSEN, D. F. MCMORROW, K. LEFMANN, N. E. HUSSEY, N. MANGKORNTONG, M. NOHARA, H. TAKAGI, T. E. MASON ET A. SCHRODER, *Spins in the vortices of a high-temperature superconductor*, Science **291**, 1759 (2001).
- (91) B. LAKE, H. RONNOW, N. CHRISTENSEN, G. AEPPLI, K. LEFMANN, D. MCMORROW, P. VORDERWISCH, P. SMEIBIDL, N. MANGKORNTONG, T. SASAGAWA, M. NOHARA, H. TAKAGI ET T. MASON, *Antiferromagnetic order induced by an applied magnetic field in a high-temperature superconductor*, Nature **415**, 29 (2002).
- (92) R. I. MILLER, R. F. KIEFL, J. H. BREWER, J. E. SONIER, J. CHAKHALIAN, S. DUNSIGER, G. D. MORRIS, A. N. PRICE, D. A. BONN, W. H. HARDY ET R. LIANG, *Evidence for static magnetism in the vortex cores of ortho-II $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{6.50}$* , Physical Review Letters **88**, 137002 (2002).
- (93) V. F. MITROVIC, E. E. SIGMUND, M. ESCHRIG, H. N. BACHMAN, W. P. HALPERIN, A. P. REYES, P. KUHN ET W. G. MOULTON, *Spatially resolved electronic structure inside and outside the vortex cores of a high-temperature superconductor*, Nature **413**, 501 (2001).
- (94) V. F. MITROVIC, E. E. SIGMUND, W. P. HALPERIN, A. P. REYES, P. KUHN ET W. G. MOULTON, *Antiferromagnetism in the vortex cores of $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_{7-\delta}$* , Physical Review B **67**, 220503 (2003).
- (95) Z. TESANOVIC, *Charge Modulation, Spin Response, and Dual Hofstadter Butterfly in High- T_c Cuprates*, Physical Review Letters **93**, 217004 (2004).

- (96) P. W. ANDERSON, *A suggested 4×4 structure in underdoped cuprate superconductors: a Wigner supersolid*, cond-mat/0406038 (2004).
- (97) A. DORNEICH, W. HANKE, E. ARRIGONI, M. TROYER ET S. ZHANG, *Phase diagram and dynamics of the projected $SO(5)$ symmetric model of High- $T_{\text{sub}} c$ superconductivity.*, Physical Review Letters **88**, 057003 (2002).
- (98) M. JÖSTINGMEIER, A. DORNEICH, E. ARRIGONI, W. HANKE ET S. ZHANG, *Scaling properties of the projected $SO(5)$ model in three dimensions*, Physical Review B **68**, 245111 (2003).
- (99) M. P. A. FISHER, P. B. WEICHMAN, G. GRINSTEIN ET D. S. FISHER, *Boson localization and the superfluid-insulator transition*, Physical Review B **40**, 546 (1989).
- (100) C. PICH ET E. FREY, *Phase diagrams, critical, and multicritical behavior of hard-core Bose-Hubbard models*, Physical Review B **57**, 13712 (1998).
- (101) F. HÉBERT, G. G. BATROUNI, R. T. SCALETTAR, G. SCHMID, M. TROYER ET A. DORNEICH, *Quantum phase transitions in the two-dimensional hardcore boson model*, Physical Review B **65**, 014513 (2002).
- (102) A. VAN OTTERLO ET K. H. WAGENBLAST, *Coexistence of diagonal and off-diagonal long-range order: A Monte Carlo study*, Physical Review Letters **72**, 3598 (1994).
- (103) G. G. BATROUNI, R. T. SCALETTAR, G. T. ZIMANYI ET A. P. KAMPF, *Supersolids in the Bose-Hubbard Hamiltonian*, Physical Review Letters **74**, 2527 (1995).
- (104) A. W. SANDVIK ET J. KURKIJARVI, *Quantum Monte Carlo simulation method for spin systems*, Physical Review B **43**, 5950 (1991).
- (105) A. W. SANDVIK, *Stochastic series expansion method with operator-loop update*, Physical Review B **59**, R14157 (1999).
- (106) G. SCHMID, S. TODO, M. TROYER ET A. DORNEICH, *Finite-temperature phase diagram of hard-core bosons in two dimensions.*, Physical Review Letters **88**, 167208 (2002).
- (107) E. L. POLLOCK ET D. M. CEPERLEY, *Path-integral computation of superfluid densities*, Physical Review B **36**, 8343 (1987).
- (108) A. W. SANDVIK, *Finite-size scaling of the ground-state parameters of the two-dimensional Heisenberg model*, Physical Review B **56**, 11678 (1997).
- (109) Y. J. UEMURA, G. M. LUKE, B. J. STERNLIEB, J. H. BREWER, J. F. CAROLAN, W. N. HARDY, R. KADONO, J. R. KEMPTON, R. F. KIEFL, S. R. KREITZMAN, P. MULHERN, T. M. RISEMAN, D. L. WILLIAMS, B. X. YANG, S. UCHIDA, H. TAKAGI, G. J., A. W. SLEIGHT, M. A. SUBRAMANIAN, C. L. CHIEN, M. Z. CIEPLAK, G. XIAO, V. Y. LEE, B. W. STATT, C. E. STRONACH, W. J. KOSSLER ET X. H. YU, *Universal Correlations between T_c and n_s / m^* (Carrier Density over Effective Mass) in High- T_c Cuprate Superconductors*, Physical Review Letters **62**, 2317 (1989).
- (110) H. SATO, A. TSUKADA, M. NAITO ET A. MATSUDA, *Absence of $1/8$ anomaly in strained thin films of $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_{4+\delta}$* , Physical Review B **62**, R799 (2000).
- (111) A. R. MOODENBAUGH, Y. W. XU, M. SUENAGA, T. J. FOLKERTS ET R. N. SHELTON, *Superconducting properties of $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$* , Physical Review B **38**, 4596 (1988).
- (112) S. ARUMUGAM, N. MORI, N. TAKESHITA, H. TAKASHIMA, T. NODA, H. EISAKI ET S. UCHIDA, *Competition of static stripe and superconducting phases in $\text{La}_{1.48}\text{Nd}_{0.4}\text{Sr}_{0.12}\text{CuO}_4$ controlled by pressure*, Physical Review Letters **88**, 247001 (2002).
- (113) S. KOMIYA, H. CHEN, S. ZHANG ET Y. ANDO, *Magic doping fractions for high-temperature superconductors*, Physical Review Letters **94**, 207004 (2005).
- (114) K. SHEN, T. YOSHIDA, D. LU, F. RONNING, N. ARMITAGE, W. LEE, X. ZHOU, A. DAMASCELLI, D. FENG, N. INGLE, H. EISAKI, Y. KOHSAKA, H. TAKAGI, T. KAKESHITA,

- S. UCHIDA, P. MANG, M. GREVEN, Y. ONOSE, Y. TAGUCHI, Y. TOKURA, S. KOMIYA, Y. ANDO, M. AZUMA, M. TAKANO, A. FUJIMORI ET Z. SHEN, *Fully gapped single-particle excitations in lightly doped cuprates*, Physical Review B **69**, 054503 (2004).
- (115) D. POILBLANC, *Stability of inhomogeneous superstructures from renormalized mean-field theory of the t - J model*, Physical Review B **72**, 060508(R) (2005).
- (116) G. S. BOEBINGER, Y. ANDO, A. PASSNER, T. KIMURA, M. OKUYA, J. SHIMOYAMA, K. KISHIO, K. TAMASAKU, N. ICHIKAWA ET S. UCHIDA, *Insulator-to-metal crossover in the normal state of $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ near optimum doping*, Physical Review Letters **77**, 5417 (1996).
- (117) K. KUDO, M. YAMAZAKI, T. KAWAMATA, T. ADACHI, T. NOJI, Y. KOIKE, T. NISHIZAKI ET N. KOBAYASHI, *Field-induced magnetic order in $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ ($x=0.10, 0.115, 0.13$) studied by in-plane thermal conductivity measurements*, Physical Review B **70**, 014503 (2004).
- (118) D. G. HAWTHORN, R. W. HILL, C. PROUST, F. RONNING, M. SUTHERLAND, E. BOAKNIN, C. LAPIEN, M. A. TANATAR, J. PAGLIONE, S. WAKIMOTO, H. ZHANG, L. TAILLEFER, T. KIMURA, M. NOHARA, H. TAKAGI ET N. E. HUSSEY, *Field-induced thermal metal-to-insulator transition in underdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_{4+\delta}$* , Physical Review Letters **90**, 197004 (2003).
- (119) X. F. SUN, S. KOMIYA, J. TAKEYA ET Y. ANDO, *Magnetic-field-induced localization of quasiparticles in underdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ single crystals*, Physical Review Letters **90**, 117004 (2003).
- (120) M. SUTHERLAND, S. Y. LI, D. G. HAWTHORN, R. W. HILL, F. RONNING, M. A. TANATAR, J. PAGLIONE, H. ZHANG, L. TAILLEFER, J. DEBENEDICTIS, R. LIANG, D. A. BONN ET W. N. HARDY, *Delocalized fermions in underdoped cuprate superconductors*, Physical Review Letters **94**, 147004 (2005).
- (121) X. F. SUN, K. SEGAWA ET Y. ANDO, *Metal-to-Insulator Crossover in $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_y$ Probed by Low-Temperature Quasiparticle Heat Transport*, Physical Review Letters **93**, 107001 (2004).
- (122) K. MCELROY, J. LEE, J. A. SLEZAK, D.-H. LEE, H. EISAKI, S. UCHIDA ET J. C. DAVIS, *Atomic-Scale Sources and Mechanism of Nanoscale Electronic Disorder in $\text{Bi}_2\text{Sr}_2\text{CaCu}_2\text{O}_{8+\delta}$* , Science **309**, 1048 (2005).
- (123) Z. A. XU, N. P. ONG, Y. WANG, T. KAKESHITA ET S. UCHIDA, *Vortex-like excitations and the onset of superconducting phase fluctuation in underdoped $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$* , Nature **406**, 486 (2000).
- (124) Y. Y. WANG, N. P. ONG, Z. A. XU, T. KAKESHITA, S. UCHIDA, D. A. BONN, R. LIANG ET W. N. HARDY, *High field phase diagram of cuprates derived from the Nernst effect*, Physical Review Letters **88**, 257003 (2002).
- (125) W. VON DER LINDEN, *A quantum Monte Carlo approach to many-body physics*, Physics Reports **220**, 53 (1992).
- (126) F. F. ASSAAD, *Quantum Monte Carlo Methods on Lattices: The Determinantal method*, dans *Lecture notes of the Winter School on Quantum Simulations of Complex Many-Body Systems : From Theory to Algorithms*, édité par J. Grotendorst, D. Marx et A. Muramatsu, tm. NIC series Vol. 10., p. 99 (Publication Series of the John von Neumann Institute for Computing, 2002).
- (127) R. M. FYE, *New results on Trotter-like approximations*, Physical Review B **33**, 6271 (1986).
- (128) R. BLANKENBECLER, D. J. SCALAPINO ET R. L. SUGAR, *Monte-Carlo calculations of coupled boson-fermion systems*, Physical Review D **24**, 2278 (1981).
- (129) E. Y. LOH ET J. E. GUBERNATIS, *Electronic phase transitions: Modern problem in condensed matter sciences*, chap. Stable numerical simulation of model of interacting electrons in condensed-matter physics (North-Holland, 1992).
- (130) J. E. HIRSCH, *Discrete Hubbard-Stratonovich transformation for fermion lattice models*, Physical Review B **28**, 4059 (1983).

- (131) F. F. ASSAAD ET M. IMADA, *Stable quantum Monte Carlo algorithm for $T=0$ calculation of imaginary time Green functions.*, Journal of the Physical Society of Japan **65**, 189 (1996).
- (132) M. FELDBACHER ET F. F. ASSAAD, *Efficient calculation of imaginary-time-displaced correlation functions in the projector auxiliary-field quantum Monte Carlo algorithm*, Physical Review B **63**, 073105 (2001).
- (133) M. JARRELL ET J. E. GUBERNATIS, *Bayesian inference and the analytic continuation of imaginary-time quantum Monte Carlo data*, Physics Reports **269**, 134 (1996).
- (134) F. F. ASSAAD, *Phase diagram of the half-filled two-dimensional $SU(N)$ Hubbard-Heisenberg model: A quantum Monte Carlo study*, Physical Review B **71**, 075103 (2005).
- (135) R. M. FYE ET D. J. SCALAPINO, *One-dimensional symmetric Kondo lattice: A quantum Monte Carlo study*, Physical Review Letters **65**, 3177 (1990).
- (136) R. M. FYE ET D. J. SCALAPINO, *Quantum Monte Carlo study of the one-dimensional symmetric Kondo lattice*, Physical Review B **44**, 7486 (1991).
- (137) F. F. ASSAAD, *Quantum Monte Carlo simulations of the half-filled two-dimensional Kondo lattice model.*, Physical Review Letters **83**, 796 (1999).
- (138) F. F. ASSAAD, V. ROUSSEAU, F. HEBERT, M. FELDBACHER ET G. G. BATROUNI, *Spin and charge dynamics of stripes in doped Mott insulators.*, Europhysics Letters **63**, 569 (2003).
- (139) C. J. WU ET S. C. ZHANG, *Sufficient condition for absence of the sign problem in the fermionic quantum Monte Carlo algorithm*, Physical Review B **71**, 155115 (2005).
- (140) A. C. HEWSON, *The Kondo Problem to Heavy Fermions* (Cambridge Studies in Magnetism, 1997).
- (141) J. KONDO, *Resistance minimum in dilute magnetic alloys*, Progress of Theoretical Physics **32**, 37 (1964).
- (142) S. DONIACH, *Kondo lattice and weak antiferromagnetism*, Physica B **91**, 231 (1977).
- (143) J. M. LUTTINGER, *Fermi Surface and Some Simple Equilibrium Properties of a System of Interacting Fermions*, Physical Review **119**, 1153 (1960).
- (144) N. MATSUMOTO ET F. J. OHKAWA, *Kondo-lattice model in infinite dimensions*, Physical Review B **51**, 4110 (1995).
- (145) G. M. ZHANG ET L. YU, *Kondo singlet state coexisting with antiferromagnetic long-range order: A possible ground state for Kondo insulators*, Physical Review B **62**, 76 (2000).
- (146) T. M. RICE ET K. UEDA, *Gutzwiller method for heavy electrons*, Physical Review B **34**, 6420 (1986).
- (147) M. JARRELL, *Symmetric periodic Anderson model in infinite dimensions*, Physical Review B **51**, 7429 (1995).
- (148) N. READ ET D. M. NEWNS, *On the solution of the Coqblin-Schrieffer Hamiltonian by the large- N expansion technique*, J. Phys. C **16**, 3273 (1983).
- (149) C. HUSCROFT, R. GASS ET M. JARRELL, *Maximum entropy method of obtaining thermodynamic properties from quantum Monte Carlo simulations*, Physical Review B **61**, 9300 (2000).
- (150) L. DEGIORGI, *The electrodynamic response of heavy-electron compounds*, Rev. Mod. Phys. **71**, 687 (1999).
- (151) T. TAKABATAKE, F. TESHIMA, H. FUJII, S. NISHIGORI, T. SUZUKI, T. FUJITA, Y. YAMAGUCHI, J. SAKURAI ET D. JACCARD, *Formation of an anisotropic energy gap in the valence-fluctuating system of $CeNiSn$* , Physical Review B **41**, 9607 (1990).
- (152) D. GOLDHABER-GORDON, H. SHTRIKMAN, D. MAHALU, D. ABUSCH-MAGDER, U. MEIRAV ET M. A. KASTNER, *Kondo effect in a single-electron transistor*, Nature **391**, 156 (1998).

- (153) Y. OREG ET D. GOLDHABER-GORDON, *Two-channel Kondo effect in a modified single electron transistor*, Physical Review Letters **90**, 136602 (2003).
- (154) H. C. MANOHARAN, C. P. LUTZ ET D. M. EIGLER, *Quantum mirages formed by coherent projection of electronic structure*, Nature **403**, 512 (2000).
- (155) F. F. ASSAAD, *Depleted Kondo lattices: Quantum Monte Carlo and mean-field calculations.*, Physical Review B **65**, 115104 (2002).
- (156) K. S. D. BEACH, P. A. LEE ET P. MONTHOUX, *Field-induced antiferromagnetism in the Kondo insulator.*, Physical Review Letters **92**, 026401 (2004).
- (157) I. MILAT, F. ASSAAD ET M. SIGRIST, *Field induced magnetic ordering transition in Kondo insulators.*, European Physical Journal B **38**, 571 (2004).
- (158) I. AFFLECK ET J. MARSTON, *Large- n limit of the Heisenberg-Hubbard model: implications for high- T_c superconductors.*, Physical Review B **37**, 3774 (1988).
- (159) D. F. SCHROETER ET S. DONIACH, *Three-dimensional flux states as a model for the pseudogap phase of transition metal oxides*, Physical Review B **66**, 075120 (2002).
- (160) P. CHANDRA, P. COLEMAN, J. MYDOSH ET V. TRIPATHI, *Hidden orbital order in the heavy fermion metal URu₂Si₂.*, Nature **417**, 831 (2002).
- (161) J. O. FJÆRESTAD ET J. B. MARSTON, *Staggered orbital currents in the half-filled two-leg ladder*, Physical Review B **65**, 125106 (2002).
- (162) C. J. WU, W. V. LIU ET E. FRADKIN, *Competing orders in coupled Luttinger liquids*, Physical Review B **68**, 115104 (2003).
- (163) M. TSUCHIIZU ET A. FURUSAKI, *Generalized two-leg Hubbard ladder at half filling: Phase diagram and quantum criticalities*, Physical Review B **66**, 245106 (2002).
- (164) H. J. SCHULZ, *Phases of two coupled Luttinger liquids*, Physical Review B **53**, R2959 (1996).
- (165) D. J. SCALAPINO, S. R. WHITE ET I. AFFLECK, *Rung-rung current correlations on a 2-leg t - J ladder*, Physical Review B **64**, 100506 (2001).
- (166) U. SCHOLLWÖCK, S. CHAKRAVARTY, J. FJÆRESTAD, J. MARSTON ET M. TROYER, *Broken time-reversal symmetry in strongly correlated ladder structures.*, Physical Review Letters **90**, 186401 (2003).
- (167) J. B. MARSTON, J. O. FJÆRESTAD ET A. SUDBØ, *Staggered Flux Phase in a Model of Strongly Correlated Electrons*, Physical Review Letters **89**, 056404 (2002).
- (168) D. J. SCALAPINO, S. C. ZHANG ET W. HANKE, *SO(5) symmetric ladder*, Physical Review B **58**, 443 (1998).
- (169) C. J. WU, J. P. HU ET S. C. ZHANG, *Exact SO(5) Symmetry in the Spin-3/2 Fermionic System*, Physical Review Letters **91**, 186402 (2003).
- (170) F. F. ASSAAD, M. IMADA ET D. J. SCALAPINO, *Charge and spin structures of a $d_{x^2-y^2}$ superconductor in the proximity of an antiferromagnetic Mott insulator.*, Physical Review B **56**, 15001 (1997).
- (171) W. HOFSTETTER, J. CIRAC, P. ZOLLER, E. DEMLER ET M. LUKIN, *High-temperature superfluidity of fermionic atoms in optical lattices.*, Physical Review Letters **89**, 220407 (2002).
- (172) C. J. WU, *Competing orders in one-dimensional spin-3/2 fermionic systems*, Physical Review Letters **95**, 266404 (2005).
- (173) P. LECHEMINANT, E. BOULAT ET P. AZARIA, *Confinement and Superfluidity in one-dimensional Degenerate Fermionic Cold Atoms*, Physical Review Letters **95**, 240402 (2005).

Sélection de publications

Article [10]

S. Capponi et F. F. Assaad

Spin and charge dynamics of the ferromagnetic and antiferromagnetic two-dimensional half-filled Kondo lattice model.

Spin and charge dynamics of the ferromagnetic and antiferromagnetic two-dimensional half-filled Kondo lattice model

S. Capponi and F. F. Assaad

Institut für Theoretische Physik III, Universität Stuttgart, Pfaffenwaldring 57, D-70550 Stuttgart, Germany

(Received 26 October 2000; published 30 March 2001)

We present a detailed numerical study of ground state and finite temperature spin and charge dynamics of the two-dimensional Kondo lattice model with hopping t and exchange J . Our numerical results stem from auxiliary field quantum Monte Carlo simulations formulated in such a way that the sign problem is absent at half-band filling thus allowing us to reach lattice sizes up to 12×12 . At $T=0$ and antiferromagnetic couplings $J>0$ the competition between the Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida interaction and the Kondo effect triggers a quantum phase transition between antiferromagnetically ordered and magnetically disordered insulators: $J_c/t = 1.45 \pm 0.05$. At $J<0$ the system remains an antiferromagnetically ordered insulator and irrespective of the sign of J , the quasiparticle gap scales as $|J|$. The dynamical spin structure factor $S(\vec{q}, \omega)$ evolves smoothly from its strong-coupling form with spin gap at $\vec{q}=(\pi, \pi)$ to a spin-wave form. For $J>0$, the single-particle spectral function $A(\vec{k}, \omega)$ shows a dispersion relation following that of hybridized bands as obtained in the noninteracting periodic Anderson model. In the ordered phase this feature is supplemented by shadows, thus allowing an interpretation in terms of the coexistence of Kondo screening and magnetic ordering. In contrast, at $J<0$ the single-particle dispersion relation follows that of noninteracting electrons in a staggered external magnetic field. At finite temperatures spin T_S and charge T_C scales are defined by locating the maximum in the charge and spin uniform susceptibilities. For weak to intermediate couplings, T_S marks the onset of antiferromagnetic fluctuations—as observed by a growth of the staggered spin susceptibility—and follows a J^2 law. At strong couplings T_S scales as J . On the other hand T_C scales as J both in the weak- and strong-coupling regime. At and slightly below T_C we observe (i) the onset of screening of the magnetic impurities, (ii) a rise in the resistivity as a function of decreasing temperature, (iii) a dip in the integrated density of states at the Fermi energy, and finally (iv) the occurrence of hybridized bands in $A(\vec{k}, \omega)$. It is shown that in the weak-coupling limit, the charge gap of order J is formed only at T_S and is hence of magnetic origin. The specific heat shows a two-peak structure. The low-temperature peak follows T_S and is hence of magnetic origin. Our results are compared to various mean-field theories.

DOI: 10.1103/PhysRevB.63.155114

PACS number(s): 71.27.+a, 71.10.Fd

I. INTRODUCTION

The Kondo lattice model (KLM) as well as the periodic Anderson model (PAM) are the prototype Hamiltonians to describe heavy fermion materials¹ and Kondo insulators.² The physics under investigation is that of a lattice of magnetic impurities embedded in a metallic host. The symmetric PAM reads

$$H_{PAM} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} - V \sum_{\vec{i}, \sigma} (c_{\vec{i}, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \sigma} + f_{\vec{i}, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}, \sigma}) + U_f \sum_{\vec{i}} (n_{\vec{i}, \uparrow}^f - 1/2)(n_{\vec{i}, \downarrow}^f - 1/2). \quad (1)$$

The unit cell, denoted by $\vec{i}$, contains an extended and a localized orbital. The fermionic operators $c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger$ ($f_{\vec{k}, \sigma}^\dagger$) create electrons on extended (localized) orbitals with wave-vector $\vec{k}$ and z component of spin σ . The overlap between extended orbitals generates a conduction band with dispersion relation $\varepsilon(\vec{k})$. There is a hybridization matrix element V between both orbitals in the unit cell and the Coulomb repulsion—modeled by a Hubbard U_f —is taken into account on the

localized orbitals. In the limit of large U_f , charge fluctuations on the localized orbitals are suppressed and the PAM maps onto the KLM:³

$$H_{KLM} = \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} + J \sum_{\vec{i}} \vec{S}_i^c \cdot \vec{S}_i^f. \quad (2)$$

Here, $\vec{S}_i^c = \frac{1}{2} \sum_{s, s'} c_{i, s}^\dagger \vec{\sigma}_{s, s'} c_{i, s'}$, where $\vec{\sigma}$ are the Pauli $s = 1/2$ matrices. A similar definition holds for $\vec{S}_i^f$. A magnetic energy scale $J = 8V^2/U$ emerges and there is a constraint of one electron per localized orbital. Although this constraint forbids charge fluctuations on the localized orbitals, those fluctuations are implicitly taken into account leading to the above form and sign of the exchange interaction. On the other hand, when charge fluctuations on the localized orbitals are absent, the exchange interaction follows from Hund's rule and is ferromagnetic. The ferromagnetic KLM has attracted much attention in conjunction with manganites.⁴ In this paper we will consider both ferromagnetic and antiferromagnetic exchange interactions with emphasis on the antiferromagnetic case.

The physics of the single impurity Anderson and Kondo models at $J/t > 0$ is well understood.⁵ In the temperature range $J < T < U$, charge is localized on the f orbital, but the spin degrees of freedom are essentially free, thus leading to a

Curie-Weiss law for the impurity spin susceptibility. Below the Kondo temperature $T_K \propto \varepsilon_f e^{-1/JN(\varepsilon_f)}$ the impurity spin is screened by the conduction electrons. Here, ε_f is the Fermi energy and $N(\varepsilon_f)$ the density of states taken at the Fermi energy. The transition from high to low temperatures is non-perturbative and corresponds to the Kondo problem with the known resistivity minimum⁶ and orthogonality catastrophe.⁷ At low temperatures, T_K is the only energy scale in the problem.

A lattice of magnetic impurities introduces new energy scales. In the spin sector, the Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida (RKKY) interaction⁸ couples impurity spins via polarization of the conduction electrons. This interaction takes the form of a Heisenberg model with exchange $J_{\text{eff}}(\vec{q}) \propto -J^2 \text{Re} \chi(\vec{q}, \omega=0)$ where $\chi(\vec{q}, \omega)$ corresponds to the spin susceptibility of the conduction electrons. Since this interaction favors magnetic ordering, it freezes the impurity spins and, hence, competes with the Kondo effect. By comparing energy scales, one expects the RKKY interaction (Kondo effect) to dominate at weak (strong) couplings. As suggested by Doniach,⁹ this leads to a quantum phase transition between ordered and disordered magnetic phases.

As a function of dimension, contrasting results are obtained for the PAM and KLM. We first consider the limit of large dimensions^{10,11} and the Gutzwiller approximation.¹² The Gutzwiller approximation leads to a noninteracting PAM with renormalized hybridization V . At half filling an insulating state is obtained, with quasiparticle gap $\sim e^{-1/2JN(\varepsilon_f)}$ in the large U_f limit. Both the Gutzwiller and dynamical mean-field approaches yield charge and spin gaps equal to each other. As a function of temperature, optical and quasiparticle gaps start appearing at an energy scale $\sim e^{-1/2JN(\varepsilon_f)}$.¹⁰ In the doped phase, the Luttinger volume includes the f electrons, and due to the renormalization of the hybridization, the effective mass of charge carriers is enhanced. The above quoted results stem from calculations for the PAM. However, similar results are obtained in the framework of the KLM at $J/t \ll 1$ in the limit of large dimensions.¹¹ The above approximations predict an instability to magnetic ordering in the large U_f or small J limit. The occurrence of this instability has been observed in the framework of quantum Monte Carlo (QMC) simulations of the PAM in two dimensions.^{13,14} In the one-dimensional case, a good understanding of the phase diagram of the KLM as a function of electronic density and coupling has been achieved.^{15,16} In particular, at half filling, a spin liquid phase is obtained irrespective of the value of J/t . In the weak-coupling limit the spin gap follows a Kondo form, whereas the charge gap tracks J .

In this paper, we present a detailed numerical study of ground-state and finite-temperature properties of the half filled KLM in intermediate dimensions, $d=2$. Our $T=0$ simulations are aimed at understanding the competition and interplay of the Kondo effect and RKKY interaction. Our finite temperature simulations provide insight into the temperature evolution of spin and charge degrees of freedom.

Our main results and structure of the article is as follows. Details of the numerical technique are presented in the next

section. We use a path integral auxiliary field quantum Monte Carlo (QMC) method.¹⁷ Our approach is based on a simple technical innovation that allows us to avoid the sign problem at least at half band filling where the model is particle-hole symmetric. Both finite- and zero-temperature versions of the algorithm are presented. In both cases imaginary time displaced correlations functions can be computed. The continuation to real time is then carried out via the use of the maximum entropy (ME) method.¹⁸ We note that the algorithms may be applied irrespective of the sign of J .

In Sec. III, ground-state equal time and dynamical properties of the ferromagnetic and antiferromagnetic KLM are presented. Our main results include the following. (i) In the spin sector, a quantum phase transition between antiferromagnetically ordered and disordered ground states occurs at $J/t = 1.45 \pm 0.05$. The dynamical spin structure factor is analyzed across the transition. As a function of decreasing values of J/t , the spin gap at the antiferromagnetic wave vector closes and the magnon spectrum evolves towards a spin-wave form. This spin-wave form persists for ferromagnetic couplings since in the limit $J/t \rightarrow \infty$, the model maps onto the $s=1$ antiferromagnetic Heisenberg model. Our results at $J/t > 0$ are compared to a bond-operator mean-field theory of the Kondo necklace model. (ii) In the charge sector, the system remains an insulator. To a first approximation, the quasiparticle gap tracks J both in the antiferromagnetic and ferromagnetic KLM. For all values of $J/t > 0$ the single-particle spectral function shows a feature whose dispersion relation follows the one obtained in the noninteracting PAM. In a mean-field approach, this feature results solely from Kondo screening of the magnetic impurities. In the magnetically ordered phase, this feature is supplemented by shadow bands. Thus, and as confirmed by a mean-field approach, the spectral function in the ordered phase may only be understood in terms of the coexistence of Kondo screening and the RKKY interaction. On the other hand, at $J/t < 0$, where Kondo screening is absent, the single-particle dispersion relation follows that of free electrons in a external staggered magnetic field.

Section IV is devoted to finite temperature properties of the KLM. We define charge T_C , as well as spin T_S scales from the location of the maximum in the charge and spin susceptibilities. In the weak- and strong-coupling limit, the charge scale tracks J . On the other hand the spin scale—as expected from the energy scale associated to the RKKY interaction—follows a J^2 law up to intermediate couplings. At strong couplings $T_S \propto J$. Since T_C corresponds to the energy scale at which a minimum in the resistivity is observed, we conclude that it describes the energy scale at which scattering is enhanced due to the screening of the impurity spins. Furthermore a reduction of the integrated density of states at the Fermi level is observed at T_C . The spin scale up to intermediate couplings (i.e., $J/t \leq W$ where W corresponds to the bandwidth) marks the onset of short-range antiferromagnetic correlations. This is confirmed by the calculation of the staggered spin susceptibility that shows a strong increase at T_S . In the weak-coupling limit, it is shown that the quasiparticle gap of magnitude $\propto J$ is formed only at the magnetic energy scale T_S and, is thus, of magnetic origin. In the tem-

perature range $T_S < T < T_C$ hybridized band are seen in the single-particle spectral function with quasiparticle gap lying beyond our resolution. Finally, the specific heat is computed and shows a two-peak structure. The low-energy peak tracks the spin scale and, is hence, of magnetic origin. In the last section, we discuss our results, as well as links with experiments.

II. AUXILIARY FIELD QUANTUM MONTE CARLO ALGORITHM FOR THE KONDO LATTICE MODEL

Auxiliary field QMC simulations of the KLM, as well as the two-impurity Kondo model have already been carried out by Fye and Scalapino.^{19,20} However, their formulation leads to a sign problem even in the half-filled case where the model is invariant under a particle-hole transformation. In this section we present an alternative formulation of the problem that is free of the sign problem in the particle-hole symmetric case. In order to achieve our goal, we take a detour and consider the Hamiltonian:

$$H = \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} - \frac{J}{4} \sum_{\vec{i}} \left[\sum_{\sigma} c_{\vec{i}, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \sigma} + f_{\vec{i}, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}, \sigma} \right]^2. \quad (3)$$

As we will see below, at vanishing chemical potential, this Hamiltonian has all the properties required to formulate a sign-free auxiliary field QMC algorithm. Here, we are interested in the ground-state properties of H that we obtain by filtering out the ground state $|\Psi_0\rangle$ by propagating a trial wave function $|\Psi_T\rangle$ along the imaginary time axis:

$$\frac{\langle \Psi_0 | O | \Psi_0 \rangle}{\langle \Psi_0 | \Psi_0 \rangle} = \lim_{\Theta \rightarrow \infty} \frac{\langle \Psi_T | e^{-\Theta H} O e^{-\Theta H} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | e^{-2\Theta H} | \Psi_T \rangle}. \quad (4)$$

The above equation is valid, provided that $\langle \Psi_T | \Psi_0 \rangle \neq 0$ and O denotes an arbitrary observable.

To see how H relates to H_{KLM} , we compute the square in Eq. (3) to obtain

$$\begin{aligned} H = & \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} + J \sum_{\vec{i}} \tilde{S}_i^c \cdot \tilde{S}_i^f \\ & - \frac{J}{4} \sum_{\vec{i}, \sigma} (c_{\vec{i}, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}, -\sigma}^\dagger f_{\vec{i}, -\sigma} + f_{\vec{i}, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}, \sigma} + \text{H.c.}) \\ & + \frac{J}{4} \sum_{\vec{i}} (n_i^c n_i^f - n_i^c - n_i^f). \end{aligned} \quad (5)$$

As apparent, there are only pair-hopping processes between the f and c sites. Thus, the total number of doubly occupied and empty f sites is a conserved quantity:

$$\left[H, \sum_{\vec{i}} (1 - n_{i, \uparrow}^f)(1 - n_{i, \downarrow}^f) + n_{i, \uparrow}^f n_{i, \downarrow}^f \right] = 0. \quad (6)$$

If we denote by Q_n the projection onto the Hilbert space with $\sum_{\vec{i}} (1 - n_{i, \uparrow}^f)(1 - n_{i, \downarrow}^f) + n_{i, \uparrow}^f n_{i, \downarrow}^f = n$ then

$$HQ_0 = H_{KLM} + \frac{JN}{4}, \quad (7)$$

since in the Q_0 subspace the f sites are singly occupied and, hence, the pair-hopping term vanishes. Here, N corresponds to the number of unit cells. Thus, it suffices to choose

$$Q_0 |\Psi_T\rangle = |\Psi_T\rangle, \quad (8)$$

to ensure that

$$\frac{\langle \Psi_T | e^{-\Theta H} O e^{-\Theta H} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | e^{-2\Theta H} | \Psi_T \rangle} = \frac{\langle \Psi_T | e^{-\Theta H_{KLM}} O e^{-\Theta H_{KLM}} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | e^{-2\Theta H_{KLM}} | \Psi_T \rangle}. \quad (9)$$

It is interesting to note that there is an alternative route to obtain the KLM. Instead of projecting onto the Q_0 Hilbert space, we can project onto the Q_N Hilbert space by suitably choosing the trial wave function,

$$\begin{aligned} HQ_N = & \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} - \frac{J}{4} \sum_{\vec{i}, \sigma} (c_{\vec{i}, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}, -\sigma}^\dagger f_{\vec{i}, -\sigma} + f_{\vec{i}, \sigma}^\dagger c_{\vec{i}, \sigma} + \text{H.c.}) \\ & + \frac{J}{4} \sum_{\vec{i}} (n_i^c n_i^f - n_i^c - n_i^f). \end{aligned} \quad (10)$$

Since in the Q_N subspace the f -sites are doubly occupied or empty, the exchange term $\tilde{S}_i^c \cdot \tilde{S}_i^f$ vanishes. To see the relation with the KLM, we define the spin-1/2 operators:

$$\begin{aligned} \tilde{S}_i^{+,f} &= -(-1)^{i_x + i_y} f_{i, \uparrow}^\dagger f_{i, \downarrow}^\dagger, \\ \tilde{S}_i^{-,f} &= -(-1)^{i_x + i_y} f_{i, \downarrow} f_{i, \uparrow}, \quad \tilde{S}_i^{z,f} = \frac{1}{2}(n_i^f - 1), \end{aligned} \quad (11)$$

which operate on the states: $|\uparrow\rangle_{i,f} = -(-1)^{i_x + i_y} f_{i, \uparrow}^\dagger f_{i, \downarrow}^\dagger |0\rangle$ and $|\downarrow\rangle_{i,f} = |0\rangle$ as well as the fermion operators:

$$\tilde{c}_{i, \uparrow}^\dagger = c_{i, \uparrow}^\dagger, \quad \tilde{c}_{i, \downarrow}^\dagger = (-1)^{i_x + i_y} c_{i, \uparrow}^\dagger. \quad (12)$$

With those definitions,

$$\begin{aligned} HQ_N = & \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon(\vec{k}) \tilde{c}_{\vec{k}, \sigma}^\dagger \tilde{c}_{\vec{k}, \sigma} + \frac{J}{2} \sum_{\vec{i}} (\tilde{S}_i^{+,c} \tilde{S}_i^{-,f} + \tilde{S}_i^{-,c} \tilde{S}_i^{+,f}) \\ & + J \tilde{S}_i^{z,c} \tilde{S}_i^{z,f} + \frac{JN}{4}, \end{aligned} \quad (13)$$

which is nothing but the KLM.

A. Basic formalism

Having shown the relationship between H and H_{KLM} we now discuss some technical aspects of the QMC evaluation of $\langle \Psi_T | e^{-\Theta H} O e^{-\Theta H} | \Psi_T \rangle / \langle \Psi_T | e^{-2\Theta H} | \Psi_T \rangle$. With the use of the Trotter formula we obtain

$$\langle \Psi_T | e^{-2\Theta H} | \Psi_T \rangle = \left\langle \Psi_T \left| \prod_{\tau=1}^M e^{\Delta \tau H_\tau} e^{-\Delta \tau H_J} \right| \Psi_T \right\rangle + \mathcal{O}(\Delta \tau^2). \quad (14)$$

Here, $H_t = -t \sum_{\langle \vec{i}, \vec{j} \rangle, \sigma} c_{\vec{i}, \sigma}^\dagger c_{\vec{j}, \sigma} + \text{H.c.}$, $H_J = -J/4 \sum_{\vec{i}} \vec{S}_i^c \cdot \vec{S}_i^f$, and $M \Delta \tau = 2\Theta$. Strictly speaking, the systematic error produced by the above Trotter decomposition should be of order $\Delta \tau$. However, if the trial wave function, as well as H_t and H_J are simultaneously real representable, it can be shown that the prefactor of the linear $\Delta \tau$ error vanishes.^{21,22}

Since we will ultimately want to integrate out the fermionic degrees of freedom, we carry out a Hubbard-Stratonovitch (HS) decomposition of the perfect square term:²³

$$\begin{aligned} e^{-\Delta \tau H_J} &= \prod_{\vec{i}} e^{\Delta \tau J/4 \{(\sum_{\sigma} c_{\vec{i}, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \sigma} + \text{H.c.})^2\}}, \\ &= \prod_{\vec{i}} \left(\sum_{l=\pm 1, \pm 2} \gamma(l) e^{\sqrt{\Delta \tau J/4} \eta(l) \sum_{\sigma} c_{\vec{i}, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \sigma} + \text{H.c.}} \right. \\ &\quad \left. + \mathcal{O}(\Delta \tau^4) \right), \end{aligned} \quad (15)$$

where the fields η and γ take the values:

$$\begin{aligned} \gamma(\pm 1) &= 1 + \sqrt{6}/3, \quad \gamma(\pm 2) = 1 - \sqrt{6}/3, \\ \eta(\pm 1) &= \pm \sqrt{2(3 - \sqrt{6})}, \quad \eta(\pm 2) = \pm \sqrt{2(3 + \sqrt{6})}. \end{aligned}$$

As indicated, this transformation is approximate and produces on each time slice a systematic error proportional to $\Delta \tau^4$. This amounts to a net systematic error of order $M \Delta \tau^4 \sim 2\Theta \Delta \tau^3$, which for constant values of the projection parameter, is an order smaller than the error produced by the Trotter decomposition.

The trial wave function is required to be a Slater determinant factorizable in the spin indices:

$$\begin{aligned} |\Psi_T\rangle &= |\Psi_T^\uparrow\rangle \otimes |\Psi_T^\downarrow\rangle, \quad \text{with} \\ |\Psi_T^\sigma\rangle &= \prod_{y=1}^{N_\sigma} \left(\sum_x a_{x, \sigma}^\dagger P_{x, y}^\sigma \right) |0\rangle. \end{aligned} \quad (16)$$

Here, we have introduced the notation $x \equiv (\vec{i}, n)$ where $\vec{i}$ denotes the unit cell and n the orbital (i.e., $a_{(\vec{i}, 1), \sigma}^\dagger = c_{\vec{i}, \sigma}^\dagger$ and $a_{(\vec{i}, 2), \sigma}^\dagger = f_{\vec{i}, \sigma}^\dagger$). It is convenient to generate $|\Psi_T^\sigma\rangle$ from a single particle Hamiltonian $H_0^\sigma = \sum_{x, y} a_x^\dagger (h_0^\sigma)_{x, y} a_y$, which has the trial wave function as non-degenerate ground state. To obtain a trial wave function that satisfies the requirements $Q_0 |\Psi_T\rangle = |\Psi_T\rangle$, we are forced to choose H_0 of the form:

$$\begin{aligned} H_0 &= \sum_{\langle \vec{i}, \vec{j} \rangle, \sigma} (t_{\vec{i}, \vec{j}} c_{\vec{i}, \sigma}^\dagger c_{\vec{j}, \sigma} + \text{H.c.}) \\ &\quad + h_z \sum_{\vec{i}} e^{i\vec{Q} \cdot \vec{i}} (f_{\vec{i}, \uparrow}^\dagger f_{\vec{i}, \uparrow} - f_{\vec{i}, \downarrow}^\dagger f_{\vec{i}, \downarrow}), \end{aligned} \quad (17)$$

which generates a Néel state $[\vec{Q} = (\pi, \pi)]$ on the localized orbitals. To obtain a non-degenerate ground state, we impose the dimerization

$$\begin{aligned} t_{\vec{i}, \vec{i} + \vec{a}_x} &= \begin{cases} -t(1 + \delta) & \text{if } i_x = 2n + 1 \\ -t(1 - \delta) & \text{if } i_x = 2n \end{cases}, \\ t_{\vec{i}, \vec{i} + \vec{a}_y} &= -t(1 + \delta), \end{aligned} \quad (18)$$

with $\delta \ll t$.

We are now in a position to integrate out the fermionic degrees of freedom to obtain:

$$\begin{aligned} \langle \Psi_T | e^{-2\Theta H} | \Psi_T \rangle &= \sum_{\{l\}} \left(\prod_{\vec{i}, \tau} \gamma(l_{\vec{i}, \tau}) \right) \\ &\quad \times \prod_{\sigma} \det \left(P^{\sigma \dagger} \prod_{\tau=1}^M e^{-\Delta \tau \hat{T}} e^{\hat{J}(\tau)} P^{\sigma} \right), \end{aligned} \quad (19)$$

where the matrices $\hat{T}$ and $\hat{J}(\tau)$ are defined via:

$$H_t = \sum_{\vec{k}, \sigma} \epsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} = \sum_{x, y, \sigma} a_{x, \sigma}^\dagger \hat{T}_{x, y} a_{y, \sigma},$$

$$\sum_{x, y, \sigma} a_{x, \sigma}^\dagger \hat{J}(\tau)_{x, y} a_{y, \sigma} = \sqrt{\Delta \tau J/4} \sum_{\vec{i}, \sigma} \eta(l_{\vec{i}, \tau}) (c_{\vec{i}, \sigma}^\dagger f_{\vec{i}, \sigma} + \text{H.c.}). \quad (20)$$

The HS field l has acquired a space $\vec{i}$ and time τ index.

The basic ingredients to compute observables are equal-time Green functions. They are given by

$$\begin{aligned} \frac{\langle \Psi_T | e^{-\Theta H} a_{x, \sigma}^\dagger a_{y, \sigma} e^{-\Theta H} | \Psi_T \rangle}{\langle \Psi_T | e^{-2\Theta H} | \Psi_T \rangle} \\ = \sum_{\{l\}} \text{Pr}(l) \langle \langle a_{x, \sigma} a_{y, \sigma}^\dagger \rangle \rangle(l), \quad \text{with} \end{aligned}$$

$$\langle \langle a_{x, \sigma} a_{y, \sigma}^\dagger \rangle \rangle(l) = [1 - U_{\sigma, l}^> (U_{\sigma, l}^< U_{\sigma, l}^>)^{-1} U_{\sigma, l}^<]_{x, y},$$

$$U_{\sigma, l}^> = \prod_{\tau=1}^{M/2} e^{-\Delta \tau \hat{T}} e^{\hat{J}(\tau)} P^{\sigma}$$

$$U_{\sigma, l}^< = P^{\sigma \dagger} \prod_{\tau=M}^{M/2+1} e^{-\Delta \tau \hat{T}} e^{\hat{J}(\tau)}, \quad \text{and}$$

$$\begin{aligned} \text{Pr}(l) &= \frac{\left[\prod_{\vec{i}, \tau} \gamma(l_{\vec{i}, \tau}) \right] \prod_{\sigma} \det(U_{\sigma, l}^< U_{\sigma, l}^>)}{\sum_{\{l\}} \left[\prod_{\vec{i}, \tau} \gamma(l_{\vec{i}, \tau}) \right] \prod_{\sigma} \det(U_{\sigma, l}^< U_{\sigma, l}^>)}. \end{aligned} \quad (21)$$

Since, for a given set of HS fields, we are solving a free-electron problem interacting with an external field, a Wick theorem applies. Hence, from the knowledge of the single-particle Green function at fixed HS configuration, we may evaluate all observables. Imaginary time displaced correlation functions may equally be calculated.^{24,25}

We are left with the summation over the HS fields, which we will carry out with Monte Carlo methods. In order to do

so without further complication, we have to be able to interpret $\text{Pr}(l)$ as a probability distribution. This is possible only provided that $\text{Pr}(l) \geq 0$ for all HS configurations. In the particle-hole symmetric case, the above statement is valid. Starting from the identity:

$$\det(U_{\uparrow,l}^< U_{\uparrow,l}^>) = \lim_{\beta \rightarrow \infty} \frac{\text{Tr} \left(e^{-\beta H_0^\dagger} \prod_{\tau=1}^M e^{-\Delta \tau H_t^\dagger} e^{H_j^\dagger(\tau)} \right)}{\text{Tr}(e^{-\beta H_0^\dagger})}, \quad (22)$$

we can carry out a particle-hole transformation

$$c_{i,\uparrow}^\dagger \rightarrow (-1)^{i_x+i_y} c_{i,\downarrow}^\dagger \quad \text{and} \quad f_{i,\uparrow}^\dagger \rightarrow (-1)^{i_x+i_y} f_{i,\downarrow}^\dagger. \quad (23)$$

Here, $H_t^\sigma = \sum_{x,y} a_{x,\sigma}^\dagger \hat{T}_{x,y} a_{y,\sigma}$ and $H_j^\sigma(\tau) = \sum_{x,y} a_{x,\sigma}^\dagger \hat{J}(\tau)_{x,y} a_{y,\sigma}$. Since Eq. (23) corresponds to a canonical transformation, the trace remains invariant and $H_0^\dagger$, $H_t^\dagger$, as well as $H_j^\dagger(\tau)$, map onto $H_0^\downarrow$, $H_t^\downarrow$, and $H_j^\downarrow(\tau)$, respectively. Thus, we have shown that: $\det(U_{\uparrow,l}^< U_{\uparrow,l}^>) = \det(U_{\downarrow,l}^< U_{\downarrow,l}^>)$, which leads to $\text{Pr}(l) \geq 0$ for all values of the HS fields. Away from half filling (which would correspond to adding a chemical potential term in H_0), particle hole-symmetry is broken and $\text{Pr}(l)$ may become negative. This leads to the well-known sign problem. It is clear that by choosing $H_0^\dagger = H_0^\downarrow$ thus leading to $P^\dagger = P^\downarrow$ would produce positive values of $\text{Pr}(l)$ for all HS configurations and irrespective of particle-hole symmetry. This stands in analogy to the absence of the sign problem in the attractive Hubbard model. However, this choice of the trial wave function is incompatible with the requirement $Q_0|\Psi_T\rangle = |\Psi_T\rangle$.

For the Monte Carlo sampling of the probability distribution $\text{Pr}(l)$, we adopt a sequential single spin-flip algorithm. The details of the upgrading procedure, as well as of the numerical stabilization of the code, are similar to those used for auxiliary field QMC simulations of the Hubbard model.²⁶

B. Optimizing the algorithm

The above straightforward approach for the QMC simulation of H turns out to be numerically inefficient. The major reason for this stems from the choice of the trial wave function. The coupled constraints (i) $Q_0|\Psi_T\rangle = |\Psi_T\rangle$ and (ii) $|\Psi_T\rangle$ is a Slater determinant factorizable in the spin indices make it impossible to choose a spin-singlet trial wave function (the trial wave function generated by the single particle Hamiltonian H_0 of Eq. (17) orders the f electrons in a Néel state that is not a spin singlet). Since we know that the ground state of the KLM on a finite-size system is a spin singlet,^{27,28} we have to filter out all the spin excited states from the trial wave function to obtain the ground state. This is certainly not a problem when we are investigating the physics of a problem with a large spin gap, as is the case in the limit $J/t \gg 1$. However, in the limit of small J/t , the long-range magnetic order is present, and hence, one expects finite-size spin-gap to scale as v_s/L where v_s is the spin

velocity and L the linear size of the system. In this case, starting with a spin-singlet trial wave function is important to obtain reliable convergence.²⁴

In order to circumvent the above problem, we relax the constraint $Q_0|\Psi_T\rangle = |\Psi_T\rangle$ and add a Hubbard term for the f sites to the Hamiltonian.

$$H = \sum_{\vec{k},\sigma} \varepsilon(\vec{k}) c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} - \frac{J}{4} \sum_i \left[\sum_\sigma c_{i,\sigma}^\dagger f_{i,\sigma} + f_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right]^2 + U_f \sum_i (n_{i,\uparrow}^f - 1/2)(n_{i,\downarrow}^f - 1/2). \quad (24)$$

This Hamiltonian is again block diagonal in the Q_n subspaces. During the imaginary time propagation, the components $Q_n|\Psi_T\rangle$ of the trial wave function will be suppressed by a factor $e^{-\Theta U_f n/2}$ in comparison to the component $Q_0|\Psi_T\rangle$.

The usual procedure to incorporate the Hubbard term in the QMC simulation relies on Hirsch's HS transformation:²⁹

$$\begin{aligned} & \exp \left[-\Delta \tau U \sum_i \left(n_{i,\uparrow}^f - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i,\downarrow}^f - \frac{1}{2} \right) \right] \\ &= \tilde{C} \sum_{s_1, \dots, s_N = \pm 1} \exp \left[\tilde{\alpha} \sum_i s_i (n_{i,\uparrow}^f - n_{i,\downarrow}^f) \right], \end{aligned} \quad (25)$$

where $\cosh(\tilde{\alpha}) = \exp(\Delta \tau U/2)$. As apparent from the above equation, for a fixed set of HS fields, $s_1 \dots s_N$, SU(2) spin symmetry is broken. Clearly SU(2) spin symmetry is restored after summation over the HS fields.

Alternatively, one may consider²⁹

$$\begin{aligned} & \exp \left[-\Delta \tau U \sum_i \left(n_{i,\uparrow}^f - \frac{1}{2} \right) \left(n_{i,\downarrow}^f - \frac{1}{2} \right) \right] \\ &= C \sum_{s_1, \dots, s_N = \pm 1} \exp \left[i \alpha \sum_i s_i (n_{i,\uparrow}^f + n_{i,\downarrow}^f - 1) \right], \end{aligned} \quad (26)$$

where $\cos(\alpha) = \exp(-\Delta \tau U/2)$ and $C = \exp(\Delta \tau U N/4)/2^N$. With this choice of the HS transformation, SU(2) spin invariance is retained for any given HS configuration. Even taking into account the overhead of working with complex numbers, one of the authors has argued³⁰ that this choice of HS transformation produces a more efficient code.

Having relaxed the condition $Q_0|\Psi_T\rangle = |\Psi_T\rangle$, we are now free to choose a spin singlet trial wave function that we generate from:

$$H_0 = \sum_{\vec{k},\sigma} \varepsilon(\vec{k}) c_{\vec{k},\sigma}^\dagger c_{\vec{k},\sigma} - \frac{J}{4} \sum_{i,\sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger f_{i,\sigma} + f_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}), \quad (27)$$

which is nothing but the noninteracting PAM with hybridization $V = J/4$. The ground state at half filling is clearly a spin singlet. With this choice of the trial wave function, and the Hubbard-Stratonovitch transformation of Eq. (26), the

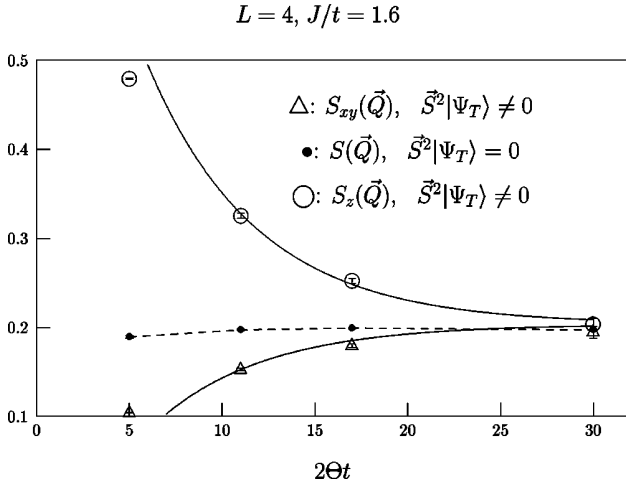


FIG. 1. Spin-spin correlations as a function of the projection parameter Θ . Here, $S(\vec{Q}) = \frac{4}{3} \langle \vec{S}^f(\vec{Q}) \cdot \vec{S}^f(-\vec{Q}) \rangle$, $S_z^f(\vec{Q}) = 4 \langle \vec{S}_z^f(\vec{Q}) \cdot \vec{S}_z^f(-\vec{Q}) \rangle$, and $S_{xy}^f(\vec{Q}) = 2 \langle (\vec{S}_x^f(\vec{Q}) \cdot \vec{S}_x^f(-\vec{Q})) + (\vec{S}_y^f(\vec{Q}) \cdot \vec{S}_y^f(-\vec{Q})) \rangle$. The trial wave function with $\vec{S}^2|\Psi_T \neq 0$ ($\vec{S}^2|\Psi_T = 0$) corresponds to the ground state of the Hamiltonian in Eq. (27) [Eq. (17)]. In the large Θ limit, the results are independent on the choice of the trial wave function. In particular, starting from a broken-symmetry state the symmetry is restored at large values of Θt . For this system, the spin gap is given by $\Delta_{sp} = 0.169 \pm 0.004$ (Ref. 31). Starting with a trial wave function with $\vec{S}^2|\Psi_T \neq 0$, convergence to the ground state follows approximatively the form: $a + b e^{-\Delta_{sp} 2\Theta}$. The solid lines correspond to a least-square fit to this form.

particle-hole transformation of Eq. (23) maps $\det(U_{\uparrow,l,s}^< U_{\uparrow,l,s}^>)$ on $\det(U_{\downarrow,l,s}^< U_{\downarrow,l,s}^>)$. Hence, no sign problem occurs at half filling.

Figure 1 demonstrates the importance of using a spin singlet trial wave function. Starting from a Néel order for the f -electrons, convergence to the ground state follows approximatively $e^{-\Delta_{sp} 2\Theta}$, where Δ_{sp} corresponds to the spin gap. When the spin gap is small, convergence is poor and the remedy is to consider a spin singlet trial wave function.

Having optimized the trial wave function we now consider convergence as a function of J/t . As apparent from Fig. 2, for small values of J/t , increasingly large projection parameters are required to obtain convergence. The origin of this behavior may be traced back to the energy scale of the RKKY interaction that follows a J^2 law. At $J/t=0.4$, $2\Theta t \sim 40$ is enough to obtain convergence whereas at $J/t=0.2$, a value of $2\Theta t \sim 170$ is required.

The systematic error produced by the Trotter decomposition scales as $(\Delta\tau)^2$. This behavior is shown in Fig. 3. All our calculations were carried out at values of $\Delta\tau$ small enough so as to neglect this systematic error.

C. Ferromagnetic exchange

Until now, we have implicitly considered an antiferromagnetic exchange, $J > 0$. It is straightforward to generalize the above case to a ferromagnetic one. The only point to take care of is the choice of the trial wave function in order to

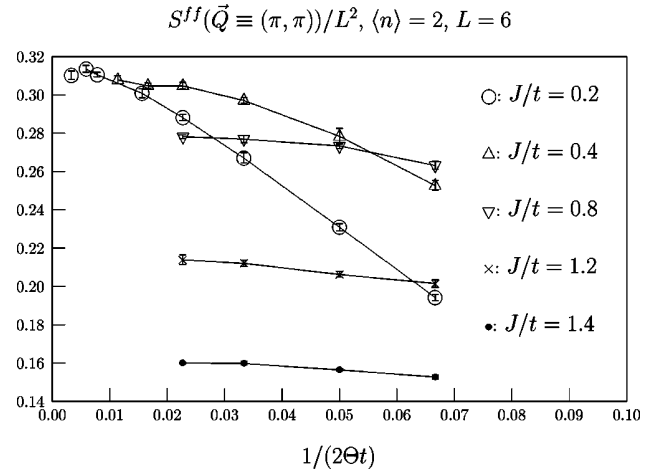


FIG. 2. Spin structure factor at $\vec{Q} = (\pi, \pi)$ for the f electrons [$S^{ff}(\vec{Q})$] at various values of J/t and as a function of the projection parameter Θt . Here we consider a spin singlet trial wave function.

avoid the sign problem. In this case, the noninteracting Hamiltonian that generates the trial wave function has to be invariant under the particle-hole transformation:

$$c_{i,\uparrow}^\dagger \rightarrow (-1)^{i_x+i_y} c_{i,\downarrow}^\dagger \quad \text{and} \quad f_{i,\uparrow}^\dagger \rightarrow +(-1)^{i_x+i_y} f_{i,\downarrow}^\dagger. \quad (28)$$

Note that in comparison to Eq. (23), there is an overall sign difference in the particle-hole transformation of the f operators. With this condition one has: $\det(U_{\uparrow,l,s}^< U_{\uparrow,l,s}^>) = \det(U_{\downarrow,l,s}^< U_{\downarrow,l,s}^>)$ so that no sign problem occurs. The trial wave function is thus generated from the noninteracting Hamiltonian:

$$H_0 = \sum_{k,\sigma} \varepsilon(\vec{k}) c_{k,\sigma}^\dagger c_{k,\sigma} - \frac{J}{4} \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i,\sigma}^\dagger f_{j,\sigma} + f_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}). \quad (29)$$

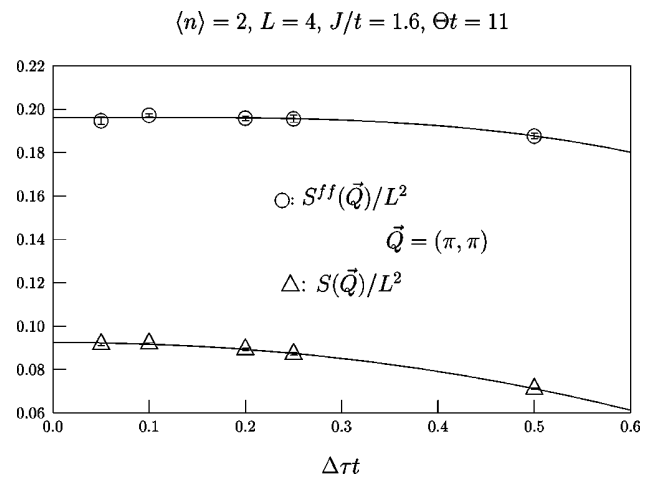


FIG. 3. Systematic error produced by the Trotter decomposition. In our simulations, we have used $\Delta\tau=0.1$ and $\Delta\tau=0.2$. Here, $S(\vec{Q})$ corresponds to the spin structure factor of the total spin at $\vec{Q} = (\pi, \pi)$.

D. Finite-temperature algorithm

The QMC method presented above may be generalized to finite temperatures to compute expectation values of observables in the grand-canonical ensemble:

$$\langle O \rangle = \frac{\text{Tr}(e^{-\beta H} O)}{\text{Tr}(e^{-\beta H})}. \quad (30)$$

Since the step from the $T=0$ approach to the finite- T algorithm is similar to the one for the standard Hubbard model, we refer the reader to the Ref. 26. We note however, that at finite temperatures, the projection onto the Q_0 subspace may only be achieved via the inclusion of the Hubbard term $U_f \sum_i (n_{i,\uparrow}^f - 1/2)(n_{i,\downarrow}^f - 1/2)$ in the Hamiltonian. At this point, it is very convenient to choose the $SU(2)$ invariant HS decomposition of Eq. (26) since one can take the limit $U_f \rightarrow \infty$ by setting $\alpha = \pi/2$. Hence, irrespective of the considered temperature, we are guaranteed to be in the correct Hilbert space.

III. SPIN AND CHARGE DEGREES OF FREEDOM AT $T=0$

The different phases occurring at half filling are summarized in Fig. 4. All quantities have been extrapolated to the thermodynamic limit.³¹ We have considered sizes ranging from 4×4 to 12×12 with periodic boundary conditions. The staggered moment

$$m_s = \lim_{L \rightarrow \infty} \sqrt{\frac{4}{3}} \langle \vec{S}(\vec{Q}) \cdot \vec{S}(-\vec{Q}) \rangle, \quad (31)$$

indicates the presence of long-range magnetic order. Here, $\vec{S}(\vec{Q}) = (1/L) \sum_j e^{i\vec{Q} \cdot \vec{j}} \vec{S}(\vec{j})$ where $\vec{S}(\vec{j}) = \vec{S}^f(\vec{j}) + \vec{S}^c(\vec{j})$ is the total spin, $\vec{Q} = (\pi, \pi)$ the antiferromagnetic wave vector, and L corresponds to the linear size of the system. This quantity is maximal at $J/t = -\infty$ and vanishes at $J_c/t \sim 1.45$, thus signaling a phase transition. The onset of a spin gap,

$$\Delta_{sp} = \lim_{L \rightarrow \infty} E_0^L(S=1, N_p=2N) - E_0^L(S=0, N_p=2N), \quad (32)$$

is observed when magnetic order disappears. Here, $E_0^L(S, N_p)$ is the ground-state energy on a square lattice with $N=L^2$ unit cells, N_p electrons, and spin S . Finally, the system remains an insulator for all considered coupling constants. This is supported by a nonvanishing quasiparticle gap,

$$\Delta_{qp} = \lim_{L \rightarrow \infty} E_0^L(S=1/2, N_p=2N+1) - E_0^L(S=0, N_p=2N). \quad (33)$$

We will first discuss the spin degrees of freedom and then turn our attention to charge degrees of freedom.

A. Spin degrees of freedom

To investigate the spin degrees of freedom, we compute the dynamical spin susceptibility,

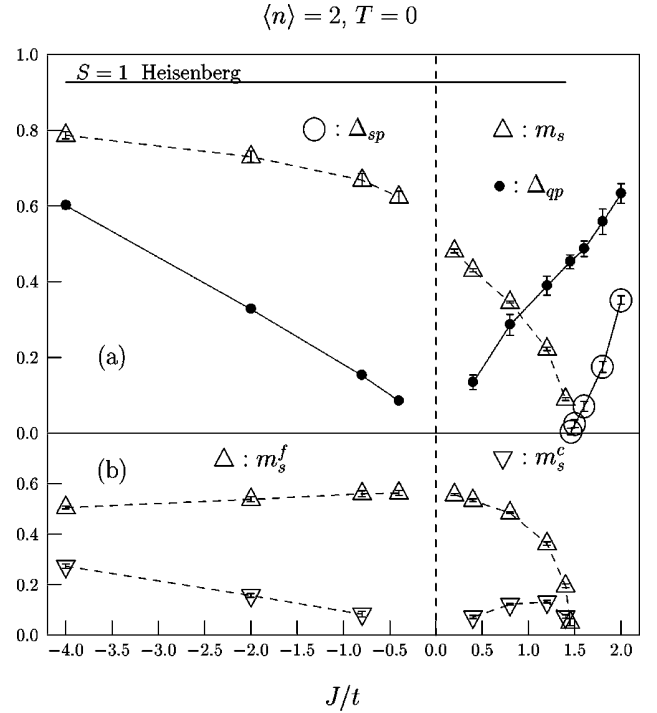


FIG. 4. (a) Staggered moment m_s , spin gap Δ_{sp} , and quasiparticle gap for the ferromagnetic and antiferromagnetic KLM. All quantities have been extrapolated to the thermodynamic limit based on results on lattice sizes up to 12×12 . The data for $J > 0$ stems from Ref. 31. The staggered moment corresponds to that of the total spin [see Eq. (31)]. The solid line corresponds to the value of the staggered moment for the $s=1$ antiferromagnetic model as obtained in a spin-wave approximation (Ref. 8). (b) Staggered moment of the f and c electrons after extrapolation to the thermodynamic limit.

$$S(\vec{q}, \omega) = \pi \sum_n |\langle n | \vec{S}(\vec{q}) | 0 \rangle|^2 \delta[\omega - (E_n - E_0)], \quad (34)$$

where the sum runs over a complete set of eigenstates and $|0\rangle$ corresponds to the ground state. This quantity is related to the imaginary time spin-spin correlations that we compute with the QMC method:³¹

$$\langle 0 | \vec{S}(\vec{q}, \tau) \cdot \vec{S}(-\vec{q}) | 0 \rangle = \frac{1}{\pi} \int d\omega e^{-\tau\omega} S(\vec{q}, \omega). \quad (35)$$

Here, $\vec{S}(\vec{q}, \tau) = e^{\tau H} \vec{S}(\vec{q}) e^{-\tau H}$. We use the maximum entropy (ME) method to accomplish the above numerically ill-defined inverse Laplace transform.¹⁸

In the strong coupling limit $J \rightarrow \infty$, the model becomes trivial, since each f spin captures a conduction electron to form a singlet. In this limit, the ground state corresponds to a direct product of singlets on the f - c bonds of a unit cell. Starting from this state, one may create a magnon excitation by breaking a singlet to form a triplet. In second-order perturbation in t/J , this magnon acquires a dispersion relation given by

$$E_{sp}(\vec{q}) = J - \frac{16t^2}{3J} + \frac{4t^2}{J} \gamma(\vec{q}), \quad (36)$$

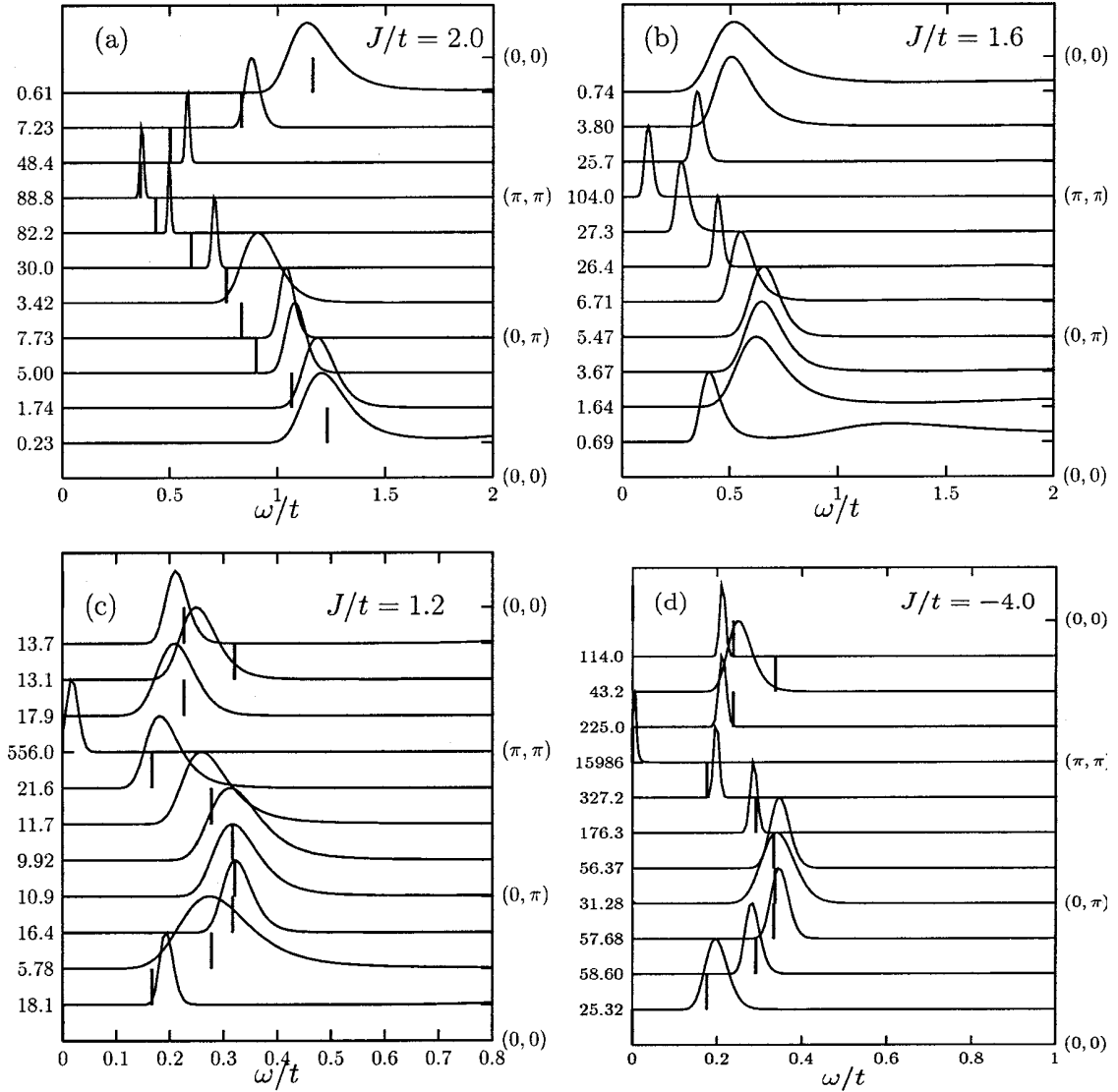


FIG. 5. Dynamical spin structure factor at $T=0$ for the ferromagnetic and antiferromagnetic KLM. We have normalized the peak heights to unity. The numbers on the left-hand side of the figures correspond to the normalization factor. The vertical bars are fits to the data, see text. Due to finite-size effects, the peak at $\vec{Q}=(\pi, \pi)$ in the antiferromagnetic phase ($J/t=1.2$ and $J/t=-4$) is shifted to finite frequencies.

where $\gamma(\vec{q}) = \cos(q_x) + \cos(q_y)$.¹⁵ At $\vec{Q}=(\pi, \pi)$, $E_{sp}(\vec{q})$ is minimal and is nothing but the spin gap. In Fig. 5(a), we plot the dynamical spin structure factor for $J/t=2.0$. The solid bars in the plot correspond to a fit to the above strong-coupling functional form: $a + b\gamma(\vec{q})$. As apparent, this functional form reproduces well the QMC data. We note that this magnon mode lies below the particle-hole continuum located at $2\Delta_{qp}$ (see Fig. 4).

As we approach the antiferromagnetically ordered phase, one expects that the above magnon mode evolves towards a spin-wave form:

$$E_{sw}(\vec{q}) = \frac{J_{sp}}{2} \sqrt{1 - \gamma(\vec{q})^2/4}. \quad (37)$$

As apparent from Fig. 5(b), as one approaches J_c the spin gap vanishes and the magnon mode softens around $\vec{q}=\vec{0}$. In

the antiferromagnetic phase [see Fig. 5(c)] the data follow well the above spin-wave form.

In the limit of large ferromagnetic couplings, the model maps onto the $S=1$ antiferromagnetic Heisenberg model. At $J/t=-\infty$, the ground state is macroscopically degenerate since the f - c bonds are effectively decoupled and occupied by a triplet with arbitrary z component of spin. This degeneracy is lifted in second-order perturbation theory, yielding a $S=1$ antiferromagnetic Heisenberg model:

$$H_{eff} = \frac{2t^2}{J} \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j. \quad (38)$$

Here, $\vec{S}_i = \sum_{m,m'} t_{i,m}^\dagger \vec{\sigma}_{m,m'}^{(1)} t_{i,m'}$, $t_{i,1} = c_{i,\uparrow}^\dagger f_{i,\uparrow}^\dagger$, $t_{i,0} = 1/\sqrt{2}(c_{i,\uparrow}^\dagger f_{i,\downarrow}^\dagger + c_{i,\downarrow}^\dagger f_{i,\uparrow}^\dagger)$, and $t_{i,-1} = c_{i,\downarrow}^\dagger f_{i,\downarrow}^\dagger$. $\vec{\sigma}^{(1)}$ correspond to the $s=1$ Pauli spin matrices. The magnetic excita-

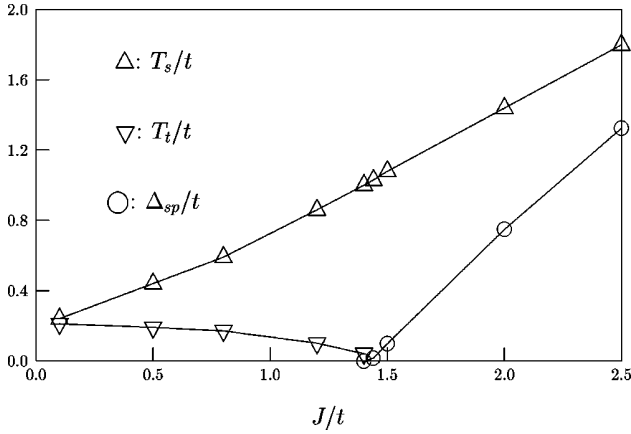


FIG. 6. Mean field of the two-dimensional Kondo necklace model. T_s (T_t) corresponds to the energy scale below that the bond singlets (triplets) condense. Δ_{sp} denotes the spin gap.

tions are clearly spin waves as confirmed by the QMC data of Fig. 5(d). In the limit of large negative J , the staggered moment should scale to the value obtained for the $S=1$ Heisenberg model. Within a spin-density wave approximation,⁸ this quantity takes the value 0.93. As apparent from Fig. 4, the QMC data approaches smoothly this value as J/t decreases.

The quantum phase transition in the spin degrees of freedom at $J_c/t \sim 1.45$ may be described in the framework of the Kondo necklace model given by

$$H_{KN} = t \sum_{i,j} (S_i^{c,x} S_j^{c,x} + S_i^{c,y} S_j^{c,y}) + J \sum_i \tilde{S}_i^c \cdot \tilde{S}_i^f. \quad (39)$$

This model neglects charge fluctuations, and the spin-flip processes between conduction electrons mimic the kinetic energy. Although the Kondo necklace model has a lower symmetry [$U(1)$] than the KLM [$SU(2)$] one may expect this model to give a reasonable description of the spin degrees of freedom at energy scales smaller than the charge gap. A mean-field solution is obtained in terms of bond singlet and triplet operators.³² Both the conduction and impurity spins are represented by singlets, $\Delta_i^\dagger$, and triplets $\tilde{t}_i^\dagger$ on the f - c bonds of the unit cell. The bond operators obey bosonic commutation rules and are subject to the constraint $\Delta_i^\dagger \Delta_i + \tilde{t}_i^\dagger \tilde{t}_i = 1$. At the mean-field level and generalizing the work of Zhang *et al.*³³ to finite temperatures, one obtains the phase diagram shown in Fig. 6. The condensation of singlets $s = \langle \Delta_i^\dagger \rangle > 0$ occurs at a temperature scale T_s , which, to a first approximation, tracks J . At $J > J_c$, the triplet excitations remain gapped and have a dispersion relation given by: $\omega(\vec{q}) = \alpha \sqrt{1 + s^2 t \gamma(\vec{q}) / \alpha}$ with $\alpha = s^2 t (1 + \sqrt{1 + \Delta_{sp}^2 / t^2 s^2})$. Here, Δ_{sp} corresponds to the spin gap plotted in Fig. 6. The gap in the magnon spectrum at $\vec{q} = (\pi, \pi) \equiv \vec{Q}$ vanishes at $J_c/t \sim 1.4$ in remarkable agreement with the QMC results. We note that this mean-field approach shows no phase transition in the one-dimensional case consistently with numerical calculations.^{15,33} For $J < J_c$, the ground state has both con-

densation of singlets ($s > 0$) and of triplets at the antiferromagnetic wave vector ($t = \sqrt{N} \langle t_Q^{\dagger,x} \rangle > 0$). The energy scale below which the triplet excitations condense is denoted by T_t in Fig. 6. In terms of the KLM, the condensation of triplets (singlets) follows from the RKKY interaction (Kondo effect). Thus, the fact that at the mean-field level, both s and t do not vanish may be interpreted as the coexistence of Kondo screening and antiferromagnetism in the ordered phase. We will confirm this point of view in the study of the charge degrees of freedom.

B. Charge degrees of freedom: the single-particle spectral function

To study the charge degrees of freedom, we compute the spectral function $A(\vec{k}, \omega)$ which is related to the imaginary time Green function via:

$$\langle c_{\vec{k}}^\dagger(\tau) c_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{\pi} \int_0^\infty d\omega e^{-\tau\omega} A(\vec{k}, -\omega). \quad (40)$$

The Maximum Entropy (ME) method is used to extract $A(\vec{k}, \omega)$. Starting from the bond-singlet ground state valid in the strong coupling limit, one can create a quasiparticle excitation, which to first order in t/J has the dispersion relation

$$E_{qp}(\vec{k}) = 3J/4 + t\gamma(\vec{k}). \quad (41)$$

$E_{qp}(\vec{k})$ is a minimal at $\vec{k} = (\pi, \pi)$ so that the quasiparticle gap takes the value $\Delta_{qp} = E_{qp}[\vec{k} = (\pi, \pi)]$. Comparison with Eq. (36) leads to $\Delta_c = 2\Delta_{qp} > \Delta_{sp}$ in the strong-coupling limit. This marks the difference to a standard band insulator that satisfies $\Delta_c = \Delta_{sp}$. In accordance with the strong-coupling limit, the numerical data of Figs. 7(a)–(c) show that irrespective of J/t , the quasiparticle gap is defined by the $\vec{k} = (\pi, \pi)$ wave vector. Furthermore, comparison with Fig. 5 shows that the inequality $\Delta_c > \Delta_{sp}$ is valid for all considered coupling constants.

For antiferromagnetic couplings ($J > 0$), the spectral function shows similar features in the ordered ($J < J_c$) and disordered ($J > J_c$) magnetic phases, thus lending support that Kondo screening, which is responsible for the functional form of the dispersion relation at strong couplings, is equally present in the ordered phase. However, upon closer analysis, shadow features are seen in the antiferromagnetically ordered phase. Shadows are most easily understood by considering the self-energy $\Sigma(\vec{k}, \omega_m) \propto g^2 / N \beta \sum_{\nu_m, \vec{q}} \chi(\vec{q}, \nu_m) G_0(\vec{k} - \vec{q}, \omega_m - \nu_m)$ describing electrons with propagator $G_0(\vec{k}, \omega_m)$ scattering off spin fluctuations with coupling constant g . Long-range magnetic order at wave vector $\vec{Q} = (\pi, \pi)$ and staggered moment m_s justify the Ansatz $\chi(\vec{q}, \nu_m) \propto m_s^2 N \beta \delta_{\nu_m, 0} \delta_{\vec{q}, \vec{Q}}$ for the spin susceptibility. The Green function is then given by: $G(\vec{k}, \omega_m) = 1/[G_0^{-1}(\vec{k}, \omega_m) - \alpha G_0(\vec{k} + \vec{Q}, \omega_m)]$ with $\alpha \propto (gm_s)^2$. It is then easy to see that if $G(\vec{k}, \omega)$ has a pole at ω_0 then $G(\vec{k} + \vec{Q}, \omega)$ also has a pole at ω_0 , i.e., the shadow. Numerically, it is convenient to establish the existence of shadows by considering the imaginary time Green function. Figure 8 plots $\langle c_{\vec{k}}^\dagger(\tau) c_{\vec{k}} \rangle$ for $\vec{k}$

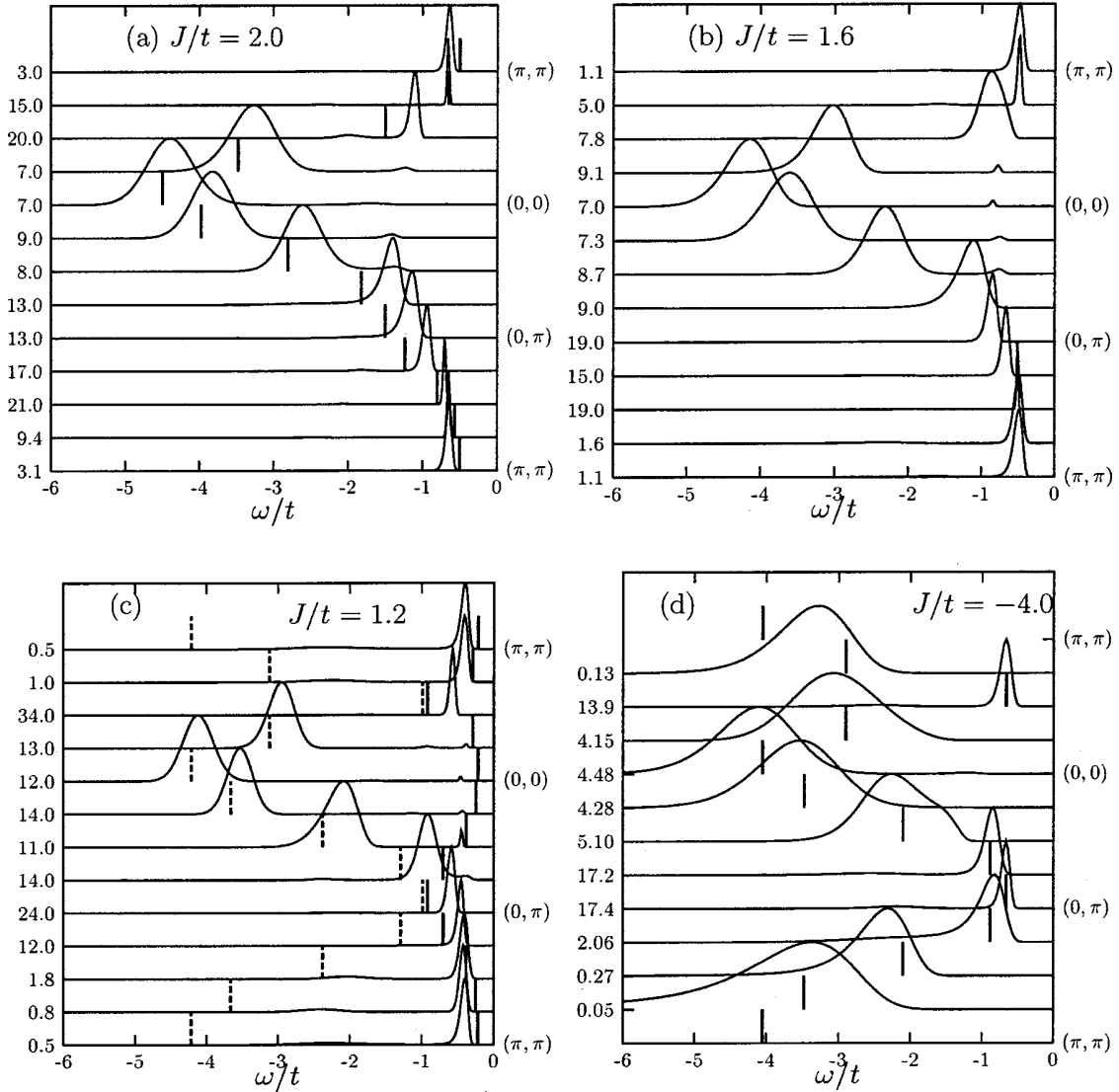


FIG. 7. Single-particle spectral function at $T=0$ for the ferromagnetic and antiferromagnetic KLM. We have normalized the peak heights to unity. The numbers on the left-hand side of the figures correspond to the normalization factor. The vertical bars are fits to the data, see text.

$=(\pi, \pi)$. At large values of τt this quantity follows an exponential law $e^{-\tau \Delta_{qp}}$. This exponential decay generates the pole in $A(\vec{k}, \omega)$ at $\omega = -\Delta_{qp}$ [see Eq. (40)]. As argued above, due to the long-range antiferromagnetic order one expects a pole in $A(\vec{k} + \vec{Q}, \omega)$ at $\omega = -\Delta_{qp}$, i.e., the shadow. As demonstrated in Fig. 8, $\langle c_{\vec{k}+\vec{Q}}^\dagger(\tau) c_{\vec{k}+\vec{Q}} \rangle$ shows the same asymptotic behavior as $\langle c_{\vec{k}}^\dagger(\tau) c_{\vec{k}} \rangle$. Thus, the low-energy feature around $\vec{k}=(0,0)$ in Fig. 7(c) corresponds to the shadow of the band in the vicinity of $\vec{k}=(\pi, \pi)$. We note that shadow features at high energies are hard to resolve within the ME. Close to the phase transition in the disordered phase precursors features of the shadow bands are seen [see Fig. 7(b)]. As is apparent, they are shifted by an energy scale that corresponds approximately to the spin gap.

To obtain further insight into the charge degrees of freedom we will consider a mean-field theory of the KLM re-

cently introduced by Zhang and Yu.³⁴ This mean-field theory is appealing since (i) it takes into account both Kondo screening and magnetic ordering of the f and c electrons and (ii) a phase where both Kondo screening and magnetic ordering emerges in a narrow region around the phase transition.

Following Zhang and Yu,³⁴ we write the KLM as

$$\begin{aligned}
 H_{KLM} = & \sum_{\vec{k}, \sigma} \varepsilon(\vec{k}) c_{\vec{k}, \sigma}^\dagger c_{\vec{k}, \sigma} \\
 & + \frac{J}{4} \sum_i (f_{i, \uparrow}^\dagger f_{i, \uparrow} - f_{i, \downarrow}^\dagger f_{i, \downarrow}) (c_{i, \uparrow}^\dagger c_{i, \uparrow} - c_{i, \downarrow}^\dagger c_{i, \downarrow}) \\
 & - \frac{J}{4} \sum_i [(f_{i, \downarrow}^\dagger c_{i, \downarrow} + c_{i, \uparrow}^\dagger f_{i, \uparrow})^2 \\
 & + (f_{i, \uparrow}^\dagger c_{i, \uparrow} + c_{i, \downarrow}^\dagger f_{i, \downarrow})^2],
 \end{aligned} \tag{42}$$

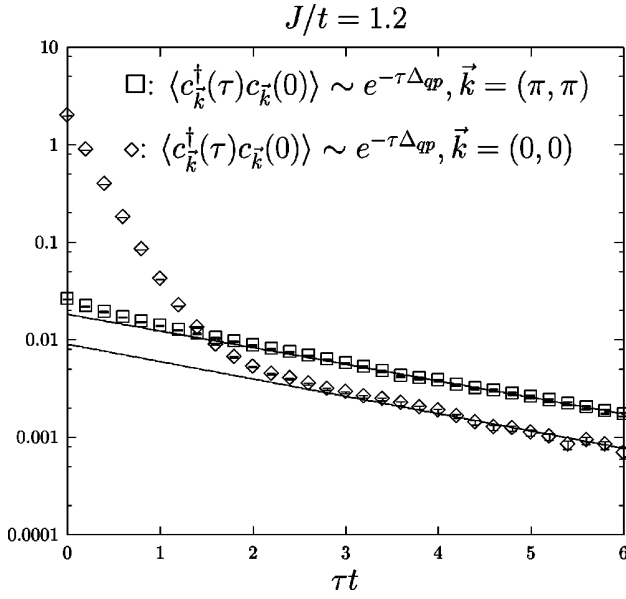


FIG. 8. $\langle c_{\vec{k}+\vec{Q}}^\dagger(\tau) c_{\vec{k}}(0) \rangle$ and $\langle c_{\vec{k}}^\dagger(\tau) c_{\vec{k}}(0) \rangle$ as a function of τt on a 8×8 lattice at $T=0$. Both considered $\vec{k}$ points follow a $e^{-\Delta_{qp}\tau}$ law (solid lines), thus confirming the existence of shadows.

Mean Field, $\langle n \rangle = 2$, $T = 0$

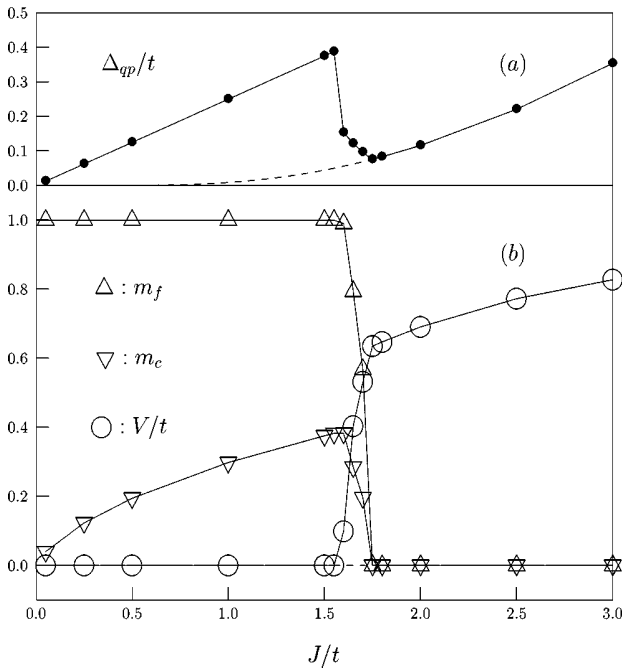


FIG. 9. Solution of the mean-field equations in Eq. (46). The solid line in (a) corresponds to the quasiparticle gap as obtained with the mean-field order parameters plotted in (b). The dashed line corresponds to the quasiparticle gap obtained in the absence of magnetic ordering (i.e., we consider the solution of the mean-field equations with $m_c, m_f = 0$ but $V \neq 0$. In the weak-coupling limit, those solutions produce higher energy values than when magnetic ordering is allowed.)

with the constraint: $f_{i,\uparrow}^\dagger f_{i,\uparrow} + f_{i,\downarrow}^\dagger f_{i,\downarrow} = 1$. The second term of Eq. (42) describes the polarization of the conduction electrons by the impurity spins and leads to a magnetic instability. The third term is nothing but a rewriting of the spin-flip processes:

$$\frac{J}{2} \sum_i (f_{i,\uparrow}^\dagger f_{i,\downarrow} c_{i,\downarrow}^\dagger c_{i,\uparrow} + f_{i,\downarrow}^\dagger f_{i,\uparrow} c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}), \quad (43)$$

which are at the origin of the screening of the impurity spins by the conduction electrons. The mean-field approximation proposed by Zhang and Yu³⁴ is based on the order parameters:

$$\langle f_{i,\uparrow}^\dagger f_{i,\uparrow} - f_{i,\downarrow}^\dagger f_{i,\downarrow} \rangle = m_f e^{i\vec{Q} \cdot \vec{i}},$$

$$\langle c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\uparrow} - c_{i,\downarrow}^\dagger c_{i,\downarrow} \rangle = -m_c e^{i\vec{Q} \cdot \vec{i}} \quad \text{and}$$

$$\langle f_{i,\downarrow}^\dagger c_{i,\downarrow} + c_{i,\uparrow}^\dagger f_{i,\uparrow} \rangle = \langle f_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\uparrow} + c_{i,\downarrow}^\dagger f_{i,\downarrow} \rangle = -V. \quad (44)$$

Here, $\vec{Q}$ is the antiferromagnetic wave vector, m_f and m_c are, respectively, the staggered moments of the impurity spins and conduction electrons, and V is the hybridization order parameter that leads to the screening of the impurity spins. With the above Ansatz, one obtains the mean field Hamiltonian:

$$\begin{aligned} \tilde{H} = & \sum_{k,\sigma} \begin{pmatrix} c_{\vec{k},\sigma} \\ c_{\vec{k}+\vec{Q},\sigma} \\ f_{\vec{k},\sigma} \\ f_{\vec{k}+\vec{Q},\sigma} \end{pmatrix}^\dagger \\ & \times \begin{pmatrix} \varepsilon(\vec{k}) & \frac{Jm_f\sigma}{4} & \frac{JV}{2} & 0 \\ \frac{Jm_f\sigma}{4} & -\varepsilon(\vec{k}) & 0 & \frac{JV}{2} \\ \frac{JV}{2} & 0 & 0 & -\frac{Jm_c\sigma}{4} \\ 0 & \frac{JV}{2} & -\frac{Jm_c\sigma}{4} & 0 \end{pmatrix} \\ & \times \begin{pmatrix} c_{\vec{k},\sigma} \\ c_{\vec{k}+\vec{Q},\sigma} \\ f_{\vec{k},\sigma} \\ f_{\vec{k}+\vec{Q},\sigma} \end{pmatrix} + NJ(m_fm_c/4 + V^2/2), \end{aligned} \quad (45)$$

where the $\vec{k}$ sum runs over the magnetic Brillouin zone. We note that due to particle-hole symmetry present in the half filled case, the constraint of no double occupancy of the f sites is satisfied on average: $\langle f_{i,\uparrow}^\dagger f_{i,\uparrow} + f_{i,\downarrow}^\dagger f_{i,\downarrow} \rangle = 1$. The saddle point equations,

$$\left\langle \frac{\partial \tilde{H}}{\partial m_f} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \tilde{H}}{\partial m_c} \right\rangle = \left\langle \frac{\partial \tilde{H}}{\partial V} \right\rangle = 0, \quad (46)$$

may then be solved.³⁴

Solutions to the saddle-point equations at $T=0$ and as a function of J/t are plotted in Fig. 9. As is apparent, solutions with $m_c, m_f \neq 0$, $V=0$, as well as with $m_c, m_f=0$, $V \neq 0$ and most interestingly with $m_c, m_f, V \neq 0$ are obtained. Each solution predicts very different functional forms for the quasiparticle dispersion relation of the conduction electrons. Thus, by comparing with the numerical data, we can deduce which values of the mean-field order parameters are appropriate to best describe each phase.

We start by considering the spin-gap phase with $J > J_c$. Here, magnetic order is absent and the impurity spins are completely screened by the conduction electrons. It is thus appropriate to set $m_c = m_f = 0$ but $V \neq 0$. This yields two quasiparticle bands with dispersion relation:

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \frac{1}{2}(\varepsilon(\vec{k}) \pm E(\vec{k})), \quad \text{with} \quad E(\vec{k}) = \sqrt{\varepsilon(\vec{k})^2 + (JV)^2}. \quad (47)$$

The quasiparticle weights are given by the coherence factors: $u_{\pm}(\vec{k})^2 = \frac{1}{2}[1 \pm \varepsilon(\vec{k})/E(\vec{k})]$. We can use this form to fit the

QMC data shown in Fig. 7(a). As is apparent, the functional form of the dispersion relation is well reproduced.

We now consider $J < J_c$. Here, antiferromagnetic order is present both in the conduction electrons and localized spins so that: $m_c \neq 0$ as well as $m_f \neq 0$. Following the idea that the spin degrees of freedom are frozen due to the magnetic ordering, we set $V=0$ to obtain

$$E_{\pm}(\vec{k}) = \pm E(\vec{k}), \quad \text{with} \quad E(\vec{k}) = \sqrt{\varepsilon(\vec{k})^2 + (Jm_f/4)^2}. \quad (48)$$

The residues of the poles of the Green function follow: $u_{\pm}(\vec{k})^2 = \frac{1}{2}[1 \pm \varepsilon(\vec{k})/E(\vec{k})]$. This clearly does not reproduce the QMC results since the very flat quasiparticle band observed numerically around $\vec{k}=(\pi, \pi)$ is absent [see Fig. 7(c)]. Assuming, on the other hand, that magnetic ordering and Kondo screening coexist, we set $V \neq 0$ to obtain four quasiparticle bands:

$$E_{\pm, \pm}(\vec{k}) = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} \left\{ E(\vec{k}) \pm \sqrt{E(\vec{k})^2 - \frac{J^4}{4}(m_c m_f/4 + V^2)^2 - J^2 m_c^2/4 \varepsilon(\vec{k})^2} \right\}^{1/2}, \quad \text{with} \\ E(\vec{k}) = \varepsilon(\vec{k})^2 + J^2(m_c^2/4 + m_f^2/4 + 2V^2)/4. \quad (49)$$

An acceptable account of the numerical data is obtained by using the QMC values of the staggered moments and V as a fit parameter [see Fig. 7(c)]. We are thus led to the interpretation that the localized spins play a dual role. On one hand, they are partially screened by the conduction electrons. On the other hand, the remnant magnetic moment orders due to the RKKY interaction.

It is now interesting to consider the ferromagnetic KLM. When $J < 0$, Kondo screening is not present. Thus, we expect the appropriate mean-field solution to have $m_c \neq 0$, as well as $m_f \neq 0$ but $V=0$. This choice of mean-field parameters leads to the dispersion relation given in Eq. (48). As apparent, and using m_f as a fit parameter, we can reproduce the QMC results [see Fig. 7(d)].

IV. SPIN AND CHARGE DEGREES OF FREEDOM AT FINITE TEMPERATURE

The aim of this section is to define relevant energy scales for both spin and charge degrees of freedom as a function of J/t . In doing so, we will discuss the behavior of the optical conductivity, staggered spin susceptibility, single particle spectral functions, as well as the specific heat as a function of temperature. We will put the emphasis on the behavior of those quantities at the spin and charge energy scales.

A. Spin and charge energy scales

To define the charge scale, we consider the charge susceptibility $\chi_c = \beta/L^2(\langle N^2 \rangle - \langle N \rangle^2)$, where N corresponds to the particle number operator. It suffices to consider only the conduction electrons since the f electrons are localized and have no charge fluctuations. Since we are discussing the temperature dependence of χ_c , let us recall the high-temperature result:

$$\chi_c = \frac{1}{2T} \left[1 - \frac{1}{8T^2} \left(\frac{3J^2}{8} + 8t^2 \right) \right]. \quad (50)$$

From that behavior, it appears that $J\chi_c$ will exhibit some approximative scaling form as a function of T/J only for large $J/t \gg 8/\sqrt{3} \sim 4.62$. In Fig. 10, we find consistent results at high temperature with Eq (50).

We can define a characteristic charge temperature T_C in a precise way by looking at the maximum of χ_c . In the weak-coupling limit, our numerical results are consistent with $T_C \sim J$ (See Figs. 10 and 19). In the large J limit ($J >$ bandwidth), the physics becomes local and one can consider decoupled sites. For each site, there are only eight states to take into account for computing the grand-canonical partition function: the singlet state, the threefold degenerate triplet, the fourfold degenerate $S=1/2$ state containing either an

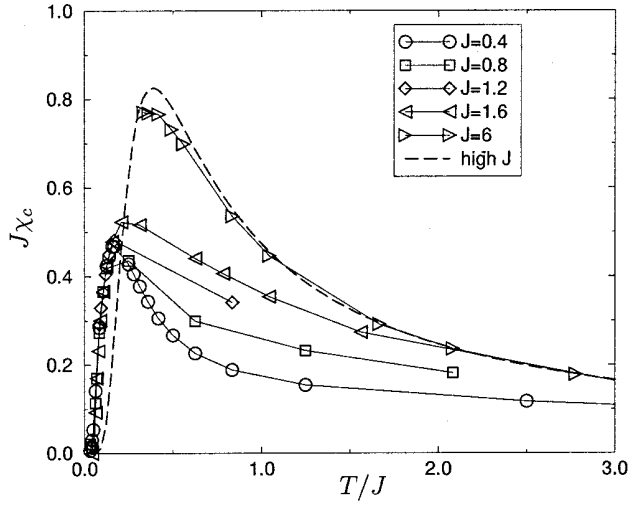


FIG. 10. Charge susceptibility $J\chi_c$ vs T/J for various couplings on the $L=6$ lattice. For very large J , we obtain good agreement with the large- J expression (51) plotted with a dashed line.

empty conduction site or a doubly occupied one, and with the two different spin configurations. In this limit, $\Delta_{sp} = J$, $\Delta_{qp}/J = 3/4$, and

$$\chi_c = \beta \frac{4}{4 + 3e^{-\beta J/4} + e^{3\beta J/4}}, \quad (51)$$

which exhibits a peak at $T_C = 0.386J$. Hence, and apart from different numerical prefactors at weak and strong couplings, T_C scales as J in both limits (see Fig. 19).

To best understand the meaning of the charge scale, we consider the real part of the optical conductivity as obtained from the Kubo formula, $\sigma(\omega, T)$. This quantity is related to the imaginary time current-current correlation functions via:

$$\langle J(\tau)J(0) \rangle = \int d\omega K(\omega, \tau) \sigma(\omega, T), \quad \text{with} \quad K(\omega, \tau) = \frac{1}{\pi} \frac{e^{-\tau\omega}}{1 - e^{-\beta\omega}}. \quad (52)$$

Here, J is the current operator along the x or y lattice direction and $\langle \rangle$ represents an average over the finite-temperature ensemble. The above inverse Laplace transform, to obtain the optical conductivity is carried out with the ME (Ref. 18) method. The default model is chosen as follows. We start at high temperature with a flat default and then, for lower temperatures, we take as default the result obtained at the temperature just above.³⁵ This allows us to obtain smoother results, but emphasizes the fact that the ME method depends on the default that is used.

The overall features of the conductivity are shown in Fig. 11 for a given J . At high temperatures, there is only a very broad lorentzian Drude peak. By lowering the temperature, we first observe an enhancement of the Drude weight as expected for a metal. At temperature scales lower than T_C , there is a transfer of spectral weight from the Drude peak to finite frequencies and finally, at very low temperatures, we

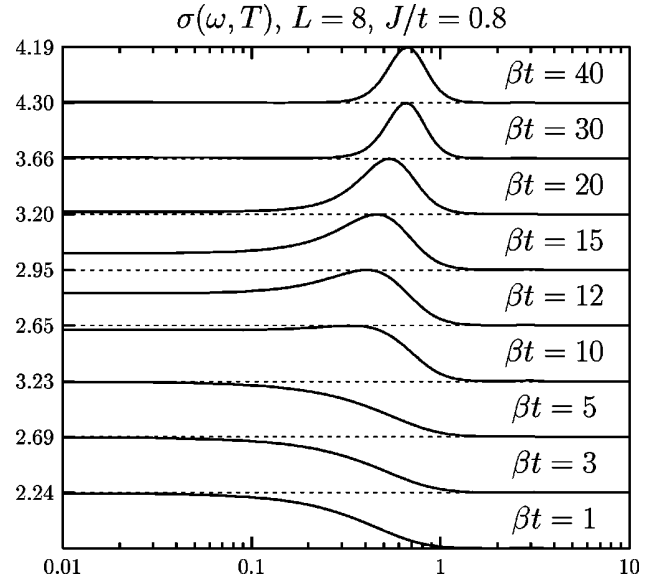


FIG. 11. Optical conductivity $\sigma(\omega, T)$ versus ω on a logarithmic scale for $J/t=0.8$ and various temperatures ($\Delta\tau=0.2$, $L=8$ lattice). The peak height has been normalized to unity and the normalization factor is listed on the left-hand side of the figure. As the temperature is decreased below the charge scale $T_C/t \sim 0.16$ spectral weight is transferred from the Drude peak to finite frequencies.

observe the opening of an optical gap related to the quasi-particle gap observed in the single-particle density of states (DOS).

The resistivity is defined as $\rho(T) = 1/\sigma(0, T)$. In Fig. 12, we plot $\rho(T)$ for various J . We observe a minimum located at approximately T_C . Thus, we will conclude that T_C corresponds to an energy scale where scattering of the electrons is enhanced, while decreasing temperature due to the screening of magnetic impurities.

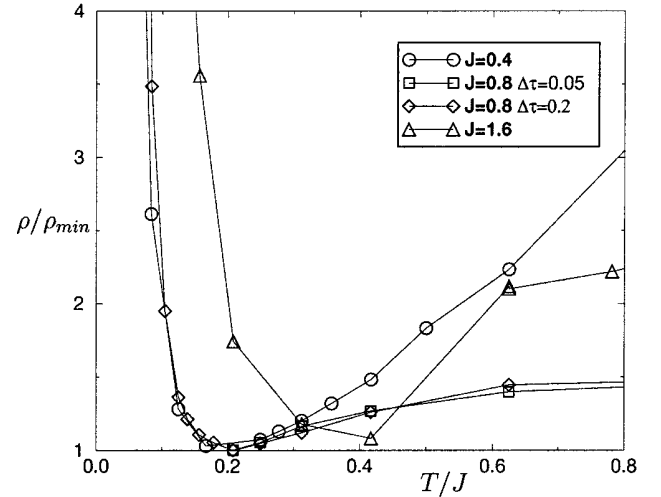


FIG. 12. Normalized dc resistivity ρ as a function of T/J for various couplings. We have checked for $J/t=0.8$ that the results do not depend on $\Delta\tau$. To a first approximation, and taking into account the scatter of the data at $J/t=1.6$, the temperature of the minimum in ρ tracks T_C : $T_C/J \sim 0.2, 0.2, 0.25$ for $J/t=0.4, 0.8$, and 1.6 , respectively.

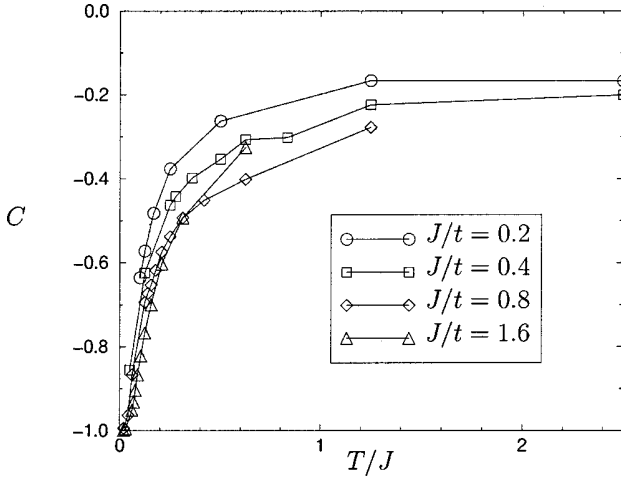


FIG. 13. Normalized local spin-spin correlation function $C = \langle \vec{S}_f \cdot \vec{S}_c \rangle(T) / \langle \vec{S}_f \cdot \vec{S}_c \rangle(T=0)$ as a function of T/J for various couplings. To a first approximation, the temperature scale of the onset of correlations tracks J .

This scenario is reinforced by the behavior of the local spin-spin correlation function $C = \langle \vec{S}_f \cdot \vec{S}_c \rangle(T) / \langle \vec{S}_f \cdot \vec{S}_c \rangle(T=0)$ plotted in Fig. 13. As the temperature is lowered, this quantity decreases indicating the formation of local singlets. Since the curves are almost identical as a function of T/J and for various couplings, we deduce that the typical energy scale is J and that the formation of those singlets are responsible for the enhancement of the resistivity which occurs at a similar temperature.

Before considering the characteristic energy scale for the spin degrees of freedom, we comment on the relation between the optical gap—as obtained from the low-temperature conductivity data—and quasiparticle gap (see Sec. III). They are not directly related since optical transitions involve only zero-momentum transfer. Starting from the hybridization picture, we can represent the band structure as in Fig. 14.

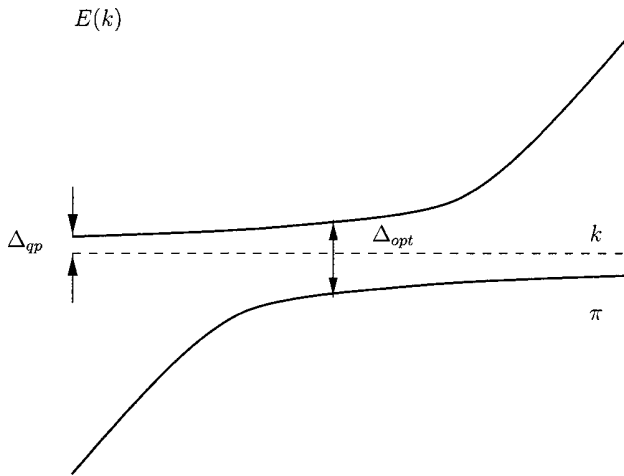


FIG. 14. Schematic 1D band structure showing the hybridized bands. k varies for $k=0$ to $k=\pi$ and as apparent charge gap $\Delta_C \sim 2\Delta_{qp}$ is smaller than the optical gap Δ_{opt} .

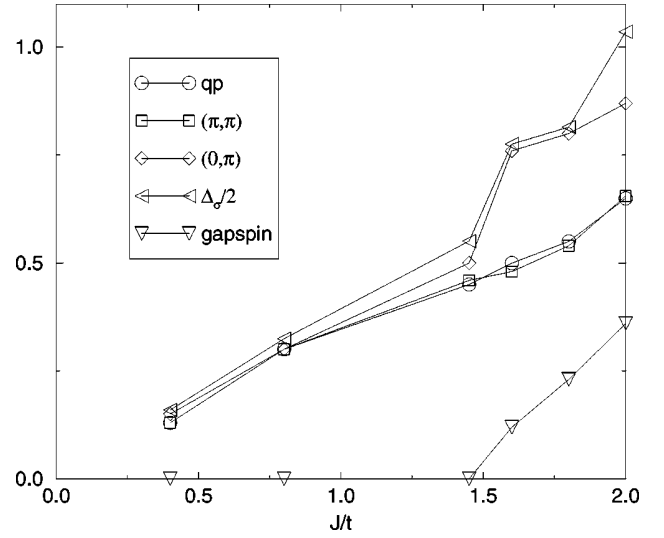


FIG. 15. Various gaps as a function of J . We have considered low enough temperatures so as to reproduce ground-state results and $L=6$. The quasiparticle gap is obtained from the DOS, the gaps at (π, π) and $(0, 0)$ are seen in the spectral functions at those points, the optical gap, Δ_σ stems from the optical conductivity and finally, the spin gap Δ_{sp} is taken from Ref. 31. As apparent, in the weak-coupling limit, where the quasiparticle dispersion is very flat along the $\vec{k}=(\pi, \pi)$ to $\vec{k}=(0, \pi)$ direction, the optical and charge gaps are comparable (see Fig. 7).

Generalizing this figure to 2D, we clearly see that the smallest optical gap is at $\vec{k}=(\pi, 0)$ (or equivalent points) and is larger than the charge gap $\Delta_C \approx 2\Delta_{qp}$. We recall that the quasiparticle gap corresponds to a transfer from a particle at $k=(\pi, \pi)$ in the lower band to the chemical potential. We then expect from that naive argument $\Delta_{opt} > \Delta_C \approx 2\Delta_{qp}$. More precisely, we can relate the optical gap to the gap at $\vec{k}=(0, \pi)$ as observed in Fig. 15.

To define a characteristic energy for the spin degrees of freedom, we compute the uniform spin susceptibility, $\chi_s = \beta/L^2 (\langle m_z^2 \rangle - \langle m_z \rangle^2)$. Here, $m_z = \sum_i (\tilde{n}_{i,\uparrow} - \tilde{n}_{i,\downarrow})$ with $\tilde{n}_{i,\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} + f_{i,\sigma}^\dagger f_{i,\sigma}$. In order to observe magnetic properties, it can be necessary to go to very low temperatures when J is small. With our algorithm, which is free from the sign problem, we can go down to $T=0.01t$ for $L=6$ or $T=0.02t$ for $L=8$.

In a high-temperature expansion, χ_s takes the form:

$$\chi_s = \frac{3}{8T} \left(1 - \frac{J}{6T} \right). \quad (53)$$

From this expansion, one expects to observe a scaling property $J\chi_s = f(T/J)$ in this regime. This is indeed what is observed in Fig. 16 for $T/J \geq 0.6$. We define the magnetic characteristic temperature T_s via the position of the maximum in χ_s . At large coupling, the physics of the Kondo lattice becomes local. In that limit, the susceptibility is easily computed [see a similar calculation for the charge susceptibility in Eq. (51)] and takes the form:

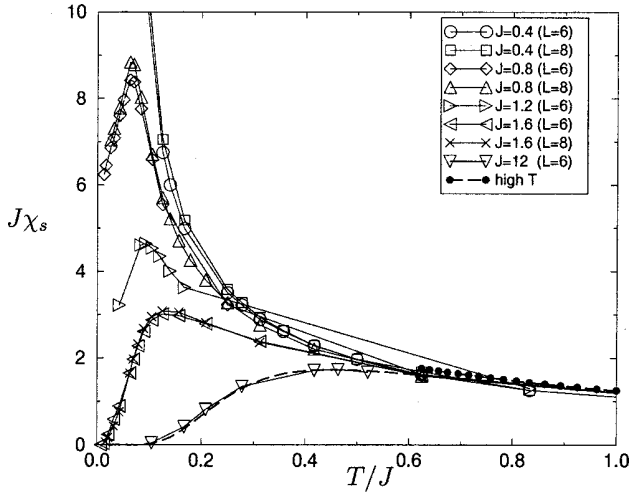


FIG. 16. Uniform spin susceptibility $J\chi_s$ as a function of T/J for various couplings and lattice sizes. The high-temperature expansion (53) is shown with filled circles and the large-coupling expansion (54) is plotted in dashed line.

$$\chi_s = \beta \frac{1 + 2e^{-\beta J/4}}{4 + 3e^{-\beta J/4} + e^{3\beta J/4}}, \quad (54)$$

which exhibits a maximum at $T_S \approx 0.453J$. In contrast, for smaller J , the position of the maximum clearly increases more slowly than J (see Fig. 17). As is apparent from Fig. 17 and for the considered values of J/t , T_S scales approximately as J^2 .

Figure 19 plots T_S as a function of J . In the large coupling region, we have excellent agreement with the expansion of Eq. (54); but, for couplings up to ~ 5 (or bandwidth, which is the physical case), T_S is well fitted by $\sim J^2$.

The meaning of the energy scale T_S is elucidated by considering the spin susceptibility at the antiferromagnetic wave vector $\vec{Q} = (\pi, \pi)$. This quantity measures the antiferromag-

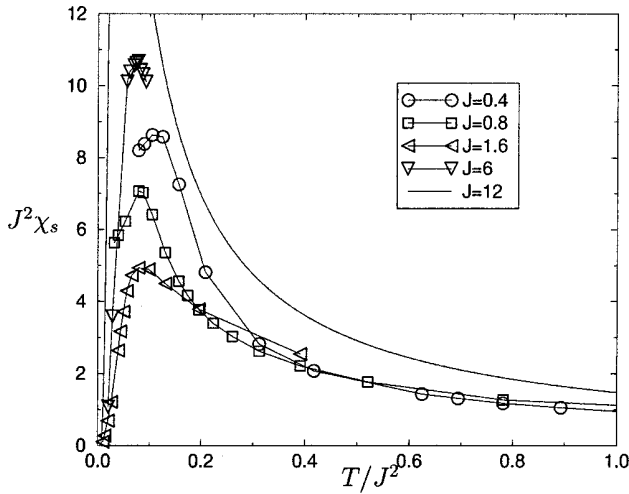


FIG. 17. Uniform spin susceptibility $J^2\chi_s$ as a function of T/J^2 for various couplings and $L=8$. For $J \leq 6$, the maximum T_S/J^2 is roughly constant.

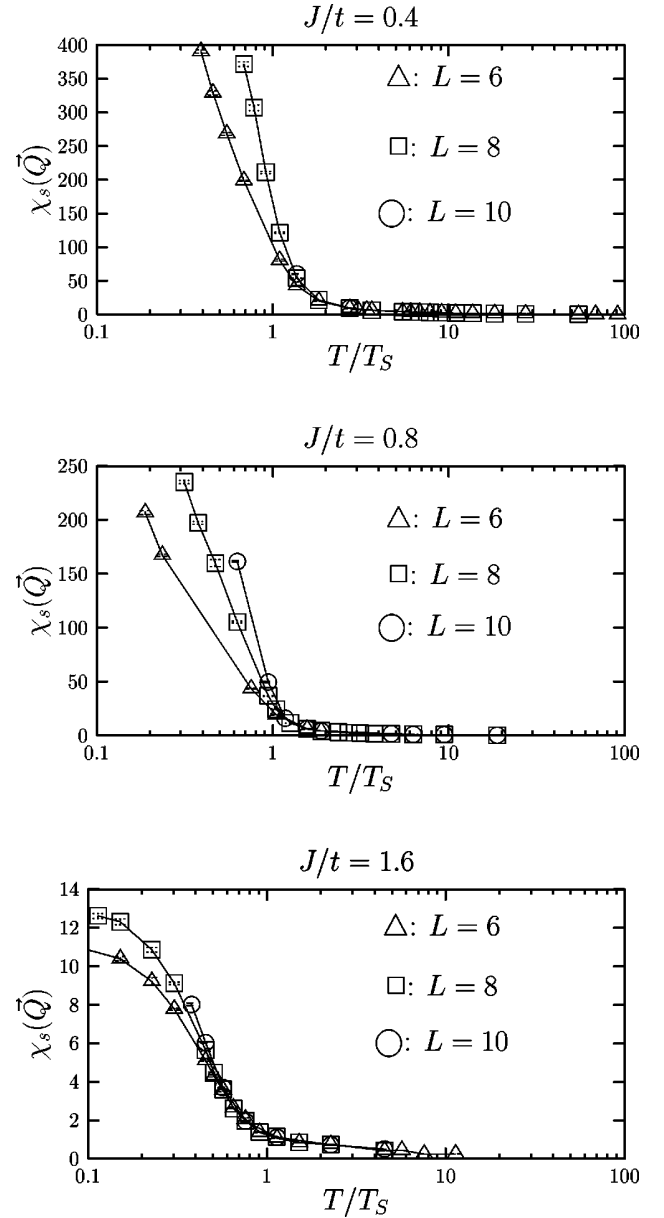


FIG. 18. Staggered spin susceptibility $\chi_s(\vec{Q})$ for various couplings and sizes. Since $\chi_s(\vec{Q}) \sim \xi^3$, we can extract the behavior of the antiferromagnetic correlation length ξ . $T_S \approx 0.017, 0.05, 0.22$ for $J/t = 0.4, 0.8, 1.6$.

netic correlation length. Indeed, writing the spin-spin correlation functions in space and imaginary time as $S(\vec{r}, \tau) = A \exp(i\vec{r} \cdot \vec{Q}) \exp(-r/\xi) \exp(-\tau/\xi_\tau)$, we find that the staggered susceptibility $\chi_s(\vec{Q}) = \int_0^\beta d\tau \int d\vec{r} \exp(-i\vec{Q} \cdot \vec{r}) S(\vec{r}, \tau) \sim \xi^D \xi_\tau$ in D dimensions. For the Heisenberg model, the dynamical exponent z defined by $\xi_\tau \sim \xi^z$ is equal to 1.^{36,37} Since the charge degrees of freedom are gapped, we expect that our model is in the same universality class as the O(3) model. We then obtain in our case $\chi_s(\vec{Q}) \sim \xi^3$.

$\chi_s(\vec{Q})$ is plotted in Fig. 18. As apparent and for the considered J/t range, the energy scale T_S marks the onset of

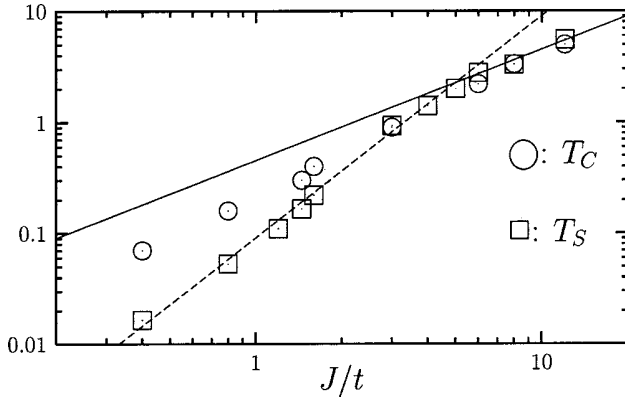


FIG. 19. Characteristic spin T_S and charge T_C temperatures as defined by the maximum of χ_s and χ_c as a function of J for $L=6$ and $L=8$ when available. At large J , the asymptotic behavior of T_S is $0.453J$ [Eq. (54) shown in full line] with no adjustable parameter; at small J , T_S is well fitted by the form $J^2/11$ (dashed line).

short-range antiferromagnetic fluctuations. At low temperatures in the ordered phase, one expects ξ to grow exponentially as a function of decreasing temperature. On the other hand, in the spin-gap phase, $J/t > 1.45$, the antiferromagnetic correlation length saturates to a constant.³⁷

The results of this section are summarized in Fig. 19. We have defined both a charge, T_C and a spin T_S scales. The charge scale corresponds to the onset of enhanced scattering as a function of decreasing temperature due to the screening of the magnetic impurities. Apart from different numerical prefactors T_C scales as J in the weak- and strong-coupling limits. From weak to intermediate couplings, the spin scale defines the onset of short-range antiferromagnetic fluctuations and follows a J^2 law in agreement with the energy scale associated to the RKKY interaction. At strong couplings, T_S tracks the spin gap. We note that we find good agreement with exact diagonalizations studies at finite temperatures.³⁸ This approach is, however, limited to very small cluster sizes and consequently to high temperatures and/or large values of J/t where the local approximation becomes valid. Thus, those studies cannot extract the behavior of T_S in the weak coupling limit.

B. Temperature dependence of spectral functions and origin of quasiparticle gap

The origin of the quasiparticle gap in the strong-coupling limit is the formation of Kondo singlets. In the weak-coupling limit, the situation is not *a priori* clear. In the mean-field theory presented in Fig. 9, and retaining only Kondo screening, we obtain an exponentially small gap corresponding to the dashed line in Fig. 9(a). On the other hand, retaining only magnetic ordering, the quasiparticle gap takes the value $J/4t$ in good agreement with the numerical data. We note that an exponentially small gap is equally obtained with (i) Gutzwiller approximation;¹² (ii) dynamical mean-field theory;¹⁰ (iii) $1/N$ expansion³⁹ since those approximations neglect magnetic fluctuations. In this section, we argue that at or slightly below T_C a small gap emerges leading to the

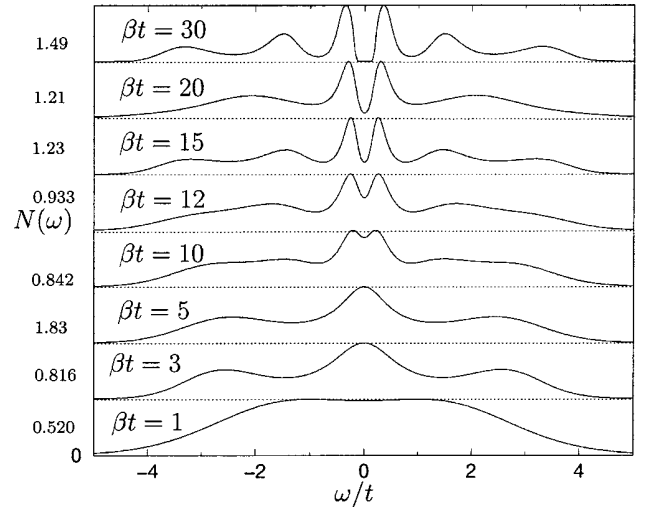


FIG. 20. Integrated DOS for $J/t=0.8$ on the $L=8$ lattice for various temperatures shown on the plot. The peak height is normalized to unity and normalization factor is listed on the left-hand side of the figure.

quasiparticle dispersion relation $\frac{1}{2}(\varepsilon(\vec{k}) \pm \sqrt{\varepsilon^2(\vec{k}) + \Delta^2})/2$ and that the quasiparticle gap of order J is formed only at T_S .

We start by considering the integrated DOS, $N(\omega)$ obtained with the ME method. Results are shown in Fig. 20 at $J/t=0.8$. In the vicinity of the charge scale, $T_C=0.16t$, one observes a reduction of spectral weight at the Fermi energy. Within the mean-field approximation of the KLM presented in Eqs. (42) and (44), this dip in the DOS of the conduction electrons follows directly from the occurrence of Kondo screening, i.e., $V \neq 0$. Hence, this feature in $N(\omega)$ at T_C stands in agreement with our interpretation of the charge scale T_C . As the temperature is lowered below T_C , the density of states at the Fermi level is further depleted and a gap opens in the low temperature limit.

In order to gain more insight into the distribution of spectral weight, it is convenient to compute the momentum-dependent DOS, $A(\vec{k}, \omega)$. The integrated density of states merely corresponds to the sum over all $\vec{k}$ of $A(\vec{k}, \omega)$. Therefore, we expect the same behavior by decreasing the temperature but we have more information on the dispersion relations of the excitations for example. Fig. 21(a) plots $A(\vec{k}, \omega)$ again for $J/t=0.8$ and at a temperature $T=0.083t$ corresponding to $T_S < T < T_C$. For comparison, we have included the $T=0$ data [see Fig. 21(b)]. As apparent the substantial spectral weight of the $\vec{k}$ points on the non-interacting Fermi line, i.e., $\vec{k} = (0, \pi), (\pi/2, \pi/2)$ has shifted to lower energies. This is the origin of the decrease in spectral weight observed at the Fermi level in the integrated DOS at $T \approx T_C$. However, the flat dispersion relation around $\vec{k} = (\pi, \pi)$ —with significantly less spectral weight—remains pinned at the Fermi level. The dominant features of the quasiparticle dispersion relation are well reproduced by the fit: $(\varepsilon(\vec{k}) \pm \sqrt{\varepsilon^2(\vec{k}) + \Delta^2})/2$ with $\Delta=0.5t$. This value of Δ produces a quasiparticle gap $\Delta_{qp} = \Delta^2/16t \approx 0.016t$ that lies be-

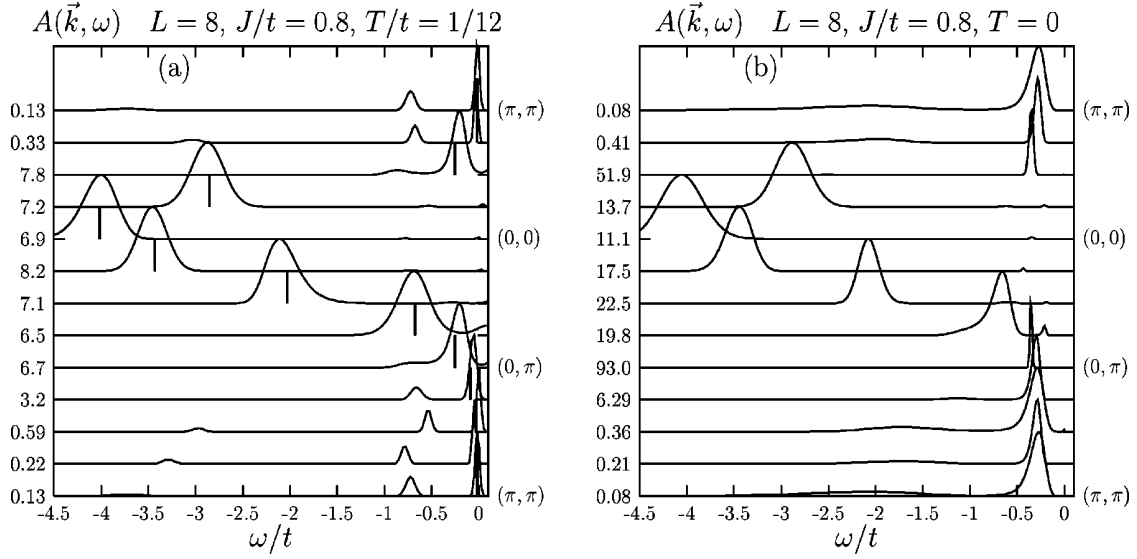


FIG. 21. (a) Spectral functions for $J/t=0.8$ and $\beta t=12$ ($\Delta\tau=0.2$, $L=8$ lattice). Normalization factors are written on the vertical axis. At this temperature, $T_S < T < T_C = 0.2t$, there is a clear formation of hybridized bands with quasiparticle gap lying beyond our resolution. The vertical bars correspond to a fit of the data (see text). For comparison, we have included the $T=0$ results (b).

yond our resolution. As seen in Fig. 21(b), $\Delta_{qp} = 0.28 \pm 0.02$ in the zero-temperature limit.

Since the quasiparticle gap is determined by the $\vec{k} = (\pi, \pi)$ wave vector we concentrate on this k point to analyze the temperature evolution. As is apparent in Fig. 22 at $J/t=0.8$, the quasiparticle gap of order J is formed approximately at the magnetic scale $T_S = 0.05t$. Since the model is particle-hole symmetric $A(\vec{k}, \omega) = A(\vec{k} + \vec{Q}, -\omega)$. Thus, the fact that the peak splits symmetrically around the Fermi energy confirms the presence of shadow bands. In the spin-gap phase, the quasiparticle gap originates solely from Kondo screening. In the mean-field approximation presented in Eqs. (42) and (44) and retaining only Kondo screening, the quasiparticle gap will grow continuously as a function of de-

creasing temperatures below the charge scale. This merely reflects the temperature dependence of the mean-field order parameter V . Precisely this behavior is seen in Fig. 22 at $J/t=1.6$.

The evolution of the quasiparticle gap as a function of temperature is equally seen in the charge susceptibility. At low temperatures one expects $\chi_c = \beta \exp(-\Delta_{qp}\beta)$. As is apparent from Fig. 23, it is only below T_S that the data follows the above exponential form.

C. Specific heat

Finally, we consider the specific heat that contains information on both spin and charge degrees of freedom. In principle, one can obtain the specific heat $C_v(T)$ by direct cal-

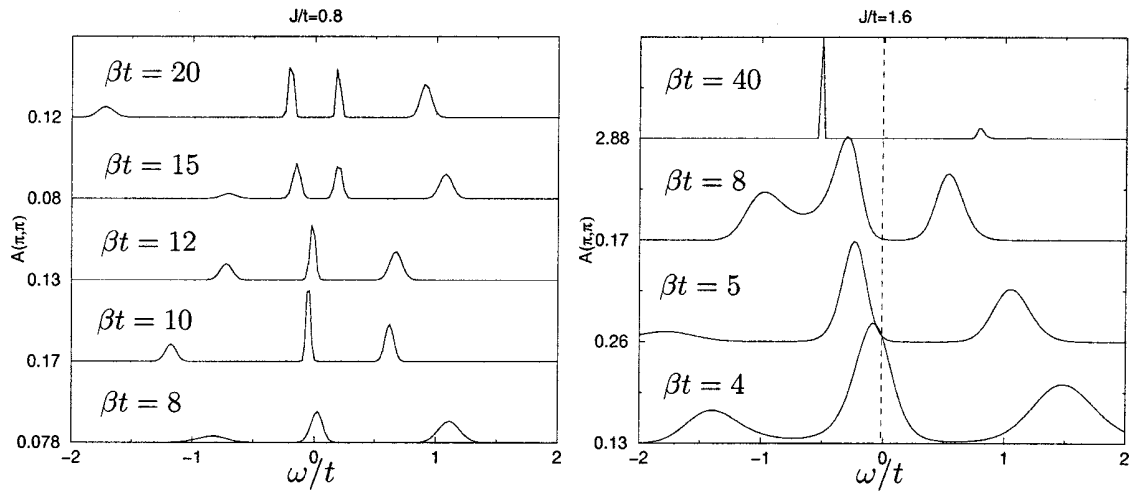


FIG. 22. Spectral functions at (π, π) for various couplings and β (increasing from down to up) ($\Delta\tau=0.2$, $L=8$ lattice). At $J/t=0.8$, the quasiparticle gap of order $J/4t$ opens at a temperature scale comparable to $T_S = 0.05$. In the spin-gap phase, at $J/t=1.6$ the quasiparticle gap grows smoothly as a function of decreasing temperature.

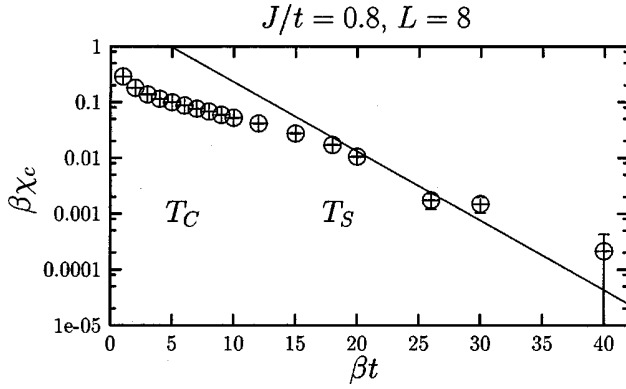


FIG. 23. χ_c/β at $J/t=0.8$. The solid line corresponds to $\exp(-\Delta_{qp}\beta)$ where quasiparticle corresponds to the value obtained with $T=0$ simulations (See Fig. 4). Only below the spin scale, T_S , do the data follow the above exponential form.

culuation of the fluctuations of the internal energy $E(T)$: $C_v(T) = 1/NdE/dT = 1/N(\langle H^2 \rangle - \langle H \rangle^2)/T^2$. However, this method produces very poor results at low temperatures. We have thus used a ME method to compute C_v as proposed in Ref. 40. In Fig. 24, we show $C_v(T)$ as well as the uniform spin and charge susceptibilities for various couplings as a function of temperature.

At $J/t=0$, the specific heat is given by the sum of a delta function at $T=0$ for the localized spins and the specific heat of free fermions. By switching on the coupling, they are combined to form a two-peak structure. The broad peak at high-temperature $T \sim t$ is almost independent of the coupling J and is rather similar to the free-electron gas. The sharp peak at lower temperatures strongly depends on the exchange constant. It shifts toward higher temperatures and becomes broader with increasing J/t . The location of this peak tracks the magnetic scale T_S indicating that its origin comes from the spin excitations. In the spin gapped phase, we note that the overall features of C_v agree with the 1D case.⁴¹

V. SUMMARY AND CONCLUSION

We have presented a detailed numerical study of ground-state and thermodynamic properties of the ferromagnetic and antiferromagnetic half filled KLM model on a square lattice. From the technical point of view, we have described and used an efficient (i.e., free of the minus-sign problem) auxiliary field QMC method to investigate the model. Both finite and ground-state algorithms were discussed. The approach is by no means restricted to the KLM and may be applied to investigate models such as the half filled two channel Kondo lattice or various forms of depleted Kondo lattices in which the impurity spins are removed in a regular or random way. However, we are tied to particle-hole symmetry, since only in this case can we avoid the minus-sign problem.

In two dimensions, the KLM shows a quantum phase transition between antiferromagnetically ordered and disordered states. This transition occurs at $J/t=1.45 \pm 0.05$. The magnon dispersion evolves smoothly from its strong cou-

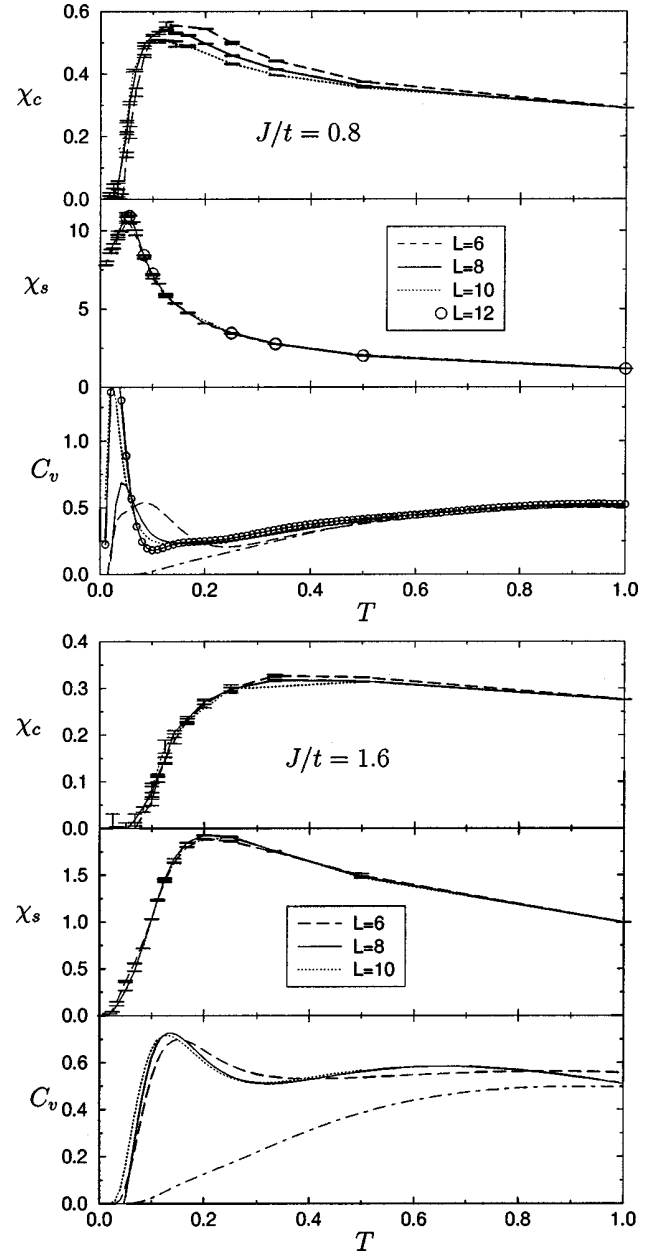


FIG. 24. Spin χ_s and charge χ_c susceptibilities as well as specific heat C_v as a function of temperature for various values of J/t . The dot-dashed line represents the specific heat of free electrons on $L=8$.

pling form with spin gap at $\vec{Q}=(\pi, \pi)$ to a spin-wave form in the ordered phase. The transition may be well understood in the framework of a bond-operator mean-field approximation of the Kondo necklace model.³³ Here, the disordered phase is represented by a condensation of singlets with an energy gap at $\vec{Q}=(\pi, \pi)$ for magnon excitations. At and below the critical point, the spin gap closes, leading to a condensation of both singlets and triplets at the antiferromagnetic wave vector. The system remains insulating. To a first approximation and as in the one-dimensional case, the quasiparticle gap scales a $|J|$ irrespective of the sign of J . In

contrast, the quasiparticle dispersion relation shows marked differences between ferromagnetic and antiferromagnetic couplings. For antiferromagnetic couplings the quasiparticle dispersion always has a structure that follows the functional form obtained in the noninteracting PAM: $E_{\pm}(\vec{k}) = \frac{1}{2}(\varepsilon(\vec{k}) \pm \sqrt{\varepsilon(\vec{k})^2 + \Delta^2})$. This functional form is obtained in various approximations^{34,42} that take into account Kondo screening but neglect magnetic ordering. In the antiferromagnetic phase, the above dispersion relation is merely supplemented by shadow features. One obtains a four-band structure that is well reproduced by mean-field theories that produce phases with coexistence of magnetic ordering and Kondo screening.³⁴ Thus, in the ordered phase, screening of the impurities is not complete. The remnant magnetic moments order due to the RKKY interaction. Although we cannot dope the system—due to severe minus-sign problems—it is tempting to assume a rigid band picture and to describe the doped phase by shifting the chemical potential into the conduction band. Since the quasiparticle gap is determined by the $\vec{k} = (\pm\pi, \pm\pi)$ points, the Fermi line will consist of hole pockets around those points and one expects the Luttinger volume to account both for localized and conduction electrons. Furthermore, since the band is very flat around those points, a larger effective mass is anticipated. Ferromagnetic couplings show a different behavior. In this case, Kondo screening is absent but the RKKY interaction present. The quasiparticle dispersion is well fitted by the form $E_{\pm}(\vec{k}) = \pm \sqrt{\varepsilon(\vec{k})^2 + \Delta^2}$ corresponding to free electrons subject to an external staggered magnetic field. In this case, again assuming a rigid band picture, doping produces a Luttinger volume containing only the conduction electrons. This contrasting behavior of the Luttinger volume for the ferromagnetic and antiferromagnetic KLM is reproduced in the limit of large dimensions.¹¹

From the finite-temperature simulations, we can define spin T_S and charge T_C energy scales by locating the maximum in the charge and spin susceptibilities. From weak to intermediate couplings, the spin scale follows a J^2 law, in agreement with the energy scale associated with the RKKY interaction. At strong couplings, $T_S \propto J$. In contrast, both in the weak- and strong-coupling limit, $T_C \sim J$. In the range where $T_S \propto J^2$, the staggered susceptibility shows a marked increase at $T \sim T_S$. Hence, in this range T_S corresponds to the onset of antiferromagnetic fluctuations. On the other hand, the charge scale determines to a first approximation the minimum in the resistivity. Furthermore, at T_C antiferromagnetic intracell correlations between the f and c electrons are formed and a dip in the integrated density of states $N(\omega)$ at the Fermi level is observed. Thus, this scale marks the onset of enhanced scattering originating from the screening of the magnetic impurities. In the limit of infinite dimensions, a similar behavior in the charge degrees of freedom is seen, but at a much smaller energy scale, $T_0 \sim e^{-1/2JN(\varepsilon_f)}$.¹⁰ Apart from a factor 1/2 in the exponent, T_0 corresponds to Kondo temperature of the single impurity problem. In one dimension, a dip in $N(\omega)$ is observed at an energy scale larger than the spin gap that scales as $e^{-1/\alpha JN(\varepsilon_f)}$ in the weak-coupling

limit [with a numerical estimation of $1 \leq \alpha \leq 5/4$ (Ref. 15) or $\alpha = 1.4$ (Ref. 16)].

In the weak-coupling limit, one can analyze the single-particle spectral function at various temperatures. Our results show that the quasiparticle gap of order J is formed only at the magnetic energy scale. Thus, one can only conclude that the quasiparticle gap at weak couplings is of magnetic origin. In contrast, at strong coupling, the quasiparticle gap originates from Kondo screening. The above stands in agreement with arguments and numerical results presented for the one-dimensional (1D) case.^{15,16} At weak couplings in one dimension the spin gap becomes exponentially small. Hence, the time scale associated with magnetic fluctuations is exponentially larger than the time scale relevant for charge fluctuations that is set by t . The conduction electrons thus effectively feel a static magnetic ordering. In one dimension and in 2D, in the presence of particle-hole symmetry, nesting of the noninteracting Fermi surface is present. At a mean-field level and in the presence of magnetic ordering, this leads to a quasiparticle gap $\Delta_{qp} = J/4$. In 2D, one may alter the shape of the noninteracting Fermi surface so as to avoid nesting by introducing a small nearest-neighbor hopping matrix element. In this case, the mean-field approximation does not produce an insulating state in the presence of antiferromagnetic ordering. Since nesting is related to particle-hole symmetry, we cannot address this question in the QMC approach due to severe sign problems. Hence, it is worth paying particular attention to our results at weak couplings and $T_C > T > T_S$, before antiferromagnetic correlations set in. Here, Kondo screening is present but antiferromagnetic correlations absent. In this temperature range, $A(\vec{k}, \omega)$ shows a dispersion relation following that of hybridized bands with the quasiparticle gap lying beyond our resolution.

We have equally computed the specific heat, C_v . This quantity shows a two-peak structure. The broad high-energy ($T \sim t$) feature stems from the conduction electrons. The low-energy peak is very sharp in the ordered phase and tracks T_S . It is hence of magnetic origin.

Finally, we discuss the relationship of our results to experiments. Let us first concentrate on $\text{Ce}_3\text{Bi}_4\text{Pt}_3$. At $T = 100$ K the effective magnetic moment of Ce ions starts decreasing.⁴³ At higher temperatures, the Ce ion has a next to fully developed moment (i.e., $J = 5/2$ as appropriate for Ce^{3+}). At the same temperature scale, the real part of the optical conductivity shows a reduction of spectral weight in a frequency range of 39 meV or 450 K.^{43,44} Those results imply that the opening of a gap is related to the screening of magnetic impurities and hence, the KLM seems to be an adequate prototype model for the description of this class of materials. The above-described temperature evolution is precisely seen in our numerical simulations. At $T \approx T_C$ and at weak couplings, the optical conductivity shows a transfer of spectral weight from low frequencies to frequencies well above T_C (Fig. 11). Screening of the magnetic moments start equally at $T \approx T_C$ (Fig. 13). For the above material, the optical gap is estimated by $\Delta_{\sigma} = 39$ meV (Ref. 45) and photoemission experiments suggest a quasiparticle gap $\Delta_{qp} = 20$ meV.⁴⁶ At a temperature scale $T \approx 25$ K, a gap in the mag-

netic excitation of $\Delta_{sp}=12$ meV is observed. Those small energy scales imply that small values of J/t should be considered. The gaps equally satisfy the relation $\Delta_c \approx 2\Delta_{qp} > \Delta_{sp}$ as obtained in the KLM. Hence, one should place this material in the parameter range $J > J_c$, which in our calculations seem rather large in comparison to the small charge gap observed in experiments. However, one should keep in mind that J_c may be sensitive to the properties of the noninteracting Fermi surface. In particular nesting—which is present in our calculation—will certainly enhance the value of J_c . We now turn our attention to CeNiSn. CeNiSn has a transport gap roughly an order of magnitude smaller than $\text{Ce}_3\text{Bi}_4\text{Pt}_3$, and hence—assuming a KLM description of the material—should correspond to smaller values of J/t in comparison to $\text{Ce}_3\text{Bi}_4\text{Pt}_3$. (Note that recent measurements down to ~ 0.1 K have found an electronic contribution to the spe-

cific heat.⁴⁷ This is interpreted in terms of a finite density of states within the gap.) This smaller value of J/t leads to signs of magnetism. Indeed, along the a axis of the orthorhombic structure, CeNiSn shows a peak in the magnetic susceptibility at 12 K. At the same energy scale, an anomaly is seen in the specific heat.⁴⁸ This seems consistent with our results.

ACKNOWLEDGMENTS

We acknowledge useful discussions and communications with R. Eder, M. Feldbacher, G. Grüner, O. Gunnarson, C. Huscroft, Y. Lu, A. Muramatsu, H. Tsunetsugu, and G. M. Zhang. We thank HLRS Stuttgart for generous allocation of CPU time on the Cray-T3E.

- ¹P. A. Lee, T. M. Rice, J. W. Serene, L. J. Sham, and J. W. Wilkins, *Comments Condens. Matter Phys.* **12**, 99 (1986).
- ²G. Aeppli and Z. Fisk, *Comments Condens. Matter Phys.* **16**, 155 (1992).
- ³J. R. Schrieffer and P. A. Wolff, *Phys. Rev.* **149**, 491 (1966).
- ⁴M. Imada, A. Fujimori, and Y. Tokura, *Rev. Mod. Phys.* **70**, 1039 (1998).
- ⁵A. C. Hewson, *The Kondo Problem to Heavy Fermions, Cambridge Studies in Magnetism* (Cambridge University Press, Cambridge, 1997).
- ⁶J. Kondo, *Prog. Theor. Phys.* **32**, 37 (1964).
- ⁷P. W. Anderson, *Phys. Rev.* **164**, 352 (1967).
- ⁸C. Kittel, *Quantum Theory of Solids* (Wiley, New York, 1963).
- ⁹S. Doniach, *Physica B* **91**, 231 (1977).
- ¹⁰M. Jarrell, *Phys. Rev. B* **51**, 7429 (1995).
- ¹¹N. Matsumoto and F. J. Ohkawa, *Phys. Rev. B* **51**, 4110 (1995).
- ¹²T. M. Rice and K. Ueda, *Phys. Rev. B* **34**, 6420 (1986).
- ¹³M. Vekic, J. W. Cannon, D. J. Scalapino, R. T. Scalettar, and R. L. Sugar, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2367 (1995).
- ¹⁴C. Gröber and R. Eder, cond-mat/9909008 (unpublished).
- ¹⁵H. Tsunetsugu, M. Sigrist, and K. Ueda, *Rev. Mod. Phys.* **69**, 809 (1997).
- ¹⁶N. Shibata and K. Ueda, *J. Phys.: Condens. Matter* **11**, R1 (1999).
- ¹⁷R. Blankenbecler, D. J. Scalapino, and R. L. Sugar, *Phys. Rev. D* **24**, 2278 (1981).
- ¹⁸M. Jarrell and J. Gubernatis, *Phys. Rep.* **269**, 133 (1996).
- ¹⁹R. M. Fye and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **65**, 3177 (1990).
- ²⁰R. M. Fye and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **44**, 7486 (1991).
- ²¹R. M. Fye, *Phys. Rev. B* **33**, 6271 (1986).
- ²²F. F. Assaad, W. Hanke, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **50**, 12 835 (1994).
- ²³F. F. Assaad, M. Imada, and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. B* **56**, 15 001 (1997).
- ²⁴F. F. Assaad and M. Imada, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 189 (1996).
- ²⁵M. Feldbacher and F. F. Assaad, *Phys. Rev. B* **63**, 73105 (2001).
- ²⁶E. Loh and J. Gubernatis, in *Modern Problems of Condensed Matter Physics*, edited by W. Hanke and Y. V. Kopaev (North-Holland, Amsterdam, 1992), Vol. 32, p. 177.
- ²⁷S. Q. Shen, *Phys. Rev. B* **53**, 14 252 (1996).
- ²⁸H. Tsunetsugu, *Phys. Rev. B* **55**, 3042 (1997).
- ²⁹J. E. Hirsch, *Phys. Rev. B* **28**, 4059 (1983).
- ³⁰F. F. Assaad, in *High Performance Computing in Science and Engineering*, edited by E. Krause and W. Jäger (Springer, Berlin, 1998), p. 105; cond-mat/9806307 (unpublished).
- ³¹F. F. Assaad, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 796 (1999).
- ³²S. Sachdev and R. N. Bhatt, *Phys. Rev. B* **41**, 9323 (1990).
- ³³G.-M. Zhang, Q. Giu, and L. Yu, *Phys. Rev. B* **62**, 69 (2000).
- ³⁴G.-M. Zhang and L. Yu, *Phys. Rev. B* **62**, 76 (2000).
- ³⁵O. Gunnarsson and J. E. Han, *Nature (London)* **405**, 1027 (2000).
- ³⁶S. Chakravarty, B. I. Halperin, and D. R. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1057 (1988).
- ³⁷S. Chakravarty, B. I. Halperin, and D. R. Nelson, *Phys. Rev. B* **39**, 2344 (1989).
- ³⁸K. Haule, J. Bonča, and P. Prelovšek, *Phys. Rev. B* **61**, 2482 (2000).
- ³⁹N. Read and D. N. Newns, *J. Phys. C* **16**, 3273 (1983).
- ⁴⁰C. Huscroft, R. Gass, and M. Jarrell, *Phys. Rev. B* **61**, 9300 (2000).
- ⁴¹N. Shibata, B. Ammon, M. Troyer, M. Sigrist, and K. Ueda, *J. Phys. Soc. Jpn.* **67**, 1086 (1998).
- ⁴²R. Eder, O. Rogojanu, and G. A. Sawatzky, *Phys. Rev. B* **58**, 7599 (1998).
- ⁴³B. Bucher, Z. Schlesinger, P. C. Canfield, and Z. Fisk, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 522 (1994).
- ⁴⁴L. Degiorgi, *Rev. Mod. Phys.* **71**, 687 (1999).
- ⁴⁵A. Severing, J. D. Thompson, P. C. Canfield, Z. Fisk, and P. Riseborough, *Phys. Rev. B* **44**, 6832 (1991).
- ⁴⁶K. Breuer, S. Messerli, D. Purdie, M. Garnier, M. Hengesberger, G. Panaccione, Y. Baer, T. Takahashi, S. Yoshi, M. Kasaya, K. Katoh, and T. Takabatake, *Europhys. Lett.* **41**, 565 (1998).
- ⁴⁷K. Izawa, T. Suzuki, T. Fujita, T. Takabatake, G. Nakamoto, H. Fujii, and K. Maezawa, *Phys. Rev. B* **59**, 2599 (1999).
- ⁴⁸T. Takabatake, F. Teshima, H. Fujii, S. Nishigori, T. Suzuki, T. Fujita, Y. Yamaguchi, J. Sakurai, and D. Jaccard, *Phys. Rev. B* **41**, 9607 (1990).

Article [16]

S. Capponi et D. Poilblanc

Charge density correlations in t - J ladders investigated by the contractor-renormalization method

Charge density correlations in t - J ladders investigated by the contractor-renormalization method

Sylvain Capponi* and Didier Poilblanc

Groupe de Physique Théorique, Laboratoire de Physique Quantique, UMR-CNRS 5626, Université Paul Sabatier, F-31062 Toulouse, France

(Received 16 August 2002; published 27 November 2002)

Using four-site plaquette or rung basis decomposition, the contractor-renormalization method is applied to two-leg and four-leg t - J ladders and cylinders. Resulting range-2 effective Hamiltonians are studied numerically on *periodic rings* taking full advantage of the translation symmetry as well as the drastic reduction of the Hilbert space. We investigate the role of magnetic and fermionic degrees of freedom. Spin gaps, pair-binding energies, and charge correlations are computed and compared to available exact-diagonalization and density-matrix renormalization-group data for the full Hamiltonian. Strong evidence for short-range diagonal stripe correlations are found in periodic four-leg t - J ladders.

DOI: 10.1103/PhysRevB.66.180503

PACS number(s): 75.10.-b, 71.27.+a, 75.50.Ee, 75.40.Mg

Competition between superconducting correlations and charge ordering has long been a challenge to numerical computations^{1,2} of low-dimensional strongly correlated electron systems. Spin and hole-doped ladders³ offer an ideal system to investigate the crossover between one to two dimensions. The two-leg ladder, for example, is known to exhibit a robust spin gap at and close to half filling as well as hole-pair binding.^{4,5} Dominant power-law $d_{x^2-y^2}$ -like pairing and $4k_F$ -charge-density-wave (CDW) correlations at small doping are characteristic of a Luther-Emery (LE) liquid regime.^{6,7} However, the spin-gap magnitude drops sharply as the number of legs is increased, e.g., from $0.50J$ in the Heisenberg two-leg ladder to $0.190J$ in the Heisenberg four-leg ladder.⁸ Both the increase of the magnetic correlation length (of the undoped ladder) as well as the drastic reduction of the available ladder length for increasing leg number restrict enormously the accuracy of standard numerical techniques such as exact diagonalization (ED) and density matrix renormalization-group (DMRG) techniques. In addition, the DMRG method is limited (in practice) to open boundary conditions (OBC) in the leg direction.

In this Communication, we use the contractor-renormalization (CORE) method^{9,10} to investigate hole-doped two-leg and four-leg ladders.¹² Our aim is to get further insights on the issue of pairing and density correlations from the investigation of large enough systems with periodic boundary conditions (PBC) in the ladder direction. Such investigations are greatly needed to complement available DMRG calculations using OBC. Our approach is done in two steps: (i) using an appropriate partition into small subsystems, we use the CORE method to construct an effective Hamiltonian, which integrates out quantum fluctuations at short length scales; (ii) we use ED techniques (supplemented by finite-size analysis) to compute various physical properties (pair binding, spin gaps, etc.) and compare them to those of the original model. The method provides strong evidence for stripe correlations in translationally invariant four-leg ladders.

We shall consider here a generic n -leg t - J ladder,

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & J_{\text{leg}} \sum_{i,a} \tilde{S}_{i,a} \cdot \tilde{S}_{i+1,a} + J_{\text{rung}} \sum_{i,a} \tilde{S}_{i,a} \cdot \tilde{S}_{i,a+1} \\ & + t_{\text{leg}} \sum_{i,a} (c_{i,a}^\dagger c_{i+1,a} + \text{H.c.}) + t_{\text{rung}} \sum_{i,a} (c_{i,a}^\dagger c_{i,a+1} + \text{H.c.}), \end{aligned} \quad (1)$$

where $c_{i,a}$ are projected hole fermionic operators. Open (ladders) or systems closed (cylinders) along the rungs with isotropic coupling, $t_{\text{leg}} = t_{\text{rung}} = 1$ and $J_{\text{leg}} = J_{\text{rung}} = J$, will be of interest here.

In order to implement the CORE algorithm the ladders are decomposed in small four-site subunits, as shown in Fig. 1, whose M low-energy states are kept to define a reduced Hilbert space. The full Hamiltonian (1) is then diagonalized on N connected units (with OBC) to retain its M^N low-energy states. These true eigenstates are then projected on the reduced Hilbert space (tensorial product of the M states of each unit) and Gram-Schmidt orthonormalized.^{9,10} An effective Hamiltonian containing N -body interactions with an identical low-energy spectrum can then be constructed in terms of the reduced basis by a unitary transformation.¹¹ For the sake of simplicity, we shall restrict ourselves to the range-2 approximation ($N=2$).¹²

At half filling, retaining in each four-site unit only the lowest singlet and triplet states (four states) gives excellent results.¹² Away from half filling, the simplest truncation, referred to as the “B” approximation, is to include, in addition, the lowest singlet hole pair on the four-site unit (of d -wave symmetry in the case of a plaquette). Formally, one can define four hard-core bosonic (plaquette or rung) operators describing the four possible transitions from the singlet half-filled ground state (GS) (vacuum) to one component of the triplet state, $t_{\alpha,i}$, or to the hole-pair state, b_i (Ref. 13). The effective B Hamiltonian $\mathcal{H}^B$ can then be written as a sum of a simple bilinear kinetic term $\mathcal{H}^b + \mathcal{H}^t$ and a quartic interaction $\mathcal{H}^{\text{int}}$ (Refs. 10 and 12),

$$\mathcal{H}^b = \epsilon_0 + \epsilon_b \sum_i b_i^\dagger b_i - J_b \sum_{\langle ij \rangle} (b_i^\dagger b_j + \text{H.c.}), \quad (2)$$

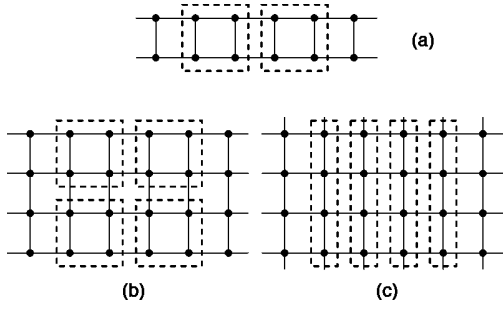


FIG. 1. CORE decomposition in term of plaquette or rung sub-systems; (a) two-leg ladder split into plaquettes; (b) four-leg ladder split into 2×2 plaquettes; (c) four-leg cylinder split into four-site rungs.

$$\mathcal{H}^t = \epsilon_t \sum_{i\alpha} t_{\alpha i}^\dagger t_{\alpha i} - \frac{J_t}{2} \sum_{\alpha\langle ij \rangle} (t_{\alpha i}^\dagger t_{\alpha j} + \text{H.c.}) - \frac{J_{tt}}{2} \sum_{\alpha\langle ij \rangle} (t_{\alpha i}^\dagger t_{\alpha j}^\dagger + \text{H.c.}), \quad (3)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}^{int} = & V_b \sum_{\langle ij \rangle} n_{bi} n_{bj} + \sum_{\langle ij \rangle} [V_0(t_i t_j)_0^\dagger (t_i t_j)_0 + V_1(t_i t_j)_1^\dagger (t_i t_j)_1 \\ & + V_2(t_i t_j)_2^\dagger (t_i t_j)_2] - J_{bt} \sum_{\langle ij \rangle \alpha} (b_i^\dagger b_j t_{\alpha j}^\dagger t_{\alpha i} + \text{H.c.}) \\ & + V_{bt} \sum_{\langle ij \rangle \alpha} (b_i^\dagger b_i t_{\alpha j}^\dagger t_{\alpha j} + b_j^\dagger b_j t_{\alpha i}^\dagger t_{\alpha i}), \end{aligned} \quad (4)$$

where $(t_i t_j)^\dagger_S$ creates two triplets on plaquettes i and j , which are coupled total spin S . Such an effective Hamiltonian may serve for analytic and numerical treatments. Its parameters listed for $J=0.35$ and $J=0.5$ in Table I are consistent with those found for the Hubbard model.¹⁰ Although, $\mathcal{H}^B$ gives already a faithful description of the physics of the original model, a systematic improvement can be done by adding to the above local basis four extra “fermionic” states corresponding to the degenerate ($S_z = \pm 1/2$, even and odd chirality or parity) single-hole GS of the four-site unit (hereafter referred to as the “BF” approximation).

The two-leg t - J ladder offers an ideal system to test the efficiency of the CORE method and the choice of the plaquette decomposition. As seen from the behavior of the

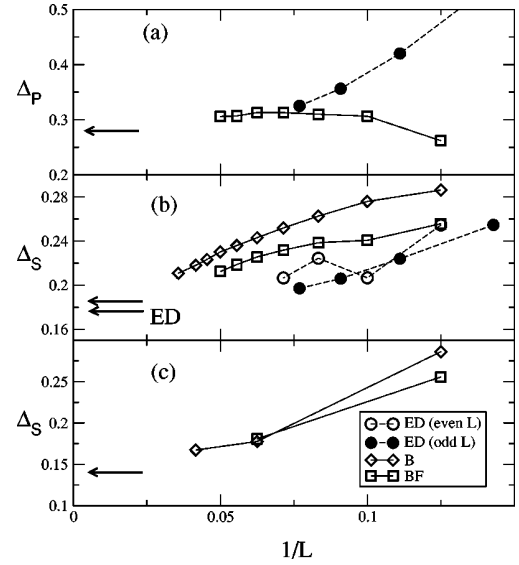


FIG. 2. Finite-size scaling analysis vs $1/L$ for a periodic two-leg $2 \times L$ t - J ladder at $J=0.5$ using the decomposition of Fig. 1(a) and the effective B or BF Hamiltonians (as indicated on plot). DMRG and ED data for the original t - J ladder are also shown for comparison. ED data obtained with odd ladder lengths are averaged over boundary conditions (see Ref. 18). DMRG data and $L \rightarrow \infty$ ED extrapolations are shown by arrows. (a) Pair-binding energy Δ_P . (b) Spin gap of the two-hole-doped ladder. (c) Spin gap of the $1/8$ -doped ladder.

pair-binding energy $\Delta_P = 2E_0(n_h=1) - E_0(n_h=2) - E_0(n_h=0)$ plotted in Fig. 2(a) and from the plaquette charge density-density correlation in the two-hole GS of the BF Hamiltonian plotted in Fig. 3(a), pairs are found to be strongly bound and localized almost on a single plaquette. This confirms *a posteriori* the relevance of CORE and of the local basis. Furthermore, the finite-size scaling of the spin gap for a fixed number of $n_h=2$ holes [see Fig. 2(b)] or at $1/8$ hole density [Fig. 2(c)] gives gaps with 10%–20% accuracy in comparison to existing numerical data.¹⁸ Due to the small size of the hole pairs, accurate results are obtained even when fermionic excitations are not included. Note that the effective models lead to a smooth finite-size behavior, in contrast to the original t - J model where “band-filling” effects may lead to oscillatory behaviors as seen in Fig. 2.

We point out the qualitative agreement between our re-

TABLE I. Parameters of $\mathcal{H}^B$ (in units of t) computed for the t - J ladder model using a range-2 CORE with two plaquettes (row 1 and 2) or two four-site rungs (row 3).

J	ϵ_0	ϵ_b	ϵ_t	J_t	J_{tt}	J_b
0.35	-3.8895	-3.5340	0.1379	0.2128	0.2319	0.2139
0.5	-5.5564	-3.0919	0.1970	0.304	0.3112	0.2174
0.35	-3.5564	-3.6579	0.4733	-0.4836	-0.4336	0.4855
J	J_{bt}	V_b	V_0	V_1	V_2	V_{bt}
0.35	-0.0709	1.0345	-0.1244	-0.0928	0.0412	-0.3298
0.5	-0.1044	0.8326	-0.1777	-0.1326	0.0588	-0.3325
0.35	0.2887	1.4164	-0.2158	-0.0202	0.0149	-0.2489

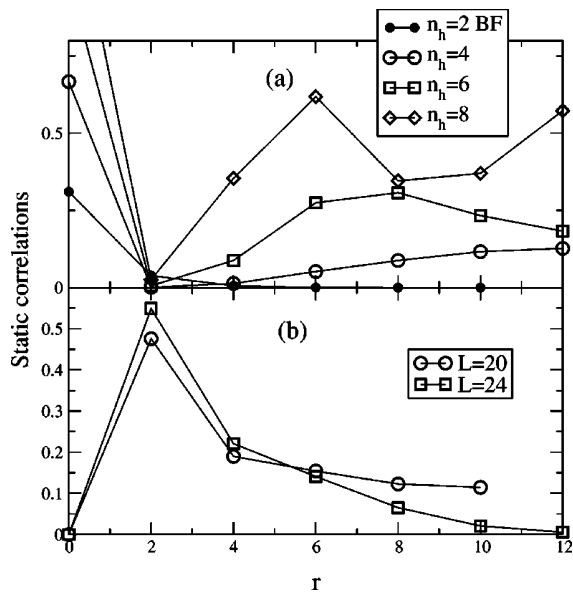


FIG. 3. Correlations as a function of distance (in units of the original bond length) up to $r=L/2$ in $2 \times L$ t - J ladder at $J=0.5$. (a) Plaquette charge-density correlations for $L=24$. The BF Hamiltonian (B Hamiltonian) is used for $n_h=2$ holes (otherwise). (b) Hole-pair density- S_z correlation in the lowest triplet excited state of 2×20 and 2×24 two hole-doped ladders using the B Hamiltonian.

sults and those of Siller *et al.*¹⁷ who used a more involved hard-core charged boson model with longer-range repulsive interactions (giving rise to a Luttinger liquid behavior), but neglected both fermionic and gapped triplet excitations.¹⁷ Our more systematic and general treatment using the B Hamiltonian gives a similar qualitative picture as can be seen from the charge correlations shown in Fig. 3(a); we observe the characteristic $4k_F$ -CDW spatial oscillations of the LE phase showing the same number of maxima as the number of hole pairs. Let us emphasize that this is also in agreement with DMRG calculations.¹⁷ Our approach performed on finite homogeneous systems is then complementary to the DMRG technique using OBC.

Although the agreement with the hard-core charged boson model is qualitatively good, we believe that including magnetic triplet excitations in the local basis is nevertheless important to describe interplay between magnetic and pairing correlations. For example, it is known that the lowest triplet excitation in a two-hole-doped (or very weakly doped) t - J ladder consists of a hole-pair-magnon bound state.¹⁸ Indeed, the extrapolated value of the spin gap in the presence of two holes [see Fig. 2(b)] is lower than that of the undoped ladder ($0.5J$) and the hole-pair binding energy [shown in Fig. 2(a)]. Moreover, as seen in Fig. 3(b), the correlation between the hole-pair density and the plaquette S_z component clearly shows an enhancement at short distance.¹⁴

We finish the investigation of the two-leg ladder by using the effective Hamiltonian to calculate the Luttinger liquid parameter K_ρ which governs the long-distance power-law behavior of the charge correlations related to the unique massless charge mode. Some values of K_ρ obtained from the Drude weight D and the compressibility κ (Ref. 15) as K_ρ

TABLE II. Parameters K_ρ and u_ρ as a function of doping computed on 2×24 (12.5%, 8.3%, 4.2%) and 2×28 (14.3%, 10.7%, 7.1%, 3.6%) ladders with B Hamiltonian and $J/t = 0.5$.

Doping	14.3%	12.5%	10.7%	8.3%	7.1%	4.2%	3.6%
K_ρ	0.559	0.602	0.668	0.753	0.798	0.914	0.920
u_ρ	0.881	0.779	0.652	0.445	0.399	0.188	0.180

$= \pi \sqrt{D\kappa/2}$ are listed in Table II. In addition, we also list here the charge velocity u_ρ obtained from the relation $u_\rho = \pi D/K_\rho$ which agrees within a few percent to the values obtained directly from the linear dispersion of the charge mode. Note also that these values compare very well to existing ED (Ref. 7) and DMRG (Ref. 17) data.

We now turn to the investigation of the four-leg t - J ladder (with OBC along rungs) or cylinder (with PBC along rungs), for which the best choices of unit decomposition are depicted in Fig. 1(b) and Fig. 1(c), respectively. Results for pair-binding energies and spin gaps are shown in Fig. 4(a)–4(c). Results for ladders and cylinders are similar although the hole-pair binding is much stronger in cylinders where hole pairs are preferably formed on cross-sectional plaquettes (periodic rungs) rather than on “surface” plaquettes. Generically we found that the pair-binding energy is larger than the spin gap of the undoped (Heisenberg) system ($0.190J$ for the $4 \times L$ ladder). Therefore, the lowest triplet state in the two-hole-doped (or very lightly doped) four-leg ladder is similar to a Heisenberg ladder magnon, which may be (or may not be) loosely bound to a hole pair depending on whether its

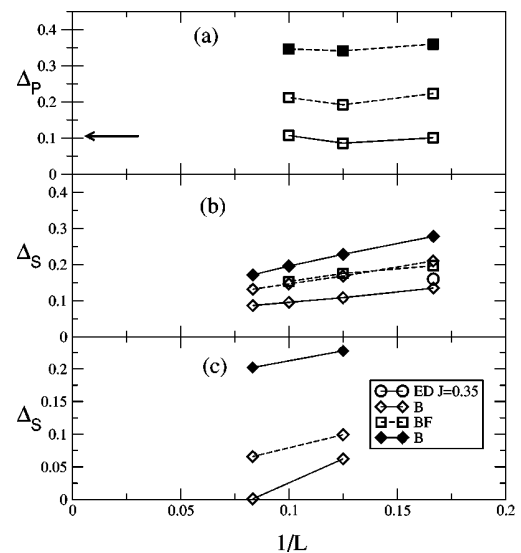


FIG. 4. Finite-size scaling analysis vs $1/L$ for a periodic four-leg $4 \times L$ t - J ladder (open symbols) using the decomposition of Fig. 1(b) for $J=0.35$ (full lines) and $J=0.5$ (dashed lines). Data are also shown in the case of a periodic cylinder (filled symbols) for $J=0.35$ using the decomposition of Symbols and Fig. 1(c). notations and similar to Figs. 2(a)–2(c). (a) Pair-binding energy Δ_P . (b) Spin gap of the two-hole-doped system. (c) Spin gap of the $1/8$ -doped system.

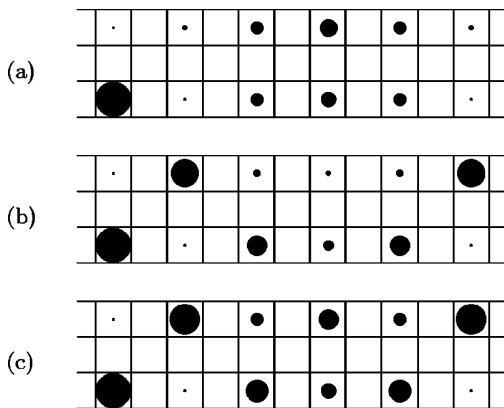


FIG. 5. Hole-pair density-density correlation on a 4×12 ladder at $J/t=0.35$. PBC are used in the leg direction and correlations are measured from the reference plaquette on the lower left corner. From top to bottom, $n_h=4,6,8$. The surfaces of the dots are proportional to the values of the correlations.

excitation energy is lower or equals the magnon energy of the undoped system. Since the data shown in Fig. 4(b) are not fully conclusive we have computed in addition the hole-pair density- S_z correlation and found, as for the two-leg ladder case, an enhancement of the spin density on the neighboring sites of the hole pair suggesting, indeed, the existence of a hole-pair-magnon bound state.

Upon increased doping, as seen from the hole-pair density-density correlation shown in Fig. 5, we observe a clear tendency of the hole pairs to align along the diagonal $(1, \pm 1)$ directions with a periodicity corresponding to one pair for every two plaquettes, a behavior also reported in DMRG calculations^{16,19} and reminiscent of the picture of diagonal stripes. Note that real-space charge correlations are fully consistent with the power-law decay found in the effective charge boson model.¹⁹

To conclude, the CORE method is a powerful method to extract effective Hamiltonians for strongly correlated models. It allows numerical simulations on significantly larger systems than those available for the original model. We show that including charge *and* spin bosonic excitations gives reliable results as long as the hole-pair-binding energy is not too small. Results for the effective model of the two-leg t - J ladder are in excellent agreement with known analytic and numerical data. Within the effective models hole-pair triplet bound states form for both two-leg and four-leg ladders, a key feature to be compared to $SO(5)$ phenomenological theories.²⁰ In addition, the method enables unbiased (since calculated on translationally invariant clusters) analysis of hole-pair density correlations. While $4k_F$ -CDW correlations are found in two-leg ladders, our computations provide clear evidence in favor of short-range diagonal stripes in four-leg ladders.

We thank IDRIS (Orsay) for allocation of CPU time. We also acknowledge useful discussions with E. Altman, A. Auerbach, and S. C. Zhang.

*Email address: <http://w3-phystheo.ups-tlse.fr>

¹E. Dagotto *et al.*, Phys. Rev. B **45**, 10 741 (1992); S. Sorella *et al.*, Phys. Rev. Lett. **88**, 117002 (2002).

²J. Zaanen and O. Gunnarsson, Phys. Rev. B **40**, 7391 (1989); D. Poilblanc and T.M. Rice, *ibid.* **39**, 9749 (1989); H.J. Schulz, Phys. Rev. Lett. **64**, 1445 (1990).

³E. Dagotto and T.M. Rice, Science **271**, 618 (1996).

⁴E. Dagotto, J. Riera, and D.J. Scalapino, Phys. Rev. B **45**, 5744 (1992).

⁵C.A. Hayward *et al.*, Phys. Rev. Lett. **75**, 926 (1995).

⁶D. Poilblanc, D.J. Scalapino, and W. Hanke, Phys. Rev. B **52**, 6796 (1995).

⁷M. Troyer, H. Tsunetsugu, and T.M. Rice, Phys. Rev. B **53**, 251 (1996); C.A. Hayward and D. Poilblanc, *ibid.* **53**, 11 721 (1996).

⁸S.R. White, R.M. Noack, and D.J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **73**, 886 (1994); see also D. Poilblanc, H. Tsunetsugu, and T.M. Rice, Phys. Rev. B **50**, 6511 (1994).

⁹C.J. Morningstar and M. Weinstein, Phys. Rev. D **54**, 4131 (1996).

¹⁰For applications to Hubbard models see E. Altman and A. Auerbach, Phys. Rev. B **65**, 104508 (2002).

¹¹A local basis change is also used in the truncated Lanczos

method, see, e.g., E. Dagotto *et al.*, Phys. Rev. B **58**, 12 063 (1998); O. Chiappa, S. Capponi, and D. Poilblanc, *ibid.* **63**, 115120 (2001).

¹²Details and extensions will be reported elsewhere; S. Capponi *et al.* (unpublished).

¹³A similar procedure uses a decomposition in terms of two-site rungs, see J. Riera, Phys. Rev. B **66**, 134523 (2002).

¹⁴Within the two-site rung decoupling scheme no hole-pair-magnon bound state is found (Ref. 13) in contradiction with numerical results (Ref. 18). However, this result might apply to *anisotropic* ladders [J. Riera (private communication)].

¹⁵ D and κ^{-1} are defined as second-order corrections of the GS energy (per site) to a phase twist of the PBC and a change of the particle density, respectively; see, e.g., Ref. 7.

¹⁶S.R. White and D.J. Scalapino, Phys. Rev. B **55**, R14 701 (1997).

¹⁷T. Siller, M. Troyer, T.M. Rice, and S.R. White, Phys. Rev. B **63**, 195106 (2001).

¹⁸D. Poilblanc *et al.*, Phys. Rev. B **62**, R14 633 (2000).

¹⁹T. Siller, M. Troyer, T.M. Rice, and S.R. White, Phys. Rev. B **65**, 205109 (2002).

²⁰S.C. Zhang, Science **275**, 1089 (1997).

Article [19]

H. D. Chen, S. Capponi, F. Alet et S. C. Zhang
Global phase diagram of the high- T_c cuprates

Global phase diagram of the high- T_c cuprates

Han-Dong Chen

Department of Applied Physics, McCullough Building, Stanford University, Stanford, California 94305-4045, USA

Sylvain Capponi

*Laboratoire de Physique Théorique UMR 5152, Université Paul Sabatier, 118 Route de Narbonne, 31062 Toulouse, France
and Department of Physics, McCullough Building, Stanford University, Stanford, California 94305-4045, USA*

Fabien Alet

*Theoretische Physik, ETH Zürich, CH-8093 Zürich, Switzerland
and Computational Laboratory, ETH Zürich, CH-8092 Zürich, Switzerland*

Shou-Cheng Zhang

*Department of Physics, McCullough Building, Stanford University, Stanford, California 94305-4045, USA
(Received 27 December 2003; published 26 July 2004)*

The high- T_c cuprates have a complex phase diagram with many competing phases. We propose a bosonic effective quantum Hamiltonian based on the projected SO(5) model with extended interactions, which can be derived from the microscopic models of the cuprates. The global phase diagram of this model is obtained using mean-field theory and the quantum Monte Carlo simulation, which is possible because of the absence of the minus sign problem. We show that this single quantum model can account for most salient features observed in the high- T_c cuprates, with different families of the cuprates attributed to different traces in the global phase diagram. Experimental consequences are discussed and theoretical predictions are presented.

DOI: 10.1103/PhysRevB.70.024516

PACS number(s): 74.25.Dw, 71.30.+h, 71.10.-w

I. INTRODUCTION

At first glance, the phase diagram of the high transition temperature superconducting (HTSC) cuprates has a striking simplicity: there are only three universal phases in the phase diagram of all HTSC cuprates: the antiferromagnetic (AF), the superconducting (SC), and the metallic phases, all with *homogeneous* charge distributions. However, closer inspection shows a bewildering complexity of other possible phases, which may or may not be universally present in all HTSC cuprates. A large class of these phases have inhomogeneous charge distributions. Because of this complexity, formulating a universal theory of HTSC is a great challenge. The SO(5) theory unifies the AF and the SC order parameters into a single five-dimensional order parameter called the superspin, and the effective quantum theory of the superspin naturally explains proximity between the AF and the SC phases in the observed phase diagram.¹ The Goldstone modes of the superspin fluctuations can be identified with the π resonance mode observed in the neutron scattering experiments.^{2–16} This theory also predicts the AF vortex state,^{1,17} which has recently been observed in a number of experiments.^{18–26} Initially, the SO(5) theory was motivated by the simplicity of the pure AF and SC states, however, given the encouraging agreements with the experiments, it is tempting to construct a unified theory of the global phase diagram of the HTSC which addresses the more complex inhomogeneous phases as well. Complexities can of course be introduced phenomenologically into the Landau-Ginzburg-type of theories by simply introducing more order parameters. However, this type of approach necessarily limits the predictive power of theory. The goal of this paper is to

present a single effective quantum model of the superspin degree of freedom, which can be derived systematically from the microscopic electron models, and can be investigated reliably both analytically and numerically. The global phase diagram of this model is then compared with the experimentally observed phase diagram of the HTSC cuprates.

When formulated on a coarse-grained lattice, with high energy charge states projected out, the projected SO(5) model describes five local superspin degrees of freedom per plaquette.²⁷ These five states are the spin singlet state at half-filling, the spin triplet states at half-filling, and the singlet *d*-wave hole pair state. Using the contractor renormalization group (CORE) algorithm, Altman and Auerbach²⁸ showed that the projected SO(5) model can be systematically derived from the microscopic electron models, and they also determined the parameters of the effective SO(5) model explicitly from the microscopic interaction parameters (see also Ref. 29). Restricted within the subspace of these five local states, the Hamiltonian describing their propagation and interaction is completely expressed in terms of bosonic operators and can be studied reliably by the quantum Monte Carlo (QMC) calculations. The simplest form of the projected SO(5) model has been studied extensively by the QMC method both in two dimensions^{30–32} and in three dimensions.³³ The overall topology of the phase diagram, the scaling properties near the multicritical point and the nature of the collective excitations can be reliably obtained from the QMC method, within the parameter regime of experimental interests.

The simplest form of the quantum SO(5) model describes either the direct, first order transition from the AF to the SC state, or two second order transitions with a uniform, inter-

mediate AF/SC mix phase in between the pure AF and the SC states.^{1,27} In the case of the direct first order transition as a function of the chemical potential, the system at a fixed density is phase separated. However, in the HTSC cuprates, there are other forms of charge and spin ordered states. For example, neutron scattering cross section in LSCO material is peaked around $(\pi \pm \delta, \pi)$ and $(\pi, \pi \pm \delta)$, where $\delta \sim 1/8$.^{34–36} STM experiments have revealed periodic charge modulation with period close to four lattice spacing,^{37,38} either near the vortex core or near surface impurities. In the latter case, alternative interpretation^{39–41} based on quasiparticle interference is also possible, and the two points of views are summarized by Kivelson *et al.*⁴² Motivated by these experiments, we extend the simplest form of the projected SO(5) model to include extended interactions among the five bosonic states. In fact, these extended interactions also arise naturally by carrying out the CORE algorithm to extended ranges.

The projected SO(5) model with extended interactions supports a more complex phase diagram. In particular, there are insulating phases at fractional filling factors where the charges form a lattice, usually commensurate with the underlying lattice. A crucial aspect of this model is that all charge density wave states are formed by the Cooper pairs of the holes, rather than the holes themselves.⁴³ Throughout this paper, we shall denote such states as the pair-density-wave (PDW) states or pair checkerboard states. This distinction has a profound experimental consequence, since the real space periodicity of the former is larger than the latter by a factor of $\sqrt{2}$. This type of insulating PDW states is a consequence of strong pairing and low superfluid density, a condition which is naturally fulfilled in the underdoped cuprates, but has not yet been unambiguously identified in other experimental systems before. The PDW state can either take the form of stripes or checkerboards, depending on the ratios of the extended interaction parameters in the model. Furthermore, PDW states with longer periodicity generally require longer range interactions to stabilize. Based on this reasoning, a simple picture emerges for the global phase diagram of underdoped cuprates. The phase diagram consists of islands of insulating PDW states, each with a preferred rational filling fraction, immersed in the background of SC states (see Fig. 4). The height of the Mott insulating PDW lobes varies depending on the preferred filling fraction and the range of extended interactions, but in principle, these insulating states are all self-similar to each other, and similar to the parent AF insulator at half-filling. There can be either a direct first order transition or two second order phase transitions between the SC state and the PDW state, with the possibility of an intermediate “supersolid” phase, where both orders are present.

Based on our model, the bewildering complexity of the cuprate phase diagram can be deduced from a simple principle of the “Law of Corresponding States.” This concept is borrowed from the work of Kivelson, Lee, and Zhang on the global phase diagram of the quantum Hall effect,⁴⁴ in fact, our proposed phase diagram in Fig. 4 bears great similarity to Fig. 1 of that reference. In the case of the QHE, the “Law of Corresponding States” physically relates *all* quantum phase transitions at various filling fractions to a *single* quantum phase transition from the $\nu=1$ integer state to the Hall

insulator. In recent years, this powerful mapping among the different fractional states has been made more precise by the derivation of the $SL(2, Z)$ discrete modular group transformation from the Chern-Simons theory.^{45–47} Similarly, the central idea of the current paper is to relate the fractional Mott insulator to SC transition with the transition from the AF Mott insulator at half-filling to SC state, which is already well understood within the context of the original, simple SO(5) theory. The construction of the Mott insulating states at various fractional filling factors can be constructed from the “Law of Corresponding States,” iterated *ad infinitum*, to give a beautiful fractal structure of self-similar phases and phase transitions, as presented in Fig. 4. The various different compounds of the HTSC cuprates families have slightly different microscopic parameters, and they correspond to different slices of this global phase diagram. The global phase diagram provides a basic road-map to understand the common elements and differences among various HTSC compounds.

This paper mainly focuses on the zero temperature global phase diagram of the underdoped cuprates. However, it is understood that the model is valid below the pseudogap temperature, which we interpret as the temperature below which the system can be effectively described by the collective bosonic degrees of freedom, like the magnons and the hole pairs. Therefore, it is implied that the pseudogap state is a regime where the various ground states discussed here compete with each other, and different experiments may access different aspects of these competing states. The existence of the pseudogap temperature gives the fundamental experimental justification to investigate the global phase diagram of the underdoped cuprates by a purely bosonic model. In the future, we shall use the same model to investigate the manifestations of these competing states at finite temperature, in the pseudogap regime. A comparison of the charge order predicted by this work and the STM experiment in the pseudogap regime has recently been reported in Ref. 48.

While this paper is presented within the logical context of the SO(5) theory, some of the ideas and results bear intellectual similarities to the previous theoretical works. The idea of doped holes forming ordered stripes has been discussed extensively in Refs. 34 and 49–53. Although we focus more on the charged ordered states in the forms of checkerboards of hole pairs, they are conceptually related to stripes and can be realized experimentally or theoretically depending on the microscopic parameters. The pseudogap temperature was identified as the formation temperature of Cooper pairs by Emery and Kivelson.⁵⁴ Our interpretation of the pseudogap temperature is more general, which also includes the formation of the magnetic collective modes in addition to the holes pairs. Vojta and Sachdev⁵⁵ have discussed the phase diagram of doped Mott insulator with various charge ordered insulating states at rational fractions. More recently, Zhang, Demler, and Sachdev have studied extensively the competition among charge and spin order.^{56,57} Laughlin pointed out that the small superfluid density in the underdoped regime is responsible for various charge ordering phenomena.⁵⁸ Haas *et al.*⁵⁹ have noticed that the Wigner crystal state of the hole pairs could be stabilized due to the competition of phase separation and long ranged Coulomb interaction. Kim and

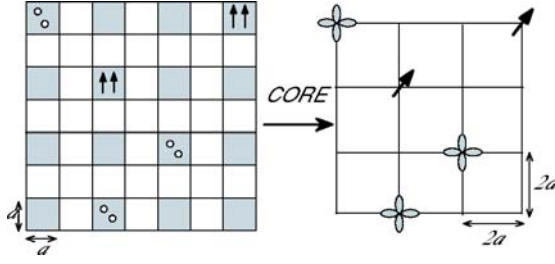


FIG. 1. Illustration of the basic idea of the CORE method. To implement the CORE method, first decompose the original lattice in plaquettes, and then truncate the spectrum of a given plaquette to five lowest states, i.e., the singlet, hole-pair and three magnon states. An effective Hamiltonian for these bosons can then be determined using the CORE method. Left: local bosons in the original lattice. Gray rectangle denotes the singlet RVB vacua, circles denote holes and the set of two parallel vertical arrows denote the magnon. Right: local bosons on the lattice of plaquette. Leaflike pattern denotes a local d -wave hole-pair on a plaquette. Canted arrow denotes local magnon on a plaquette. The singlet RVB vacuum is denoted by an empty site.

Hor⁶⁰ have discussed experiments at certain “magic” filling fractions in terms of the commensurate Wigner crystal type of order of the electrons, rather than the hole pairs discussed in this paper. Restricted to the charge sector, the projected SO(5) model is essentially the same as the hard-core quantum boson model on a lattice, whose phase diagram has been extensively studied.^{61–63}

This paper is organized as follows: In Sec. II, the projected SO(5) model with extended interactions is presented. The choice of parameters is discussed from the CORE algorithm and phenomenology. The self-similarity of the insulating states and the classification of the quantum phase transitions are then discussed in Sec. III. In Sec. IV, the global phase diagram of the model is obtained within the mean field theory. The low energy collective modes and their quantum symmetry are then studied using a slave-boson approach. In Sec. V, QMC simulation is carried out to compare with mean-field results obtained in Sec. IV. The experimental consequences and predictions are discussed in Sec. VI. Finally, Sec. VII concludes our study.

II. HAMILTONIAN OF THE MODEL

The effective bosonic SO(5) model can be derived directly from the microscopic Hubbard model or t - J model, through a renormalization group transformation called the contractor renormalization (CORE) method.^{28,64} To construct bosonic quasiparticles from fermionic model, we divide the lattice into effective sites containing an *even* number of sites. In order to conserve the symmetry between x and y direction in the system, a plaquette of 2×2 sites are typically chosen.^{27,28} In their CORE study of the 2D Hubbard model, Altman and Auerbach²⁸ started from the spectrum of lowest-energy eigenstates of the 2×2 plaquette for 0, 1, and 2 holes, respectively (Fig. 1). The low energy eigenstates of the Heisenberg plaquette can be determined easily. The nondegenerate ground state $|\Omega\rangle$ (see Ref. 28 for a real-space rep-

resentation in terms of the microscopic states on a plaquette) has energy $E_0 = -2J$ and total spin $S=0$. This “RVB” like singlet state will be the vacuum state of the effective bosonic SO(5) model. The next set of energy eigenstates are three triplet states $t_\alpha^\dagger|\Omega\rangle$ with energy $E_t = -J$ and total spin quantum number $S=1$. All other energy eigenstates of the Heisenberg plaquette have energies $E \geq 0$ and can be neglected in the low energy effective model. It should be noted that the operator $t_\alpha^\dagger$ with spin 1 and charge 0 create *hardcore bosons* because one cannot create more than one of them simultaneously on a single plaquette. The ground state of two holes is a “Cooper”-like hole pair with internal d -wave symmetry with respect to the vacuum.

Using the CORE method and keeping only the five lowest states (the singlet boson, the three magnons $t_\alpha^\dagger$ and the hole-pair $t_h^\dagger$), the effective Hamiltonian of these bosons can be obtained as^{28,29,64}

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\text{ext}}, \quad (1)$$

where $\mathcal{H}_0$ is the Hamiltonian of the previously studied SO(5) model containing only on-site interactions^{27,30,33}

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 = & \Delta_c \sum_i t_h^\dagger(i) t_h(i) + \Delta_s \sum_\alpha \sum_i t_\alpha^\dagger(i) t_\alpha(i) \\ & - J_c \sum_{\langle ij \rangle} [t_h^\dagger(i) t_h(j) + \text{H.c.}] \\ & - J_s \sum_\alpha \sum_{\langle ij \rangle} [t_\alpha^\dagger(i) + t_\alpha(i)][t_\alpha^\dagger(j) + t_\alpha(j)], \end{aligned} \quad (2a)$$

and $\mathcal{H}_{\text{ext}}$ is the part containing extended interactions

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{ext}} = & \left[V_c \sum_{\langle ij \rangle} + V'_c \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \right] n_h(i) n_h(j) \\ & - J_\pi \sum_\alpha \sum_{\langle ij \rangle} [t_h^\dagger(i) t_h(j) t_\alpha^\dagger(j) t_\alpha(i) + \text{H.c.}] \\ & + V_\pi \sum_\alpha \sum_{\langle ij \rangle} [n_h(i) n_\alpha(j) + n_h(j) n_\alpha(i)] \\ & + \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{S=0,1,2} V_S(t_i t_j)^\dagger_S (t_i t_j)_S. \end{aligned} \quad (2b)$$

The model is subjected to the hard-core constraint

$$\sum_\alpha n_\alpha(i) + n_h(i) \leq 1. \quad (3)$$

Here, Δ_c and Δ_s are the energy costs to create a hole-pair and magnon, respectively. J_c and J_s are the hopping terms of hole-pairs and magnons. $t_h(i)$ and $t_h^\dagger(i)$ are the annihilation and creation operators of hole-pair on plaquette i . $t_\alpha(i)$ and $t_\alpha^\dagger(i)$ are the annihilation and creation operators of magnon on plaquette i for $\alpha=x,y,z$. $\langle \cdots \rangle$ and $\langle\langle \cdots \rangle\rangle$ denote nearest-neighbor (nn) and next-nearest-neighbor (nnn), respectively. $n_h(i) = t_h^\dagger(i) t_h(i)$ and $n_\alpha(i) = t_\alpha^\dagger(i) t_\alpha(i)$ are the hole-pair density and magnon density operators on plaquette i , respectively. The hole-pair density of n_h per plaquette corresponds to twice the real doping of δ holes per lattice site, i.e.,

$$\delta = n_h/2. \quad (4)$$

Finally, $(t_i t_j)^\dagger_S$ creates two magnons simultaneously on plaquettes i and j , which are coupled into total spin S . $\mathcal{H}_{\text{ext}}$ contains nn and nnn hole pair interactions V_c and V'_c , exchange hopping terms J_π between t_α and t_h bosons, interaction V_π between nn magnons and hole-pairs. The 4-magnon interactions $V_{0,1,2}$ are important in the pure AF phase but we can neglect them since we are mostly interested in the doped phase where magnon density decreases. According to the CORE calculation on 2-plaquettes and fixing $J_s=1$ as the unit of energy, one obtains from the t - J model with $J/t \approx 0.4$ (relevant for cuprates):

J_c	J_π	V_c	V_0	V_1	V_2	V_π
2.	-0.6	10	-1	-1	0.4	-3

For $J_c \sim 2$, $\mathcal{H}_0$ is approximately SO(5) symmetric at the mean field level.^{27,30,33}

The CORE derivation of the SO(5) model (1) is only approximate. It should also be borne in mind that the t - J and the Hubbard models are also approximate models of the real cuprates themselves. If one started from a different microscopic model (for example, next-nearest-neighbor hopping, extended Coulomb repulsion, etc.), one would have obtained a similar effective Hamiltonian with different parameters. Therefore, in this paper, we shall take the CORE parameters as a guidance, and study the robust properties of the SO(5) model with a more general set of parameters, as to reproduce well-known results and compare directly with experiments.

At half-filling ($n_h=0$), the model involves only the singlet and the magnon, and the effective Hamiltonian containing only J_s and Δ_s can be rewritten as

$$H = 2J_s \sum_{\langle ij \rangle} \frac{t_\alpha^\dagger(i) + t_\alpha(i)}{\sqrt{2}} \frac{t_\alpha^\dagger(j) + t_\alpha(j)}{\sqrt{2}} + \frac{\Delta_s}{2} \sum_i L_{\alpha\beta}^2(i), \quad (5)$$

where $[t_\alpha^\dagger(i) + t_\alpha(i)]/\sqrt{2}$ is the AF moment and $L_{\alpha\beta}(i)$ is the SO(3) symmetry generator²⁷

$$L_{\alpha\beta}(i) = -i[t_\alpha^\dagger(i)t_\beta(i) - t_\beta^\dagger(i)t_\alpha(i)]. \quad (6)$$

This model is similar to the nonlinear σ model (NL σ M),^{65,66}

$$H = \rho_s \sum_{\langle ij \rangle} m_i^\alpha m_j^\alpha + \frac{1}{\chi} \sum_i S_i^2, \quad (7)$$

where m_i^α is the α component of the AF moment and S_i is the angular momentum on site i . After rescaling of time using the spin velocity $c = \sqrt{\rho_s/\chi}$ and up to a prefactor, the Lagrangian density of the NM σ M can be cast in the usual form in the continuum limit

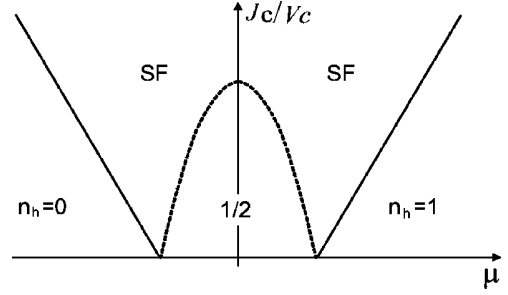


FIG. 2. Phase diagram of a hard-core boson model with nearest-neighbor interaction. There are one superfluid (SF) state and three insulating states: zero-doping state ($n_h=0$), half-filled state ($n_h=1/2$), and fully occupied state ($n_h=1$). At the next level of the hierarchy, longer ranged interactions lead to new insulating states with $n_h=1/4$ and $n_h=3/4$, as shown in Fig. 3.

$$\mathcal{L}_{NL\sigma} = \frac{1}{g} (\partial_x m)^2 + g (\partial_t m)^2, \quad (8)$$

where $g \sim 1/\sqrt{\rho_s \chi}$ is a dimensionless constant. This model has been studied extensively.⁶⁶ It has a transition towards a disordered state at $g_c=1.45$. From the computation of the staggered moment, we can find g such that the original Heisenberg value (0.3) of the AF moment is recovered: $g_H=1.125$. On the other hand, we know from mean-field calculations and QMC simulation that the disordered phase occurs at $\Delta_s/J_s=8$. We then obtain the proportionality phase factor between g and $1/\sqrt{\rho_s \chi}$. Using g_H , we find that an effective model for Heisenberg corresponds to $\Delta_s/J_s=4.8$.

In most parts of this paper, we shall consider the simplified model with $J_\pi = V_\pi = 0$.

III. HEURISTIC ARGUMENT ON THE SELF-SIMILARITY BETWEEN PAIR-DENSITY-WAVE (PDW) STATES

Let us ignore for a moment the magnons, and consider a hard-core boson model with extended interactions. The phase diagram^{61,62} of a hard-core boson model with nn interaction

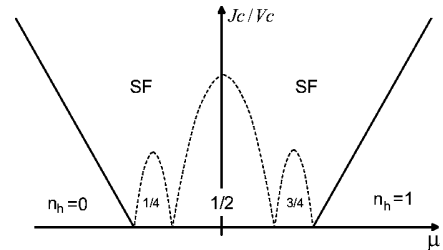


FIG. 3. Phase diagram of a hard-core boson model with nn and nnn interactions. There are a superfluid (SF) state and five insulating states with doping $0/4, 1/4, 2/4, 3/4$, and $4/4$. At the next level of the hierarchy, new insulating states are developed at doping level $n_h=1/8, n_h=3/8, n_h=5/8$, and $n_h=7/8$. This hierarchy construction can be iterated *ad infinitum*, to obtain a self-similar phase diagram with insulating phases at doping level $p/2^n$, with integers p and n , such that $0 < p < 2^n$.

contains one superfluid state and three Mott-insulating states, corresponding to zero-doping ($n_h=0$), half-filling ($n_h=1/2$), and fully occupied ($n_h=1$), as sketched in Fig. 2. The half-filling state has checkerboard charge order. If one transforms the hard-core boson model into an AF Heisenberg model, the checkerboard order of the bosons simply corresponds to the AF order of the Heisenberg spins. The following argument assumes that the checkerboard order at half-filling is a basic and robust form of order, such that it is repeated at all different levels of the hierarchy.

If we regard the empty sites of the half-filled checkerboard state as an inert background, we obtain a fully-occupied Mott-insulating state on the coarse-grained lattice, with lattice spacing $\sqrt{2}a \times \sqrt{2}a$. The nnn interaction on the original lattice becomes the nn interaction on the coarse-grained lattice, and a new half-filled checkerboard state can be stabilized on the coarse-grained lattice. Such a state corresponds to doping $n_h=1/4$ on the original lattice. Similarly, we can regard the filled sites of the original half-filled checkerboard lattice as an inert background, leaving with an empty state on the coarse-grained lattice. A new checkerboard state can again be stabilized on the coarse-grained lattice, which corresponds to doping $n_h=3/4$ on the original lattice. This hierarchical procedure of forming a new daughter checkerboard state from two parent checkerboard state can obviously be iterated *ad infinitum*, to obtain a fractal-like, self-similar phase diagram as shown in Fig. 3. It is interesting to note that the nearest-neighbor interaction on the coarse-grained lattice is just the next-nearest-neighbor interaction on the original lattice. There is also the possibility that small regions with coexisting SF and PDW orders (“supersolids”) are present around the Mott-insulating lobes in the phase diagram.^{62,63,67,68}

Having presented the generic phase diagram for the charge boson only, we consider now the inclusion of the magnons in the full SO(5) with extended interactions. Generally, charge ordered insulating states also have AF order. The $n_h=0$ state of the charge boson corresponds to the undoped parent Mott insulator. The $n_h=1/2$ state of the charge boson would correspond to $\delta=1/4$ doping for the cuprates, which is probably at or beyond the limit of applicability of our bosonic model. Therefore, the phase diagram of the hard-core boson model in the range of $0 < n_h < 1/2$ from Fig. 3 would translate into a phase diagram of the cuprates in the doping range of $0 < \delta < 1/4$, as shown in Fig. 4. As we shall show later, this phase diagram is supported by accurate QMC calculations of the SO(5) model with extended interactions. We expect that the insulating states of $\delta=1/16$ and $1/8$ are AF ordered. Since the magnon density decreases with increasing doping, the $\delta=3/16$ state may not be AF ordered.

The nature of the phase boundary between two different phases shown in Fig. 4 requires careful characterization. We can classify all phase transitions into two broad classes. Class A describes transitions at fixed chemical potential, typically at an effectively particle-hole symmetric point around the tip of the Mott lobe. Class B describes transitions where the chemical potential or the density is varied. Each broad class is further classified into three types, 1, 2, and 1.5. Generically, the phase transition between two ordered phases

can be either a single first-order transition or two second order transitions, with a mixed state in between, where both order parameters are nonzero. A third marginal possibility occurs at a symmetric point, when these two second order phase transitions collapse into a single one. In the context of high T_c cuprates, these three types are shown in phase diagrams of Ref. 1 as Figs. 1(a)—1(c), respectively. This situation can be easily understood by describing the competition in terms of a Landau-Ginzburg functional of two competing order parameters,⁶⁹ which is given by

$$F = \frac{1}{2}r_1\phi_1^2 + \frac{1}{2}r_2\phi_2^2 + u_1\phi_1^4 + u_2\phi_2^4 + 2u_{12}\phi_1^2\phi_2^2, \quad (9)$$

where ϕ_1 and ϕ_2 are vector order parameters with N_1 and N_2 components, respectively. In the context of SO(5) theory, $N_1=2$ and $N_2=3$, and we can view ϕ_1^2 as a SC component of the superspin vector, and ϕ_2^2 as the AF component of the superspin vector. These order parameters are obtained by minimizing the free energy F . By tuning r_1 , one can drive a quantum phase transition from AF to SC. For $u_{12} > \sqrt{u_1u_2}$, the quantum phase transition from AF to SC is a single first order transition of “type 1.” For $u_{12} < \sqrt{u_1u_2}$, the transition from AF to SC consists of two second order transitions, and there is a finite range of r_1 where AF and SC coexist uniformly; the transition is of “type 2.” For $u_{12} = \sqrt{u_1u_2}$, the phase transition occurs at

$$\frac{r_1}{\sqrt{u_1}} = \frac{r_2}{\sqrt{u_2}}, \quad (10)$$

where the free energy takes the SO(5) symmetric form

$$F = \frac{r_1\sqrt{u_1}}{2}\tilde{\phi}^2 + u_{12}^2\tilde{\phi}^4 \quad (11)$$

with

$$\tilde{\phi}^2 = \frac{\phi_1^2}{\sqrt{u_1}} + \frac{\phi_2^2}{\sqrt{u_2}}. \quad (12)$$

Since the free energy depends only on $\tilde{\phi}$, one order parameter can be smoothly rotated into the other without any energy cost. At this point, the chemical potential is held fixed, but the SC order parameter and the charge density can change continuously according the condition that $\tilde{\phi}^2$ is constant. This is a special case intermediate between “type 1 and 2” transitions, where two second order phase transitions collapse into one. This transition can only occur at an SO(5) symmetric point. We thus classify it as “type 1.5.” The full quantum SO(5) symmetry can only be realized in the class A transition of “type 1.5.” On the other hand, the static, or projected SO(5) symmetry can be realized in class B transitions of “type 1.5.”

In HTSC cuprates, the charge gap at half-filling is very large, of the order of $U \sim 6$ eV, it is not possible to induce the “class A1” transition from the AF to the SC state by conventional means. However, the charge gap in the fractional insulating states is much smaller, of the order of J_c , and it is possible to induce the “class A2” or “class A3”

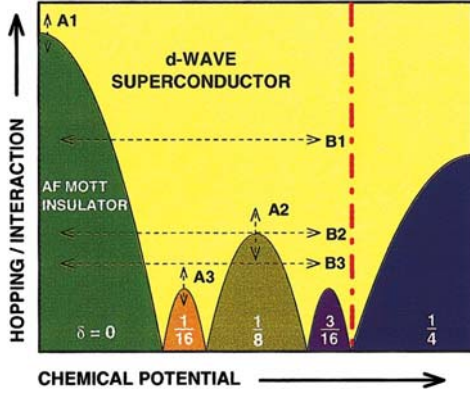


FIG. 4. (Color) A typical global phase diagram of the cuprates in the parameter space of chemical potential and the ratio of boson hopping energy over Coulomb interaction energy. This phase diagram shows self-similarity among the insulating PDW states at half-filling and other rational filling fractions. There are two types of superfluid-insulator transition. The quantum phase transition of “class A” can be approached by varying the hopping energy, for example, by applying a pressure and magnetic field at constant doping. The quantum phase transition of “class B” can be realized by changing the chemical potential or doping. There can be either a direct first order phase transition or two second order phase transitions between the SC state and the PDW state, with the possibility of an intermediate “supersolid” phase, where both orders are present. Different families of cuprates correspond to different traces of “class B.” For example, we believe YBCO is B1-like, BSCO may be close to B2-like and LSCO is B3-like. The vertical dashed-dotted line denotes a boundary in the overdoped region beyond which our pure bosonic model becomes less accurate.

insulator to superconductor transition by applying pressure^{70,71} or by applying a magnetic field.^{72,73}

As the chemical potential or the doping level is varied, a given system, roughly corresponding to a fixed value of the quantum parameter J_c/V_c , traces out different one dimensional slices in this phase diagram, with typical slices B1, B2, and B3 depicted in Fig. 4. The nature of the phase transition B1 is similar to that of the superspin-flop transition discussed in Ref. 1. In this case, the phase transition from the AF to the SC state can be further classified into “types 1, 1.5, and 2,” with the last two cases leading to an AF/SC mixed phase at the phase transition boundary. For lower values of J_c/V_c , the trace B3 encounters the $\delta=1/8$ insulating phase. The key signature of this type of phase transition is that the SC T_c will display a pronounced minimum as the doping variation traces through the $\delta=1/8$ insulating state. Meanwhile, the AF ordering [possibly at a wave vector shifted from (π, π)] will show reentrant behavior as doping is varied. The phase transition around the fractional insulating phases can again be classified into “types 1, 1.5, and 2,” with possible AF/SC, AF/PDW, SC/PDW, and AF/PDW/SC mixed phases.

We believe that the AF to SC transition in the YBCO, BCCO, and the NCCO systems corresponds to a “class B1” transition. These systems only have an AF to SC transition, which can be further classified into “types 1, 1.5, and 2,” but they do not encounter additional statically ordered fractional

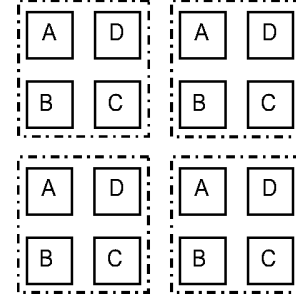


FIG. 5. The schematic plot of the unit cell of a quarter-filled magnetic insulating state. The solid square denotes a plaquette of the original lattice and the dashed-dotted square denotes a 2-plaquette by 2-plaquette unit cell.

insulating phases. On the other hand, the phase transition in the LSCO system, where T_c displays a pronounced dip at $\delta=1/8$, corresponds to the “class B3” transition.

IV. MEAN-FIELD PHASE DIAGRAM OF THE MODEL

A. Four-sublattice ansatz and mean-field phase diagram

Since the Hamiltonian (1) contains up to nnn interactions, we can introduce the following four-sublattice ansatz within mean field theory:

$$|\Psi\rangle = \prod_{r,m} [e_m + h_m t_h^\dagger(m,r) + x_m t_x^\dagger(m,r)] |\Omega\rangle, \quad (13)$$

where $|\Omega\rangle$ is the singlet ground state, e_m, x_m, h_m are real variational parameters, $m=A,B,C,D$ denote the sites in a unit cell, and r is the coordinate in the lattice of unit cells, as sketched in Fig. 5. The mean-field energy E_{MF} reads

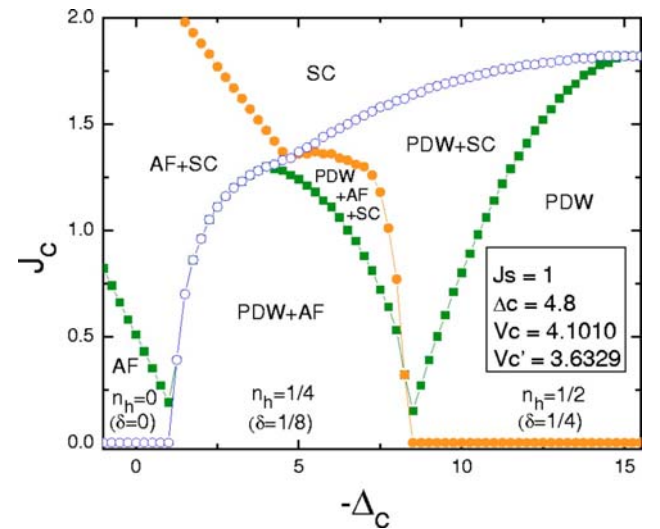


FIG. 6. (Color online) The MF phase diagram obtained by minimizing the energy functional (14) subjected to the hard-core constraint (15). J_π and V_π are taken to be zero.

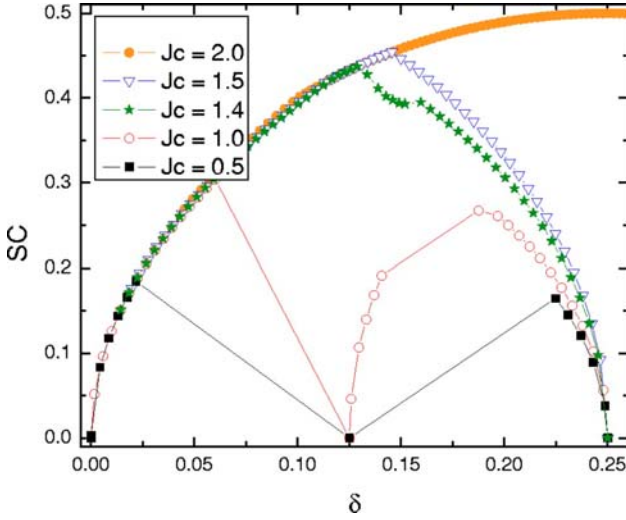


FIG. 7. (Color online) Doping dependence of SC order parameter for different J_c . For small J_c , there is a dip around hole-pair doping $n_h=1/4$ (real doping $\delta=1/8$).

$$\begin{aligned}
 \frac{4E_{MF}}{N} = & \Delta_c(h_A^2 + h_B^2 + h_C^2 + h_D^2) - 2J_c[e_A h_A + e_C h_C][e_B h_B \\
 & + e_D h_D] + \Delta_s(x_A^2 + x_B^2 + x_C^2 + x_D^2) - 4J_s[e_A x_A + e_C x_C] \\
 & \times [e_B x_B + e_D x_D] - 4J_\pi[h_A x_A + h_C x_C][h_B x_B + h_D x_D] \\
 & + 2V_c[h_A^2 + h_C^2][h_B^2 + h_D^2] + 4V'_c[h_A^2 h_C^2 + h_B^2 h_D^2] \\
 & + 2V_\pi([h_A^2 + h_C^2][x_B^2 + x_D^2] + [h_B^2 + h_D^2][x_A^2 + x_C^2])
 \end{aligned} \quad (14)$$

with the hard-core constraint

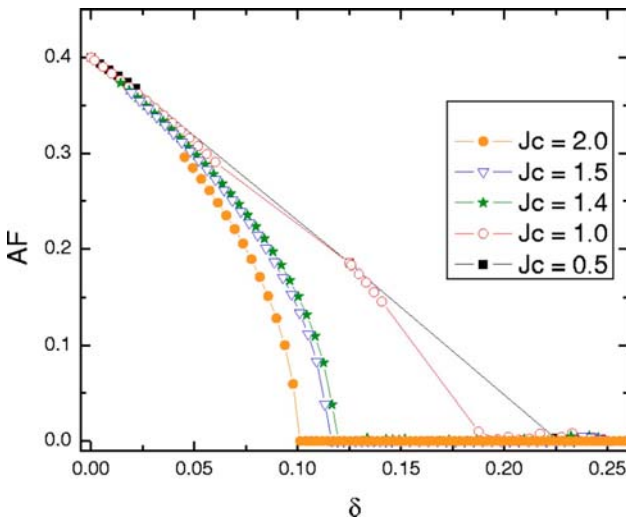


FIG. 8. (Color online) Doping dependence of AF order parameter for different J_c . For $J_c > 1.3$, AF order decreases as doping increases and vanishes around $\delta=0.1$.

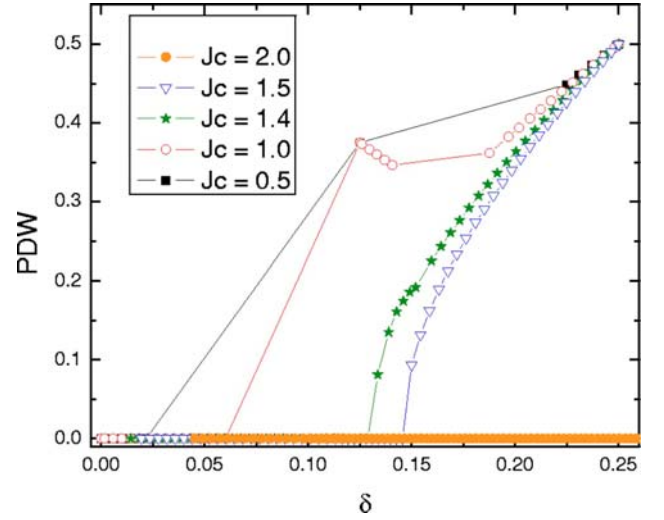


FIG. 9. (Color online) Doping dependence of PDW order defined for difference J_c . For $J_c < 1.3$, a strong peak is present at $n_h=1/4$ or real doping $\delta=1/8$.

$$h_m^2 + x_m^2 + e_m^2 = 1, \quad m = A, B, C, D. \quad (15)$$

Here, $N/4$ is the number of unit-cells and N is the number of plaquettes.

By minimizing the energy functional (14) subjected to the hard-core constraint (15), we obtain the mean-field ground state for a given set of parameters. Figure 6 plots the mean-field global phase diagram, for $\Delta_s=4.8$, $V_c=4.1010$, $V'_c=3.6329$, and $J_\pi=V_\pi=0$.

This phase diagram displays some rich features as expected. It has three insulating states: an undoped antiferromagnetic (AF) state, an insulating AF PDW state with hole-pair density $n_h=1/4$ ($\delta=1/8$) and an insulating PDW state with hole-pair density $n_h=1/2$ ($\delta=1/4$). Besides these insulating states, it also has a pure SC phase, a supersolid phase and mix phases of coexisting AF and SC order.

In Figs. 7 and 8, we plot the doping dependence of SC and AF orders for different J_c . If one follows a “class B1” trace, such as the one with fixed $J_c=1.5$, the doping dependence of SC order mimics the behavior of YBCO and BSCO families with a underdoped region $n_h < 0.3$ ($\delta < 0.15$) and an overdoped region $n_h > 0.3$ ($\delta > 0.15$). If one follows a “class B3” trace, such as the one with fixed $J_c=1.0$, the SC order displays a pronounced dip and the AF ordering is strongly enhanced around $n_h=1/4$ ($\delta=1/8$). Therefore, the “class B2” trace mimics the behavior of the LSCO family.

The doping dependence of charge order parameter is also plotted in Fig. 9. It measures the charge modulation defined by

$$PDW = \frac{1}{4} \sum_m |n_h(m) - n_h|, \quad (16)$$

where n_h is the average hole-pair density and m is summed over A,B,C,D. While “class B1” trace shows no charge ordering in underdoped region, “class B3” trace displays a clear signature of charge ordering around $\delta=1/8$.

B. Slave-boson approach, effective Hamiltonian, and dynamical SO(5) symmetry

The hard-core constraint (3) can also be enforced by introducing a slave-boson $t_e^\dagger(i)$ for each lattice.²⁷ The presence of this boson indicates that the plaquette i is empty. The hard-core condition (3) is then replaced by

$$\hat{Q}(i) = \left(\sum_{\alpha} t_{\alpha}^\dagger t_{\alpha}(i) + t_h^\dagger t_h(i) + t_e^\dagger t_e(i) - 1 \right) = 0. \quad (17)$$

This constraint can be enforced by introducing an additional site dependent field $\lambda(i)$ and adding to the Hamiltonian (1) an additional term

$$H_{\lambda} = - \sum_i \lambda(i) Q(i). \quad (18)$$

Since in physical states one always has one and only one boson per lattice sites, destruction (creation) of a boson $t_a(t_a^\dagger)$, $a=x,y,z,h$, must always be accompanied by creation (destruction) of the empty boson $t_e^\dagger(t_e)$. In this way, the whole Hamiltonian takes the form

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{sb} = & \Delta_c \sum_i t_h^\dagger(i) t_h(i) + \Delta_s \sum_i t_{\alpha}^\dagger(i) t_{\alpha}(i) \\ & - J_c \sum_{\langle ij \rangle} [t_h^\dagger(i) t_e(i) t_e^\dagger(j) t_h(j) + \text{H.c.}] - J_s \sum_{\langle ij \rangle} [t_{\alpha}^\dagger t_e(i) \\ & + t_e^\dagger t_{\alpha}(i)] [t_{\alpha}^\dagger t_e(j) + t_e^\dagger t_{\alpha}(j)] - \sum_i \lambda(i) Q(i) + \mathcal{H}_{\text{ext}}. \end{aligned} \quad (19)$$

By integrating out the λ field in the partition function, one automatically enforces the hard-core constraint $Q(i)=0$ on each site. The saddle point approximation to (19) corresponds to replacing the boson operators and λ field with real constants to minimize the energy. Within the four-sublattice ansatz, this is equivalent to minimizing the energy functional subjected to the hard-core constraint (15). After obtaining the ground state, we can expand the boson operators around their mean-field values and drop quartic terms in the Hamiltonian (19) to yield an effective Hamiltonian of the boson operators around the ground state.

We shall now study the checkerboard state characterized by following mean-field solution:

$$h_A = 1, \quad x_A = e_A = h_B = h_C = h_D = 0 \quad (20)$$

for the simplified model with $J_{\pi} = V_{\pi} = 0$.

The saddle-point of the slave-boson Hamiltonian (19) can be solved to yield

$$x_D = x_B = x_C = 0, \quad (21a)$$

$$e_D = e_B = e_C = 1, \quad (21b)$$

$$\lambda_D = \lambda_B = \lambda_C = 0, \quad (21c)$$

$$\lambda_A = \Delta_c, \quad (21d)$$

for $\Delta_s/J_s \geq 4\sqrt{2}$ and

$$x_D = x_B = \sqrt{\frac{1}{16} \left[8 - \frac{\Delta_s}{J_s} \sqrt{\frac{64J_s^2 + \Delta_s^2}{16J_s^2 + \Delta_s^2}} \right]}, \quad (22a)$$

$$e_D = e_B = \sqrt{\frac{1}{16} \left[8 + \frac{\Delta_s}{J_s} \sqrt{\frac{64J_s^2 + \Delta_s^2}{16J_s^2 + \Delta_s^2}} \right]}, \quad (22b)$$

$$x_C = \sqrt{\frac{1}{8} \left[4 - \frac{\Delta_s}{J_s} \sqrt{\frac{16J_s^2 + \Delta_s^2}{64J_s^2 + \Delta_s^2}} \right]}, \quad (22c)$$

$$e_C = \sqrt{\frac{1}{8} \left[4 + \frac{\Delta_s}{J_s} \sqrt{\frac{16J_s^2 + \Delta_s^2}{64J_s^2 + \Delta_s^2}} \right]}, \quad (22d)$$

$$\lambda_C = \frac{\Delta_s}{2} - 2J_s \sqrt{\frac{64J_s^2 + \Delta_s^2}{16J_s^2 + \Delta_s^2}}, \quad (22e)$$

$$\lambda_A = \Delta_c, \quad (22f)$$

$$\lambda_D = \lambda_B = \frac{\Delta_s}{2} - 4J_s \sqrt{\frac{16J_s^2 + \Delta_s^2}{64J_s^2 + \Delta_s^2}} \quad (22g)$$

for $\Delta_s/J_s \leq 4\sqrt{2}$.

The bosons are then expanded around their mean-field values as

$$t_h(m, r) = h_m + \hat{b}_h(m, r), \quad (23a)$$

$$t_x(m, r) = x_m + \hat{b}_x(m, r), \quad (23b)$$

$$t_e(m, r) = e_m + \hat{b}_e(m, r), \quad (23c)$$

$$t_y(m, r) = \hat{b}_y(m, r), \quad (23d)$$

$$t_z(m, r) = \hat{b}_z(m, r). \quad (23e)$$

Again, $m=A,B,C,D$ and r is the coordinate in the coarse-grained lattice of unit cells. Plug (23a)–(23e) into the slave-boson Hamiltonian (19) and drop the quartic terms to yield the quadratic effective Hamiltonian

$$H^{\text{eff}} = E_0 + H_h^{\text{eff}} + H_x^{\text{eff}} + H_y^{\text{eff}} + H_z^{\text{eff}} \quad (24)$$

with E_0 the mean-field ground state energy given by

$$E_0 = 2N(\Delta_c - \lambda_B)x_B^2 + N(\Delta_c - \lambda_C)x_C^2 + 4Nx_C e_C x_B e_B \quad (25a)$$

and H_x^{eff} , H_h^{eff} , H_y^{eff} , and H_z^{eff} ,

$$\begin{aligned} H_x^{\text{eff}} = & \sum_{m=B,C,D} \left[\sum_q (\Delta_s - \lambda_m) \hat{b}_x^\dagger \hat{b}_x(m, q) - \sum_q \lambda_m \hat{b}_e^\dagger \hat{b}_e(m, q) \right] \\ & - J_s \sum_q [4e_B x_B (\hat{b}_x^\dagger(C, q) \hat{b}_x(C, q) + \text{H.c.}) + B \leftrightarrow C] \\ & - 2J_s \sum_q [e_C (\hat{b}_x^\dagger(C, q) + \hat{b}_x(C, -q)) + x_C (\hat{b}_e^\dagger(C, q) \end{aligned}$$

$$+ \hat{b}_e(C, -q)] \times [\cos q_x (e_B [\hat{b}_x^\dagger(B, -q) + \hat{b}_x(B, q)] + x_B [\hat{b}_e^\dagger(B, -q) + \hat{b}_e(B, q)]) + \cos q_y (B \leftrightarrow D)], \quad (25b)$$

$$\begin{aligned} H_h^{\text{eff}} = & \sum_q (\Delta_c - \lambda_B + 2V_c) [\hat{b}_h^\dagger(B, q) + \hat{b}_h^\dagger(D, q)] + \sum_q (\Delta_c \\ & - \lambda_C + 4V'_c) \hat{b}_h^\dagger(C, q) + \sum_q (\Delta_s - \Delta_c) \hat{b}_x^\dagger(A, q) \\ & - \lambda_A \sum_q \hat{b}_e^\dagger(A, q) - J_s \sum_q 8e_B x_B [\hat{b}_x^\dagger(A, q) \hat{b}_e(A, q) \\ & + \hat{b}_e^\dagger(A, q) \hat{b}_x(A, q)] - 2J_c e_B \sum_q [\cos q_y (\hat{b}_e(A, q) \hat{b}_h(B, -q) \\ & + \hat{b}_h^\dagger(B, -q) \hat{b}_e^\dagger(A, q)) + \cos q_x (B \leftrightarrow D)] \\ & - 2J_c e_B e_C \sum_q [\cos q_x (\hat{b}_h^\dagger(C, q) \hat{b}_h(B, q) \\ & + \hat{b}_h^\dagger(B, q) \hat{b}_h(C, q)) + \cos q_y (B \leftrightarrow D)], \quad (25c) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} H_\alpha^{\text{eff}} = & \sum_q (\Delta_s - \lambda_B) (\hat{b}_\alpha^\dagger(B, q) + \hat{b}_\alpha^\dagger(D, q)) \\ & + \sum_q (\Delta_s - \lambda_C) \hat{b}_\alpha^\dagger(C, q) + \sum_q (\Delta_s - \Delta_c) \hat{b}_\alpha^\dagger(A, q) \\ & - 2J_s e_C e_B \sum_q [\hat{b}_\alpha^\dagger(C, q) + \hat{b}_\alpha(C, -q)] [\cos q_y (\hat{b}_\alpha^\dagger(D, -q) \\ & + \hat{b}_\alpha(D, q)) + \cos q_x (D \leftrightarrow B)], \quad \alpha = y, z. \quad (25d) \end{aligned}$$

Here, the operators $\hat{b}(m, q)$ are the Fourier transforms of the bosonic operators $\hat{b}(m, r)$

$$\hat{b}(m, q) = \sum_r e^{iqr} \hat{b}(m, r), \quad m = A, B, C, D, \quad (26)$$

where the summation of r is over the lattice of unit cells.

This effective Hamiltonian has four decoupled parts, H_h^{eff} , H_x^{eff} , H_y^{eff} , and H_z^{eff} . Among these four decoupled parts, H_y^{eff} and H_z^{eff} are just the Hamiltonian for the gapped magnetic mode on sublattice A and gapless magnetic Goldstone modes on sublattice B, C, and D due to the spontaneous symmetry breaking of SO(3) spin symmetry. These two gapless Goldstone modes correspond to the gapless uniform rotation of the AF ordering from x direction to y or z direction. H_x^{eff} is the Hamiltonian of gapped x -magnon mode on sublattice B, C, and D due to the condensation of x -magnons on these sublattices. The remaining H_h^{eff} is of great interest for it is the Hamiltonian of the charge modes and x -magnon mode on sublattice A.

Under the insulating lobe of checkerboard state, the charge modes are gapped. The charge gap ω_0 is given by the solution to the quartic equation of the form

$$\omega_0^4 + C_2 \omega_0^2 + C_3 = 0, \quad (27)$$

where C_2 and C_4 are quadratic functions of J_c . This equation is quartic because fields with momentum q and $-q$ are coupled and there are $t^\dagger t^\dagger$ terms in the effective Hamiltonian.

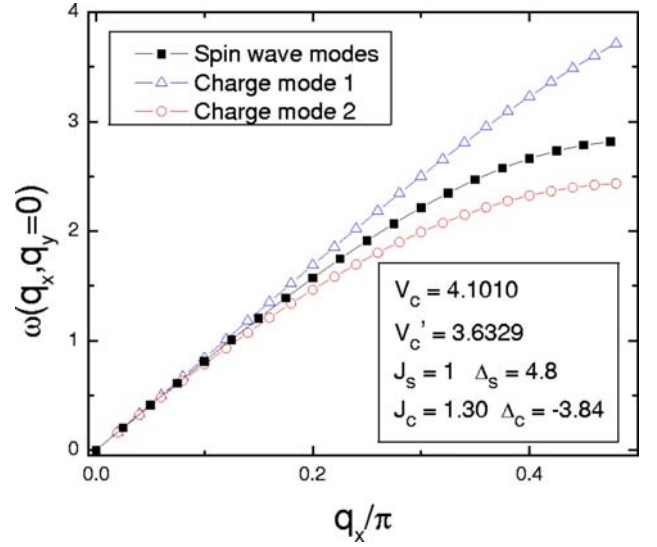


FIG. 10. (Color online) Dispersion of four gapless modes at a quantum multicritical point, located tip of the $\delta=1/8$ checkerboard lobe illustrated in Fig. 6. The two spin wave modes have exactly the same dispersion due to the SO(3) symmetry of the AF moment. For the parameters shown in the figure, these four modes have the same speed at the multicritical point. These four modes correspond the four Goldstone modes required by the quantum dynamical SO(5) symmetry.

The condition $C_3=0$ gives the lobe-shaped second order phase boundary where one charge mode becomes soft and a phase transition from the PDW state to the SC state occurs. However, one must be careful since it is possible that the system takes a first order transition before the charge mode softens. This indeed happens for lower left part of the lobe, where the PDW state takes a first order transition to an AF + SC mixed state. In the following discussion, we assume the tip and some of the left part of the lobe survive, as in the case plotted in Fig. 6.

As one approaches the left part of the second order lobe following a trajectory with constant J_c , the energy cost of removing hole-pair decreases and becomes zero at the phase boundary. This observation leads to the conclusion that a particlelike charge mode becomes soft on the left part of the lobe. Similarly, one can argue that a holelike charge mode becomes soft at the right part. At the tip, where the left part and right part of the lobe meet, both particlelike and holelike modes become soft. Consequently, an effective particle-hole symmetry is dynamically restored. One can check that C_2 indeed vanishes at the tip of the lobe.

At the tip of the lobe, the speed of gapless charge modes is determined by the interaction V_c and V'_c . For appropriate values of V_c and V'_c , the speed of the gapless charge mode can be the same as the speed of the two gapless AF spin wave modes. When quantum SO(5) symmetry is spontaneously broken to an SO(4) symmetry, there should be exactly four degenerate gapless Goldstone bosons. This model shows that such a dynamical symmetry is possible at the multicritical point around the tip of the $\delta=1/8$ lobe. Figure 10 plots the dispersions of four gapless modes at the tip of an AF insulating checkerboard lobe in the phase diagram of Fig. 6.

V. PHASE DIAGRAM OBTAINED FROM QUANTUM MONTE CARLO SIMULATION

A. Numerical simulation

Because of the bosonic nature, the minus-sign problem is absent in the quantum SO(5) model. Therefore, simulations can be carried out for systems with sizes much larger than the ones available with fermionic QMC simulation in the physically interesting region. The pioneering numerical works^{30–33,74,75} show that the projected SO(5) model can give a realistic description of the phase diagram of the HTSC cuprates and account for many of their physical properties. In this section, we shall present the simulation of the SO(5) model with extended interactions using the stochastic series expansion (SSE) method^{76–78} with operator-loop update.⁷⁸ This quantum Monte Carlo method was shown to be very efficient for simulations of hardcore bosonic systems.^{30,63,79} The overall topology of the phase diagram agrees well with the mean field calculation presented in the previous section, although the parameters are strongly renormalized.

From the values given in Sec. II, we see that we can safely neglect J_π which is rather small so that only remains J_c and J_s which are both positive. In this section, $J_\pi=0$.

In order to avoid the notorious sign problem in the quantum Monte Carlo simulations of the SO(5) model with extended interactions, all off-diagonal terms should be positive. On a square lattice with only nearest-neighbor nonzero off-diagonal terms, the sign of these matrix elements can be safely changed by a harmless unitary transformation acting on hopping terms in only one of the sublattices.

For each simulation, the number of loops (or “worms”) made during the loop operator update⁷⁸ is calculated self-consistently during the thermalization part, such that on average the number of vertices visited by worms during each loop operator update is equal to $C\langle n \rangle$. Here $\langle n \rangle$ is the average number of non-identity vertices in the operator string (see Ref. 78) and C a proportionality constant, usually taken between 1 and 5 (the larger C , the more autocorrelations between successive Monte Carlo configurations are reduced).

In order to plot the phase diagram, we should compute the order parameters corresponding to AF, SC, and PDW phase. We use the superfluid density ρ_c to locate SC phases. Indeed, ρ_c can be related to the winding numbers of the world-lines which can be directly computed during the QMC simulations.^{77,80} Here the winding number only involves the charged particles, i.e., the hole pair hopping. We can take a similar definition with the magnetic bosons to define the spin stiffness.

It is straightforward to measure the density-density correlations and their Fourier transform, the structure factors $N(q_x, q_y)$ which indicate PDW phases

$$N(\mathbf{q}) = \frac{1}{L^2} \sum_{i, \mathbf{r}} \exp(i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}) \langle n_h(i) n_h(i + \mathbf{r}) \rangle.$$

These quantities characterize the diagonal long-range order. On finite clusters, the structure factor at the appropriate momentum diverges as the volume of the system in the ordered phase, so that, by plotting $N(q_x, q_y)/L^2$ vs $1/L$ (L is the linear

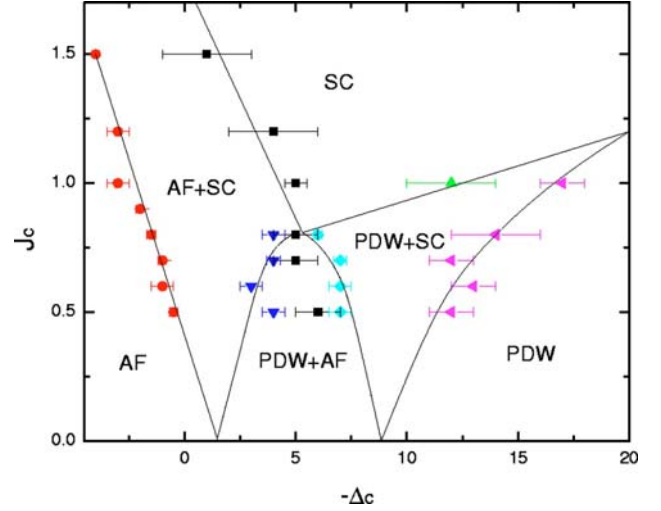


FIG. 11. (Color online) The global phase diagram obtained by QMC. The parameters used in simulation are $\Delta_s=4.8$, $V_c=4.1010$, $V'_c=3.6329$, and $J_\pi=V_\pi=0$. The lines are guides to the eye only. The overall topology of the phase diagram agrees well with the mean-field phase diagram of Fig. 6, although the parameters are renormalized.

size of the system), a scaling analysis can demonstrate long range order.

Due to the intrinsic complexity of the projected SO(5) model and to the large number of interaction types, we restricted the simulations to small lattices (4×4 up to 10×10 lattices) at low temperatures (typically $\beta=10$), to mainly be in the ground state. Even using the powerful SSE method, we found that for specific points in the phase diagram (near phase boundaries for example), autocorrelation times of different observables or tunneling times between two neighboring phases can be long, decreasing the statistical precision. This sometimes prevents us from providing definitive statements about the nature of phase transitions. However, outside of these regions, we can clearly distinguish the nature of the different phases.

B. Limiting cases

The pure projected SO(5) model corresponds to $V_c=V'_c=V_\pi=0$ and $J_c=2J_s$. This model has been studied with the same technique.³⁰ A first-order transition between AF and SC phases was observed. It was already recognized that a small V_c and V'_c were enough to turn this transition into a second-order phase transition.

Another interesting case occurs when the triplet density becomes small. In that limit, the model reduces to one type of hard-core boson with hopping J_c and nearest and next-nearest neighbor repulsion V_c and V'_c respectively.

$$H = -J_c \sum_{\langle ij \rangle} [t_h^\dagger(i) t_h(j) + \text{H.c.}] + \left[V_c \sum_{\langle ij \rangle} + V'_c \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \right] n_h(i) n_h(j) \quad (28)$$

so that we can fix $J_c=1$ as the energy unit. This model has been extensively studied in Ref. 63 and some results have

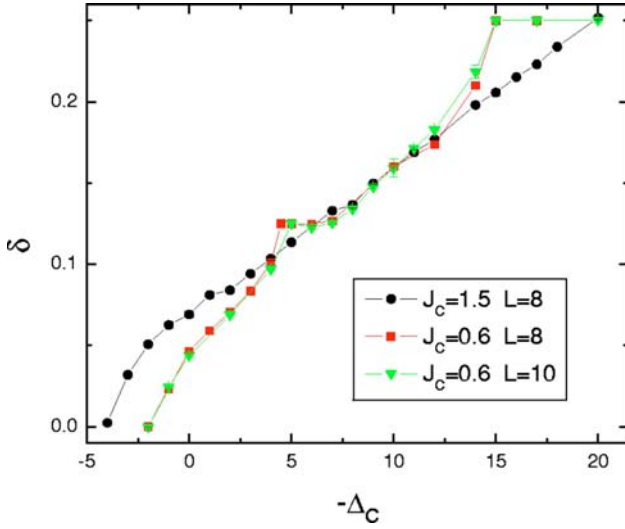


FIG. 12. (Color online) $\delta = n_h/2$ vs chemical potential for $J_c = 1.5$ and $J_c = 0.6$. The presence of plateaus indicates incompressible PDW phases. The finite size effects are rather small.

been obtained with the same SSE method. Let us review a few useful results.

1. Half-filling

The phase diagram at half-filling is well known and exhibits solid phases with either $(\pi, 0)$ (stripe) or (π, π) (checkerboard) structures. In between exists a superfluid phase with a nonzero superfluid density ρ_c . We recover the same results as Hebert *et al.*⁶³ with our choice of interactions, by varying J_c , we can drive the system from a superfluid toward a $(\pi, 0)$ (stripe) phase.

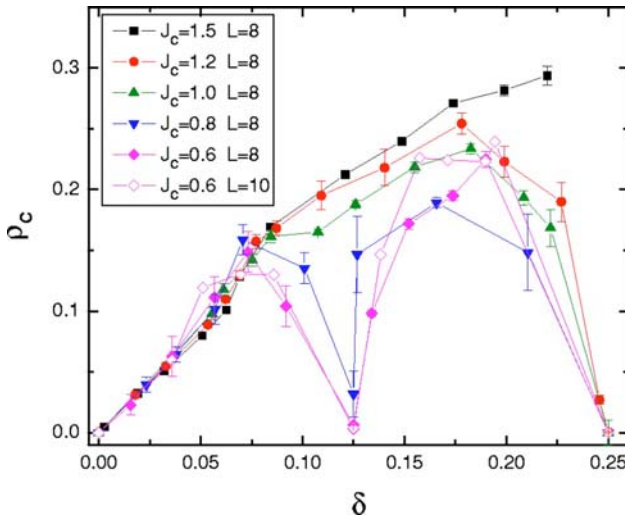


FIG. 13. (Color online) Superfluid density as a function of doping for various J_c . The “class B1” trace with $J_c = 1.0$ bears great similarity with the famous domelike phase diagram of many cuprate families. Also, the “class B3”-like trace with $J_c \leq 0.8$ has a pronounced dip at $\delta = 1/8$ as the phase diagram of the *LSCO* family does.

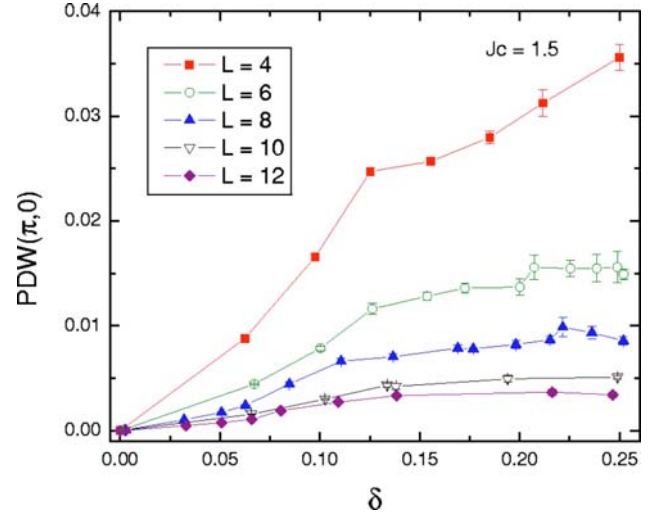


FIG. 14. (Color online) Scaling of $(\pi, 0)$ PDW order parameter $[N(\pi, 0)/L^2]$ for various sizes ($L = 6$ to 12 from top to bottom) with $J_c = 1.5$. We checked that it extrapolates to 0 for all δ .

2. Away from half-filling

Away from half-filling, our grand-canonical algorithm is able to check whether we are in a phase separated state or not by looking at the histogram of the density during the simulation. On general grounds, the presence of a double peak structure shows the presence of true phase separation in the system.

With our choice of parameters, we find that away from the striped state, there is a phase, close to half-filling, where both $N(0, \pi)/L^2$ (PDW order parameter) and ρ_c are finite, that is a supersolid phase. Moreover, there is no sign of phase separation so that it is a true homogeneous phase, as claimed in Ref. 63.

C. Global phase diagram

Now that the parameters are fixed, we can compute the phase diagram for various J_c and chemical potential Δ_c (see Fig. 11). In order to discuss these results, we plot in the following most of the data as a function of doping $\delta = n_h/2$ which depends on the chemical potential Δ_c as shown in Fig. 12, but has no strong finite-size effects. Let us comment on some results.

1. Large J_c

For all values of J_c , the superfluid density increases linearly with doping, for small doping, thus capturing a key piece of the Mott physics. For large J_c ($J_c = 1.5$ for example), reducing hole density starting from $\delta = 1/4$, we have a smooth decrease of superfluid density (see Fig. 13). At the same time, magnon density increases and gives rise to AF. Figure 14 shows typical data of $N(\pi, 0)/L^2$ which is the PDW order parameter for various sizes. In order to get information on the thermodynamic limit, we have performed a finite-size scaling of our data, and it vanishes for all fillings. We have a superconducting state for all dopings, with a pos-

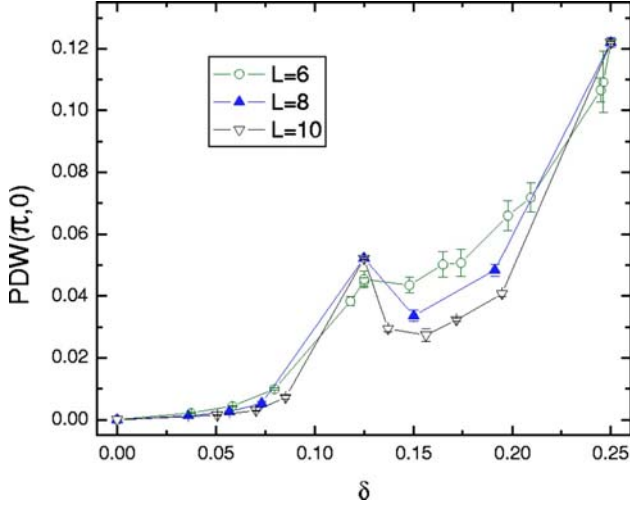


FIG. 15. (Color online) $(\pi, 0)$ PDW order as a function of δ for various sizes ($L=6, 8$, and 10) for $J_c=0.6$. We checked that, within the system sizes simulated, finite PDW order survives in the thermodynamic limit for $n_h \geq 0.25$ ($\delta \geq 0.125$).

sible coexistence with AF at low-doping. When the doping vanishes, we recover a pure AF phase.

2. Small J_c

For smaller J_c , the long-range interactions between hole pairs start to play a role.

a. Large doping. The first example is the appearance of a $(\pi, 0)$ PDW insulating phase at $n_h=1/2$ ($\delta=1/4$). Indeed, close to this doping, the magnon density is very small so that the model is similar to the single hardcore boson case. We therefore recover a transition at fixed $n_h=1/2$ ($\delta=1/4$) as a function of J_c between a superfluid phase (SC) and an insulating stripe phase (with a finite PDW order and a vanishing superfluid density). A finite-size scaling of the PDW order

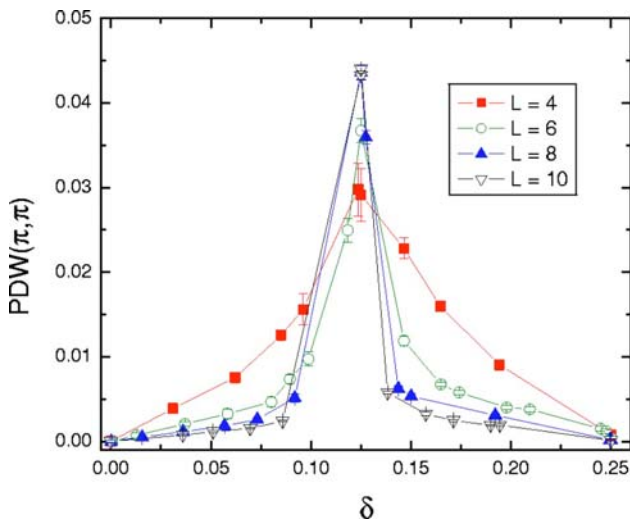


FIG. 16. (Color online) (π, π) PDW order as a function of δ for various sizes ($L=4, 6, 8$ and 10) and $J_c=0.7$. We checked that it is finite only for $n_h=1/4$ ($\delta=1/8$) checkerboard.

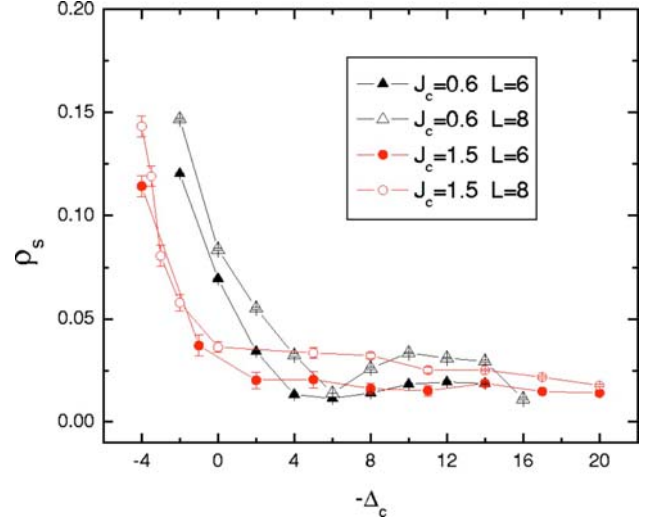


FIG. 17. (Color online) The spin stiffness vs chemical potential for different sizes and J_c .

parameter showing a finite value is shown in Fig. 15 for $n_h=0.5$ ($\delta=0.25$) and $J_c=0.6$. In Fig. 13, we see that below $J_c \sim 1.3$, the superfluid density vanishes at $n_h=1/2$ ($\delta=1/4$) in agreement with what has been found for the single-boson model.⁶³ Mean-field results find a higher value ($V'_c/2 \approx 1.8$).

b. Intermediate doping. A second example of the interaction effect is given by the appearance of an insulating PDW phase at $n_h=0.25$ ($\delta=0.125$) for low enough J_c ($J_c \leq 0.7$). A finite PDW order parameter and $\rho_s=0$ are shown again in Figs. 15 and 13 for $J_c=0.6$. This state corresponds to a localization of one hole-pair every 4 sites, so that this $n_h=1/4$ ($\delta=1/8$) checkerboard also possesses a finite $N(\pi, \pi)/L^2$ as shown in Fig. 16. We find that this $n_h=1/4$ ($\delta=1/8$) checkerboard is insulating, with a vanishing superfluid density. However, it could be possible to have a supersolid phase.⁸¹

For intermediate dopings $0.25 < n_h < 0.5$ ($0.125 < \delta < 0.25$) and small J_c , we find a finite superfluid density and possibly a finite PDW order, that is a supersolid region. We checked that this phase is stable against phase separation. We cannot be conclusive about its extension in the phase diagram, due to the long autocorrelation time for some observables. This explains the large error bars in some parts of the phase diagram. However, since we know that such a phase exists and is stable close to half-filling, we can assume that it has a finite extension. It would be interesting to check whether this supersolid also exists for a single hard-core boson model close to $n_h=1/4$ ($\delta=1/8$), which is much easier to simulate. It is remarkable that for J_c values close to the transition, we see a dip in the superfluid density (Fig. 13), which is due to the proximity to the insulating state.

3. Magnetic properties

As shown in Fig. 17, the spin stiffness shows a monotonic decrease with chemical potential (or doping) so that it is difficult to locate precisely where it vanishes. For small doping δ or chemical potential $-\Delta_c$, we observe a rapid linear

decrease so that we can estimate roughly where AF could vanish in the thermodynamic limit. These phase boundaries are shown in Fig. 11 and are in agreement with what has been found at the mean-field level.

For small J_c , AF seems to vanish at $n_h=1/4$ ($\delta=1/8$). However, our data of ρ_s also show a shallow peak above this filling, which could indicate a reentrance of AF as found in mean-field. Unfortunately, with our current limitation on available sizes and statistics, we cannot conclude for sure about this possibility.

D. Summary

The qualitative features found at the mean-field level are still present in a full numerical calculation and we have a very nice overall agreement (see Figs. 6 and 11). Of course, exact critical values of J_c for superconducting-insulator transition are different from mean-field values but this does not change the physical conclusions.

It is very difficult to point precisely where AF vanishes since spin stiffness does not show any sharp drop. However, we clearly see a strong reduction of ρ_s , which seems to decrease linearly with doping. With the chosen parameters, it seems plausible that both this line and the PDW transition line merge close to the tip of the $n=1/4$ lobe as was found at the mean-field level. This result was associated to the dynamical restoration of SO(5) symmetry at this point. Our data might be an indication that this is indeed the case (we have taken the same V_c and V'_c so it seems pretty robust). However, a complete answer can only be provided by computing dynamical correlations, which is more involved and requires good statistics.

VI. EXPERIMENTAL CONSEQUENCE AND PREDICTIONS

In this work we have constructed a single quantum Hamiltonian based on the projected SO(5) model with extended interactions, and presented detailed analytical and numerical calculations which give a consistent global phase diagram as depicted in Fig. 4. This schematic phase diagram is obtained from the quantitative model calculations summarized in Figs. 6 and 11. This model captures the overall topology of the cuprates phase diagram, including the dome-like feature of T_c , which is determined within our model by the superfluid density, the 1/8 anomaly due to charge ordering, the coexistence of SC with AF and possibly with charge order. As mentioned in the Introduction, some of these features have been discussed in other theoretical contexts before, however, it is rather remarkable that they are all reproduced by a single quantum model accessible by reliable QMC. Below we shall discuss some of these features and present more detailed theoretical predictions.

A. Dependence of superfluid density on doping

A remarkable feature of the HTSC cuprates is the dome-like dependence of T_c on doping. Experiments have also shown a remarkable dependence of superfluid density on doping. On the underdoped side, both T_c and the superfluid density scale linearly with doping, a fact commonly referred

to as the ‘‘Uemura plot.’’ Further examination also shows that the superfluid density in the overdoped regime decreases with increasing doping, which is commonly referred to as the ‘‘boomerang effect.’’ In cuprate system, the muon spin relaxation rate $\sigma(T \rightarrow 0)$ is proportional to n_s/m^* where n_s is the superfluid density and m^* is the effective mass of hole-pairs.⁸² To explain the deviation from the linear relation between σ and doping in the overdoped regime, Uemura proposed that some of the doped holes do not form pairs and are phase separated from the SC hole-pairs, even at zero temperature.⁸² A similar phase separation picture was proposed by Uchida.⁸³ However, it has always been rather puzzling that if the phase separated normal electrons existed at zero temperature, they should provide a channel of relaxations, which has not been observed experimentally.

Within our effective bosonic model, T_c is directly determined by the superfluid density ρ_c . As we can see from Fig. 13, ρ_c indeed scales linearly with the doping density for small doping, and has a dome-like dependence for higher doping for intermediate values of J_c . It peaks around $\delta \sim 18\%$ for $J_c=1.2$. The physical reason for the behavior on the overdoped side arises from the tendency of hole pairs to form a competing charge ordering state at either 3/16 or 1/4. Within this picture, when more holes are added into the system on the overdoped side, the holes are still paired, but some of them form a charge ordered PDW state, with preferred doping of 3/16 or 1/4. This charge ordered PDW state either phase separates from the SC state, or coexists with it, but either way, the superfluid density is reduced because of the repulsive coupling between the two forms of order. Therefore, this picture predicts a new charge ordered state on the overdoped side, which should be tested experimentally. Since the magnon density decreases monotonically with doping, the charge ordered states on the overdoped side may not be AF ordered, which makes it hard to observe by neutron scattering. Furthermore, on the overdoped side, our purely bosonic model also becomes less accurate, and a fully quantitative theory has to include the low energy fermionic excitations.

B. The 1/8 anomaly and pressure experiments

In the *LSCO* systems, T_c has a pronounced dip near doping of $\delta=1/8$.⁸⁴ More recently, it has been demonstrated that the competition between the nearly insulating 1/8 phase and the SC phase in the *LSCO* family can be controlled by pressure. There are two different approaches. One is to apply hydrostatic or uniaxial pressure on single crystal.⁷⁰ In this way, the pressure in *ab* plane increases T_c while the pressure in *c* direction decreases T_c . The other is to introduce compressive or expansive strain into thin films with the help of the lattice mismatch between the film and substrate.⁷¹ Enhanced T_c and disappearance of the 1/8 anomaly for compressed film and strong reduction of T_c for expanded film were observed.⁷¹

Our model reproduces the $\delta=1/8$ effect for $J_c < 1$, as one can see from Fig. 13. The pronounced dip is caused from the competition between the SC state and the insulating PDW states. Varying doping corresponds to the ‘‘B2’’ or ‘‘B3’’

traces as depicted in Fig. 4. On the other hand, pressure in the ab plane reduces the lattice constant, thus increases the hopping term J_c . Therefore, applying pressure in the ab plane is equivalent to following a “class A2” trace starting from a small J_c in the global phase diagram. The doping dependence of T_c for different films given in Fig. 3 of Sato *et al.*⁷¹ shares many common features with our doping dependence of SC order parameter, both MF results (Fig. 7) and QMC results (Fig. 13). The destructive effect on T_c of the pressure in the c direction can also be understood in terms of the Poisson effect. The lattice constant in ab plane will increase when the sample is compressed in the c direction. This will lead to the decrease of T_c as argued previously.

Similar to the “class A2” trace, “class A3” trace can also be realized by applying pressure. Therefore, we predict a similar pressure induced superconductor-to-insulator transition at $\delta=1/16$.

In this way, the pressure effect on the $1/8$ anomaly is understood in terms of the bosonic superfluid-to-insulator transition at the fixed density of $\delta=1/8$. Standard predictions on the superfluid-to-insulator transition apply to the $\delta=1/8$ transition. In addition, we argued that the tip of the $\delta=1/8$ lobe can possibly have the full quantum $SO(5)$ symmetry. This prediction can be experimentally tested by comparing both the static and dynamic charge and magnetic responses, as we have discussed in Sec. II B.

C. The vortex phase and the ground state above H_{c2}

The “class A2” and “class A3” traces can also be approached in the cuprates by applying a magnetic field along the c -axis, which effectively reduces the hopping term J_c . In underdoped *LSCO* samples, we predict that the magnetic field destroys SC order by localizing hole-pairs into a PDW state. This naturally leads to the field-induced insulating behavior in underdoped *LSCO*.^{72,73} For the *YBCO* and *BSCO* systems, the magnetic field could drive the hole-pairs into a disordered state before the lobe of $\delta=1/8$ or $\delta=1/16$ is reached.

Recently, a striking feature is revealed in the STM experiments by Hoffman *et al.*,³⁷ where the local density of states (DOS) near the vortex core shows a two-dimensional checkerboardlike modulation with a $4a \times 4a$ charge unit cell. Here a is the lattice spacing of the CuO_2 plane. This modulation decays exponentially away from the center of the vortex core, with a decay length of about $10a$. A similar pattern has also been seen in the absence of the applied magnetic field.³⁸ possibly induced by the impurities at the surface. In the case of vortex core experiment, SC is destroyed by the magnetic field, and the nature of the competing state is revealed. The case of impurity scattering is more complex, and the experimental observation can also be interpreted as due to quasi-particle interference.^{39–41}

The $\delta=1/8$ insulating PDW state was proposed as an explanation for the STM measurements.⁴³ This state has the $4a \times 4a$ checkerboard symmetry as observed in the experiment, and the doping level for the insulating $\delta=1/8$ state is reasonably close to the optimal doping level of the cuprates. On the other hand, if the holes themselves, rather than the

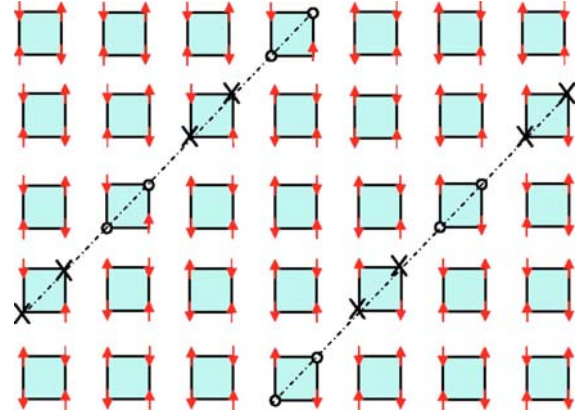


FIG. 18. (Color online) The hole-pair checkerboard state with antiphase magnetic domain at doping level $\delta=1/16$. Circles denote holes and arrows denote spins while black crosses denote spins in a singlet bond.

hole pairs, form a Wigner crystal state, the periodicity of the charge ordering would be larger by a factor of $\sqrt{2}$, inconsistent with the experiment. Therefore, by forming the Wigner crystal state of the hole pairs rather than the holes themselves, the doping level can be compatible with the observed size of the charge unit cell. In Ref. 43, the hole pair checkerboard state was established by a mean field calculation. A main result of the present work is to establish the existence of this state by QMC calculations.

Our calculations as summarized in Figs. 6 and 11 show that the charge ordered insulating states are also accompanied by AF magnetic order. Enhanced AF fluctuation in the vortex state was originally predicted within the $SO(5)$ theory in Refs. 1 and 17 and has been experimentally observed in a number of HTSC cuprate families by a variety of experimental techniques.^{18–24} More recently, AF order has been detected by neutron scattering above H_{c2} , in electron doped cuprates.^{25,26} This magnetic field induced quantum phase transition from the SC state to the AF state corresponds to the “A2” trace as depicted in Fig. 4.

D. Charge localization and suppression of thermal conductivity

In previous subsections, we argue that the competition between PDW and SC can be tuned by applying pressure or magnetic field. In particular, we show that the PDW ordering of hole-pairs can develop in the vortex core. The localized hole-pairs in a PDW state are expected to have little contribution to the transport properties such as thermal conductivity. This leads to the argument of the suppression of thermal conductivity by applying a magnetic field in c -axis below some temperature T_K . Since the onset temperature T_K is expected to be proportional to the superfluid density, T_K has weak dependence on the magnetic field and follows T_c in the underdoped cuprates. Moreover, the closer the system is to the charge ordered insulating state such as the $1/8$ PDW state, the smaller the suppression effect would be. Finally, the in-plane magnetic field has little effect on the thermal

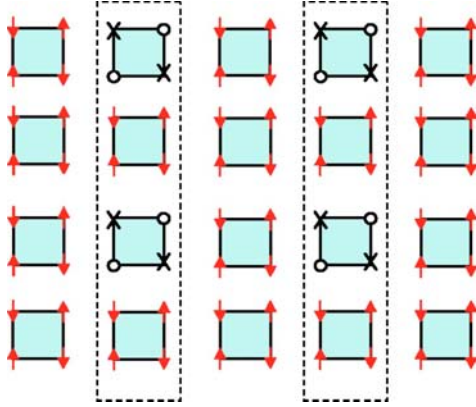


FIG. 19. (Color online) The hole-pair checkerboard state with in-phase magnetic domain at doping level $\delta=1/8$. Circles denote holes and arrows denote spins while black crosses denote spins in a singlet bond.

conductivity due to the fact that it does not create vortex in the ab plane.

Therefore, trace “A2” in our global phase diagram and the charge localization into a hole pair crystal can possibly explain the recent experiment on the suppression of thermal conductivity by applying a magnetic field in the c direction.⁸⁵ We also predict that applying pressure will also induce the suppression or enhancement of the thermal conductivity around the $1/8$ doping, assuming the pressure will not induce strong effect of the lattice structure which can also change the thermal conductivity.

E. $1/16$ doping

As discussed in Sec. III, additional insulating lobes at $\delta=1/16$ and $\delta=3/16$ doping levels are predicted if interactions are more extended than the nnn interactions included in this work. The charge and spin ordering patterns for this state are depicted in Fig. 18. Even though the current paper does not investigate this type of more extended interactions ex-

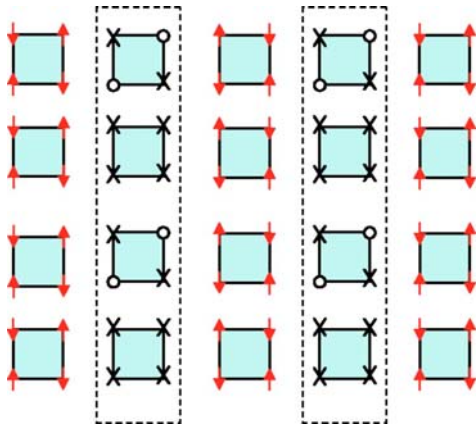


FIG. 20. (Color online) The hole-pair checkerboard state with antiphase magnetic domain at doping level $\delta=1/8$. Circles denote holes and arrows denote spins while black crosses denote spins in a singlet bond.

PLICITLY due to numerical complexities, it is clear that the physics of these PDW states are similar to the $1/8$ doping. Preliminary evidence for the $\delta=1/16$ insulating state exists for the *LSCO* material.^{60,86} As we see from Figs. 18 and 19, the charge ordering pattern rotates from diagonal at $\delta=1/16$ to square at $\delta=1/8$. This transition between states with different rotational symmetries could possibly be related to the diagonal to square transition observed in the neutron scattering experiments at $\delta \sim 5\%$ in the *LSCO* material.^{87,88}

F. Magnetic order

In this paper, we focused our discussion on the checkerboard charge order at $\delta=1/8$. Strictly within our model, the accompanied AF magnetic order is commensurate, as sketched in Fig. 19. This type of magnetic structure is consistent with the recently observed field induced magnetic order in the *NCCO* material,^{25,26} but not consistent with the magnetic structure observed in the *LSCO* material, which has antiphase domain walls. We would like to stress that this is not a limitation on the fundamental approach taken here. As shown in Fig. 20, checkerboard charge order of the hole pairs can be fully consistent with the AF magnetic structure with antiphase domain walls. However, stability of this type of magnetic structure requires more extended magnetic interactions. Since the complexity of both the CORE algorithm and the QMC increases substantially, we have not yet been able to derive such extended interactions from the microscopic models, and simulate them with QMC.

G. Coexistence phases

While the simple $SO(5)$ model¹ predicts the coexistence phases of AF and SC, more regions with coexisting charge, AF and SC orders are predicted in the global phase diagram of Figs. 6 and 11. In particular, the “type 1” first order transition from undoped AF state to SC state predicted by simple $SO(5)$ model is turned into two “type 2” second order transitions by the interactions V_c and V'_c , which is consistent with previous study.³⁰ While the width of these coexistence regions is model dependent, coexistence phases are important qualitative predictions of our theory. Experiments on cuprates have indeed suggested such coexistence phases.^{89–94}

As we see from Fig. 8, the AF order disappears around $\delta=0.10$. This is consistent with the value obtained from the t - J model.⁹⁵ The width of the AF/SC coexistence phase largely depends on the values of J_π and V_π . As determined by the CORE method, J_π is negative and V_π is positive. Thus, at the mean-field level, both J_π and V_π terms induce a repulsion between AF and SC in the mixed state of coexisting AF and SC. When these terms are included, one would expect a smaller region of the AF/SC coexistence state in the global phase diagram. On the other hand, these two terms have different effects on the checkerboard state. Since the mean-field value of π -operator in the PDW state is zero, the J_π interaction will not induce any interaction terms at the mean-field level. In contrast, the V_π term effectively changes the local chemical potential of hole-pairs (magnons) due to the nonzero mean-field value of magnons (hole-pairs) on the

nn plaquette. Therefore, V_π also reduces the height of the insulating PDW lobe.

VII. CONCLUSIONS

Starting from commonly used microscopic models of high T_c cuprates, an effective bosonic model can be derived by the CORE algorithm.^{28,29} In addition to the simple interactions included in the original projected SO(5) model,^{27,30,33} extended interactions play an important role in determining the global phase diagram of the model. This model can be studied systematically by the analytical mean field theory and by the QMC method, thanks to the absence of the minus sign problem. The global phase diagram consists of self-similar insulating PDW phases at rational filling fractions, immersed in the background of the uniform SC phase, as depicted schematically in Fig. 4. Different families of cuprates are attributed to different traces in the global phase diagram. The

overall topology of the phase diagram obtained from our model agrees well with the experiments, and so are the behaviors of various physical quantities. Inclusion of longer ranged interactions could bring detailed and quantitative agreements with the cuprate phase diagram.

ACKNOWLEDGMENTS

We would like to acknowledge useful discussions with Dr. A. Auerbach, Dr. E. Demler, Dr. W. Hanke, Dr. J.P. Hu, Dr. S. Kivelson, E. Mukamel, Dr. G. Schmid, Dr. M. Troyer, and C.J. Wu. This work is supported by the NSF under Grant No. DMR-9814289, and the U.S. Department of Energy, Office of Basic Energy Sciences under Contract No. DE-AC03-76SF00515 and by the Swiss National Science Foundation. H.D.C. is also supported by a Stanford Graduate Fellowship. Part of the simulations were performed on the Asgard Beowulf cluster at ETH Zürich and at SLAC.

- ¹S. C. Zhang, *Science* **275**, 1089 (1997).
- ²E. Demler and S. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 4126 (1995).
- ³E. Demler and S. C. Zhang, *Nature (London)* **396**, 733 (1998).
- ⁴J. Rossatmignod, L. P. Regnault, C. Vettier, P. Bourges, P. Burlet, J. Bossy, J. Y. Henry, and G. Lapertot, *Physica C* **185**, 86 (1991).
- ⁵H. A. Mook, M. Yethiraj, G. Aeppli, T. E. Mason, and T. Armstrong, *Phys. Rev. Lett.* **70**, 3490 (1993).
- ⁶H. F. Fong, B. Keimer, P. W. Anderson, D. Reznik, F. Dogan, and I. A. Aksay, *Phys. Rev. Lett.* **75**, 316 (1995).
- ⁷P. Dai, M. Yethiraj, H. A. Mook, T. B. Lindemer, and F. Dogan, *Phys. Rev. Lett.* **77**, 5425 (1996).
- ⁸H. F. Fong, B. Keimer, D. Reznik, D. L. Milius, and I. A. Aksay, *Phys. Rev. B* **54**, 6708 (1996).
- ⁹H. A. Mook, P. C. Dai, S. M. Hayden, G. Aeppli, T. G. Perring, and F. Dogan, *Nature (London)* **395**, 580 (1998).
- ¹⁰P. C. Dai, H. A. Mook, and F. Dogan, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1738 (1998).
- ¹¹H. F. Fong, P. Bourges, Y. Sidis, L. P. Regnault, J. Bossy, A. Ivanov, D. L. Milius, I. A. Aksay, and B. Keimer, *Phys. Rev. B* **61**, 14773 (2000).
- ¹²H. F. Fong, P. Bourges, Y. Sidis, L. P. Regnault, A. Ivanov, G. D. Gu, N. Koshizuka, and B. Keimer, *Nature (London)* **398**, 588 (1999).
- ¹³H. He *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 1610 (2001).
- ¹⁴H. He, P. Bourges, Y. Sidis, C. Ulrich, L. P. Regnault, S. Pailhes, N. S. Berzigiarova, N. N. Kolesnikov, and B. Keimer, *Science* **295**, 1045 (2002).
- ¹⁵C. Stock, W. J. L. Buyers, R. Liang, D. Peets, Z. Tun, D. Bonn, W. H. Hardy, and R. J. Birgeneau, *Phys. Rev. B* **69**, 014502 (2004).
- ¹⁶J. M. Tranquada, C. H. Lee, K. Yamada, Y. S. Lee, L. P. Regnault, and H. W. Ronnow, *Phys. Rev. B* **69**, 174507 (2004).
- ¹⁷D. P. Arovas, A. J. Berlinsky, C. Kallin, and S. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2871 (1997).
- ¹⁸S. Katano, M. Sato, K. Yamada, T. Suzuki, and T. Fukase, *Phys. Rev. B* **62**, R14677 (2000).
- ¹⁹V. F. Mitrovic, E. E. Sigmund, M. Eschrig, H. N. Bachman, W. P. Halperin, A. P. Reyes, P. Kuhns, and W. G. Moulton, *Nature (London)* **413**, 501 (2001).
- ²⁰B. Lake *et al.*, *Science* **291**, 1759 (2001).
- ²¹B. Lake *et al.*, *Nature (London)* **415**, 299 (2002).
- ²²R. I. Miller *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 137002 (2002).
- ²³B. Khaykovich, Y. S. Lee, R. W. Erwin, S. H. Lee, S. Wakimoto, K. J. Thomas, M. A. Kastner, and R. J. Birgeneau, *Phys. Rev. B* **66**, 014528 (2002).
- ²⁴V. F. Mitrovic, E. E. Sigmund, W. P. Halperin, A. P. Reyes, P. Kuhns, and W. G. Moulton, *Phys. Rev. B* **67**, 220503 (2003).
- ²⁵H. J. Kang, P. C. Dai, J. W. Lynn, M. Matsuura, J. R. Thompson, S. C. Zhang, D. N. Argyriou, Y. Onose, and Y. Tokura, *Nature (London)* **423**, 522 (2003).
- ²⁶M. Fujita, A. Matsuda, S. Katano, and K. Yamada, *cond-mat/0311269* (unpublished).
- ²⁷S. C. Zhang, J. P. Hu, E. Arrigoni, W. Hanke, and A. Auerbach, *Phys. Rev. B* **60**, 13070 (1999).
- ²⁸E. Altman and A. Auerbach, *Phys. Rev. B* **65**, 104508 (2002).
- ²⁹S. Capponi and D. Poilblanc, *Phys. Rev. B* **66**, 180503 (2002).
- ³⁰A. Dorneich, W. Hanke, E. Arrigoni, M. Troyer, and S. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 057003 (2002).
- ³¹J. A. Riera, *Phys. Rev. B* **66**, 134523 (2002).
- ³²J. A. Riera, *Phys. Rev. B* **65**, 174526 (2002).
- ³³M. Jöstingmeier, E. Arrigoni, W. Hanke, and S.-C. Zhang, *Phys. Rev. B* **68**, 245111 (2003).
- ³⁴J. M. Tranquada, B. J. Sternlieb, J. D. Axe, Y. Nakamura, and S. Uchida, *Nature (London)* **375**, 561 (1995).
- ³⁵G. Aeppli, T. E. Mason, S. M. Hayden, H. A. Mook, and J. Kulda, *Science* **278**, 1432 (1997).
- ³⁶B. O. Wells, Y. S. Lee, M. A. Kastner, R. J. Christianson, R. J. Birgeneau, K. Yamada, Y. Endoh, and G. Shirane, *Science* **277**, 1067 (1997).
- ³⁷J. E. Hoffman, E. W. Hudson, K. M. Lang, V. Madhavan, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, *Science* **295**, 466 (2002).
- ³⁸C. Howald, H. Eisaki, N. Kaneko, M. Greven, and A. Kapitulnik, *Phys. Rev. B* **67**, 014533 (2003).

- ³⁹K. McElroy, R. W. Simmonds, J. E. Hoffman, D. H. Lee, J. Orenstein, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, *Nature* (London) **422**, 592 (2003).
- ⁴⁰Q. H. Wang and D. H. Lee, *Phys. Rev. B* **67**, 020511 (2003).
- ⁴¹K. McElroy, J. E. Hoffman, D. H. Lee, K. M. Lang, H. Eisaki, S. Uchida, and J. C. Davis, *Physica C* **388**, 225 (2003).
- ⁴²S. A. Kivelson, I. P. Bindloss, E. Fradkin, V. Oganesyan, J. M. Tranquada, A. Kapitulnik, and C. Howald, *Rev. Mod. Phys.* **75**, 1201 (2003).
- ⁴³H. D. Chen, J. P. Hu, S. Capponi, E. Arrigoni, and S. C. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 137004 (2002).
- ⁴⁴S. Kivelson, D. H. Lee, and S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **46**, 2223 (1992).
- ⁴⁵L. P. Pryadko and S. C. Zhang, *Phys. Rev. B* **54**, 4953 (1996).
- ⁴⁶C. P. Burgess and B. P. Dolan, *Phys. Rev. B* **63**, 155309 (2001).
- ⁴⁷E. Witten, hep-th/0307041 (unpublished).
- ⁴⁸H. Chen, O. Vafek, A. Yazdani, and S. Zhang, cond-mat/0402323 (unpublished).
- ⁴⁹J. Zaanen and O. Gunnarsson, *Phys. Rev. B* **40**, 7391 (1989).
- ⁵⁰H. Tsunetsugu, M. Troyer, and T. M. Rice, *Phys. Rev. B* **51**, 16456 (1995).
- ⁵¹S. A. Kivelson, E. Fradkin, and V. J. Emery, *Nature* (London) **393**, 550 (1998).
- ⁵²S. R. White and D. J. Scalapino, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 1272 (1998).
- ⁵³J. Zaanen, *Science* **286**, 251 (1999).
- ⁵⁴V. J. Emery and S. A. Kivelson, *Nature* (London) **374**, 434 (1995).
- ⁵⁵M. Vojta and S. Sachdev, *Phys. Rev. Lett.* **83**, 3916 (1999).
- ⁵⁶E. Demler, S. Sachdev, and Y. Zhang, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 067202 (2001).
- ⁵⁷Y. Zhang, E. Demler, and S. Sachdev, *Phys. Rev. B* **66**, 094501 (2002).
- ⁵⁸R. B. Laughlin, cond-mat/0209269 (unpublished).
- ⁵⁹S. Haas, E. Dagotto, A. Nazarenko, and J. Riera, *Phys. Rev. B* **51**, 5989 (1995).
- ⁶⁰Y. H. Kim and P. H. Hor, *Mod. Phys. Lett. B* **15**, 497 (2001).
- ⁶¹M. P. A. Fisher, P. B. Weichman, G. Grinstein, and D. S. Fisher, *Phys. Rev. B* **40**, 546 (1989).
- ⁶²C. Pich and E. Frey, *Phys. Rev. B* **57**, 13712 (1998).
- ⁶³F. Hebert, G. G. Batrouni, R. T. Scalettar, G. Schmid, M. Troyer, and A. Dorneich, *Phys. Rev. B* **65**, 014513 (2002).
- ⁶⁴C. J. Morningstar and M. Weinstein, *Phys. Rev. D* **54**, 4131 (1996).
- ⁶⁵S. Chakravarty, B. I. Halperin, and D. R. Nelson, *Phys. Rev. Lett.* **60**, 1057 (1988).
- ⁶⁶E. Manousakis, *Rev. Mod. Phys.* **63**, 1 (1991).
- ⁶⁷A. Vanotterlo and K. H. Wagenblast, *Phys. Rev. Lett.* **72**, 3598 (1994).
- ⁶⁸G. G. Batrouni, R. T. Scalettar, G. T. Zimanyi, and A. P. Kampf, *Phys. Rev. Lett.* **74**, 2527 (1995).
- ⁶⁹J. M. Kosterlitz, D. R. Nelson, and M. E. Fisher, *Phys. Rev. B* **13**, 412 (1976).
- ⁷⁰S. Arumugam, N. Mori, N. Takeshita, H. Takashima, T. Noda, H. Eisaki, and S. Uchida, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 247001 (2002).
- ⁷¹H. Sato, A. Tsukada, M. Naito, and A. Matsuda, *Phys. Rev. B* **62**, R799 (2000).
- ⁷²D. G. Hawthorn *et al.*, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 197004 (2003).
- ⁷³X. F. Sun, S. Komiya, J. Takeya, and Y. Ando, *Phys. Rev. Lett.* **90**, 117004 (2003).
- ⁷⁴X. Hu, *J. Low Temp. Phys.* **117**, 289 (1999).
- ⁷⁵X. Hu, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 057004 (2001).
- ⁷⁶A. W. Sandvik and J. Kurkijarvi, *Phys. Rev. B* **43**, 5950 (1991).
- ⁷⁷A. W. Sandvik, *Phys. Rev. B* **56**, 11678 (1997).
- ⁷⁸A. W. Sandvik, *Phys. Rev. B* **59**, R14157 (1999).
- ⁷⁹G. Schmid, S. Todo, M. Troyer, and A. Dorneich, *Phys. Rev. Lett.* **88**, 167208 (2002).
- ⁸⁰E. L. Pollock and D. M. Ceperley, *Phys. Rev. B* **36**, 8343 (1987).
- ⁸¹M. Troyer (private communication).
- ⁸²Y. J. Uemura, *Solid State Commun.* **120**, 347 (2001).
- ⁸³S. Uchida, *Solid State Commun.* **126**, 57 (2003).
- ⁸⁴A. R. Moodenbaugh, Y. W. Xu, M. Suenaga, T. J. Folkerts, and R. N. Shelton, *Phys. Rev. B* **38**, 4596 (1988).
- ⁸⁵K. Kudo, M. Yamazaki, T. Kawamata, T. Adachi, T. Noji, Y. Koike, T. Nishizaki, and N. Kobayashi, cond-mat/0311402 (unpublished).
- ⁸⁶F. Zhou, P. H. Hor, X. L. Dong, W. X. Ti, J. W. Xiong, and Z. X. Zhao, cond-mat/0309034 (unpublished).
- ⁸⁷M. Fujita, K. Yamada, H. Hiraka, P. M. Gehring, S. H. Lee, S. Wakimoto, and G. Shirane, *Phys. Rev. B* **65**, 064505 (2002).
- ⁸⁸M. Matsuda, M. Fujita, K. Yamada, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, H. Hiraka, Y. Endoh, S. Wakimoto, and G. Shirane, *Phys. Rev. B* **62**, 9148 (2000).
- ⁸⁹J. H. Brewer *et al.*, *Physica C* **162**, 33 (1989).
- ⁹⁰C. Niedermayer, C. Bernhard, T. Blasius, A. Golnik, A. Moodenbaugh, and J. I. Budnick, *Phys. Rev. Lett.* **80**, 3843 (1998).
- ⁹¹J. E. Sonier *et al.*, *Science* **292**, 1692 (2001).
- ⁹²Y. Sidis, C. Ulrich, P. Bourges, C. Bernhard, C. Niedermayer, L. P. Regnault, N. H. Andersen, and B. Keimer, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 4100 (2001).
- ⁹³H. A. Mook, P. C. Dai, S. M. Hayden, A. Hiess, J. W. Lynn, S. H. Lee, and F. Dogan, *Phys. Rev. B* **66**, 144513 (2002).
- ⁹⁴R. I. Miller, R. F. Kiefl, J. H. Brewer, J. E. Sonier, D. A. Bonn, W. H. Hardy, R. Liang, J. M. Mnard, and P. Poon (unpublished).
- ⁹⁵A. Himeda and M. Ogata, *Phys. Rev. B* **60**, R9935 (1999).

Article [21]

S. Capponi, A. Läuchli et M. Mambrini

Numerical contractor renormalization method for quantum spin models

Numerical contractor renormalization method for quantum spin models

Sylvain Capponi,* Andreas Läuchli, and Matthieu Mambrini

Laboratoire de Physique Théorique, CNRS UMR 5152, Université Paul Sabatier, F-31062 Toulouse, France

(Received 4 May 2004; published 29 September 2004)

We demonstrate the utility of the numerical contractor renormalization (CORE) method for quantum spin systems by studying one- and two-dimensional model cases. Our approach consists of two steps: (i) building an effective Hamiltonian with longer ranged interactions up to a certain cutoff using the CORE algorithm and (ii) solving this new model numerically on finite clusters by exact diagonalization and performing finite-size extrapolations to obtain results in the thermodynamic limit. This approach, giving complementary information to analytical treatments of the CORE Hamiltonian, can be used as a semiquantitative numerical method. For ladder-type geometries, we explicitly check the accuracy of the effective models by increasing the range of the effective interactions until reaching convergence. Our results in the perturbative regime and also away from it are in good agreement with previously established results. In two dimensions we consider the plaquette lattice and the *kagomé* lattice as nontrivial test cases for the numerical CORE method. As it becomes more difficult to extend the range of the effective interactions in two dimensions, we propose diagnostic tools (such as the density matrix of the local building block) to ascertain the validity of the basis truncation. On the plaquette lattice we have an excellent description of the system in both the disordered and the ordered phases, thereby showing that the CORE method is able to resolve quantum phase transitions. On the *kagomé* lattice we find that the previously proposed twofold degenerate $S=1/2$ basis can account for a large number of phenomena of the spin $1/2$ *kagomé* system. For spin $3/2$, however, this basis does not seem to be sufficient. In general we are able to simulate system sizes which correspond to an 8×8 lattice for the plaquette lattice or a 48-site *kagomé* lattice, which are beyond the possibilities of a standard exact diagonalization approach.

DOI: 10.1103/PhysRevB.70.104424

PACS number(s): 75.10.Jm, 75.40.Mg, 75.40.Cx

I. INTRODUCTION

Low-dimensional quantum magnets are at the heart of current interest in strongly correlated electron systems. These systems are driven by strong correlations and large quantum fluctuations—especially when frustration comes into play—and can exhibit various unconventional phases and quantum phase transitions.

One of the major difficulties in trying to understand these systems is that strong correlations often generate highly nontrivial low-energy physics. Not only is the ground state of such models generally not known but also the low-energy degrees of freedom cannot be easily identified. Moreover, among the techniques available for investigating these systems, not many have the required level of generality to provide a systematic way to derive low-energy effective Hamiltonians.

Recently the contractor renormalization (CORE) method was introduced by Morningstar and Weinstein.¹ The key idea of the approach is to derive an effective Hamiltonian acting on a truncated local basis set, so as to exactly reproduce the low energy spectrum. In principle the method is exact in the low-energy subspace, but only at the expense of having *a priori* long range interactions. The method becomes most useful when one can significantly truncate a local basis set and still restrict oneself to short range effective interactions. This, however, depends on the system under consideration and has to be checked systematically. Since its inception the CORE method has been mostly used as an analytical method to study strongly correlated systems.^{2–4} Some first steps in using the CORE approach and related ideas in a numerical framework have also been undertaken.^{5–8}

The purpose of the present paper is to explore the numerical CORE method as a complementary approach to more analytical CORE procedures, and to systematically discuss its performance in a variety of low-dimensional quantum magnets, both frustrated and unfrustrated. The approach consists basically of numerical exact diagonalizations of the effective Hamiltonians. In this way a large number of interesting quantities are accessible, which otherwise would be hard to obtain. Furthermore, we discuss some criteria and tools useful to estimate the quality of the CORE approach.

The outline of the paper is as follows: In Sec. II we will review the CORE algorithm in general and discuss some particularities in a numerical CORE approach, both at the level of the calculation of the effective Hamiltonians and the subsequent simulations.

In Sec. III we move to the first applications on one-dimensional (1D) systems: the well-known two-leg spin ladder and the three-leg spin ladder with periodic boundary conditions in the transverse direction (three-leg torus). Both systems exhibit, generically, a finite spin gap and a finite magnetic correlation length. We will show that the numerical CORE method is able to get rather accurate estimates of the ground state energy and the spin gap by successively increasing the range of the effective interactions.

In Sec. IV we discuss two-dimensional (2D) systems. Because in 2D a long-ranged cluster expansion of the interactions is difficult to achieve, we will discuss some techniques to analyze the quality of the basis truncation. We illustrate these issues on two model systems, the plaquette lattice and the *kagomé* lattice. The plaquette lattice is of particular interest as it exhibits a quantum phase transition from a disordered plaquette state to a long-range ordered Néel antiferro-

magnet, which cannot be reached by a perturbative approach. We show that a range-two effective model captures many aspects of the physics over the whole range of parameters. The *kagomé* lattice on the other hand is a highly frustrated lattice built of corner-sharing triangles. For spin 1/2 it has been studied both numerically and analytically and it is one of the best-known candidate systems for a spin liquid ground state. A very peculiar property is the exponentially large number of low-energy singlets in the magnetic gap. We show that already a basic range two CORE approach is able to devise an effective model which exhibits the same exotic low-energy physics. For higher half-integer spin, i.e., $S = 3/2$, this simple effective Hamiltonian breaks down; we analyze how to detect this, and discuss some ways to improve the results.

In Sec. V we conclude and give some perspectives. Finally three appendices are devoted to (i) the density matrix of local building block, (ii) the calculation of observables by energy considerations, and (iii) some general remarks on effective Hamiltonians coupling antiferromagnetic half-integer spin triangles.

II. CORE ALGORITHM

The contractor renormalization (CORE) method has been proposed by Morningstar and Weinstein in the context of general Hamiltonian lattice models.¹ Later, Weinstein applied this method with success to various spin chain models.² For a review of the method we refer the reader to these original papers^{1,2} and also to a pedagogical article by Altman and Auerbach³ which includes many details. Here, we summarize the basic steps before discussing some technical aspects which are relevant in our numerical approach.

CORE Algorithm:

- (1) Choose a small cluster (e.g., rung, plaquette, triangle, etc.) and diagonalize it. Keep M suitably chosen low-energy states.
- (2) Diagonalize the full Hamiltonian H on a connected graph consisting of N_c clusters and obtain its low-energy states $|n\rangle$ with energies ε_n .
- (3) The eigenstates $|n\rangle$ are projected on the tensor product space of the states kept and Gram-Schmidt orthonormalized in order to get a basis $|\psi_n\rangle$ of dimension M^{N_c} . As it may happen that some of the eigenstates have zero or very small projection, or vanish after the orthogonalization it might be necessary to explicitly compute more than just the lowest M^{N_c} eigenstates $|n\rangle$.
- (4) Next, the effective Hamiltonian for this graph is built as

$$h_{N_c} = \sum_{n=1}^{M^{N_c}} \varepsilon_n |\psi_n\rangle \langle \psi_n|. \quad (1)$$

- (5) The connected range- N_c interactions $h_{N_c}^{\text{conn}}$ are determined by subtracting the contributions of all connected sub-clusters.
- (6) Finally, the effective Hamiltonian is given by a cluster expansion as

$$H^{\text{CORE}} = \sum_i h_i + \sum_{\langle ij \rangle} h_{ij} + \sum_{\langle ijk \rangle} h_{ijk} + \dots \quad (2)$$

This effective Hamiltonian *exactly* reproduces the low-energy physics provided the expansion goes to infinity. However, if the interactions are short-range in the starting Hamiltonian, we can expect that these operators will become smaller and smaller, at least in certain situations. In the following, we will truncate at range r and verify the convergence in several cases. This convergence naturally depends on the number M of low-lying states that are kept on a basic block. In order to describe quantitatively how “good” these states are, we introduce the density matrix in Sec. IV.

When the number of blocks increases, a full diagonalization is not always easy and one is tempted to use a Lanczos algorithm in order to compute the low-lying eigenstates. In that case, one has to be very careful to resolve the correct degeneracies, which is known to be a difficult task in the Lanczos framework. In practice such degeneracies arise when the cluster to be diagonalized is highly symmetric. If the degeneracies are ignored, often a wrong effective Hamiltonian with broken $SU(2)$ symmetry is obtained. As a consequence we recommend to use specialized LAPACK routines whenever possible.

In the present work we investigate mainly $SU(2)$ invariant Heisenberg models described by the usual Hamiltonian

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (3)$$

where the exchange constants J_{ij} will be limited to short-range distances in the following. As a consequence of the $SU(2)$ symmetry, the total spin of all states is a good quantum number. This also has some effects when calculating the effective Hamiltonian. It is possible to have situations where a low energy state has a nonzero overlap with the tensor product basis, but gets eliminated by the orthogonalization procedure because one has already exhausted all the states in one particular total spin sector by projecting states with lower energy.

Once an effective Hamiltonian has been obtained, it is still a formidable task to determine its properties. Within the CORE method different routes have been taken in the past. In their pioneering papers Morningstar and Weinstein have chosen to iteratively apply the CORE method on the preceding effective Hamiltonian in order to flow to a fixed point and then to analyze the fixed point. A different approach has been taken in Refs. 3 and 4: There the effective Hamiltonian after one or two iterations has been analyzed with mean-field like methods and interesting results have been obtained. Yet another approach—and the one we will pursue in this paper—consists of a single CORE step to obtain the effective Hamiltonian, followed by a numerical simulation thereof. This approach has been explored in a few previous studies.^{5–7} The numerical technique we employ is the exact diagonalization (ED) method based on the Lanczos algorithm. This technique has easy access to many observables and profits from the symmetries and conservation laws in the problem, i.e., total momentum and the total S^z component. Using a parallelized program we can treat matrix problems

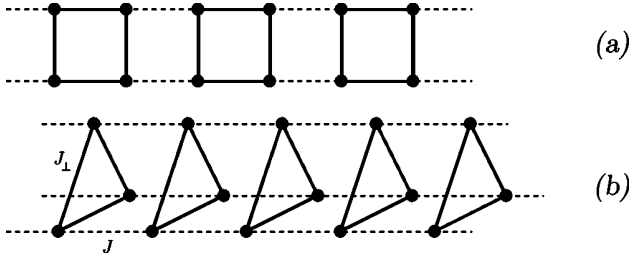


FIG. 1. (a) 2-leg ladder. Basic block is a 2×2 plaquette. (b) 3-leg torus with rung coupling $J_{\perp}$ and inter-rung coupling $J_{\parallel}$.

of dimensions up to ~ 50 million, however the matrices contain significantly more matrix elements than the ones of the microscopic Hamiltonian we start with.

III. LADDER GEOMETRIES

In this section, we describe results obtained on ladder systems with 2 and 3 legs, respectively.

We want to build an effective model that is valid from a perturbative regime to the isotropic case $J_{ij}=J=1$. We have chosen periodic boundary conditions (PBC) along the chains in order to improve the convergence to the thermodynamic limit.

A. Two-leg Heisenberg ladder

The 2-leg Heisenberg ladder has been intensively studied and is known to exhibit a spin gap for all couplings.^{9,10}

In order to apply our algorithm, we select a 2×2 plaquette as the basic unit [see Fig. 1(a)]. The truncated subspace is formed by the singlet ground-state (GS) and the lowest triplet state.

Using the same CORE approach, Piekarewicz and Shepard have shown that quantitative results can be obtained within this restricted subspace.⁵ Moreover, dynamical quantities can also be computed in this framework.⁶

Since we are dealing with a simple system, we can compute the effective models including rather long-range interactions (typically, to obtain range-4 interactions, we need to compute the low-lying states on a 2×8 lattice with open boundary conditions which is feasible, although it requires a large numerical effort). It is desirable to compute long-range effective interactions since we wish to check how the truncation affect the physical results and how the convergence is reached.

In a second step, for each of these effective models, we perform a standard exact diagonalization (ED) using the Lanczos algorithm on finite clusters up to $N_c=12$ clusters ($N=48$ sites for the original model). The GS energy and the spin gap are shown in Fig. 2. The use of PBC allows us to reduce considerably finite-size effects since we have an exponential convergence as a function of inverse length. CORE results are in perfect agreement with known results and the successive approximations converge uniformly to the exact results. For instance, the relative errors of range-4 results are 10^{-4} for the GS energy and 10^{-2} for the spin gap. This fast convergence is probably due to the rather short correlation

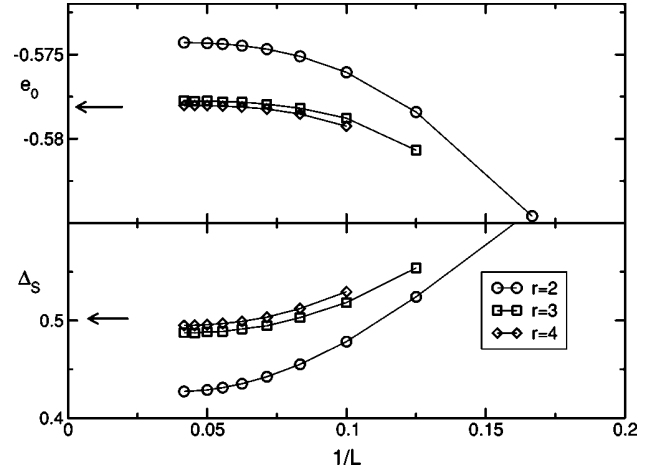


FIG. 2. Ground-state energy per site and spin gap of a $2 \times L$ Heisenberg ladder using CORE method with various range r using PBC. For comparison, we plot the best known extrapolations (Ref. 10) with arrows.

length in an isotropic ladder (typically 3–4 lattice spacings¹¹).

B. 3-leg Heisenberg torus

As a second example of ladder geometry, we have studied a 3-leg Heisenberg ladder with PBC along the rungs. This property causes geometric frustration which leads to a finite spin-gap and finite dimerization for all interchain coupling $J_{\perp}$,^{12,13} contrary to the open boundary condition case along the rungs, which is in the universality class of the Heisenberg chain.

1. Perturbation theory

The simple perturbation theory is valid when the coupling along the rung ($J_{\perp}$) is much larger than between adjacent rungs ($J_{\parallel}$). In the following, we fix $J_{\perp}=1$ as the energy unit and denote $\alpha=J_{\parallel}/J_{\perp}$.

On a single rung, the low-energy states are the following degenerate states, defined as

$$\begin{aligned}
 |\uparrow L\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + \omega|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + \omega^2|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle), \\
 |\downarrow L\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + \omega|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + \omega^2|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle), \\
 |\uparrow R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + \omega^2|\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + \omega|\downarrow\uparrow\uparrow\rangle), \\
 |\downarrow R\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}}(|\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + \omega^2|\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + \omega|\uparrow\downarrow\downarrow\rangle),
 \end{aligned} \tag{4}$$

where $\omega=\exp(i2\pi/3)$. The indices L and R represent the momentum of the 3-site rung $k_y=2\pi/3$ and $-2\pi/3$, respectively. They define two chiral states which can be viewed as

pseudo-spin states with operators τ on each rung defined by

$$\tau^+|\cdot R\rangle = 0, \quad \tau^+|\cdot L\rangle = |\cdot R\rangle,$$

$$\tau^-|\cdot R\rangle = |\cdot L\rangle, \quad \tau^-|\cdot L\rangle = 0,$$

$$\tau^z|\cdot R\rangle = \frac{1}{2}|\cdot R\rangle, \quad \tau^z|\cdot L\rangle = -\frac{1}{2}|\cdot L\rangle.$$

These states have in addition a physical spin 1/2 described by σ .

Applying the usual perturbation theory for the inter-rung coupling, one finds^{12,14}

$$H_{\text{pert}} = -\frac{N}{4} + \frac{\alpha}{3} \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \cdot \sigma_j (1 + 4(\tau_i^+ \tau_j^- + \tau_i^- \tau_j^+)), \quad (5)$$

where N is the total number of sites.

This effective Hamiltonian has been studied with DMRG and ED techniques and it exhibits a finite spin gap $\Delta_S = 0.28 J_{\parallel}$ and a dimerization of the ground state.^{12,13}

Here we want to use the CORE method to extend the perturbative Hamiltonian with an effective Hamiltonian in the same basis for *any* coupling.

2. CORE approach

As a basic unit, we choose a single 3-site rung. The subspace consists of the same low-energy states as for the perturbative result [Eq. (4)] which are fourfold degenerate (2 degenerate $S=1/2$ states). We can apply our procedure to compute the effective interactions at various ranges, in order to be able to test the convergence of the method.

First, we write down the range-2 contribution under the most general form which preserves both SU(2) (spin) symmetry and simultaneous translation or reflection along all the rungs:

$$H_{r=2} = Na_0 + \sum_{\langle ij \rangle} (b_0 \tau_i^z \tau_j^z + c_0 (\tau_i^+ \tau_j^- + \tau_i^- \tau_j^+)) + \sigma_i \cdot \sigma_j (a_1 + b_1 \tau_i^z \tau_j^z + c_1 (\tau_i^+ \tau_j^- + \tau_i^- \tau_j^+)). \quad (6)$$

In the perturbative regime given in (5), the only nonvanishing coefficients are given by: $a_0 = -1/4$, $a_1 = \alpha/3$, and $c_1 = 4\alpha/3$.

The parameters of the effective Hamiltonian can be obtained and their dependence as a function of the inter-rung coupling α is shown in Fig. 3. We immediately see some deviations from the perturbative result since coefficients in panel (i) and (ii) are nonzero and become as important as the other terms in the isotropic limit. Surprisingly, we observe that c_1 follows its perturbative expression on the whole range of couplings whereas a_1 deviates strongly as one goes to the isotropic case but does not change sign.

In order to study how the physical properties evolve as a function of $J_{\parallel}/J_{\perp}$, we have computed the GS energy and the spin gap both for a small-coupling case and in the isotropic limit, up to range 5 in the effective interactions.

3. Small inter-rung coupling

We have chosen $J_{\parallel}/J_{\perp} = 0.25$ which corresponds to a case where perturbation theory should still apply. Using ED, we

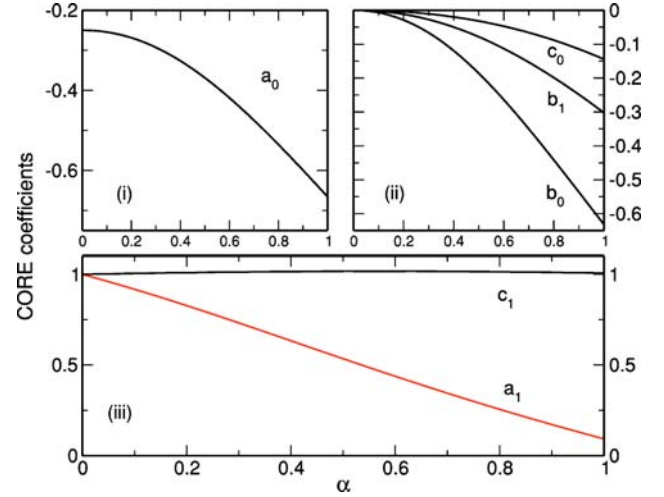


FIG. 3. (Color online) CORE coefficients [see Eq. (6)] for two coupled triangles as a function of the inter-rung coupling $\alpha = J_{\parallel}/J_{\perp}$. The parameters were computed using range-2 CORE. The coefficients in panel (iii) have been divided by their values in the perturbative limit. They therefore all start at 1.

can solve the effective models on finite lattices and in Fig. 4, we plot the scaling of the GS energy and of the spin gap as a function of the system length L . Even for this rather small value of $J_{\parallel}/J_{\perp}$, our effective Hamiltonian can be considered as an improvement over the first order perturbation theory. Moreover, we observe a fast convergence with the range of interactions and already the range-3 approximation is almost indistinguishable from ED results.

The estimated gap is $0.16J_{\parallel}$ and correspond to a lower bound since ultimately the gap should converge exponentially to its thermodynamic value. Our value is consistent with the DMRG one¹² ($\sim 0.2J_{\parallel}$), and is already reduced compared to the strong coupling result¹² ($\Delta_S = 0.28J_{\parallel}$).

4. Isotropic case

We apply the same procedure in the isotropic limit. As expected, the convergence with the range of interactions is much slower than in the perturbative regime. We show in Fig. 5 that indeed the ground state energy converges slowly and oscillates around the correct value. These oscillations come from the fact that, in order to compute range- r interactions, one has to study alternatively clusters with an even or odd number of sites. Since this system has a tendency to form dimers on nearest-neighbor bonds, it is better to compute clusters with an even number of sites.

For the spin gap, we find accurate results even with limited range interactions. In particular, we find that frustration induces a finite spin gap $\approx 0.11 J_{\parallel}$ in that system. As in the previous case, this is a lower bound which is in perfect agreement with DMRG study.¹²

Moreover, we observe that the singlet gap vanishes in the thermodynamic limit as $1/L^2$ (data not shown), similar to a related study.¹³ This singlet state at momentum π along the chains corresponds to the state built in the generalized Lieb-Schultz-Mattis argument.¹⁵ Here, the physical picture is a

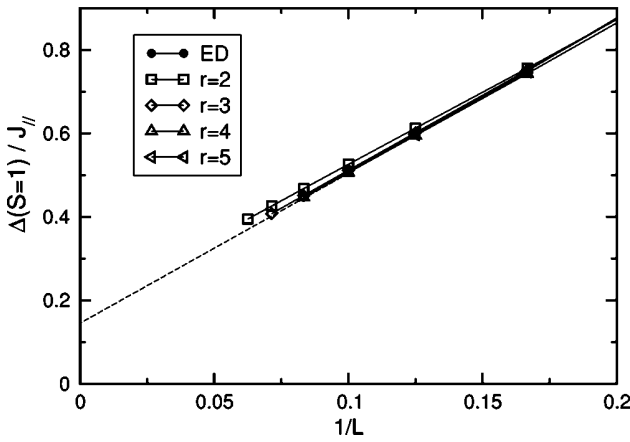
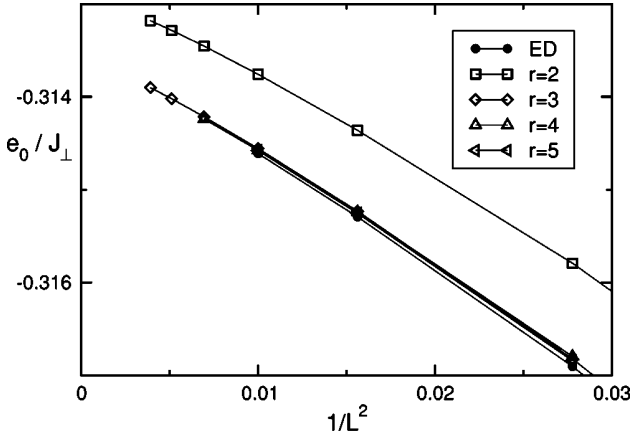


FIG. 4. GS energy per site and spin gap for a $3 \times L$ Heisenberg torus with $J_{\parallel}/J_{\perp}=0.25$. Results are obtained using the CORE method at various range r .

twofold degenerate GS due to the appearance of spontaneous dimerization.

5. Spinon dispersion relation for the spin tube

One of the advantages of this method is to be able to get information on some quantum numbers (number of particles, magnetization, momentum,...). For example, the effective Hamiltonian H_{eff} still commutes with translations along the legs, with the total S_z^{tot} and τ_z so that we can work in a given momentum sector (k_x, k_y) with a fixed magnetization S_z^{tot} . By computing the energy in each sector, we can compute the dispersion relation.

In order to try to identify if the fundamental excitation is a spinon, we compute the energy difference between the lowest $S=1/2$ state when the length is odd ($L=2p+1$) and the extrapolated GS energy obtained from the data on systems with even length $2p$ and $2p+2$. The data are taken from CORE with range-4 approximation. In Fig. 6, we plot this dispersion as a function of the longitudinal momentum, relative to the GS with $L=2p$.

We observe a dispersion compatible with a spinonlike dispersion, which is massive with a gap at $\pi/2 \approx 0.05 \approx \Delta_S/2$. This result is consistent with a picture in which the triplet excitation Δ_S is made of two elementary spinons. With our

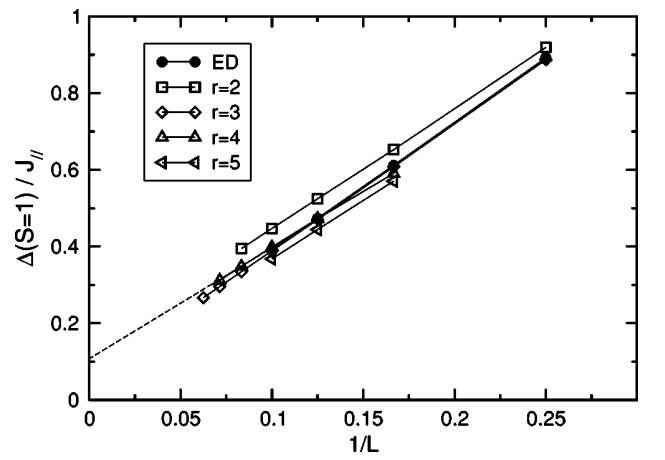
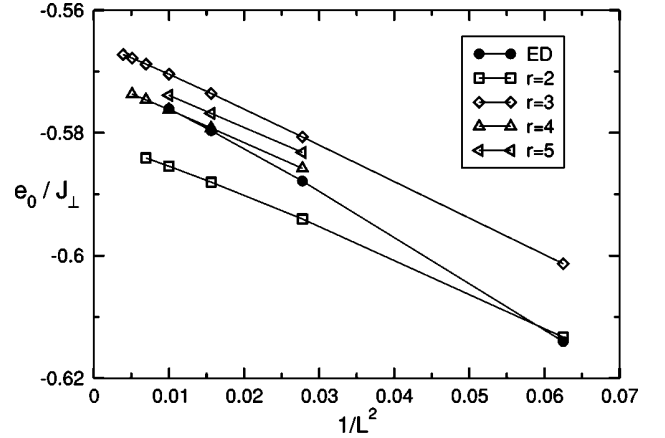


FIG. 5. Same as Fig. 4 for the isotropic case $J_{\parallel}=J_{\perp}=1$.

precision, it seems that the spinons are not bound but we cannot exclude a small binding energy.

We have a good overall agreement with results obtained in the strong interchain coupling regime.¹³

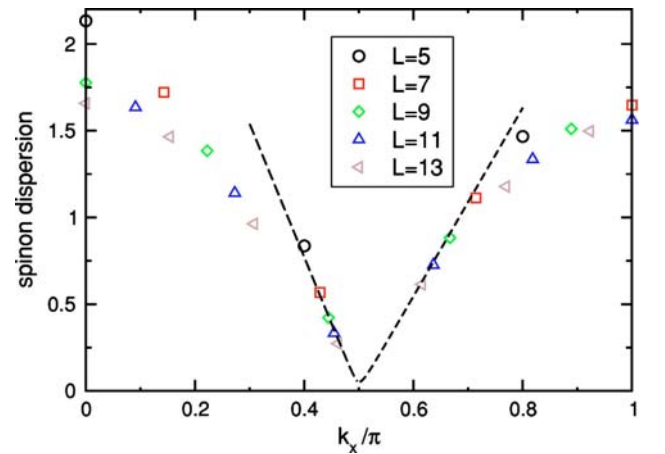


FIG. 6. (Color online) Spinon dispersion relation (see text) as a function of longitudinal momentum (in units of π). We only plot the lowest branch corresponding to $k_y = \pm 2\pi/3$. The odd lengths run from 5 to 13. The lines are guide to the eyes for an extrapolation on both sides of $\pi/2$.

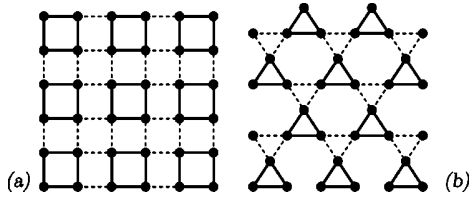


FIG. 7. (a) The plaquette lattice. Full lines denote the plaquette bonds J , dashed lines denote the inter-plaquette coupling J' . (b) The trimerized *kagomé* lattice. Full lines denote the up-triangle J bonds, dashed lines denote the down-triangle coupling J' . The standard *kagomé* lattice is recovered for $J'/J=1$.

Therefore, with CORE method, we have both the advantage of working in the reduced subspace and not being limited to the perturbative regime. Amazingly, we have observed that for a very small effort (solving a small cluster), the effective Hamiltonian gives much better results (often less than 1% on GS energies) than perturbation theory. It also gives an easier framework to systematically improve the accuracy by including longer range interactions.

For these models, the good convergence of CORE results may be due to the fact that the GS in the isotropic limit is adiabatically connected to the perturbative one. In the following part we will therefore study 2D models where a quantum phase transition occurs as one goes from the perturbative to the isotropic regime.

IV. TWO-DIMENSIONAL SPIN MODELS

In this section we would like to discuss the application of the numerical CORE method to two dimensional quantum spin systems. We will present spectra and observables and also discuss a novel diagnostic tool—the density matrix of local objects—in order to justify the truncation of the local state set.

One major problem in two dimension is the more elaborate cluster expansion appearing in the CORE procedure. Especially our approach based on numerical diagonalization of the resulting CORE Hamiltonian faces problems once the CORE interaction clusters wrap around the boundary of the finite size clusters. We therefore try to keep the range of the interactions minimal, but we still demand a reasonable description of low energy properties of the system. We will therefore discuss some ways to detect under what circumstances the low-range approximations fail and why.

As a first example we discuss the plaquette lattice [Fig. 7(a)], which exhibits a quantum phase transition from a gapped plaquette-singlet state with only short ranged order to a long range ordered antiferromagnetic state as a function of the interplaquette coupling.^{16–19} We will show that the CORE method works particularly well for this model by presenting results for the excitation spectra and the order parameter. It is also a nice example of an application where the CORE method is able to correctly describe a quantum phase transition, thus going beyond an augmented perturbation scheme.

The second test case is the highly frustrated *kagomé* lattice [Fig. 7(b)] with noninteger spin, which has been intensively studied for $S=1/2$ during the last few years.^{20–24} Its

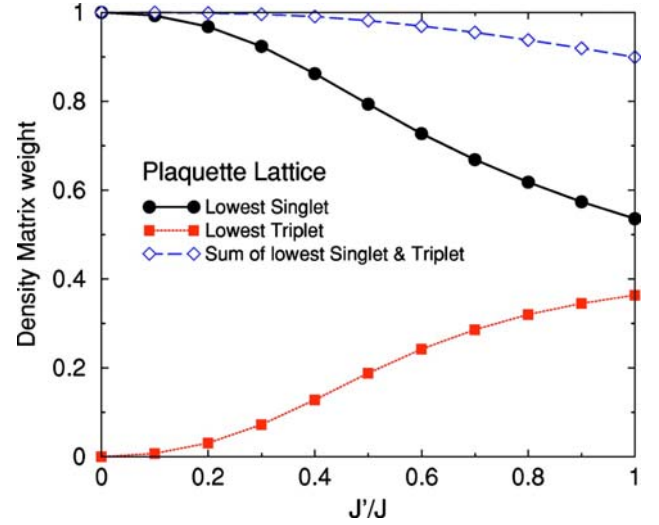


FIG. 8. (Color online) Density matrix weights of the two most important states on a strong (J -bonds) plaquette as a function of J'/J . These results were obtained by ED with the original Hamiltonian on a 4×4 cluster.

properties are still not entirely understood, but some of the features are well accepted by now: There is no simple local order parameter detectable, neither spin order nor valence bond crystal order. There is probably a small spin gap present and most strikingly an exponentially growing number of low energy singlets emerges below the spin gap. We will discuss a convenient CORE basis truncation which has emerged from a perturbative point of view^{23,25,26} and consider an extension of this basis for higher noninteger spin.

A. Plaquette lattice

The CORE approach starts by choosing a suitable decomposition of the lattice and a subsequent local basis truncation. In the plaquette lattice the natural decomposition is directly given by the uncoupled plaquettes. Among the 16 states of an isolated plaquette we retain the lowest singlet [$K=(0,0)$] and the lowest triplet [$K=(\pi,\pi)$]. The standard argument for keeping these states relies on the fact that they are the lowest energy states in the spectrum of an isolated plaquette.

As discussed in Appendix A, the density matrix of a plaquette in the fully interacting system gives clear indications whether the basis is suitably chosen. In Fig. 8 we show the evolution of the density matrix weights of the lowest singlet and triplet as a function of the interplaquette coupling. Even though the individual weights change significantly, the sum of both contributions remains above 90% for all $J'/J \leq 1$. We therefore consider this a suitable choice for a successful CORE application.

A next control step consists in calculating the spectrum of two coupled plaquettes, and one monitors which states are targeted by the CORE algorithm. We show this spectrum in Fig. 9 along with the targeted states. We realize that the 16 states of our tensor product basis cover almost all the low energy levels of the coupled system. There are only two triplets just below the $S=2$ multiplet which are missed.

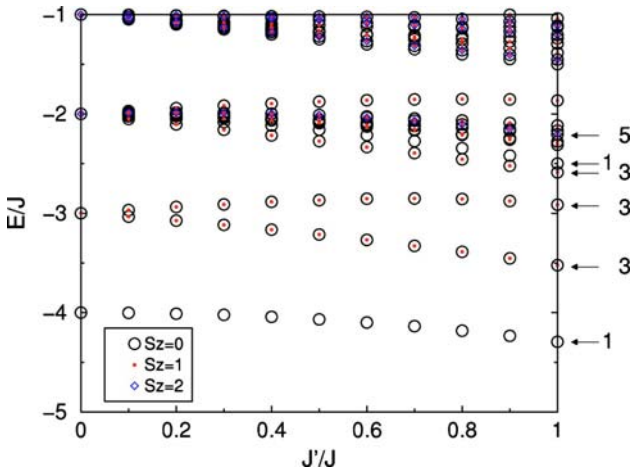


FIG. 9. (Color online) Low energy spectrum of two coupled plaquettes. The states targeted by the CORE algorithm are indicated by arrows together with their SU(2) degeneracy.

In a first application we calculate the spin gap for different system sizes and couplings J'/J . The results shown in Fig. 10 indicate a reduction of the spin gap for increasing J'/J . We used a simple finite size extrapolation in $1/N$ in order to assess the closing of the gap. The extrapolation levels off to a small value for $J'/J \geq 0.6$. The appearance of a small gap in this known gapless region is a feature already present in ED calculation of the original model,¹⁹ and therefore not an artefact of our method. It is rather obvious that the triplet gap is not a very accurate tool to detect the quantum phase transition within our numerical approach. We will see later that order parameter susceptibilities are much more accurate.

It is well known that the square lattice ($J'/J=1$) is Néel ordered. One possibility to detect this order in ED is to cal-

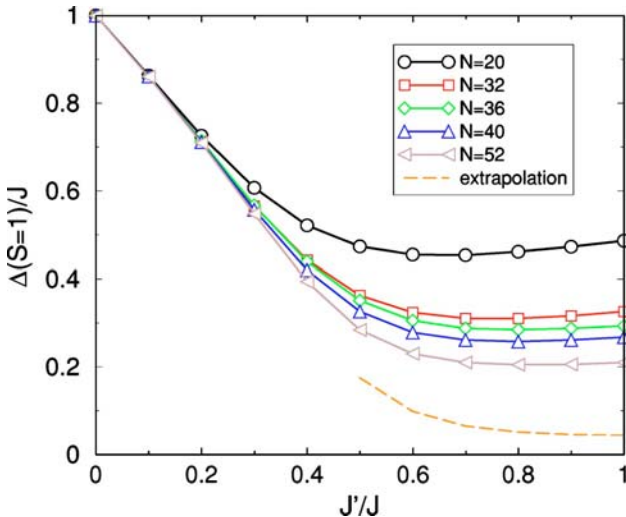


FIG. 10. (Color online) Triplet gap for effective system sizes between 20 and 52 sites, as a function of the interplaquette coupling J'/J . For $J'/J \geq 0.5$ a simple extrapolation in $1/N$ is also displayed. These results compare very well with ED results on the original model (Ref. 19).

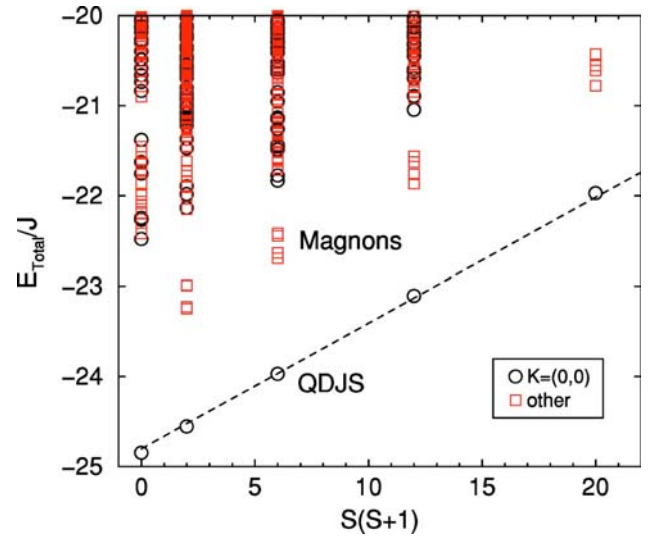


FIG. 11. (Color online) Tower of states obtained with a range-2 CORE Hamiltonian on an effective $N=36$ square lattice (9-site CORE cluster) in different reduced momentum sectors. The tower of states is clearly separated from the decimated magnons and the rest of the spectrum.

culate the so-called *tower of excitation*, i.e., the complete spectrum as a function of $S(S+1)$, S being the total spin of an energy level. In the case of standard collinear Néel order a prominent feature is an alignment of the lowest level for each S on a straight line, forming a so-called “quasidegenerate joint states” (QDJS) ensemble,²⁷ which is clearly separated from the rest of the spectrum on a finite size sample. We have calculated the tower of states within the CORE approach (Fig. 11). Due to the truncated Hilbert space we cannot expect to recover the entire spectrum. Surprisingly however the CORE tower of states successfully reproduces the general features observed in ED calculations of the same model:²⁸ (a) a set of QDJS with the correct degeneracy and quantum numbers (in the folded Brillouin zone); (b) a reduced number of magnon states at intermediate energies, both set of states rather well separated from the high energy part of the spectrum. While the QDJS seem not to be affected by the CORE decimation procedure, clearly some of the magnon modes get eliminated by the basis truncation.

In order to locate the quantum phase transition from the paramagnetic, gapped regime to the Néel ordered phase, a simple way to determine the onset of long range order is desirable. We chose to directly couple the order parameter to the Hamiltonian and to calculate generalized susceptibilities by deriving the energy with respect to the external coupling. This procedure is detailed in Appendix B. Its simplicity relies on the fact that only eigenvalue runs are necessary. Similar approaches have been used so far in ED and QMC calculations.^{29,30}

Our results in Fig. 12 show the evolution of the staggered moment per site in a rescaled external staggered field for different interplaquette couplings J' and different system sizes (up to 8×8 lattices). We note the appearance of an approximate crossing of the curves for different system sizes, once Néel LRO sets in. This approximate crossing relies on

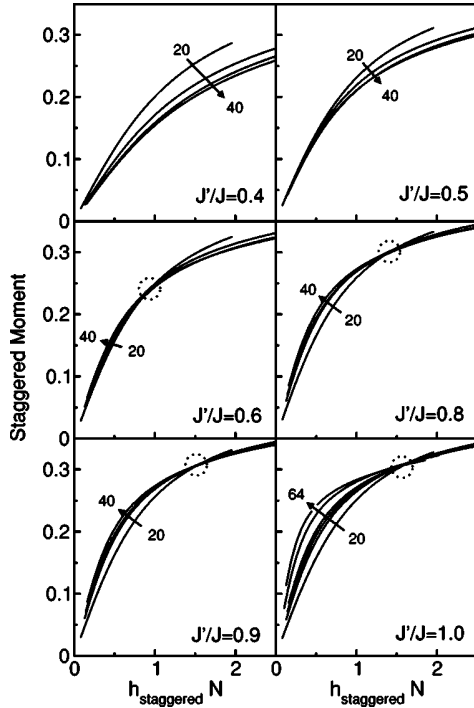


FIG. 12. Staggered moment per site as a function of the rescaled applied staggered field for the plaquette lattice and different values of J'/J . Circles denote the approximate crossing point of curves for different system sizes. We take the existence of this crossing as a phenomenological indication for the presence of Néel LRO. In this way the phase transition is detected between $0.5 < J'_c/J < 0.6$, consistent with previous estimates. The arrows indicate curves for increasing system sizes: 20, 32, 36, 40 and also 52, 64 for the isotropic case.

the fact that the slope of $m_L(hN)$ diverges at least linearly in N in the ordered phase.³⁰ We then consider this crossing feature as an indication of the phase transition and obtain a value of the critical point $J'_c/J = 0.55 \pm 0.05$. This estimate is in good agreement with previous studies using various methods.^{17–19} We have checked the present approach by performing the same steps on the two leg ladder discussed in Sec. III A and there was no long range magnetic order present, as expected.

B. Kagomé systems with half-integer spins

In the past 10 years many efforts have been devoted to understand the low energy physics of the *kagomé* antiferromagnet (KAF) for spins $1/2$.^{20–24} At the theoretical level, the main motivation comes from the fact that this model is the only known example of a two-dimensional Heisenberg spin liquid. Even though many questions remain open, some very exciting low-energy properties of this system have emerged. Let us summarize them briefly: (i) the GS is a singlet ($S=0$) and has no magnetic order. Moreover no kind of more exotic ordering (dimer-dimer, chiral order, etc.) have been detected using unbiased methods; (ii) the first magnetic excitation is a triplet ($S=1$) separated from the GS by a rather small gap of order $J/20$; (iii) more surprisingly the spectrum

appears as a continuum of states in all spin sectors. In particular the spin gap is filled with an exponential number of singlet excitations: $\mathcal{N}_{\text{singlets}} \sim 1.15^N$; (iv) the singlet sector of the KAF can be very well reproduced by a short-range resonating valence bond approach involving only nearest-neighbor dimers.

From this point of view, the spin $1/2$ KAF with its highly unconventional low-energy physics appears to be a very sharp test of the CORE method. The case of higher half-integer spins $S=3/2, 5/2, \dots$ KAF is also of particular interest, since it is covered by approximative experimental realizations.³¹ Even if some properties of these experimental systems are reminiscent of the spin $1/2$ KAF theoretical support is still lacking for higher spins due to the increased complexity of these models.

In this section we discuss in detail the range-two CORE Hamiltonians for spin $1/2$ and $3/2$ KAF considered as a set of elementary up-triangles with couplings J , coupled by down-triangles with couplings J' [see Fig. 7(b)]. The coupling ratio will be denoted by $\alpha = J'/J$. Before going any further into the derivation of the CORE effective Hamiltonian let us start with the conventional degenerate perturbation theory results. Note that in the perturbative regime these two approaches yield the same effective Hamiltonian.

As described in Appendix C, the most general two-triangle effective Hamiltonian involving only the two spin $1/2$ degrees of freedom on each triangle can be written in the following form:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & Na_0(\alpha) + \sum_{\langle i,j \rangle} (b_0(\alpha) \boldsymbol{\tau}_i \cdot \mathbf{e}_{ij} \boldsymbol{\tau}_j \cdot \mathbf{e}_{ij} + a_1(\alpha) \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j \\ & + b_1(\alpha) \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j (\boldsymbol{\tau}_i \cdot \mathbf{e}_{ij})(\boldsymbol{\tau}_j \cdot \mathbf{e}_{ij}) \\ & + c_1(\alpha) \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j (\boldsymbol{\tau}_i \cdot \mathbf{e}_{ij} + \boldsymbol{\tau}_j \cdot \mathbf{e}_{ij})). \end{aligned} \quad (7)$$

In the spirit of Mila's approach²³ for spin $1/2$ the first order perturbative Hamiltonian in α can easily be extended to arbitrary half-integer spin S :

$$\mathcal{H}^{\text{pert.}} = \frac{\alpha}{9} \boldsymbol{\sigma}_i \cdot \boldsymbol{\sigma}_j \times (1 - 2(2S+1) \boldsymbol{\tau}_i \cdot \mathbf{e}_a)(1 - 2(2S+1) \boldsymbol{\tau}_j \cdot \mathbf{e}_b) \quad (8)$$

and the coefficients of (7) in the perturbative limit are given as $a_1(\alpha) = \alpha/9$, $b_1(\alpha) = (4\alpha/9)(2S+1)^2$, $c_1(\alpha) = -(2\alpha/9)(2S+1)$, $b_0(\alpha) = 0$, and $a_0(\alpha) = (1/4 - S(S+1))/2$.

1. Choice of the CORE basis

As discussed in the previous paragraph we keep the two degenerate $S=1/2$ doublets on a triangle for the CORE basis. In analogy to the the plaquette lattice we calculate the density matrix of a single triangle embedded in a 12 site *kagomé* lattice for both spin $S=1/2$ and $S=3/2$, in order to get information on the quality of the truncated basis. The results displayed in Fig. 13 show two different behaviors: while the targeted states exhaust 95% for the $S=1/2$ case, they cover only $\approx 55\%$ in the $S=3/2$ case. This can be considered a first indication that the range-two approximation in this basis might break down for $S > 1/2$ half integer spin, while the approximation seems to work particularly well for $S=1/2$,

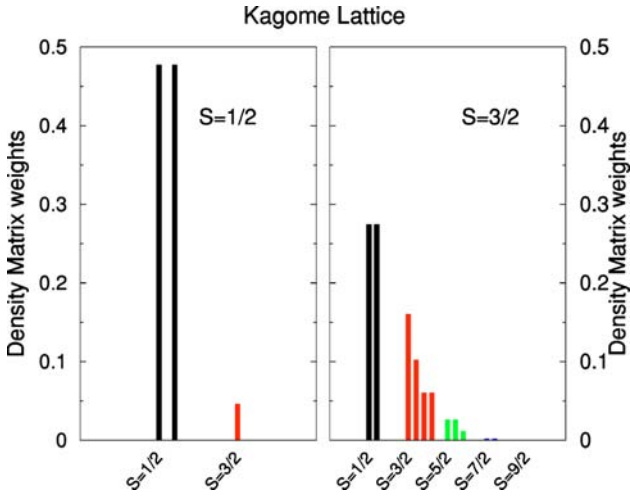


FIG. 13. (Color online) Density matrix weights of the different total spin states in a triangle of a 12 site *kagomé* cluster with $S = 1/2$ and $S = 3/2$ spins. These results are obtained for the homogeneous case $\alpha = 1$.

thereby providing independent support for the adequacy of the basis chosen in a related mean-field study.²³

We continue the analysis of the CORE basis by monitoring the evolution of the spectra of two coupled triangles in the *kagomé* geometry (cf. Fig. 22 below) as a function of the intertriangle coupling J' , as well as the states selected by the range-two CORE algorithm. The spectrum for the spin $S = 1/2$ case is shown in Fig. 14. We note the presence of a clear gap between the 16 lowest states—correctly targeted by the CORE algorithm—and the higher lying bands. This can be considered an ideal case for the CORE method. Based on this and the results of the density matrix we expect the CORE range-two approximation to work quite well.

We compare these encouraging results with the spectrum for the spin $S = 3/2$ case displayed in Fig. 15. Here the situation is less convincing: very rapidly ($J'/J \geq 0.45$) the low

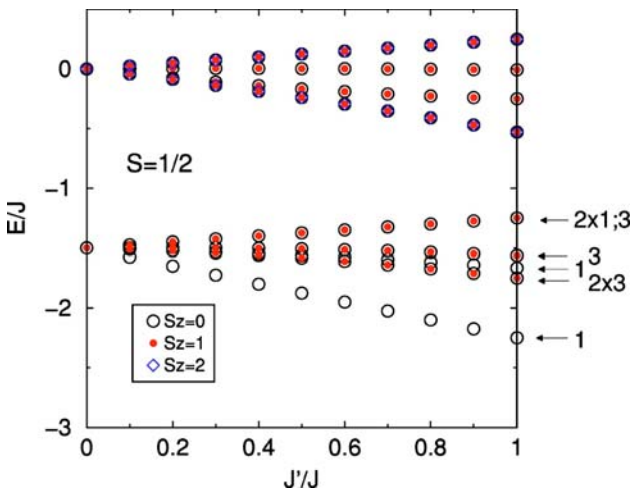


FIG. 14. (Color online) Spectrum of two coupled triangles in the *kagomé* geometry with $S = 1/2$ spins. The entire lowest band containing 16 states is successfully targeted by the CORE algorithm.

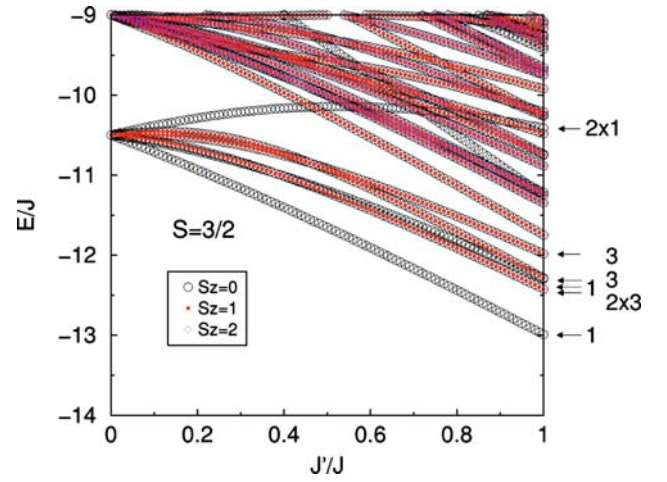


FIG. 15. (Color online) Spectrum of two coupled triangles in the *kagomé* geometry with $S = 3/2$ spins. The 16 states targeted by the CORE algorithm are indicated by the arrows and their degeneracies.

energy states mix with originally higher lying states and the CORE method continues to target two singlets which lie high up in energy when reaching $J'/J = 1$. We expect this to be a situation where the CORE method will probably not work correctly when restricted to range-two terms only.

Based on the two-triangle spectra shown above we used the CORE algorithm to determine the coefficients of the general two-body Hamiltonian Eq. (7). For an independent derivation, see Ref. 32. The coefficients obtained this way are shown in Figs. 16 and 17 for $S = 1/2$ and $S = 3/2$, respectively. In the limit $\alpha \ll 1$ the coefficients can be obtained from the perturbative Hamiltonian [Eq. (8)]. There are two classes of coefficients in both cases: a_0 and b_0 are zero in the perturbative limit, i.e., they are at least second order in α . The second class of coefficients (a_1, b_1, c_1) are linear in α . For improved visualization we have divided all the coefficients in the second class by their perturbative values. In this

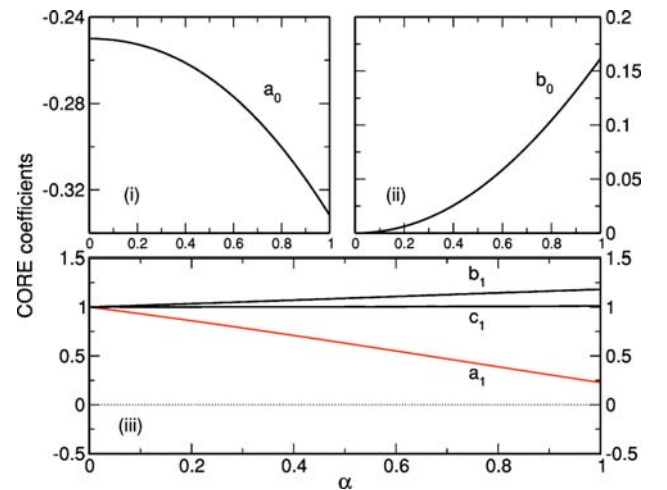


FIG. 16. (Color online) Coefficients of the CORE range-two Hamiltonian for two coupled $S = 1/2$ triangles. The coefficients in panel (iii) have been divided by their values in the perturbative limit.

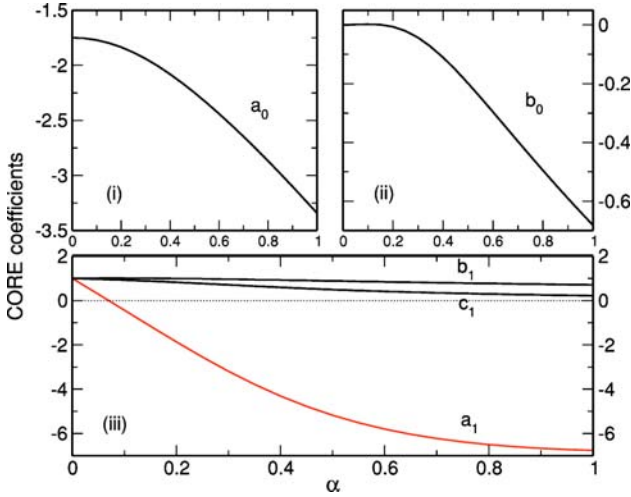


FIG. 17. (Color online) Coefficients of the CORE range-two Hamiltonian for two coupled $S=3/2$ triangles. The coefficients in panel (iii) have been divided by their values in the perturbative limit.

way we observe in Fig. 16 that coefficients b_1 and c_1 change barely with respect to their values in the perturbative limit. However a_1 has a significant subleading contribution, which leads to a rather large reduction upon reaching the $\alpha=1$ point. It does however not change sign.

The situation for the $S=3/2$ case in Fig. 17 is different: while the coefficients b_1 and c_1 decrease somewhat, it is mainly a_1 which changes drastically as we increase α . Starting from 1 it rapidly goes through zero ($\alpha \approx 0.07$) and levels off to roughly -7 times the value predicted by perturbation theory as one approaches $\alpha=1$. In this case it is rather obvious that this coefficient will dominate the effective Hamiltonian. We will discuss the implications of this behavior in the application to the $S=3/2$ *kagomé* magnet below.

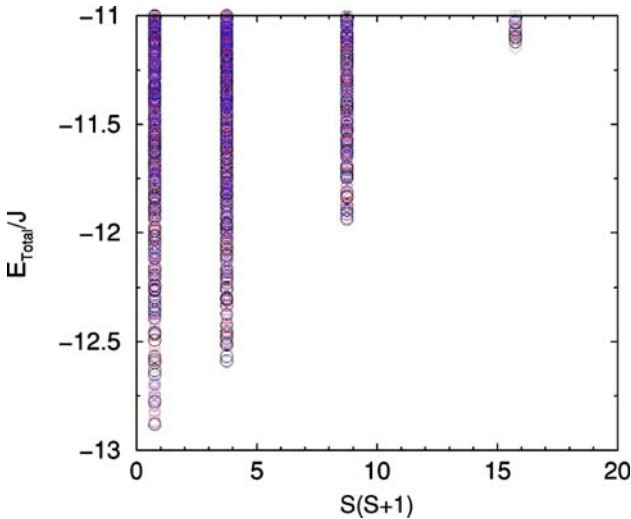


FIG. 18. (Color online) Tower of states obtained with a range-two CORE Hamiltonian on an effective $N=27$ *kagomé* lattice (9-site CORE cluster). There is a large number of low-lying states in each S sector. The symbols correspond to different momenta.

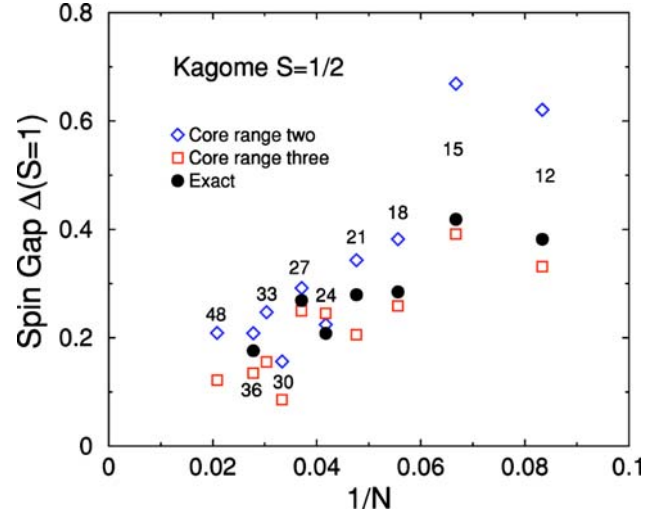


FIG. 19. (Color online) Spin gap of the *kagomé* $S=1/2$ model on various samples, obtained with the CORE method (range-two and three). Exact diagonalization result are also shown for comparison where available.

Let us note that the behavior of the a_1 coefficient is mainly due to a rather large second order correction in perturbation theory. Indeed we find good agreement with the values obtained in the perturbative approach of Ref. 26.

2. Simulations for $S=1/2$

After having studied the CORE basis and the effective Hamiltonian at range two in some detail, we now proceed to the actual simulations of the resulting model. We perform the simulations for the standard *kagomé* lattice, therefore $\alpha=1$. We will calculate several distinct physical properties, such as the tower of excitations, the evolution of the triplet gap as a

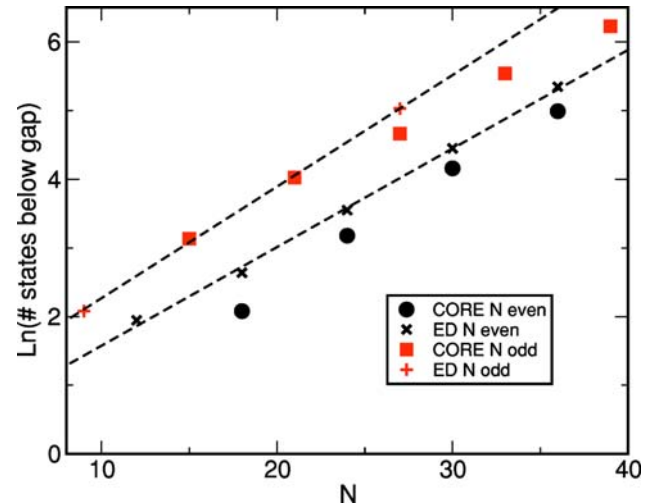
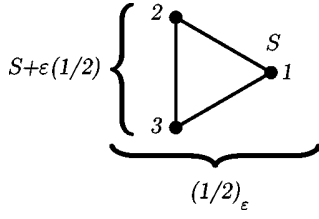


FIG. 20. (Color online) Logarithm of the number of states within the magnetic gap. Results obtained with the CORE range-two Hamiltonian. For comparison exact data obtained in Refs. 21 and 22 are shown. The dashed lines are linear fits to the exact diagonalization data.

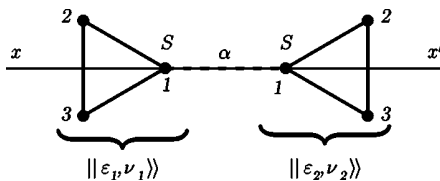
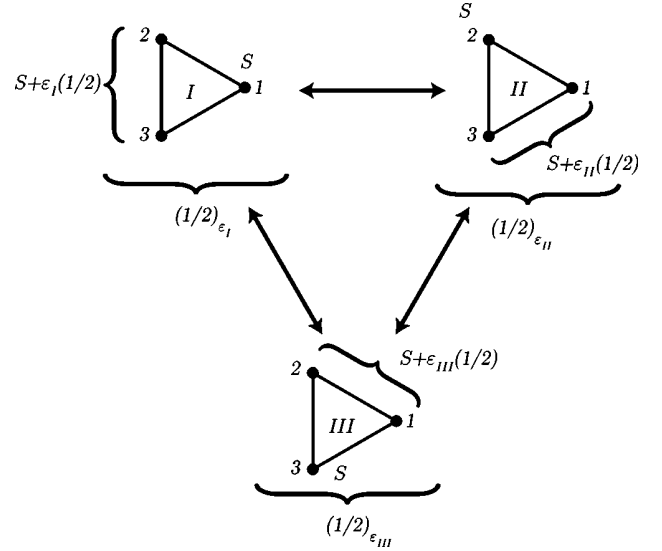

 FIG. 21. Definition of chirality ε (see text for details).

function of system size and the scaling of the number of singlets in the gap. These quantities have been discussed in great detail in previous studies of the *kagomé* $S=1/2$ antiferromagnet.^{20–24}

First we calculate the tower of excitations for a *kagomé* $S=1/2$ system on a 27 sites sample. The data are plotted in Fig. 18. The structure of the spectrum follows the exact data of Ref. 21 rather closely; i.e., there is no QDJS ensemble visible, a large number of $S=1/2$ states covering all momenta are found below the first $S=3/2$ excitations and the spectrum is roughly bounded from below by a straight line in $S(S+1)$. Note that the tower of states we obtain here is strikingly different from the one obtained in the Néel ordered square lattice case; see Fig. 11.

Next we calculate the spin gap using the range-two CORE Hamiltonian. Results for system sizes up to 48 sites are shown in Fig. 19, together with ED data where available. In comparison we note two observations: (a) the CORE range-two approximation seems to systematically overestimate the gap, but captures correctly the sample to sample variations. (b) the gaps of the smallest samples (effective $N=12,15$) deviate strongly from the exact data. We observed this to be a general feature of very small clusters in the CORE approach. In order to improve the agreement with the ED data we calculated the two CORE range-three terms containing a closed loop of triangles. The results obtained with this extended Hamiltonian are shown as well in Fig. 19. These additional terms improve the gap data somewhat. We now find the CORE gaps to be mostly smaller than the exact ones. The precision of the CORE gap data is not accurate enough to make a reasonable prediction on the spin gap in the thermodynamic limit. However we think that the CORE data is compatible with a finite spin gap.

Finally we determine the number of nonmagnetic excitations within the magnetic gap for a variety of system sizes up to 39 sites. Similar studies of this quantity in ED gave evidence for an exponentially increasing number of singlets in the gap.^{21,22} We display our data in comparison to the exact results in Fig. 20. While the precise numbers are not expected to be recovered, the general trend is well described


 FIG. 22. The two-triangle problem. α is the coupling ratio J'/J .

 FIG. 23. Three ways of coupling the three spins S on a triangle into a total spin $1/2$ state. Each construction is related to the two others by the $3j$ symbols (see text).

with the CORE results. For both even and odd N samples we see an exponential increase of the number of these nonmagnetic states. In the case of $N=39$ for example, we find 506 states below the first magnetic excitation. These results emphasize again the validity of the two doublet basis for the CORE approach on the *kagomé* spin $1/2$ system.

3. Simulations for $S=3/2$

We have also simulated the CORE Hamiltonian obtained above for $S=3/2$. While the energy per site is reproduced roughly, unfortunately the spectrum does not resemble an antiferromagnetic spin model, i.e., the groundstate is polarized in the spin variables. This fact is at odds with preliminary exact diagonalization data on the original $S=3/2$ model.³³ We therefore did not pursue the CORE study with this choice of the basis states any further. Indeed, as suggested by the analysis of the density matrix and by the evolution of the spectrum of two coupled triangles, we consider this a breakdown example of a naive range-two CORE approximation. It is important to stress that the method indicates its failure in various quantities throughout the algorithm, therefore offering the possibility of detecting a possible breakdown.

As a remedy in the present case we have extended the basis states to include all the $S=1/2$ and $S=3/2$ states on a triangle (i.e., keeping 20 out of 64 states). Computations within this basis set are more demanding, but give a better agreement with the exact diagonalization results. At the present stage we cannot decide whether the breakdown of the 4 states CORE basis is related only the CORE method or whether it implies that the *kagomé* $S=1/2$ and $S=3/2$ systems do not belong to the same phase.

V. CONCLUSIONS

We have discussed extensively the use of a novel numerical technique—the so-called numerical contractor renormal-

ization (CORE) method—in the context of low-dimensional quantum magnetism. This method consists of two steps: (i) building an effective Hamiltonian acting on the low-energy degrees of freedom of some elementary block; and (ii) studying this new model numerically on finite-size clusters, using a standard exact diagonalization or similar approach.

Like in other real-space renormalization techniques the effective model usually contains longer range interactions. The numerical CORE procedure will be most efficient provided the effective interactions decay sufficiently fast. We discussed the validity of this assumption in several cases.

For ladder type geometries, we explicitly checked the accuracy of the effective models by increasing the range of the effective interactions until reaching convergence. Both in the perturbative regime and in the isotropic case, our results on a 2-leg ladder and a 3-leg torus are in good agreement with previously established results. This rapid convergence might be due to the small correlation length that exists in these systems which both have a finite spin gap.

In two dimensions, we have used the density matrix as a tool to check whether the restricted basis gives a good enough representation of the exact states. When this is the case, as for the plaquette lattice or the $S=1/2$ *kagomé* lattice, the lowest order range-two effective Hamiltonian gives semi-quantitative results, even away from any perturbative regime. For example we can successfully describe the plaquette lattice, starting from the decoupled plaquette limit through the quantum phase transition to the Néel ordered state at homogeneous coupling. Furthermore we can also reproduce many aspects of the exotic low-energy physics of the $S=1/2$ *kagomé* lattice.

Therefore within the CORE method, we can have both the advantage of working in a strongly reduced subspace and not being limited to the perturbative regime in certain cases.

We thus believe that the numerical CORE method can be used systematically to explore possible ways of generating low-energy effective Hamiltonians. An important field is for example the doped frustrated magnetic systems, where it is not easy to decide which states are important in a low-energy description, and therefore the density matrix might be a helpful tool.

APPENDIX A: DENSITY MATRIX

In this appendix we introduce the density matrix of a basic building block in a larger cluster of the fully interacting problem as a diagnostic tool to validate or invalidate a particular choice of retained states on the basic building block in the CORE approach.

In previous applications of the CORE method, the choice of the states kept relied mostly on the spectrum of an isolated building block. While this usually gives reasonable results it is not a clear *a priori* where to place the cut-off in the spectrum.

The density matrix of a “system block” embedded in a larger “super block” forms a key concept in the density matrix renormalization group (DMRG) algorithm invented by White in 1992 (Ref. 34) and is at the heart of its success. Based on this and related ideas³⁵ we propose to monitor the

density matrix of the basic building block embedded in a larger cluster and to retain these states exhausting a large fraction of the density matrix weight.

Consider now a subsystem $\mathcal{A}$ embedded in a larger system $\mathcal{B}$. Suppose that the overall system $\mathcal{B}$ is in state $|\Psi\rangle$ (e.g., the ground state). We write the wave function as

$$|\Psi\rangle = \sum_{a,b} \psi_{a,b} |a\rangle \otimes |b\rangle, \quad (\text{A1})$$

where the sum index a runs over all states in $\mathcal{A}$ and index b over all states in $\mathcal{B} \setminus \mathcal{A}$. The density matrix $\rho^{\mathcal{A}}$ of the subsystem $\mathcal{A}$ is then defined as

$$\rho_{a,a'}^{\mathcal{A}} = \sum_b \psi_{a,b} \psi_{a',b}^*. \quad (\text{A2})$$

The eigenvalues of $\rho^{\mathcal{A}}$ denote the probability of finding a certain state a in $\mathcal{A}$, given the overall system in state $|\Psi\rangle$.

Practically we calculate the ground state of the fully interacting system on a medium size cluster by exact diagonalization, and then obtain the density matrix of a basic building block, e.g., a four site plaquette. The density matrix of a building block is a rather local object, so we expect that results on intermediate size clusters are already accurate on the percent level. The density matrix spectra shown in Figs. 8 and 13 have been obtained in this way. In the models considered, a density matrix weight of the retained states of at least 90% yielded reasonable results within a range-two CORE approximation. It is possible to allow for a lower overall weight, at the expense of increasing the range of the CORE interactions.

APPENDIX B: OBSERVABLES IN THE NUMERICAL CORE METHOD

The calculation of observables beyond simple energy related quantities is not straightforward within the CORE method, as the observables need to be renormalized like the Hamiltonian in the first place.^{3,6}

A somewhat simpler approach for measurements of symmetry breaking order parameters consists in adding a small symmetry breaking field to the Hamiltonian (for a review, see Ref. 30).

Let us denote $\hat{\mathcal{O}}$ the extensive symmetry breaking operator, such that the order parameter is related to its GS average value $m = 1/N \langle \psi_0 | \hat{\mathcal{O}} | \psi_0 \rangle$. The occurrence of a symmetry broken phase can be detected by adding this operator to the Hamiltonian:

$$\mathcal{H}(\delta) = \mathcal{H} - \delta \hat{\mathcal{O}}. \quad (\text{B1})$$

Since on a finite-size lattice the order parameter vanishes by symmetry for $\delta=0$, the ground-state energy per site varies quadratically for small δ

$$e(\delta) \simeq e_0 - \frac{1}{2} \chi_0 \delta^2,$$

where χ_0 is termed the corresponding generalized susceptibility. In that way the second derivative of the energy with respect to δ at $\delta=0$ offers one possibility to detect a finite

order parameter in the thermodynamic limit.³⁰

We found that another possibility to conveniently track the presence of a finite order parameter is to measure directly $m(\delta)$ in finite field

$$m(\delta) = \langle \Psi_\delta | \hat{O} | \Psi_\delta \rangle = d e(\delta) / d \delta$$

by the Hellmann-Feynman theorem. When plotting $m(\delta)$ as a function of the rescaled field $N\delta$ for various system sizes we observe an approximate crossing of the curves if there is a finite order parameter and no crossing in the absence of the order parameter.

Moreover, the derivative of $m(\delta)$ gives the susceptibility which should diverge at least as the volume squared N^2 in an ordered phase.³⁰

APPENDIX C: GAUGE INVARIANCE ON HALF-INTEGER SPINS KAGOMÉ LIKE SYSTEMS

In this appendix, we discuss half-integer spin Hamiltonians with triangles as the unit cell. The ground state manifold of each unit cell is generated by the four degenerate lowest states that can be built out of 3 half-integer S spins, namely the four $S_{\text{tot}}=1/2$ states. The idea of selecting these states as a starting point to describe the whole system low energy properties was originally introduced by Subrahmanyam for $S=1/2$ (Ref. 25) on the *kagomé* lattice and later used by Mila.²³ More recently it was reintroduced by Raghu *et al.*²⁶ for arbitrary half-integer S in the context of a chain of triangles. All these approaches are perturbative and state that the triangle couplings J is much larger than the intertriangle one J' .

Here we would like to discuss some general properties of any effective Hamiltonian that can be derived either by perturbative methods or more sophisticated ones such as CORE. In particular, we would like to point out that a gauge invariance appears as a direct consequence of the state selection.

To be more specific, let us label 1, 2, 3 the sites of the triangle (see Fig. 21). In order to build a total spin 1/2 out of the three S , spins 2 and 3 couple into a $S+\varepsilon(1/2)$ with $\varepsilon = \pm 1$. The coupling with the remaining site 1 produces a spin 1/2 with chirality $\varepsilon = \pm 1$. Note that this definition of chirality is equivalent to Eqs. (4) for spin $S=1/2$ up to a global unitary transform which is just a redefinition of the chirality quantification axis.

In the following, the four selected spin-chirality states on a triangle i will be denoted as $|\varepsilon_i, \nu_i\rangle$. These states are the eigenstates of the z components of spin σ and chirality τ (both are spin 1/2 like operators) with $\tau_z|\varepsilon_i, \nu_i\rangle = (\varepsilon_i/2)|\varepsilon_i, \nu_i\rangle$ and $\sigma_z|\varepsilon_i, \nu_i\rangle = \nu_i|\varepsilon_i, \nu_i\rangle$.

Let us now turn to the two-triangle problem. As it can be seen in Fig. 22, the Hamiltonian is invariant under reflections with respect to the (xx') axis. Moreover, the reflection can be taken independently on each triangle. As a consequence, both chiralities (τ_i^z and τ_j^z) are conserved by the effective Hamiltonian and the τ part is of the form $1 + a(\tau_i^z + \tau_j^z) + b\tau_i^z\tau_j^z$. For any fixed value of $(\varepsilon_i, \varepsilon_j)$, the total spin of the system is conserved and thus the spin part is $SU(2)$ invariant.

As a conclusion the most general two-triangle Hamiltonian allowed is of the form:

$$(\sigma_i \cdot \sigma_j + c)(1 + a(\tau_i^z + \tau_j^z) + b\tau_i^z\tau_j^z).$$

A. Gauge transformation

The form of the above Hamiltonian is the consequence of the particular choice we made for labeling the sites of the triangle (see Fig. 22): site 1 of triangle t_1 couples to site 1 of triangle t_2 . Although this gauge was convenient for the calculation, in general this choice cannot be made simultaneously on all couples of triangles of the lattice. So, it is essential to derive the form of the Hamiltonian in a generic situation where site $i=1,2,3$ of triangle t_1 couples to site $j=1,2,3$ of triangle t_2 .

The unitary transformations involved in the redefinition of the coupling sequence (see Fig. 23) are covered by the $3j$ symbols of elementary quantum mechanics. The problem of 3 half-integer spins S coupled into a total spin 1/2 occurs to be particularly simple and independent of S . The form of the general effective Hamiltonian then reads:

$$\mathcal{H}_{ij}^{a,b}(\alpha) = (\sigma_i \cdot \sigma_j + c(\alpha)) [1 + a(\alpha)(\tau_i \cdot \mathbf{e}_a + \tau_j \cdot \mathbf{e}_b) + b(\alpha)(\tau_i \cdot \mathbf{e}_a)(\tau_j \cdot \mathbf{e}_b)],$$

where $\mathbf{e}_a$, $a=1,2,3$ are three coplanar normalized vectors in a 120° configuration [for example, $\mathbf{e}_1=(0,1)$, $\mathbf{e}_2=(-\sqrt{3}/2, -1/2)$, and $\mathbf{e}_3=(\sqrt{3}/2, -1/2)$ in the x - z plane] and a, b are the labels of the original spins coupling triangles t_i and t_j .

B. The *kagomé* lattice

In the particular geometry of the *kagomé* lattice [see Fig. 7(b)], each triangular unit cell is coupled to six other triangular cells, each corner being coupled twice. As a consequence, for each cell the contribution involving only $\tau_i \cdot \mathbf{e}_a$ factorizes into $2\tau_i \cdot (\mathbf{e}_1 + \mathbf{e}_2 + \mathbf{e}_3) = 0$. The corresponding terms are then not relevant in the Hamiltonian and thus we denote the most general two-triangle Hamiltonian for the *kagomé* lattice as

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = & Na_0(\alpha) + \sum_{\langle i,j \rangle} [b_0(\alpha)\tau_i \cdot \mathbf{e}_{ij}\tau_j \cdot \mathbf{e}_{ij} + a_1(\alpha)\sigma_i \cdot \sigma_j \\ & + b_1(\alpha)\sigma_i \cdot \sigma_j(\tau_i \cdot \mathbf{e}_{ij})(\tau_j \cdot \mathbf{e}_{ij}) + c_1(\alpha)\sigma_i \cdot \sigma_j(\tau_i \cdot \mathbf{e}_{ij} \\ & + (\tau_j \cdot \mathbf{e}_{ij}))] \end{aligned}$$

which is the form used in the text.

ACKNOWLEDGMENTS

We thank F. Alet, A. Auerbach, F. Mila, and D. Poilblanc for fruitful discussions. Furthermore we are grateful to F. Alet for providing us QMC data. We thank M. Körner for his very useful Mathematica spin notebook. A.L. acknowledges support from the Swiss National Fund. We thank IDRIS (Orsay) and the CSCS Manno for allocation of CPU time.

*Electronic address: capponi@irsamc.ups-tlse.fr

- ¹C. J. Morningstar and M. Weinstein, Phys. Rev. Lett. **73**, 1873 (1994); Phys. Rev. D **54**, 4131 (1996).
- ²M. Weinstein, Phys. Rev. B **63**, 174421 (2001).
- ³E. Altman and A. Auerbach, Phys. Rev. B **65**, 104508 (2002).
- ⁴E. Berg, E. Altman, and A. Auerbach, Phys. Rev. Lett. **90**, 147204 (2003).
- ⁵J. Piekarewicz and J. R. Shepard, Phys. Rev. B **56**, 5366 (1997).
- ⁶J. Piekarewicz and J. R. Shepard, Phys. Rev. B **57**, 10 260 (1998).
- ⁷S. Capponi and D. Poilblanc, Phys. Rev. B **66**, 180503(R) (2002).
- ⁸J.-P. Malrieu and N. Guihéry, Phys. Rev. B **63**, 085110 (2001).
- ⁹E. Dagotto, and T. M. Rice, Science **271**, 618 (1996), and references therein.
- ¹⁰T. Barnes, E. Dagotto, J. Riera, and E. S. Swanson, Phys. Rev. B **47**, 3196 (1993); S. R. White, R. M. Noack, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. Lett. **73**, 886 (1994); B. Frischmuth, B. Ammon, and M. Troyer, Phys. Rev. B **54**, R3714 (1996).
- ¹¹M. Greven, R. J. Birgeneau, and U.-J. Wiese, Phys. Rev. Lett. **77**, 1865 (1996).
- ¹²K. Kawano and M. Takahashi, J. Phys. Soc. Jpn. **66**, 4001 (1997).
- ¹³D. C. Cabra, A. Honecker, and P. Pujol, Phys. Rev. B **58**, 6241 (1998).
- ¹⁴*Proceedings of the 31st Rencontres de Moriond*, edited by T. Martin, G. Montambaux, and J. Trân Thanh Vân (Editions Frontières, Gif-sur-Yvette, France, 1996) (cond-mat/9605075).
- ¹⁵E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, Ann. Phys. (N.Y.) **16**, 407 (1961); I. Affleck, Phys. Rev. B **37**, 5186 (1988).
- ¹⁶A. Koga, S. Kumada, and N. Kawakami, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 642 (1999).
- ¹⁷A. Koga, S. Kumada, and N. Kawakami, J. Phys. Soc. Jpn. **68**, 2373 (1999).
- ¹⁸A. Läuchli, S. Wessel, and M. Sigrist, Phys. Rev. B **66**, 014401 (2002).
- ¹⁹A. Voigt, Comput. Phys. Commun. **146**, 125 (2002).
- ²⁰P. W. Leung and V. Elser, Phys. Rev. B **47**, 5459 (1993).
- ²¹P. Lecheminant, B. Bernu, C. Lhuillier, L. Pierre, and P. Sindzingre, Phys. Rev. B **56**, 2521 (1997).
- ²²C. Waldtmann, H.-U. Everts, B. Bernu, C. Lhuillier, P. Sindzingre, P. Lecheminant and L. Pierre, Eur. Phys. J. B **2**, 501 (1998).
- ²³F. Mila, Phys. Rev. Lett. **81**, 2356, (1998).
- ²⁴M. Mambrini and F. Mila, Eur. Phys. J. B **17**, 651 (2000).
- ²⁵V. Subrahmanyam, Phys. Rev. B **52**, 1133 (1995).
- ²⁶C. Raghu, I. Rudra, S. Ramasesha, and D. Sen, Phys. Rev. B **62**, 9484 (2000).
- ²⁷B. Bernu, C. Lhuillier, and L. Pierre, Phys. Rev. Lett. **69**, 2590 (1992).
- ²⁸P. Sindzingre, C. Lhuillier, and J. B. Fouet, Int. J. Mod. Phys. B **17** 5031 (2003) (cond-mat/0110283).
- ²⁹M. Calandra and S. Sorella, Phys. Rev. B **61**, R11 894 (2000).
- ³⁰L. Capriotti, Int. J. Mod. Phys. B **15**, 1799 (2001).
- ³¹L. Limot, P. Mendels, G. Collin, C. Mondelli, B. Ouladdiaf, H. Mutka, N. Blanchard, and M. Mekata, Phys. Rev. B **65**, 144447 (2002), and references therein.
- ³²R. Budnik and A. Auerbach (unpublished); R. Budnik, M.Sc. thesis, Technion, Haifa.
- ³³S. Dommange, A. Läuchli, J.-B. Fouet, B. Normand, and F. Mila (unpublished).
- ³⁴S. R. White, Phys. Rev. Lett. **69**, 2863 (1992).
- ³⁵C. Zhang, E. Jeckelmann, and S. R. White, Phys. Rev. Lett. **80**, 2661 (1998).

Article [22]

S. Capponi, C. J. Wu et S. C. Zhang

Current carrying ground state in a bilayer model of strongly correlated systems

Current carrying ground state in a bilayer model of strongly correlated systems

Sylvain Capponi

Laboratoire de Physique Théorique UMR 5152, Université Paul Sabatier, 118 route de Narbonne, 31062 Toulouse, France
and Department of Physics, McCullough Building, Stanford University, Stanford, California 94305-4045, USA

Congjun Wu and Shou-Cheng Zhang

Department of Physics, McCullough Building, Stanford University, Stanford, California 94305-4045, USA

(Received 12 October 2004; published 21 December 2004)

Strongly interacting systems have been conjectured to spontaneously develop current carrying ground states under certain conditions. We demonstrate the existence of a commensurate staggered interlayer current phase in a bilayer model by using the recently discovered quantum Monte Carlo algorithm without the sign problem for fermionic systems. A pseudospin $SU(2)$ algebra and the corresponding anisotropic spin-1 Heisenberg model are constructed to show the competition among the staggered interlayer current, rung singlet, and charge density wave phases.

DOI: 10.1103/PhysRevB.70.220505

PACS number(s): 74.20.Mn, 71.10.Fd, 71.10.Hf, 71.30.+h

Strongly correlated systems can spontaneously break symmetries of the microscopic Hamiltonian. A particularly interesting class of ground states spontaneously break the time reversal symmetry and carry a persistent current in the ground state. Such states are known by different synonyms, e.g. the orbital antiferromagnetic phase, the staggered flux (SF), or the D -density wave (DDW) phase. In the context of high T_c superconductivity, these current carrying ground states have been proposed as competing states for the pseudogap phase.¹⁻⁶ The SF or the DDW phase has the attractive feature that the nodal quasiparticles have an energy spectrum similar to that of the d -wave superconducting state. The incommensurate SF phase was also proposed to explain the hidden order phenomenon in the URu_2Si_2 system.⁷

Whenever new ground states are proposed, it is important to establish for which microscopic Hamiltonian such states are realized. Because of the availability of reliable analytical and numerical methods, the ladder system has been used as a theoretical laboratory to investigate the DDW phase. Weak coupling bosonization methods combined with the renormalization group analysis on extended two-leg Hubbard ladders show the existence of a commensurate DDW phase at half-filling⁸⁻¹⁰ and incommensurate power law fluctuating DDW order away from half-filling.^{9,11,12} While the DDW state does not appear to be the ground state of the t - J ladder,^{13,14} numerical works using the density matrix renormalization group found commensurate DDW order at half-filling¹⁵ and incommensurate DDW order at low doping¹⁶ in a ladder model first proposed by Scalapino, Zhang, and Hanke,¹⁷ which is commonly referred as to the SZH model. The work of Schollwöck *et al.* has generated significant interest in connection with the DDW proposal for the cuprates.⁵

To the best of our knowledge, the existence of a current carrying ground state has not been conclusively demonstrated in any higher dimensional models. We investigate the current carrying ground state in a bilayer version of the SZH model, which was constructed and extensively investigated because of the exact $SO(5)$ symmetry when coupling constants satisfy a simple relation.¹⁸⁻²¹ Here we show that the

recently discovered fermionic quantum Monte Carlo (QMC) algorithm without the sign problem²² can also be applied here at and away from half-filling. Thus we can conclusively demonstrate the existence of a current carrying ground state as illustrated in Fig. 1 with staggered interlayer currents (SIC) between the bilayers and alternating source to drain currents within the bilayers. Viewed from the top, this current pattern has an s -wave symmetry. While the DDW currents are divergence-free within the layer, the SIC current is curl-free within the layer. These two patterns can be considered as dual to each other in two dimensions. In this paper, we shall first discuss the physics of the SIC phase by mapping onto an effective spin one antiferromagnetic (AF) Heisenberg model, and then proceed with the QMC results.

The Hamiltonian for the SZH model¹⁷ generalized straightforwardly to the bilayer system reads

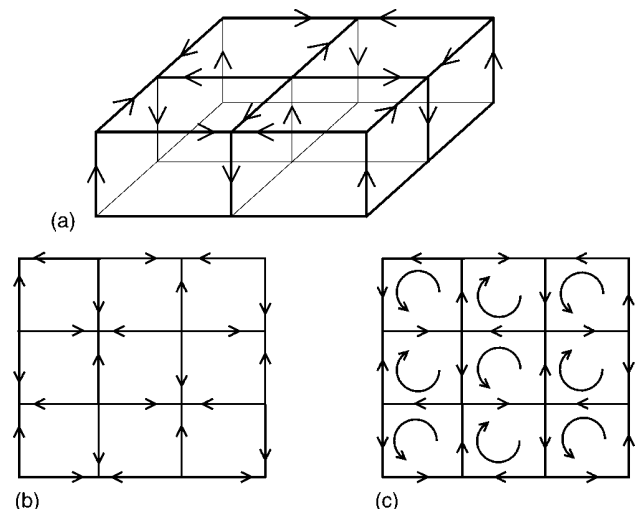


FIG. 1. (a) Sketch of a SIC phase. For clarity, we do not show the bottom layer current. By conservation, each site acts as a source or drain for the current within the bilayers. (b) The top view of the bilayer. (c) A sketch of the SF or the DDW current pattern for comparison.

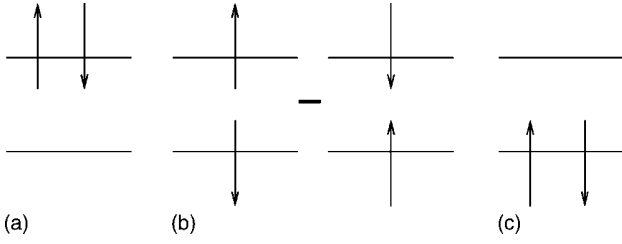


FIG. 2. The double occupancy states a and c and the rung singlet b (a), (b) and (c) are spin $SU(2)$ singlets and form the triplet representation of the pseudospin $SU(2)$ group.

$$\begin{aligned}
 H = & -t_{\parallel} \sum_{\langle ij \rangle} \{c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + d_{i\sigma}^{\dagger} d_{j\sigma} + \text{H.c.}\} - t_{\perp} \sum_i \{c_{i,\sigma}^{\dagger} d_{i,\sigma} \\
 & + \text{H.c.}\} - \mu \sum_i \{c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma} + d_{i,\sigma}^{\dagger} d_{i,\sigma}\} + J \sum_i \vec{S}_{i,c} \cdot \vec{S}_{i,d} \\
 & + U \sum_i (n_{i,\uparrow,c} - 1/2)(n_{i,\downarrow,c} - 1/2) + (n_{i,\uparrow,d} - 1/2)(n_{i,\downarrow,d} \\
 & - 1/2) + V \sum_i (n_{i,c} - 1)(n_{i,d} - 1), \quad (1)
 \end{aligned}$$

where c and d denote fermionic operators in the upper and the lower layers, respectively, and σ corresponds to up and down spins. At half-filling, $\mu=0$, and the model is particle-hole symmetric. $t_{\parallel}=1$ sets the unit of energy. The SZH model was known to have a $SO(5)$ symmetry when $J=4(U+V)$ and $\mu=0$, which unifies antiferromagnetism with superconductivity.¹⁷ Remarkably, it also has another $SO(5)$ symmetry in the particle-hole (p - h) channel when

$$J = 4(U - V), \quad t_{\perp} = 0 \quad (2)$$

is valid for all filling factors. We denote the former particle-particle $SO(5)$ symmetry as $SO(5)_{pp}$ and the later p - h $SO(5)$ symmetry as $SO(5)_{p-h}$. The mathematical structure associated with the $SO(5)_{p-h}$ algebra, not necessarily the symmetry itself, plays a crucial role in constructing the fermionic QMC algorithm without minus sign problem.

We construct a four component fermion field $\Psi = \{c_{\sigma}, d_{\sigma}\}$. Using the five Dirac Γ_a matrices given in Ref. 22, we construct the fermion bilinears

$$n_a = \Psi^{\dagger} \frac{\Gamma_a}{2} \Psi \quad L_{ab} = \Psi^{\dagger} \frac{\Gamma_{ab}}{2} \Psi.$$

It is straightforward to check that $[H, L_{ab}] = 0$ when Eq. (2) is satisfied, thus demonstrating the exact $SO(5)_{p-h}$ symmetry. The SZH model can be mapped exactly to the spin 3/2 Hubbard model,²² by the identification $c_{\uparrow} = c_{3/2}$, $c_{\downarrow} = c_{1/2}$, $d_{\uparrow} = c_{-1/2}$, $d_{\downarrow} = c_{-3/2}$, and the $SO(5)_{p-h}$ symmetry maps exactly onto the $SO(5)$ symmetry of the spin 3/2 Hubbard model. Thanks to this mapping, we are able to use the QMC algorithm discovered in Ref. 22, which has no minus sign problem in a large parameter regime.

Scalapino *et al.* identified the phases where either the rung singlet state [Fig 2(b)], or the charge-density wave (CDW) states [Figs. 2(a) and 2(c)] are the lowest energy states.¹⁷ References 15 and 16 reveal that the competition between

these two phases could result in the DDW phase. In view of this insight, let us consider the following operators:

$$n_1(i) = i/2 \sum_{\sigma} \{c_{\sigma}^{\dagger}(i) d_{\sigma}(i) - d_{\sigma}^{\dagger}(i) c_{\sigma}(i)\},$$

$$n_5(i) = 1/2 \sum_{\sigma} \{c_{\sigma}^{\dagger}(i) d_{\sigma}(i) + d_{\sigma}^{\dagger}(i) c_{\sigma}(i)\},$$

$$Q(i) = L_{15} = 1/2 \sum_{\sigma} \{c_{\sigma}^{\dagger}(i) c_{\sigma}(i) - d_{\sigma}^{\dagger}(i) d_{\sigma}(i)\}.$$

These operators describe rung current (n_1), rung kinetic energy (n_5), and the CDW order parameter (Q), which form a pseudospin $SU(2)$ algebra and commutes with the spin $SU(2)$ algebra. The three-spin singlet rung states shown in Fig. 2 form a spin-1 representation of this algebra with eigenvalues $Q=1, 0, -1$.

At half-filling and under the condition that $\max(U, V - 3/4J) < \min(V + J/4, U + 2V, U/2 + V)$, these states are the three lowest energy states, which become degenerate at $U = V - 3/4J$. In the strong coupling limit, we can construct an effective pseudospin-1 antiferromagnetic (AF) Heisenberg model as

$$H_{ex} = J_p \sum_{\langle ij \rangle} \{n_5(i) n_5(j) + n_1(i) n_1(j) + Q(i) Q(j)\}, \quad (3)$$

with $J_p = 2t_{\parallel}^2 / (V + \frac{3}{4}J)$. Several terms break the pseudospin $SU(2)$ symmetry. The intrarung hopping $t_{\perp}$ term acts as a uniform external magnetic field which couples to n_5 . Also, the deviation of U from $V - 3/4J$ removes the degeneracy between the a , c , and b states. These can be described by the on site part as

$$H_{on} = \sum_i \{-2t_{\perp} n_5(i) + \Delta U [Q^2(i) - 1/2]\} \quad (4)$$

where $\Delta U = U - (V - 3/4J)$. The nonzero value of ΔU also gives different corrections to the three exchange terms at the order of $J_p \Delta U / U$, which are small compared to the ΔU term and thus neglected. $H = H_{ex} + H_{on}$ describes a two-dimensional (2D) AF spin one Heisenberg model in an uniform magnetic field $t_{\perp}$, with either easy axis ($\Delta U < 0$) or easy plane ($\Delta U > 0$) anisotropy.

For the easy axis case, the effective Hamiltonian reduces to an Ising model with $Q = \pm 1$ states, in a transverse magnetic field as in Refs.10 and 17. For $t_{\perp} = 0$ and $\Delta U > 0$, the rung singlet state (b) has the lowest energy. However, there is a competition between the ΔU term and the exchange J_p term. For $\Delta U > zJ_p$, where $z=4$ is the coordination number, the ground state can be described as a product of each rung singlet state. On the other hand, for $\Delta U < zJ_p$, it is more favorable to develop a staggered ground state expectation value of $\langle n_1 \rangle$ and $\langle n_5 \rangle$ spontaneously. In this case with $t_{\perp} = 0$, the pseudospin vector can lie along in any direction in the (n_1, n_5) plane. On the other hand, at $\Delta U = 0$, a finite value of $t_{\perp} > 0$ corresponds to a pseudospin magnetic field along the n_5 direction, which creates an easy (n_1, Q) space. The staggered component of the pseudospin lies in the (n_1, Q) plane, while the uniform one points along the n_5 direction.

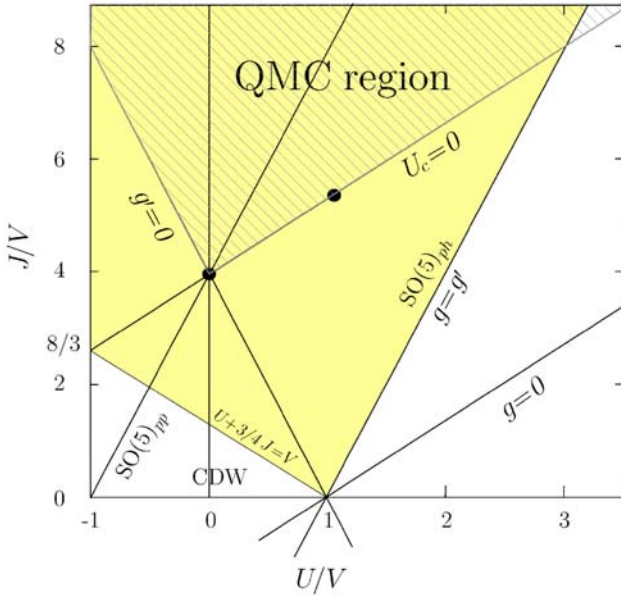


FIG. 3. (Color online) Phase diagram in the strong coupling limit. Two $SO(5)$ lines are shown as well as QMC region with no minus sign problem for any filling (hatched area): $g > 0$, $g' > 0$, and $U_c > 0$. There is also another region with $V < 0$ (not shown). In the yellow region, the low-energy bosonic states are a , b , and c as shown in Fig. 2. This is where we expect the competition between the SIC and the rung-singlet phase. Black dots correspond to where the QMC simulations are performed.

The pseudospin moment becomes fully polarized when $t_{\perp} > (z/2)J_p$, and the AF component vanishes beyond this point. We see that $t_{\perp} > 0$ favors the (n_1, Q) easy plane, while $\Delta U < zJ_p$ favors the (n_1, n_5) easy plane. Therefore, when both conditions are present, the intersection between the two easy planes, namely the n_1 easy axis, is selected. This is exactly the staggered interlayer current order. Combining all these considerations, we can summarize the subtle criteria for the SIC phase as

$$V - \frac{3}{4}J < U < \min\left(V + \frac{J}{4}, 2V\right), \quad V > 0$$

$$t_{\perp} < \frac{1}{2}zJ_p\sqrt{1 - (\Delta U/zJ_p)^2}, \quad \Delta U < zJ_p, \quad (5)$$

The first two robust conditions ensure that the a , b , and c states are the three lowest energy states, while the last two conditions are the rough mean field estimates discussed above.

In Fig. 3, we show some specific regions on the phase diagram in the strong coupling limit. There are two additional axes for $t_{\parallel}$ and $t_{\perp}$. If $t_{\parallel}$ and/or $t_{\perp}$ gets larger, we can expect some phases to have larger or smaller extensions. In the case of ladders, a similar phase diagram has been proposed.^{10,16} In order to obtain significant current correlations, one should be close enough from the line $V = U + 3/4J$ where states a , b , and c become degenerate.

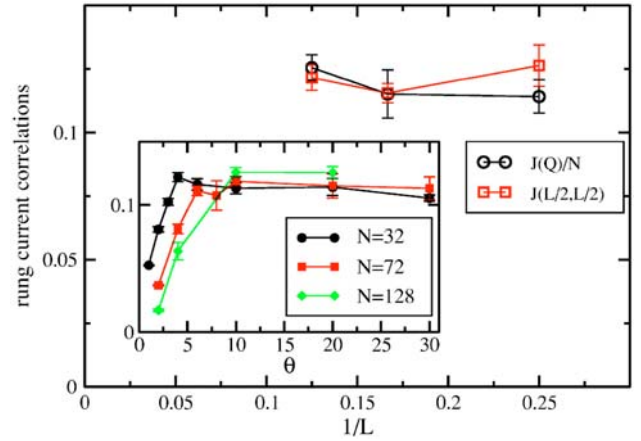


FIG. 4. (Color online) Parameters are $t_{\perp} = 0.1$, $U = 0$, $V = 0.5$, and $J = 2.0$ and correspond to $g = 0.25$, $g' = 0$, and $U_c = 0$. The scaling of $\mathcal{J}(\vec{Q})/N$ and $J(L/2, L/2)$ vs $1/L$ shows almost no finite-size effects and proves long-range order in the thermodynamic limit. (The inset shows the convergence of $\mathcal{J}(\vec{Q})/N$ with the projection parameter θ . Typically the GS value is obtained for $\theta = 20$.)

Now we proceed to discuss the QMC calculation of the SIC phase. We first express the interaction terms of the SZH model as

$$H_{int} = -\frac{g}{2}(n_1^2 + n_5^2) - \frac{g'}{2}(n_2^2 + n_3^2 + n_4^2) - \frac{U_c}{2}(n - 2)^2, \quad (6)$$

with $4U_c = -U - 3V + 3J/4$, $4g = V - U + 3J/4$ and $4g' = U - V + J/4$. The $SO(5)_{ph}$ symmetry is recovered when $g = g'$, i.e., $U = V + J/4$. We now introduce auxiliary Hubbard-Stratonovich fields to decouple each of the three terms above. Wu, Hu, and Zhang²² have shown that the QMC algorithm is free of the minus sign problem provided all three coefficients: g , g' , and U_c are positive. It corresponds to a wedge in the phase diagram shown in Fig. 3, and most remarkably, it includes a region with purely repulsive interactions, where U , V , and J are all positive. A simpler case containing only n_4^2 interaction, which explicitly breaks the $SU(2)$ spin rotation invariance, has been studied in another context.²³ The ground-state (GS) properties of our model are conveniently studied with the projector auxiliary field QMC algorithm. The basic idea is to apply the operator $\exp(-\theta H)$ to a trial state. When θ becomes large enough and with a proper normalization, this state converges exponentially to the GS. Details of the algorithm may be found in Ref. 24.

We compute correlations between rung currents $n_1(\vec{r})$ and perform its Fourier transform

$$\mathcal{J}(\vec{q}) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{r}} e^{i\vec{q}\cdot\vec{r}} \sum_i \langle n_1(i) n_1(i + \vec{r}) \rangle. \quad (7)$$

The strongest signal in the Fourier transform is found for $\vec{Q} = (\pi, \pi)$, suggesting a staggered current pattern as shown in Fig. 1. This quantity converges to its GS value as the projector parameter θ increases as shown in the inset of Fig.

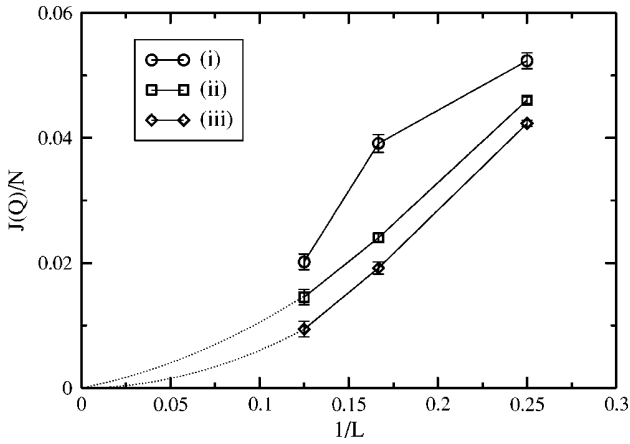


FIG. 5. Finite-size scaling of the current correlations $\mathcal{J}(\vec{Q})/N$ showing no long-range order in the thermodynamic limit. The parameters are (i) the same as Fig. 4 except for $t_{\perp}=0.5$; (ii) $U=V=0.3$, $J=1.6$, and $t_{\perp}=0.5$ at half-filling; (iii) $U=0.75$, $V=0$, $J=1$, and $t_{\perp}=0$ at 1/8 doping. Typically the GS value is obtained for $\theta=20$.

4. In order to obtain information in the thermodynamic limit, one has to make an extrapolation of these GS values with a $1/L$ finite-size scaling, where L is the linear size ($L=4, 6$, and 8 in our simulations). Note that the total number of sites is $N=2L^2$.

Following our previous mean-field arguments, in order to prefer a phase with staggered current, we choose $g>g'$ and $U_c=0$, with a small $t_{\perp}$. As shown on Fig. 4 for $U=0$, $V=0.5$, and $J=2$, and $t_{\perp}=0.1$, our values are rather constant

with size, as expected in an Ising-like phase. Both the largest distance real-space correlations $J(L/2, L/2)$ and the Fourier transform $\mathcal{J}(\vec{Q})/N$ converge to the same finite value (within error bars), meaning long-range order in the thermodynamic limit.

As expected from our analytical estimates in (5), if ΔU or $t_{\perp}$ gets too large, long-range order disappear as shown in Fig. 5. Since we can also perform the QMC simulation at finite doping without the sign problem, we have chosen to work at 1/8 doping for some parameters shown on Fig. 5. Again, rung-current correlations vanish in the thermodynamic limit since the Fermi surface is not nested anymore.

From the analytical estimates based on the mapping to the spin one antiferromagnetic Heisenberg model and the detailed fermion QMC calculations without the sign problem, we can demonstrate the existence of the SIC phase at half-filling in a bilayer model. We have also shown that this rather subtle phase can be easily destabilized by large U and doping; therefore, the findings of this work severely constrain the possibility of current carrying ground states in the high T_c cuprates. The parameter range of stability discovered in this work could guide the search of the current carrying ground states in other strongly correlated systems, for example, the heavy fermion systems.

This work is supported by the NSF under Grant No. DMR-0342832 and the US Department of Energy, Office of Basic Energy Sciences under Contract No. DE-AC03-76SF00515. S.C. thanks IDRIS (Orsay) and SLAC (Stanford) for allocation of CPU time. C.W. is also supported by Stanford University.

¹I. Affleck and J. B. Marston, Phys. Rev. B **37**, R3774 (1988).
²T. C. Hsu, J. B. Marston, and I. Affleck, Phys. Rev. B **43**, 2866 (1991).
³X. G. Wen and P. A. Lee, Phys. Rev. Lett. **76**, 503 (1996).
⁴C. M. Varma, Phys. Rev. Lett. **83**, 3538 (1999).
⁵S. Chakravarty, R. B. Laughlin, D. K. Morr, and C. Nayak, Phys. Rev. B **63**, 094503 (2001).
⁶D. F. Schroeter and S. Doniach, Phys. Rev. B **66**, 075120 (2002).
⁷P. Chandra, P. Coleman, J. Mydosh, and V. Tripathi, Nature (London) **417**, 831 (2002).
⁸J. O. Fjærestad and J. B. Marston, Phys. Rev. B **65**, 125106 (2002).
⁹C. J. Wu, W. V. Liu, and E. Fradkin, Phys. Rev. B **68**, 115104 (2003).
¹⁰M. Tsuchiizu and A. Furusaki, Phys. Rev. B **66**, 245106 (2002).
¹¹H. J. Schulz, Phys. Rev. B **53**, R2959 (1996).
¹²E. Orignac and T. Giamarchi, Phys. Rev. B **56**, 7167 (1997).
¹³D. J. Scalapino, S. R. White, and I. Affleck, Phys. Rev. B **64**, 100506(R) (2001).

¹⁴K. Tsutsui, D. Poilblanc, and S. Capponi, Phys. Rev. B **65**, 020406(R) (2002).
¹⁵J. B. Marston, J. O. Fjærestad, and A. Sudbø, Phys. Rev. Lett. **89**, 056404 (2002).
¹⁶U. Schollwöck *et al.*, Phys. Rev. Lett. **90**, 186401 (2003).
¹⁷D. Scalapino, S. C. Zhang, and W. Hanke, Phys. Rev. B **58**, 443 (1998).
¹⁸P. Bouwknegt and K. Schoutens, Phys. Rev. Lett. **82**, 2757 (1999).
¹⁹D. Duffy, S. Haas, and E. Kim, Phys. Rev. B **58**, R5932 (1998).
²⁰H. H. Lin, L. Balents, and M. P. A. Fisher, Phys. Rev. B **58**, 1794 (1998).
²¹H. Frahm and M. Stahlsmeier, Phys. Rev. B **63**, 125109 (2001).
²²C. J. Wu, J. P. Hu, and S. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **91**, 186402 (2003).
²³F. F. Assaad *et al.*, Europhys. Lett. **63**, 569 (2003).
²⁴F. F. Assaad, M. Imada, and D. J. Scalapino, Phys. Rev. B **56**, 15 001 (1997).