Université Pierre et Marie Curie

THESE DE DOCTORAT

Spécialité : PHYSIQUE THEORIQUE

présentée par

Edouard BOULAT

pour obtenir le titre de docteur de l´Université Paris VI.

Sujet :

Le modèle de Hubbard SU(4) à une dimension :
une approche de la dégénérescence orbitale.

Soutenue le 11 juillet 2003 devant la commission d'examen composée de :

Patrick AZARIA	Directeur de thèse
Pascal DEGIOVANNI	Examinateur
Vladimir DOTSENKO	Examinateur
Benoît DOUÇOT	Rapporteur
Antoine GEORGES	Examinateur
Thierry GIAMARCHI	Rapporteur
Philippe LECHEMINANT	Invité

Néanmoins il gémissait, la tête toujours enfoncée et enveloppée : « le pou est mort, vive le pou ». Et un peu plus tard : « Existe-t-il le pou qui, pris enfin, ne laisse pas de petits ? Le pou-clef ?»

S. Beckett, *Murphy*.

Remerciements

S´il est exercice qui se plie mal à l´unidimensionnalité de la prose, je veux bien croire qu´il s´agit des remerciements, qui mêlent l´immêlable. En omettant l´essentiel, dans un ordre nécessairement arbitraire. Le tourment fut apaisé, et la question tranchée, à l´ombre des hanches solides de la Tradition : mes premiers remerciements vont à l´auteur de la première des pages de remerciements. Outre son efficacité, ce choix m´offre la certitude espiègle d´arracher quelques baillements de complaisance.

Je tiens tout d´abord à remercier Patrick Azaria pour avoir accepté de diriger ma thèse. Ces trois années furent pleines, denses, et les creux de l´inévitable houle proportionnés à tout ce que j´ai appris en sa compagnie, jour après jour. Ce quotidien a eu pour cadre le L.P.T.L., dont je remercie le directeur Bertrand Guillot pour m´y avoir accueilli, et pour avoir toujours facilité mes aventures administratives. J´ai eu la chance de voir mon travail de thèse suivi également de près par Philippe Lecheminant ; outre le plaisir de la collaboration scientifique, il m´a offert son oreille attentive et ses conseils avisés qui m´ont été d´un grand secours.

Un grand merci à Benoît Douçot et à Thierry Giamarchi, qui ont accepté sans hésiter d´ajouter à leur emploi du temps déjà chargé la lourde tâche de rapporteur de cette thèse. Je remercie également les autres membres du jury, Vladimir Dotsenko, Antoine Georges et Pascal Degiovanni, qui ont bien voulu être les examinateurs de ce travail.

Michel Caffarel et Roland Assaraf ont effectué les simulations numériques présentées dans ce travail. Je salue leur constante bonne humeur au cours de cette collaboration, en dépit des errements ou exigences de “l´équipe du L.P.T.L.”

Ma gratitude va également à Claire Lhuillier, pour son soutien et pour les discussions que nous avons eues.

Mon passage au L.P.T.L. a été emaillé par de nombreuses rencontres. Que soit remercié l´ensemble des membres du L.P.T.L., qui animent ce lieu et contribuent à le rendre agréable. Plus particulièrement, je voudrais remercier Chitra, toujours prête à rendre service, pour sa compagnie vivifiante. Je salue également la promiscuité regrettée de la pièce 4C, creuset remarquable où Mathieu, Sylvain et Pietro, de collègues sont devenus amis. Merci aussi à Maria, qui est venue redonner un peu de vie à cette même pièce 4C.

L´occasion m´est donnée d´adresser une pensée à Marcel Tappaz, qui, le premier, m´a fait franchir la porte d´un laboratoire.

Enfin, je remercie tous ceux, parents, amis, qui ont suivi l´aventure de ma thèse de loin, et y ont contribué de cette manière : puisse la sècheresse de cette affirmation être interprétée comme pudeur.

Table des matières

Introduction **13**

I Introduction du modèle de Hubbard SU(4) **23**

I.1 Le modèle sur réseau 23

I.1.1 Un modèle de Hubbard pour la dégénérescence orbitale 23

I.1.2 Les symétries du modèle de Hubbard SU(4) 29

I.2 Description continue à faible couplage. 33

I.2.1 Théorie libre $U = 0$ 34

I.2.2 Limite continue de l´interaction 46

II Etude en dehors du demi remplissage **55**

II.1 Le quart de remplissage 56

II.1.1 Limite de fort couplage 56

II.1.2 Faible couplage 57

II.1.3 Fonctions de corrélation 60

II.2 Autour du quart de remplissage 64

II.2.1 Faible dopage 64

II.2.2 Fort dopage 67

III Etude du demi remplissage **71**

III.1 Le demi remplissage 72

III.1.1 Théorie continue 74

III.1.2 Régime SO(8) 82

III.1.3 Régime Heisenberg SO(6) 91

III.1.4 Résultats numériques 100

III.1.5 Résumé des résultats 112

III.2 Autour du demi remplissage 113

III.2.1 Prédictions théoriques 114
III.2.2 Résultats numériques 117
III.3 Diagramme des phases 121

IV Modèle spin-orbital 125

V Symétrie élargie et classification des phases 147
V.1 Cas général 148
V.1.1 Elargissement de symétrie 148
V.1.2 Dualités 150
V.1.3 Conséquences physiques 153
V.1.4 Robustesse des résultats 160
V.1.5 Conclusion 161
V.2 Brisure de SU(4) en SU(2)×U(1)×$\mathbb{Z}_2$ 163
V.2.1 Hamiltonien microscopique 164
V.2.2 Limite continue 166
V.2.3 Classification des phases SO(6) 169
V.2.4 Diagramme des phases 178
V.3 Conclusion 184

Conclusions 187

Annexes 191

A Quelques notions sur les groupes de Lie 191
A.1 Construction des représentations 191
A.1.1 Structure des représentations 191
A.1.2 Application à SU(4) et SO(8) 195
A.2 Règles de sélection 202
A.2.1 Classes de congruence 202
A.2.2 Contraintes sur les facteurs de forme 203

B Calcul de la fonction β resommée 205
B.1 Cas général 205
B.2 Exemple : modèle à symétrie SO(m)×SO(n) 207

C Construction des modes zéros du secteur solitonique **209**
C.1 Cas abélien 209
C.2 Cas non abélien 211

Bibliographie **213**

Introduction

En 1957, L.D. Landau, avec la théorie du liquide de Fermi, propose une justification à la description des propriétés électroniques des matériaux en terme de quasi-particules indépendantes. Dans le cadre de cette théorie [1, 2], les quasi-particules peuvent être vues comme des électrons “habillés” par les interactions : leurs nombres quantiques de spin et de charge sont ceux de l´électron et les interactions sont prises en compte par des paramètres effectifs (masse effective, durée de vie finie). Cette continuité adiabatique entre les excitations du système en interaction et les états du gaz d´électrons libres permet de décrire de manière unique une large classe de systèmes électroniques, même s´ils diffèrent fortement à l´échelle microscopique. L´universalité d´une telle description est remarquable : les détails microscopiques des interactions peuvent être oubliés au profit d´un nombre fini de paramètres effectifs. Cette universalité est élégamment comprise dans le cadre du groupe de renormalisation, outil dont Landau ne disposait pas : le liquide de Fermi est un point fixe stable du groupe de renormalisation pour les systèmes électroniques [3].

Cependant, dès 1963, J.M. Luttinger propose un modèle unidimensionnel de fermions sans spin en interaction dont le fondamental n´est pas un liquide de Fermi [4] : les interactions, dans ce modèle, ont un effet drastique, et la notion de continuité adiabatique entre le fondamental du système sans interaction et le fondamental du système en interaction est perdue. Il s´avère que ce modèle particulier est un paradigme, décrivant la classe d´universalité du fluide électronique métallique à une dimension : le liquide de Luttinger [5, 6, 7]. De manière plus générale, la découverte du liquide de Luttinger a montré que les liquides de Fermi n´épuisaient pas les comportements des systèmes fermioniques en interaction, et a ouvert la possibilité théorique de nouvelles phases de la matière. De plus, si le liquide de Luttinger, qui constitue le premier exemple de “non liquide de Fermi”, est un modèle unidimensionnel, rien n´interdit en principe l´existence de phases non liquides de Fermi dans des systèmes de dimensionnalité supérieure deux ou trois. Ces non liquides de Fermi ont suscité d´intenses recherches, motivées, entre autres, par la suggestion de P.W. Anderson [8] que la phase métallique des supraconducteurs à haute température critique n´est pas un liquide de Fermi.

Du point de vue théorique, l´étude des non liquides de Fermi est considérablement compliquée du fait de l´absence de continuité adiabatique entre les électrons - les briques élémentaires - et les modes collectifs du système - qui déterminent ses propriétés thermodynamiques et dynamiques. Cette spécificité invalide la plupart des approches perturbatives classiques. A cet égard, les systèmes unidimensionnels jouent un rôle particulier à plus d´un titre. D´une part, la réduction de la dimension tend à exacerber l´effet des interactions, favorisant l´émergence d´un non liquide de Fermi. Ce fait est dû à la réduction de la taille de l´espace des phases du système : de manière naïve, à une dimension, les collisions se produisent avec une probabilité un. A l´importance accrue des interactions viennent s´ajouter les fluctuations quantiques, dont les effets augmentent lorsque la dimension est réduite. Un autre aspect des systèmes unidimensionnels est leur relative simplicité mathématique. Il en découle que le théoricien dispose d´un ensemble de méthodes puissantes, non perturbatives, qui sont particulièrement adaptées à l´étude des systèmes fortement corrélés, et rendent même parfois une solution exacte accessible. Les systèmes unidimensionnels servent ainsi de “laboratoire” pour l´étude des non liquides de Fermi, permettant de tester de nouvelles méthodes, ou de nouveaux concepts, qui pourront éventuellement conserver leur pertinence dans des systèmes de dimension plus élevée. Enfin, les systèmes à une dimension trouvent une réalisation expérimentale dans certains matériaux caractérisés par une forte anisotropie spatiale. Le matériau lui-même étant tridimensionnel, le caractère unidimensionnel ne se manifeste que sur une plage de température $T > T_{\mathrm{1D}}$ où T_{1D} est la température de fusion dans les directions transverses à l´axe d´anisotropie du système. Mentionnons également les fameux nanotubes de carbone, qui constituent de véritables fils quantiques : il s´agit de systèmes strictement unidimensionnels, à toute température.

Parmi les modèles simples, qui ont contribué de manière significative à la compréhension de propriétés génériques dans les systèmes d´électrons fortement corrélés, le modèle de Hubbard [9, 10, 11] a une place de choix. Malgré sa grande simplicité, ce modèle, qui décrit de manière minimale la compétition entre les effets de la délocalisation et des interactions, est encore très imparfaitement compris en dimension deux et trois. A une dimension, le modèle de Hubbard à une bande a été extensivement étudié par des méthodes complémentaires (Ansatz de Bethe, bosonisation, simulations numériques), et il s´avère qu´il s´agit d´un non-liquide de Fermi pour toute valeur non nulle de la répulsion coulombienne. Le spectre de basse énergie exhibe la propriété de séparation spin-charge : les électrons se “fractionnalisent” en une partie de spin (le spinon) et une partie de charge (le holon). Le secteur de charge est un liquide de Luttinger, sauf au demi remplissage où le modèle subit une transition métal-isolant. Il s´agit d´un isolant de Mott, c´est-à-dire que ce caractère isolant est uniquement dû aux interactions coulombiennes qui localisent les charges sur les ions du réseau. Certaines de ces propriétés ont pu être observées expérimentalement, comme par exemple la séparation spin-charge [12] et la présence des spinons [13, 14]. Dans la limite de forte répulsion coulombienne et au demi remplissage, le modèle de Hubbard à une bande dégénère en un modèle ne portant que sur les degrés de liberté de spin : en chaque site, un électron est localisé, et la dynamique du spin $s = \frac{1}{2}$ qu´il porte est déterminée par le hamiltonien de Heisenberg antiferromagnétique. A une dimension, l´ordre de Néel, qui est la configuration minimisant l´énergie classiquement, est complètement détruit par les fluctuations quantiques. C´est une conséquence du théorème de Mermin - Wagner [15], qui interdit la brisure spontanée d´une symétrie continue à une dimension. Le fondamental est un singulet de spin, état hautement quantique [1] avec un ordre antiferromagnétique à quasi longue portée. L´absence d´ordre à longue portée justifie l´appelation de “liquide de spin” pour ce système. En outre, à suffisament longue distance, les fonctions de corrélation spin-spin décroissent selon une loi de puissance, si bien que la longueur de corrélation est infinie. Le système est donc critique (invariant d´échelle), ce qui est intimement relié à l´absence de gap spectral : nous parlerons d´un liquide de spin sans gap.

Une des problématiques importantes de la matière condensée théorique est la classification des différents types de liquide de spin. A une dimension, la théorie conforme fournit un outil remarquable pour classer les liquides de spin sans gap : les différentes classes d´universalité sont très fortement contraintes par la symétrie conforme, qui permet en principe le calcul de toutes les fonctions de corrélation [16]. Cependant, la situation est bien plus confuse pour les liquides de spin gapés, pour lesquels la longueur de corrélation est finie et donc l´ordre à courte portée. Ces liquides sont particulièrement intéressants puisqu´ils peuvent permettre de stabiliser des excitations collectives “exotiques”, mais leur classification est plus ardue du fait de la disparition de la structure conforme. Un exemple fameux de liquide de spin gapé est fournit par le modèle de Heisenberg antiferromagnétique pour des spin $s = 1$. Ce

[1]Nous entendons par là un état superposition d´un grand nombre de configurations classiques.

modèle est dans la classe d´universalité du liquide de Haldane [17], décrit à basse énergie par le modèle sigma non linéaire O(3). En conséquence, le spectre de basse énergie est constitué d´une branche de magnons cohérents. La cohérence du liquide de Haldane signifie que le magnon, excitation de spin 1, est une quasi-particule bien définie. Cette situation s´oppose à celle d´un liquide gapé incohérent, pour lequel le magnon est un état diffusif de deux spinons de spin $\frac{1}{2}$. Par exemple, la chaîne de spin $s = \frac{1}{2}$ dimérisée, qui admet une représentation en terme d´un modèle de sine Gordon, a pour spectre de basse énergie des kinks et anti-kinks de dimérisation, massifs et portant un spin demi-entier, si bien que le magnon n´est pas une particule élémentaire. Mais cette distinction spectrale entre liquides cohérents et incohérents n´épuise pas la richesse des liquides de spin gapés à une dimension. Ainsi, on peut imaginer, par exemple, des excitations singulettes en spin dans le bas du spectre. C´est ce qui se produit pour l´échelle de spin à deux montants dans certaines situations [18], où l´apparition de la branche singulette est attribuable à l´existence d´un nouveau degré de liberté microscopique qui correspond à l´échange des deux montants. Plus généralement, on attend dans l´échelle à deux montants des excitations portant un nouveau nombre quantique, différence de l´aimantation sur les deux montants (si les spin portés par les deux montants appartiennent à des orbitales différentes, ce nombre quantique peut s´interpréter comme un moment orbital). D´autres types de liquide de spin gapés apparaissent lorsque les interactions sont frustrantes, un archétype étant la chaîne de spin $s = \frac{1}{2}$ avec échanges antiferromagnétiques premiers et seconds voisins (modèle $J_1 - J_2$). Dans ce modèle, l´apparition d´un gap de spin s´accompagne du développement d´incommensuration [19, 20], ce qu´on peut directement attribuer à la frustration. Il existe donc un grand nombre de variantes du liquide de spin gapé à une dimension, et la question du cadre permettant leur classification est ouverte. Les caractéristiques qui distinguent ces différents liquides sont en effet variées. Doit-on s´intéresser à l´ordre du fondamental, au contenu spectral, à certaines fonctions de réponses ? Nous aborderons dans cette thèse ce problème de classification, en nous limitant aux liquides de spin gapés portés par l´échelle à plusieurs montants.

Un autre aspect des systèmes d´électrons fortement corrélés est la possibilité d´une transition métal - isolant de Mott, qui est uniquement due aux interactions. Les propriétés de la phase métallique proche du point de transition diffèrent souvent des propriétés métalliques usuelles, ce qui motive l´appelation de métallicité anormale. Un exemple frappant d´un tel comportement est la fréquente forte incohérence des excitations de charge, qui se reflète dans une dépendance inhabituelle en température de la conductivité, tandis que des fluctuations importantes dans les autres degrés de liberté - spin, orbitale - sont également observées au voisinage de la transition [21]. Expérimentalement, la plupart des études de la transition de Mott sont effectuées sur des composés à base de métaux de transition, qui sont des systèmes à électrons d. Dans certains de ces composés, comme VO_2, le fondamental est *non magnétique*. Il est remarquable que la transition de Mott puisse avoir lieu en l´absence d´antiferromagnétisme, contrairement à ce qui se produit dans le modèle école décrivant la transition de Mott, à savoir le modèle de Hubbard à une bande. La frustration est une des causes possibles de la stabilisation de la phase liquide de spin gapé. Cependant, les oxydes de métaux de transition étant des systèmes à électron d, il est également légitime de penser que la dégénérescence orbitale, intrinsèque à ces systèmes, pourrait être responsable de la phase liquide de spin. En fait, à une dimension, il est connu qu´il est difficile d´obtenir un liquide de spin gapé sans frustration et sans briser la symétrie SU(2) de spin, dans un modèle à une bande (une possibilité est néanmoins d´introduire un terme explicite de dimérisation sous l´effet d´une cause extérieure, par exemple celui des phonons [22]). Lorsque des degrés de liberté supplémentaires sont ajoutés, le liquide de spin gapé apparaît naturellement : ainsi, l´échelle de spin à deux montants est génériquement gapée. De manière plus générale, la transition de Mott, qui requiert que les porteurs de charge comportent plusieurs composantes [2], doit entretenir des liens profonds avec la dégénérescence orbitale, qui augmente le nombre de degrés de liberté microscopiques. On s´attend donc naturellement à voir la dégénérescence orbitale jouer un rôle important pour la compréhension des propriétés de ces oxydes de métaux de transition. Une partie de cette thèse sera consacrée à l´étude d´un modèle simple permettant d´élucider les effets de la dégénérescence orbitale à une dimension.

Le problème de la dégénérescence orbitale dans sa généralité est très complexe : l´accroissement du nombre de composantes s´accompagne d´une augmentation plus importante encore des possibilités d´interaction. Néanmoins, dans un certain nombre de cas, le dégénérescence prédite par la théorie des bandes est levée par un processus physique dominant. Par exemple, en présence d´une forte interaction de Hund qui tend à aligner localement les spins des électrons, la dégénérescence orbitale est perdue et on peut décrire le système de manière effective par un réseau Kondo. Les systèmes

[2] La transition se produit en effet lorsqu´il y a un nombre entier d´électron par site, et par définition, dans une bande partiellement remplie, ce qui ne peut se produire que lorsqu´il y a au moins deux composantes - les deux états d´un spin $s = \frac{1}{2}$ dans le modèle de Hubbard à une bande.

à “fermions lourds”, où les électrons qui participent à la formation de ces moments magnétiques locaux appartiennent à des orbitales f, à grande dégénérescence, sont correctement décrits par ce type de modèles. Une autre possibilité est l´existence d´une distorsion Jahn Teller statique du réseau ionique, abaissant la symétrie cristalline et menant à un modèle où de manière effective, une seule bande de conduction contribue.

Dans cette thèse, nous serons intéressés aux cas opposés où la dégénérescence est pertinente. Dans cette approche, l´ensemble des degrés de liberté microscopiques devra être conservé, puisque par hypothèse il n´existe pas de processus physique clairement dominant qui permette de ne considérer qu´un sous-ensemble de ces degrés de liberté. Une hypothèse raisonnable est de supposer que le système est bien décrit par un hamiltonien de type Hubbard, c´est-à-dire dans le cadre de l´approximation des liaisons fortes [3], et ne retenant que des interactions de portée nulle. Pour fixer les idées, le hamiltonien que l´on considère est un modèle de Hubbard généralisé à une dimension :

$$H = -\sum_{i,a,b} t^{ab} \left[c^\dagger_{i,a} c_{i+1,b} + c^\dagger_{i+1,b} c_{i,a} \right] + \sum_i \sum_{abcd} U^{abcd} c^\dagger_{i,a} c_{i,b} c^\dagger_{i,c} c_{i,d},$$

où $c_{i,a}$ est l´opérateur de destruction d´un électron de “couleur” a au site i, la couleur étant un indice représentant à la fois les degrés de liberté de spin et les degrés de liberté orbitaux : $a = (\ell, \sigma)$, $\sigma = \uparrow, \downarrow$ et $\ell = 1, \ldots, N_b$. Ce modèle de Hubbard à N_b bandes est encore très compliqué, un grand nombre de processus physiques étant possibles, ce qui se reflète dans le grand nombre de paramètres possibles U^{abcd} et t^{ab}.

Notre stratégie sera la suivante : nous considérerons tout d´abord le hamiltonien de type Hubbard, le plus simple possible, et susceptible de capturer les effets de la dégénérescence orbitale ; ce hamiltonien possède une grande symétrie SU($2N_b$) :

$$H = -t \sum_{i,a} \left[c^\dagger_{i,a} c_{i+1,a} + \text{h.c.} \right] + \frac{U}{2} \sum_i \left(\sum_a c^\dagger_{i,a} c_{i,a} \right)^2 .$$

De manière pratique, nous nous restreindrons à la situation la plus simple $N_b = 2$. Le hamiltonien à symétrie SU(4) ainsi obtenu retient de manière *maximale* les effets de la dégénérescence orbitale, puisque tous les degrés de liberté - spin et orbitale - jouent exactement le même rôle. Le diagramme des phases de ce modèle extrêmement simplifié se révèlera déjà très riche. La symétrie SU(4) n´est cependant pas du tout

[3] Dans les systèmes à électrons d, la densité électronique moyenne est fortement concentrée autour des atomes.

une symétrie naturelle du hamiltonien microscopique sur réseau ; le hamiltonien de Hubbard SU(4) constitue simplement un point de départ pour une étude en perturbation des processus réalistes brisant la symétrie SU(4). Nous pouvons ainsi espérer mettre en évidence des phases en continuité adiabatique avec les phases du modèle de Hubbard SU(4), ou bien identifier les instabilités dominantes au voisinage du point à symétrie SU(4).

Il est important de remarquer que le point à symétrie SU(4) diffère du point de départ usuel pour l´étude de l´échelle de Hubbard, qui est le point de faible couplage interchaîne. Cette différence est plus visible dans la limite de forte répulsion coulombienne au demi remplissage sur chacune des chaînes, où le hamiltonien de Hubbard dégénère en un hamiltonien de spin. Dans cette limite, il devient clair que certaines des fluctuations - à savoir les fluctuations orbitales, différence des charges sur les deux chaînes - sont négligées dans un développement autour du point de faible couplage interchaîne, tandis qu´au voisinage du point SU(4), ces fluctuations ont la même importance que les fluctuations de spin. Notons que pour cet hamiltonien de spin, la limite de fort couplage interchaîne a également été étudiée [23]. Il s´avère que la phase de liquide de spin gapé obtenue dans ce régime est connectée adiabatiquement à la physique de faible couplage interchaîne. Au contraire, nous verrons que la physique du point à symétrie SU(4) ne peut pas être adiabatiquement connectée à celle du voisinage du point de découplage interchaîne. Le choix du modèle de Hubbard SU(4) comme point de départ constitue donc une approche complémentaire aux approches de faible couplage interchaîne, et fournit un nouveau petit paramètre, la distance au point à symétrie SU(4), qui contrôlera le développement.

Dans ce travail de thèse, nous nous attacherons dans une première partie à élucider le diagramme des phases du hamiltonien de Hubbard SU(4) à une dimension, par des méthodes analytiques spécifiques aux modèles unidimensionnels (bosonisation et invariance conforme). Les résultats de cette étude théorique seront confrontés à des simulations numériques par la méthode de Monte Carlo quantique à température nulle, effectuées dans le cadre d´une collaboration avec Michel Caffarel et Roland Assaraf (laboratoire de chimie théorique de l´université Pierre et Marie Curie).

Les propriétés physiques dépendront fortement du remplissage du modèle (nombre moyen d´electrons par site). Le chapitre I sera consacré à la dérivation de ce hamiltonien de Hubbard SU(4), ainsi qu´à l´établissement des notations dont nous nous servirons dans la suite de la thèse. Nous rappelerons dans la première partie du chapitre II les résultats obtenus par Azaria *et al.* [24] et Assaraf *et al.* [25] au quart de remplissage (un électron par site) : le système subit une transition de Mott pour une valeur finie de l´interaction coulombienne U, et les degrés de liberté de spin demeurent critiques à toute valeur de U. Dans la deuxième partie de ce chapitre, nous montrerons que lorsque l´on s´éloigne du quart de remplissage, tout en restant loin du demi remplissage, la théorie effective en spin n´est pas affectée tandis que le système devient métallique.

Dans le chapitre III, nous présenterons le diagramme des phases au demi remplissage, et dans son voisinage immédiat. Au demi remplissage, nous verrons que le système est un liquide de spin gapé à toute valeur de l´interaction coulombienne. En outre, nous identifierons deux régimes des paramètres où le modèle de Hubbard est décrit par une théorie quasi intégrable, respectivement à faible U où la symétrie est élargie à SO(8) et le modèle décrit par le modèle de Gross Neveu SO(8) [26], et à fort U où la théorie effective est constituée de 6 fermions de Majorana massifs en faible interaction répulsive.

Dans une deuxième partie, nous étudierons l´effet de la brisure de la symétrie SU(4) au voisinage du quart de remplissage par des opérateurs physiques. Ceux-ci seront essentiellement de deux types : d´une part, des “champs magnétiques” généralisés, comme le champ magnétique physique H, qui se couplent de manière linéaire aux densités de spin. D´autre part, nous étudierons l´effet de perturbations qui peuvent s´écrire dans la limite continue comme une interaction marginale entre les courants de la théorie. De tels opérateurs sont par exemple l´interaction de Hund, ou une interaction densité-densité entre les deux orbitales. Dans ce cadre, le chapitre IV sera consacré à l´etude du modèle spin-orbital proposé par Kugel et Khomskii [27] pour les oxydes de métaux de transition. Ce modèle est également équivalent à un modèle de deux chaînes de spin $s = \frac{1}{2}$, couplées par un terme à quatre spin de l´ordre de grandeur des échanges à deux spin. Nous mettrons notamment en évidence une phase de liquide de spin gapé, qui diffère qualitativement de la phase obtenue à faible échange à quatre spin [28]. Le comportement de ce modèle sous champ magnétique sera également étudié.

Dans le chapitre V, nous poursuivrons l´investigation des effets de la brisure de la symétrie, en autorisant notamment une interaction de Hund. Nous établirons que dans une large partie de l´espace des paramètres, un gap de spin se développe, et que la théorie effective à basse énergie possède une symétrie élargie SO(6), ce qui nous conduira à définir un “liquide de spin SO(6)”. Cet élargissement de la symétrie peut s´accomplir de différentes manières, les différentes théories effectives résultantes étant reliées par des symétries de dualité. Une classification des différentes phases de liquide de spin gapés à symétrie SO(6), basée sur ces dualités, sera proposée, qui fera en particulier apparaître génériquement deux classes de liquides de spin, associées à un ordre respectivement diagonal (liquide “conventionnel”) et hors-diagonal (liquide “chiral”) pour les électrons sur le réseau.

Chapitre I

Introduction du modèle de Hubbard SU(4)

I.1 Le modèle sur réseau

I.1.1 Un modèle de Hubbard pour la dégénérescence orbitale

La première étape dans ce travail va être la définition d´un modèle suffisamment simple pour décrire les effets de la dégénérescence orbitale. La situation typique qui nous interessera est celle des systèmes à électrons d, de moment orbital 2, qui possèdent une bande de conduction dégénérée 10 fois (en incluant la dégénérescence de spin). Cette grande dégénérescence n´est cependant pas protégée, et la situation générique est illustrée par la figure I.1, qui montre les levées successives de la dégénérescence à mesure que la symétrie cristalline diminue. La situation générique est donc une levée totale de cette dégénérescence. Cependant, pourvu que la largeur de bande soit grande devant les écarts entre les bandes, la possibilité pour des électrons appartenant à différentes bandes d´entrer sur un pied d´égalité dans les processus de basse énergie aura probablement des conséquences importantes. Mentionnons qu´il existe bien d´autres situations qui présentent cette propriété de dégénérescence des bandes de conduction, comme les nanotubes de carbone "armchair", ou encore des matériaux formés d´empilements de cages de fullérène.

L´approximation de base que l´on fera est celle des liaisons fortes, qui considére que les fonctions d´onde électroniques sont localisées sur les sites du réseau sous-jacent. Cette approximation est naturelle pour les électrons d, la densité électronique étant fortement concentrée autour des ions du réseau. Si N_b types d´électrons des couches externes, (N_b orbitales) participent aux propriétés électroniques, introduisons

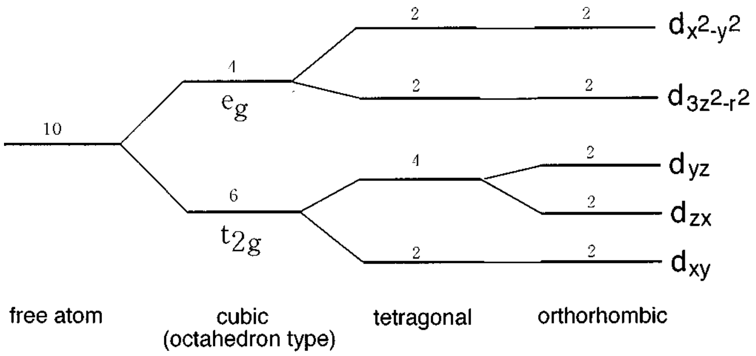


FIG. I.1: Levée de la dégénérescence d´une orbitale de conduction $3d$ en fonction de la symétrie cristalline. D´après [21].

$W_a(x-R_j)$, la fonction d´onde d´un électron de couleur $a=(\ell,\sigma)$, $\ell=1\ldots N_b$, $\sigma=\uparrow,\downarrow$, situé sur l´atome j de coordonnée R_j, et $c^\dagger_{j,a}$ l´opérateur de création de cet électron

$$\langle x|\, c^\dagger_{j,a}\,|0\rangle = W_a(x-R_j). \tag{I.1}$$

Les opérateurs de création et d´annhilation satisfont aux relations d´anticommutation canoniques :

$$\left\{c^\dagger_{i,a}, c_{j,b}\right\} = \delta_{ij}\delta_{ab}\,, \qquad \{c_{i,a}, c_{j,b}\} = 0. \tag{I.2}$$

L´orbitale de Wannier $W_a(x-R_j)$, peut en principe être déterminée de manière auto-consistante, de façon à prendre en compte les effets du potentiel ionique et les premiers effets de l´interaction coulombienne entre électrons. Sa forme précise ne jouera pas de rôle dans la suite, sa seule particularité importante étant d´être ramassée autour de l´atome j.

L´amplitude des sauts du site j au site i est simplement donnée par le recouvrement des orbitales atomiques de Wannier :

$$t^{ab}_{ij} = \int \mathrm{d}x\; W^*_a(x-R_i)\,\frac{\partial^2_x}{2m}\,W_b(x-R_j). \tag{I.3}$$

La partie cinétique de l´hamiltonien, qui décrit la tendance à la délocalisation, est alors :

$$H_{\mathrm{cin}} = -\sum_{i,j}\sum_{a,b} t^{ab}_{ij}\; c^\dagger_{i,a}c_{j,b} + \mathrm{h.c.} \tag{I.4}$$

L´interaction coulombienne résiduelle est prise en compte par un terme du type :

$$H_{\mathrm{Coulomb}} = \sum_{ijkl}\sum_{abcd} U^{abcd}_{ijkl}\; c^\dagger_{i,a}c^\dagger_{j,b}c_{k,c}c_{l,d} \tag{I.5}$$

avec les couplages U_{ijkl}^{abcd} donnés par :

$$U_{ijkl}^{abcd} = \frac{1}{2}\int dx\,dx'\; W_a^*(x-R_i)W_b^*(x'-R_j)\,V(x-x')\;W_c(x'-R_k)W_d(x-R_l), \quad \text{(I.6)}$$

où $V(x-y)$ est le potentiel coulombien écranté.

Jusque là, nous n´avons fait que réécrire le hamiltonien dans la base des états localisés, et le modèle que l´on a obtenu, de hamiltonien $H_{\text{cin}} + H_{\text{Coulomb}}$, si il décrit certainement les propriétés électroniques d´une grande classe de matériaux, mérite à peine son titre de modèle : il est trop complexe.

Dans le souci de simplifier le modèle, on ne retient que les couplages coulombiens de portée nulle (sur le même site). Cette approximation suppose que la longueur d´écrantage est beaucoup plus petite que la distance entre deux sites consécutifs (la maille du réseau a_0), et n´est pas toujours justifiée [1].

Ceci conduit à considérer le hamiltonien $H = H_{\text{cin}} + H_{\text{coulomb}}$ suivant :

$$\boxed{H = -\sum_{\langle ij\rangle} t_{ij} \sum_a \left[c_{i,a}^\dagger c_{j,a} + c_{j,a}^\dagger c_{i,a}\right] + \sum_i \sum_{abcd} U_{iiii}^{abcd} c_{i,a}^\dagger c_{i,b} c_{i,c}^\dagger c_{i,d}} \quad \text{(I.7)}$$

le symbole $\langle ij\rangle$ indiquant que les sites i et j sont premiers voisins.

La symétrie naturelle de rotation SU(2) dans l´espace de spin impose des relations entre les constantes de couplage qui apparaissent dans (I.7), mais dans le cas général, un grand nombre de couplages demeurent libres.

Modèle de Hubbard SU(2)

Commençons par nous intéresser à une limite simple de (I.7), où une seule bande est prise en compte. Seules subsistent deux types d´électrons $a = \uparrow, \downarrow$, et la symétrie SU(2) réduit l´hamiltonien à :

$$H = -t \sum_{\langle ij\rangle} \sum_{a=\uparrow,\downarrow} \left[c_{i,a}^\dagger c_{j,a} + \text{h.c.}\right] + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad \text{(I.8)}$$

où on a introduit le nombre d´occupation du fermion de projection de spin σ au site i : $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$. Il s´agit du modèle originellement proposé par Hubbard [9] en 1963. Ce modèle, que nous désignerons par la suite modèle de Hubbard SU(2), a fait ses preuves dans la description de situations où de manière effective, une seule

[1] Dans un matériau, les termes d´interaction densité-densité entre plus proches voisins U_{iijj} ne sont pas nécessairement petits devant t_{ij} et pourront jouer un rôle au voisinage des transitions. Les échanges magnétiques plus proches voisins $U_{ijji}\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j$ ont aussi été omis.

orbitale de conduction contribue[29]. Notons que certains matériaux à électrons d peuvent entrer dans cette classe. En effet, la dégénérescence orbitale peut être levée de diverses manières : par un champ cristallin, un effet Jahn Teller, un couplage de Hund, etc.., qui, si ils sont suffisamment forts, peuvent isoler une seule bande de conduction, séparée des autres par une énergie $E_b \gg U, t$.

Le modèle de Hubbard SU(2) est le modèle le plus simple qui retienne la compétition entre la délocalisation (terme cinétique) et les fortes interactions. Il a permis d´identifier un certains nombres de comportements typiques des fortes corrélations, surtout dans sa version unidimensionnelle [2], qui est exactement soluble par Ansatz de Bethe [30]. Le modèle de Hubbard à une dimension prédit ainsi l´existence d´une transition métal-isolant uniquement due aux interactions, la transition de Mott, qui a lieu à demi remplissage (un électron par site). Dans la phase isolante de Mott ($U > 0$), les charges sont localisées sur les ions du réseau, les degrés de liberté de spin demeurant critiques.

Si ce modèle a fait progresser la compréhension des systèmes à une bande en forte interaction, c´est justement par sa grande simplicité : il contient les ingrédients minimaux nécessaires à l´identification des mécanismes pertinents dans ces systèmes, et l´on peut le qualifier de modèle paradigmatique pour les systèmes à une bande en forte interaction.

En outre, il a servi de laboratoire pour tester les méthodes analytiques non perturbatives disponibles à une dimension, particulièrement adaptées à l´étude des fortes corrélations, notamment la bosonisation et la théorie conforme [31, 32, 16, 33].

Modèle de Hubbard généralisé

Néanmoins, dans les situations où plusieurs bandes sont dégénérées ou quasi dégénérées (c´est-à-dire dès que la condition $E_b \gg U, t$ n´est plus réalisée), le modèle de Hubbard SU(2) n´est clairement pas suffisant.

Nous nous attacherons dans la suite à dégager et étudier un modèle pour les propriétés électroniques de ces matériaux où la (quasi) dégénérescence des orbitales de conduction doit être prise en compte. La question que nous devons nous poser est la suivante : existe-t-il un modèle paradigmatique dans le cas où N_b bandes de conduction contribuent, et où les interactions sont fortes, à l´instar du modèle de

[2]Les modèles de Hubbard SU(2) à deux et trois dimensions ne sont malheureusement pas solubles, et c´est encore un problème ouvert que de décrire précisément leurs comportements, à l´aide de méthodes analytiques approximatives, et de méthodes de simulations numériques.

Hubbard SU(2) lorsqu´une seule bande contribue ? En d´autres termes, existe-t-il une sorte d´universalité dans les effets de la dégénérescence et si oui, quel modèle minimal exhibe ces comportements caractéristiques de la dégénérescence orbitale ?

La réponse à cette question n´est pas immédiate. Si l´on cherche à réduire le nombre de paramètres entrant dans l´hamiltonien (I.7) en imposant la seule symétrie naturelle, l´invariance SU(2) dans l´espace de spin, il contient encore trop de paramètres [3] pour pouvoir être considéré comme un modèle raisonnable (pour $N_b = 2$, l´espace des paramètres est de dimension 10 !). Une des généralisations possibles du modèle de Hubbard SU(2) est d´imposer une symétrie suffisante pour réduire au maximum le nombre de paramètres. Cette réduction est maximale lorsque tous les électrons jouent exactement le même rôle, et le modèle résultant possède alors une invariance SU($2N_b$). Cette énorme symétrie du modèle sur réseau n´est évidemment pas réaliste, le hamiltonien microscopique étant même loin de ce point isotrope. Notons également que l´éventuelle pertinence de ce modèle à symétrie SU($2N_b$) pour la description de N_b bandes dégénérées sera très probablement limitée à des valeurs-de N_b faibles (la symétrie SU($2N_b$) est d´autant moins naturelle que N_b est grand [4]). Cependant, ce modèle très simplifié prend en compte de manière maximale la dégénérescence, et c´est cette simplicité conceptuelle que l´on attend en premier lieu d´un modèle école.

Au delà des raisons techniques qui portent à l´étude de ce modèle particulier, qui après tout ne constitue qu´un point dans l´immense espace des paramètres du hamiltonien plus général (I.7), nous verrons, principalement dans le cas $N_b = 2$, que les anisotropies dans les couplages (c´est-à-dire les termes qui brisent la symétrie SU($2N_b$)) sont, dans une large partie du diagramme des phases, inessentielles à basse énergie : les propriétés asymptotiques à longue distance et à long temps sont essentiellement [5] celles du modèle de Hubbard SU($2N_b$). C´est cette sorte d´universalité qui confèrera en définitive au modèle de Hubbard SU($2N_b$) un statut particulièrement intéressant parmi l´ensemble des modèles multibandes.

[3]Par exemple, le nombre de paramètres de l´interaction coulombienne est $N_b^2(2N_b - 1)^2$ en général, et $N_b^2(N_b^2 + 1)/2$ en imposant la symétrie SU(2).

[4]Néanmoins, des modèles à symétrie SU($2N_b$) dans la limite $N_b \to \infty$ peuvent être considérés, cette approximation de grand N_b fournissant un développement intéressant permettant de capturer certains effets des corrélation[34]. Nous nous restreindrons à l´étude des valeurs raisonnables de N_b, où la symétrie SU($2N_b$) peut avoir un sens physique, c´est-à-dire, concrètement, est susceptible d´être réalisée de manière effective dans la limite infrarouge.

[5]Nous verrons qu´il peut exister des subtilités dans le mécanisme d´élargissement de symétrie à basse énergie, celle-ci ayant lieu modulo une dualité.

De manière à pouvoir capturer des propriétés non perturbatives liées à la dégénérescence orbitale, nous étudierons le modèle de Hubbard SU($2N_b$) à une dimension, où des techniques analytiques puissantes sont disponibles. La question de l´extension éventuelle des propriétés du modèle de Hubbard SU($2N_b$) à deux et trois dimensions restera ouverte. Enfin, nous nous intéresserons principalement à la plus simple des situations où seulement deux orbitales de conduction sont dégénérées.

Modèle de Hubbard SU(4)

Nous considérons donc deux orbitales de conduction $\ell = 1, 2$, si bien qu´une base de l´espace local, de dimension 4, à une particule, est $\{|a\rangle\}_{a=1\ldots4} = \{|\ell\sigma\rangle\}_{\substack{\ell=1,2 \\ \sigma=\uparrow,\downarrow}}$. Pour la suite, la correspondance : $1 \to (1,\uparrow), 2 \to (1,\downarrow), 3 \to (2,\uparrow), 4 \to (2,\downarrow)$ sera sous-entendue. L´hamiltonien du modèle de la chaîne de Hubbard SU(4) à N sites est alors :

$$\boxed{H = H_0 + H_U = -t \sum_{i=1}^{N} \sum_{a} \left[c^\dagger_{i,a} c_{i+1,a} + c^\dagger_{i+1,a} c_{i,a} \right] + U \sum_{i=1}^{N} \sum_{a<b} n_{i,a} n_{i,b}} \tag{I.9}$$

Cet hamiltonien est extrêmement simple, et ne dépend que de deux paramètres, U/t et le remplissage n (nombre moyen d´électrons par site). Du problème initial complexe, on n´a retenu que la compétition entre la délocalisation (les états propres du terme cinétique sont des superpositions d´ondes planes $c^\dagger_{k,a}|0\rangle = \sum_j e^{-ikj} c^\dagger_{j,a}|0\rangle$) et la localisation (les états propres du terme d´interaction sont les états localisés $\prod_{j,a} (c^\dagger_{j,a})^{m_{j,a}} |0\rangle$, où $m_{j,a} = 0, 1$). Le résultat de cette compétition dans le modèle à une bande (modèle de Hubbard SU(2)) est bien connu : à demi remplissage (un électron par site), une transition de Mott a lieu à $U = 0$, qui localise la charge sur les ions du réseau, tandis que les degrés de liberté de spin restent critiques à toute valeur de $U > 0$. Les excitations de spin du modèle de Hubbard à une bande peuvent être décrites en termes de spinons, particules de spin $s = \frac{1}{2}$. Notons que la séparation spin-charge a pour conséquence que la transition métal/isolant, que l´on peut induire par exemple par un potentiel chimique suffisament fort, n´influence pas l´ordre en spin.

Dans le cas de deux bandes, malgré la simplicité de (I.9), le modèle n´est pas intégrable, et l´établissement du diagramme des phases requiert l´utilisation de méthodes approchées. Ces méthodes théoriques ont été appliquées avec succès au modèle de Hubbard SU(2), et il est naturel de les étendre à l´étude du hamiltonien de Hubbard SU(4).

Nous utiliserons la bosonisation pour obtenir une théorie effective continue, puis le groupe de renormalisation permettra d´identifier la théorie effective à basse énergie, qui donnera accès à la nature du fondamental, et des excitations collectives de basse énergie. Des simulations numériques par la méthode de Monte Carlo quantique (Q.M.C.) permettront de valider et parfois de guider l´approche théorique.

A strictement parler, la bosonisation est une méthode de faible couplage : l´interaction est développée autour de la théorie libre à $U = 0$. Elle permet cependant d´obtenir de nombreuses informations sur la théorie à fort couplage, une continuité entre les régimes de faible et de fort couplage existant, pourvu que la théorie effective reste à un point fixe, ou qu´il n´y ait pas de point fixe à un couplage intermédiaire si la théorie effective est massive [6]. Cette continuité indique que les champs qui décrivent les excitations de basse énergie seront les mêmes à faible et à fort couplage, dans le sens qu´ils ont les mêmes propriétes de transformation sous les opérations de symétrie [7]. On voit ici émerger le rôle cruxial de la symétrie du modèle : elle fournit des arguments non perturbatifs, valables à fort couplage, permettant de contraindre suffisamment la théorie effective pour, parfois, la définir presque complètement (moyennant des arguments de loi d´échelle, qui permettent d´écarter les opérateurs inessentiels à basse énergie).

I.1.2 Les symétries du modèle de Hubbard SU(4)

Les symétries continues

Il est simple de vérifier que le hamiltonien (I.9) conserve séparément le nombre total de fermions de chaque espèce $\hat{N}_a = \sum_i n_{i,a}$: tout état propre $|\psi\rangle$ de (I.9) sera vecteur propre des $\hat{N}_a$ avec :

$$\hat{N}_a|\psi\rangle = \mathtt{n}_a|\psi\rangle \qquad a = 1...4 \tag{I.10}$$

Le groupe d´invariance de (I.9) est en fait plus grand, puisqu´il est invariant sous toute transformation :

[6] C´est ce qui se produit dans le modèle de Hubbard SU(2) : le secteur de spin reste toujours critique.

[7] Cependant, des informations non universelles, non contraintes par la symétrie, comme la relation entre l´intensité des couplages de la théorie continue et les paramètres du hamiltonien sur réseau, seront inaccessibles à fort couplage.

$$c_{i,a} \rightarrow \widetilde{c}_{i,a} = e^{i\varphi} c_{i,a}\,, \qquad \varphi \in \mathbb{R}, \tag{I.11}$$

$$c_{i,a} \rightarrow \widetilde{c}_{ia} = R_{ab} c_{i,b} \tag{I.12}$$

où la matrice R, qui vérifie $R^\dagger R = \mathbb{I}$ et $\det(R) = 1$, est une matrice de SU(4). Cette invariance est évidente pour le terme cinétique, et le devient pour le terme d´interaction si on le réécrit $U \left(\sum_{ia} n_{i,a}\right)^2/2 - U \sum_{ia} n_{i,a}$ (on utilise $n_{i,a}^2 = n_{i,a}$). A cette grande symétrie U(1)×SU(4) sont associées un certain nombre de quantités conservées :

• la symétrie U(1) est responsable de la conservation de la charge totale, mesurée en unité de la charge de l´électron :

$$Q_c = \sum_a \hat{N}_a, \tag{I.13}$$

• la symétrie SU(4), de la conservation des 15 générateurs :

$$Q^A = \sum_i \mathcal{S}_i^A \qquad A = 1...15 \tag{I.14}$$

où les opérateurs locaux

$$\mathcal{S}_i^A = c_{i,a}^\dagger\, \mathcal{T}_{ab}^A\, c_{i,b} \tag{I.15}$$

sont les 15 spins de SU(4). Ce sont les généralisations des opérateurs de spin de SU(2), leur nombre étant donné par la dimension de l´algèbre de Lie de SU(4) (que l´on notera selon l´usage $\mathfrak{su}(4)$). Dans toute la suite, le terme “spin” désignera le spin généralisé de SU(4), le spin physique étant désigné par l´expression “spin SU(2)”. Les 15 matrices hermitiques de trace nulle $\mathcal{T}^A$ qui entrent dans la définition des opérateurs de spin sont la généralisation des 3 matrices de Pauli.

Afin d´avoir une interprétation physique simple pour ces opérateurs de spin, il est judicieux d´utiliser le fait que le groupe SU(2) de spin est un sous groupe de SU(4). Les opérateurs de spin SU(2) sont définis sur chaque chaîne $\ell = 1, 2$ par :

$$S_{i,\ell}^a = \frac{1}{2}\, c_{i,\ell\alpha}^\dagger \sigma_{\alpha\beta}^a c_{i,\ell\beta}, \tag{I.16}$$

(sans somme sur ℓ) si bien que les opérateurs de spin SU(2) total, qui agissent simultanément sur les deux chaînes, sont :

$$S_i^a = S_{i,1}^a + S_{i,2}^a. \tag{I.17}$$

Ces opérateurs de spin SU(2) agissent dans l´espace $\{\sigma =\uparrow, \downarrow\}$ sans affecter l´indice de chaîne ℓ.

Il existe un autre sous groupe SU(2) de SU(4), commutant au groupe SU(2) de spin, qui agit dans l´espace $\{\ell = 1, 2\}$ sans affecter l´indice de spin σ. Les générateurs de ce sous groupe seront appelés les opérateurs d´isospin. Ils sont donnés explicitement par :

$$T_i^a = \frac{1}{2}\, c^\dagger_{i,\ell\alpha} \sigma^a_{\ell\ell'} c_{i,\ell'\alpha} \tag{I.18}$$

Les opérateurs de spin SU(2) et d´isospin fournissent six générateurs de SU(4). Les neuf générateurs manquant mélangeront simultanément les indices de spin SU(2) et de chaîne. Pour les 15 matrices hermitiques de trace nulle $\mathcal{T}^A$ on choisira donc :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}_s^a &= \frac{1}{2}\, \sigma^a \otimes \mathbb{I}, \\ \mathcal{T}_t^a &= \frac{1}{2}\, \mathbb{I} \otimes \sigma^a, \\ \mathcal{T}_{st}^{ab} &= \frac{1}{2}\, \sigma^a \otimes \sigma^b, \end{aligned} \tag{I.19}$$

où les $(\sigma^a)_{a=x,y,z}$ sont les matrices de Pauli, et où dans l´expression $A \otimes B$, A agit dans l´espace de spin $\sigma =\uparrow, \downarrow$ et B dans l´espace d´isospin $\ell = 1, 2$. Ces matrices $\mathcal{T}^A$ satisfont à la condition de normalisation $\mathrm{Tr}\,(\mathcal{T}^A \mathcal{T}^B) = \delta^{AB}$. Ainsi, les 15 quantités conservées dans le modèle de Hubbard SU(4) sont :

- le spin SU(2) total $Q_s^a = \sum_i S_i^a$, somme des opérateurs de spin locaux sur les chaînes $\ell = 1, 2$,
- l´isospin total $Q_t^a = \sum_i T_i^a$, dont la composante z s´interprète comme la différence des projections sur z du moment orbital des deux bandes [8],
- une quantité qui mélange spin SU(2) et isospin Q_{st}^{ab}.

Les opérations de symétrie (I.11,I.12) peuvent alors être représentées à l´aide de paramètres réels $(\lambda_A)_{A=1\ldots15}$, par la transformation unitaire :

$$\mathcal{U} = e^{i\alpha Q_c} e^{i\lambda_A Q^A}. \tag{I.20}$$

Les opérateurs de spin locaux $\mathcal{S}_i^A$, et la charge locale $\mathcal{Q}_{ci}$ ont les relations de commutation suivantes :

$$\begin{aligned} \left[\mathcal{Q}_{ci}, \mathcal{S}_j^A\right] &= 0 \\ \left[\mathcal{S}_i^A, \mathcal{S}_j^B\right] &= i\, \delta_{ij}\, f_C^{AB}\, \mathcal{S}_i^C \end{aligned} \tag{I.21}$$

[8] En effet, $T_i^z = \frac{1}{2}(n_{i,1\uparrow} + n_{i,1\downarrow} - n_{i,2\uparrow} - n_{i,2\downarrow})$ mesure la différence des nombres d´occupation entre les deux chaînes. Cependant, les opérateurs Q_t^a ne sont pas les opérateurs moment orbital.

où les constantes de structure f_C^{AB} de SU(4) sont déterminées par :

$$\left[\mathcal{T}^A, \mathcal{T}^B\right] = i\, f_C^{AB}\, \mathcal{T}^C. \tag{I.22}$$

Ceci implique que les quantités conservées obéissent à :

$$\begin{aligned} \left[Q_c, Q^A\right] &= 0, \\ \left[Q^A, Q^B\right] &= i f_C^{AB} Q^C. \end{aligned} \tag{I.23}$$

Le nombre d´opérateurs Q^A qui commutent entre eux et que l´on pourra diagonaliser simultanément est une caractéristique à SU(4) et vaut 3 (il s´agit du rang de SU(4)). Pour toute la suite, nous choisirons pour ces générateurs qui commutent (les générateurs de Cartan) $\hat{N}_s = Q_s^z, \hat{N}_t = Q_t^z, \hat{N}_{st} = Q_{st}^{zz}$.

Si l´on introduit l´opérateur $\hat{N}_c = Q_c/2$, à tout état propre de (I.9) seront associés les nombres quantiques [9] $(\mathtt{n}_\alpha)_{\alpha=c,s,t,st}$ de U(1)×SU(4), valeurs propres des opérateurs $\left(\hat{N}_\alpha\right)_{\alpha=c,s,t,st}$. Explicitement, ces nombres quantiques sont reliés aux nombres de fermions (I.10) par la relation :

$$\mathtt{n}_\alpha = A_{\alpha a}\mathtt{n}_a, \qquad A = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \end{pmatrix}. \tag{I.24}$$

Ces nombres quantiques $\mathtt{n}_\alpha$ ont été introduits dans les problèmes à deux spin dans le cadre du modèle Kondo à deux impuretés [35].

Les symétries discrètes

En dehors des symétries continues U(1), et SU(4), le modèle possède un certain nombre de symétries discrètes, qui seront d´une grande utilité puisqu´elles interdiront à tous les opérateurs qui ne les respectent pas d´intervenir dans la théorie effective.

- Translation d´un site sur le réseau $\mathcal{T}_{a_0}$

[9] On pourrait penser, que dans cette construction de SU(4) à partir de deux groupes SU(2) (associés aux spins $\vec{S}_1$ et $\vec{S}_2$ sur les chaines 1 et 2), les états peuvent être repérés par les seuls nombres quantiques S_1^z et S_2^z. Ainsi, on peut reconstruire deux générateurs de Cartan $S^z = S_1^z + S_2^z$ et $S^zT^z = S_1^z - S_2^z$. Il est facile de se rendre compte que ces deux opérateurs ne constituent pas un ensemble complet permettant d´énumérer tous les états si l´on s´intéresse, par exemple, dans l´espace à deux particules, aux deux états $c_{1\uparrow}^\dagger c_{1\downarrow}^\dagger|0\rangle$ et $c_{2\uparrow}^\dagger c_{2\downarrow}^\dagger|0\rangle$: ils ont mêmes nombres quantiques $(S_1^z, S_2^z) = (0,0)$. L´opérateur T^z les distingue, puisque la projection de leur isospin sur z vaut ± 1.

Cette symétrie discrète transforme $c_{i,a}$ en $c_{i+1,a}$ $\forall i, a$

- Conjugaison de charge $\mathcal{C}$

Indépendamment du remplissage, on peut définir l´opération de conjugaison de charge sur le réseau par :

$$c_{i,a} \xrightarrow{\mathcal{C}} \widetilde{c}_{i,a} = (-1)^i c^\dagger_{i,a} \tag{I.25}$$

La conjugaison de charge ne sera une symétrie du modèle qu´au demi remplissage $(n = 2)$.

- Parité de site $\mathcal{P}_s$

Il s´agit de la symétrie de réflexion autour d´un site, que l´on choisira comme l´origine du réseau. Elle s´écrit :

$$c_{i,a} \xrightarrow{\mathcal{P}_S} \widetilde{c}_{i,a} = c_{-i,a} \tag{I.26}$$

- Parité de lien $\mathcal{P}_L$

On peut également définir une autre symétrie de réflexion, autour d´un lien que l´on choisira comme $0 - 1$. Elle s´écrit :

$$c_{i,a} \xrightarrow{\mathcal{P}_L} \widetilde{c}_{i,a} = c_{1-i,a} \tag{I.27}$$

Il s´agit de la composition d´une translation et d´une parité de site ; explicitement : $\mathcal{P}_L = \mathcal{T}_{a_0} \circ \mathcal{P}_S = \mathcal{P}_S \circ \mathcal{T}^{-1}_{a_0}$.

I.2 Description continue à faible couplage.

Nous nous intéressons ici à la limite de faible couplage $U \ll t$ du hamiltonien (I.9). Au point $U = 0$, la théorie est à un point fixe, dont nous présenterons différentes descriptions équivalentes. L´interaction coulombienne sera ensuite introduite en perturbation autour de ce point fixe. Cette étape nous permettra d´établir le hamiltonien continu effectif du modèle de Hubbard SU(4) à faible couplage. Nous verrons enfin comment cette théorie effective continue devra être modifée lorsque l´on s´éloigne sensiblement du point $U = 0$.

I.2.1 Théorie libre $U = 0$

Le point fixe $U = 0$ est décrit par une théorie continue pour des champs fermioniques. La bosonisation permet d´obtenir une représentation bosonique de cette théorie libre. On définira également de nouveaux champs fermioniques (refermionisation), qui ont l´avantage de se transformer plus simplement sous la symétrie SU(4)×U(1) du modèle. Ces différentes descriptions en champs du point fixe $U = 0$ sont équivalentes, mais il est parfois plus commode d´utiliser l´une que l´autre.

Limite continue

Dans le but d´obtenir une théorie des champs effective, on prend donc la limite continue de (I.9), en envoyant la maille du réseau a_0 à zéro tout en maintenant fixe la taille du système $L = Na_0$ et la densité moyenne de chaque espèce de fermion. Ce procédé sera valide pourvu que les différentes échelles du problème (les longueurs de corrélation) demeurent grandes devant la maille du réseau.

Dans les modes de Fourier [10] $c_{k,a} = \sum_{j=1}^{N} e^{-ikja_0} c_{j,a}/\sqrt{N}$, le hamiltonien libre H_0 se réécrit comme :

$$H_0 = \sum_{k,a} \epsilon_k \, c^\dagger_{k,a} c_{k,a} \,, \qquad \epsilon_k = -2t\cos(ka_0) \tag{I.28}$$

et est simplement diagonalisé par les ondes planes $\left|\psi_{\{k_a\}}\right\rangle = \prod_a \prod_{k_a} \; c^\dagger_{k_a,a} \; |0\rangle$ d´énergie $E_{\{k_a\}} = \sum_a \sum_{k_a} \epsilon_{k_a}$. L´état fondamental à $U = 0$ est obtenu en remplissant sur chaque bande a les états à une particule d´énergie inférieure où égale à l´énergie de Fermi ϵ_{F}. Ceci définit l´impulsion de Fermi k_{F}. Cet état fondamental, aussi appelé mer de Fermi, sera noté $|0_{\mathrm{F}}\rangle$, et est donné explicitement par :

$$|0_{\mathrm{F}}\rangle = \prod_{a,|k|\le k_{\mathrm{F}}} c^\dagger_{k,a} \; |0\rangle \;, \qquad \epsilon_{\mathrm{F}} = -2t \, \cos\left(k_{\mathrm{F}} a_0\right). \tag{I.29}$$

Le nombre total de fermions $\mathtt{N}_{\mathrm{F}}$ est relié à l´impulsion de Fermi : $\mathtt{N}_{\mathrm{F}} = \frac{4Lk_{\mathrm{F}}}{\pi} - 4$. Lors de la limite continue, le nombre moyen d´électron par site (le remplissage n) est maintenu constant, si bien que $k_{\mathrm{F}} a_0$ a une limite finie :

$$k_{\mathrm{F}} a_0 \to \frac{\pi\, n}{4}. \tag{I.30}$$

[10] Nous utiliserons des conditions aux limites $c_{N+j,a} = e^{i\varphi} c_{j,a}$ dépendant de la parité de N : $\varphi = (1 + (-1)^{N+1})\pi/2$, de sorte que le moment k est quantifié comme : $kL \in 2\pi\mathbb{Z} + \varphi$.

En revanche, certaines quantités comme $\mathtt{N}_{\mathrm{F}}$ divergent à la limite continue, et dans la suite, les opérateurs seront systématiquement ordonnés normalement : $A := A - \langle 0_{\mathrm{F}}| A |0_{\mathrm{F}}\rangle$ de manière à être réguliers.

Parmi les excitations du système (déformations de la mer de Fermi), les seules qui participeront à la physique de basse énergie seront des combinaisons de particules et trous situés proches des points de Fermi $k = \pm k_{\mathrm{F}}$, les autres mettant en jeu des énergies trop élevées. En conséquence, la forme précise du spectre ϵ_k loin des points de Fermi n´aura pas d´influence sur la physique de basse énergie, si bien que l´on peut approximer la relation de dispersion ϵ_k en la linéarisant autour des points de Fermi (voir figure I.2). Cette approximation suppose bien entendu qu´on limite l´étude aux processus de plus basse énergie, plus précisément aux excitations d´énergie petite devant la largeur de bande t.

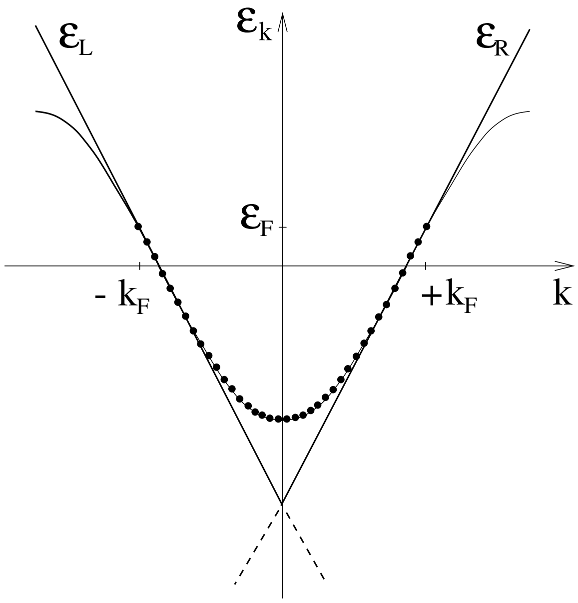


Fig. I.2: Spectre des fermions libres sur le réseau. Les états occupés constituant la mer de Fermi sont figurés par des points noirs. Sur les deux branches du spectre linéarisé autour des points de Fermi, les pointillés indiquent les états ajoutés de manière à obtenir une mer de Fermi sans fond.

Le spectre linéarisé comporte deux branches, qui correspondent à deux espèces de fermion :

– les fermions droits $\psi_{\mathrm{R}a,q} = c_{k_{\mathrm{F}}+q,a}$, avec la relation de dispersion $\epsilon_{\mathrm{R}q} = v_{\mathrm{F}}q$,
– les fermions gauches $\psi_{\mathrm{L}a,q} = c_{-k_{\mathrm{F}}+q,a}$, avec la relation de dispersion $\epsilon_{\mathrm{L}q} = -v_{\mathrm{F}}q$,

où la vitesse de Fermi v_{F} est donnée par :

$$v_{\mathrm{F}} = \left.\frac{d\epsilon_k}{dk}\right|_{k=k_{\mathrm{F}}} = 2ta_0 \sin(k_{\mathrm{F}} a_0). \tag{I.31}$$

Le hamiltonien libre (I.28) est donc approximé par :

$$H_0 = v_{\mathrm{F}} \sum_{a,q} q \left(\psi^\dagger_{\mathrm{R}a,q}\psi_{\mathrm{R}a,q} - \psi^\dagger_{\mathrm{L}a,q}\psi_{\mathrm{L}a,q}\right). \tag{I.32}$$

La somme sur q devrait être restreinte aux faibles impulsions $q \ll k_{\mathrm{F}}$; cependant, comme nous sommes intéressés aux excitations de basse énergie, on peut sans hypothèse supplémentaire étendre cette somme à toutes les valeurs de q. Cette manipulation (linéarisation du spectre et limite continue) peut se résumer dans l´espace réel par la décomposition suivante :

$$\frac{c_{j,a}}{\sqrt{a_0}} \approx e^{ik_{\mathrm{F}}x}\psi_{\mathrm{R}a}(x) + e^{-ik_{\mathrm{F}}x}\psi_{\mathrm{L}a}(x)\,, \qquad x = ja_0 \tag{I.33}$$

où les champs $\psi_{\mathrm{R(L)}a}(x)$, transformés de Fourier des modes $\psi_{\mathrm{R(L)}a,q}$, varient peu à l´échelle de la maille du réseau. Le symbole "$\approx$" signifie que cette égalité entre opérateurs est valide lorsqu´on restreint l´espace de Fock des fermions aux états de basse énergie. Ces champs chiraux $\psi_{\mathrm{R(L)}a}$ vérifient les relations canoniques

$$\left\{\psi^\dagger_{\mathrm{P}a}(x,t), \psi_{\mathrm{P}'b}(y,t)\right\} = \delta_{\mathrm{PP}'}\delta_{ab}\delta(x-y)\,, \qquad \mathrm{P}, \mathrm{P}' = \mathrm{R}, \mathrm{L}. \tag{I.34}$$

En terme de ces champs, le hamiltonien libre (I.28) devient :

$$\begin{aligned} H_0 &= \int_0^L dx\, \mathcal{H}_0, \\ \mathcal{H}_0 &= -iv_{\mathrm{F}} \sum_a \left(\psi^\dagger_{\mathrm{R}a}\partial_x\psi_{\mathrm{R}a} - \psi^\dagger_{\mathrm{L}a}\partial_x\psi_{\mathrm{L}a}\right). \end{aligned} \tag{I.35}$$

Notons qu´en vertu de (I.33), tout opérateur local A_i de la théorie sur le réseau, donné comme une fonction des fermions initiaux $c_{i,a}, c^\dagger_{i,a}$, admettra dans la limite continue un développement en harmoniques multiples entiers de k_{F} :

$$A(x) = A^{(0)}(x) + \sum_{m\in\mathbb{Z}} e^{imk_{\mathrm{F}}x}\, A^{(m\,k_{\mathrm{F}})}(x), \tag{I.36}$$

où les opérateurs $A^{(m\,k_{\mathrm{F}})}(x)$ sont des fonctions des $\psi_{\mathrm{R(L)}a}, \psi^\dagger_{\mathrm{R(L)}a}$, et sont donc lentement variables à l´échelle de la maille du réseau.

Un mot sur la symétrie conforme

Le hamiltonien (I.35) est celui de fermions libres relativistes sans masse, auxquelles on peut associer une action :

$$S_0 = i\sum_a \int dx\, dt\, \left(\psi^\dagger_{\mathrm{R}a}(\partial_t + v_{\mathrm{F}}\partial_x)\psi_{\mathrm{R}a} + \psi^\dagger_{\mathrm{L}a}(\partial_t - v_{\mathrm{F}}\partial_x)\psi_{\mathrm{L}a}\right). \tag{I.37}$$

Les noms de fermions droits et gauches donnés aux champs $\psi_{\mathrm{R(L)}a}$ viennent des équations d´Euler Lagrange pour (I.37) : $(\partial_t \pm v_{\mathrm{F}}\partial_x)\psi_{\mathrm{R(L)}a} = 0$ indique que les fermions ψ_{R} (ψ_{L}) se déplacent vers la droite (vers la gauche) à la vitesse v_{F}.

Nous allons donner les fonctions à deux points de ces champs de Dirac, et en profiter pour introduire une paramétrisation de l´espace-temps bien adaptée à la symétrie conforme de la théorie de fermions libres, et de manière plus générale de toute théorie critique à $1+1$ dimensions (on pourra consulter par exemple l´ouvrage [16]). On définit les variables complexes

$$z = v_{\mathrm{F}}\tau + ix\,, \qquad \overline{z} = v_{\mathrm{F}}\tau - ix, \tag{I.38}$$

où l´on a introduit le temps imaginaire $\tau = it$. Ces coordonnées sont les coordonnées sur le cône de lumière [11]. Le lagrangien des fermions s´exprime simplement comme :

$$\mathcal{L}_0 = \sum_a \left(\psi^\dagger_{\mathrm{R}a}\partial\psi_{\mathrm{R}a} + \psi^\dagger_{\mathrm{L}a}\overline{\partial}\psi_{\mathrm{L}a}\right) \tag{I.39}$$

où la dérivée complexe est $\partial \equiv \frac{\partial}{\partial z} = \frac{1}{2}(\partial_\tau - i\partial_x)$, $\overline{\partial} \equiv \frac{\partial}{\partial \overline{z}}$. Des équations du mouvement découle que $\psi_{\mathrm{L}(R)a}$ est (anti)holomorphe. Pour obtenir les fonctions de corrélation à deux points, on utilise par exemple $\delta(x)\delta(\tau) = \frac{1}{\pi}\partial\frac{1}{\overline{z}} = \frac{1}{\pi}\overline{\partial}\frac{1}{z}$, si bien que

$$\begin{aligned} \left\langle \psi^\dagger_{\mathrm{L}a}(z)\psi_{\mathrm{L}b}(w)\right\rangle &= \frac{\delta_{ab}}{2\pi(z-w)} \\ \left\langle \psi^\dagger_{\mathrm{R}a}(\overline{z})\psi_{\mathrm{R}b}(\overline{w})\right\rangle &= \frac{\delta_{ab}}{2\pi(\overline{z}-\overline{w})} \end{aligned} \tag{I.40}$$

toutes les autres fonctions à deux points étant nulles.

L´action S_0 est invariante sous les transformations conformes, qui consistent en toutes les redéfinitions localement analytiques

$$z \to w(z)\,, \qquad \overline{z} \to \overline{w}(\overline{z}) \tag{I.41}$$

[11] Les variables z et $\overline{z}$ doivent être considérées comme indépendantes. Cependant, toutes les quantités physiques seront définies sur le sous espace $\overline{z} = z^*$, où "*" désigne la conjugaison complexe.

des coordonnées, et qui transforment les fermions selon : $\psi_{\mathrm{L}a}(z) \to \psi'_{\mathrm{L}a}(w) = \left(\frac{dw}{dz}\right)^{-1/2} \psi_{\mathrm{L}a}(w)$ et $\psi_{\mathrm{R}a}(\overline{z}) \to \psi'_{\mathrm{R}a}(\overline{w}) = \left(\frac{d\overline{w}}{d\overline{z}}\right)^{-1/2} \psi_{\mathrm{R}a}(\overline{w})$.

Plus généralement, dans une théorie invariante conforme certains opérateurs de la théorie -les opérateurs primaires de Virasoro, dont peuvent se déduire tous les états de la théorie- se transforment sous les redéfinitions analytiques (I.41) comme :

$$\Phi(z, \overline{z}) \to \Phi'(w, \overline{w}) = \left(\frac{dw}{dz}\right)^{-h} \left(\frac{d\overline{w}}{d\overline{z}}\right)^{-\overline{h}} \Phi(w, \overline{w}) \tag{I.42}$$

où $(h, \overline{h})$ sont les dimensions conformes gauche et droite du primaire Φ. Ces primaires forment en outre une algèbre pour l´opération d´"expansion de produit d´opérateurs" (OPE), qui fixe les propriétés à courte distance de la théorie, en donnant les termes singuliers qui apparaissent lorsque les positions de deux opérateurs primaires Φ_i et Φ_j coïncident :

$$\mathrm{T}_\tau \; \Phi_i(z, \overline{z})\Phi_j(w, \overline{w}) \sim \frac{C_k^{ij}}{(z-w)^{h_i+h_j-h_k}(\overline{z}-\overline{w})^{\overline{h}_i+\overline{h}_j-\overline{h}_k}} \; \Phi_k(w, \overline{w}), \tag{I.43}$$

où T_τ est l´ordre normal en temps imaginaire. Il sera sera sous entendu pour toute la suite dans le membre de gauche des OPE. Le symbole "$\sim$" indique une égalité à des termes réguliers lorsque $z \to w$ près.

Pour nos fermions $\psi_{\mathrm{L}}, \psi_{\mathrm{R}}$, de dimensions conformes respectives $(h, \overline{h}) = (\frac{1}{2}, 0), (0, \frac{1}{2})$, ces OPE sont :

$$\begin{aligned}
\psi^\dagger_{\mathrm{L}a}(z)\psi_{\mathrm{L}b}(w) &\sim \frac{\delta_{ab}}{2\pi(z-w)}\,, \qquad \psi_{\mathrm{L}a}(z)\psi_{\mathrm{L}b}(w) \sim 0, \\
\psi^\dagger_{\mathrm{R}a}(\overline{z})\psi_{\mathrm{R}b}(\overline{w}) &\sim \frac{\delta_{ab}}{2\pi(\overline{z}-\overline{w})}\,, \qquad \psi_{\mathrm{R}a}(\overline{z})\psi_{\mathrm{R}b}(\overline{w}) \sim 0, \\
\psi_{\mathrm{L}a}(z)\psi_{\mathrm{R}b}(\overline{w}) &\sim 0\,, \qquad \psi^\dagger_{\mathrm{L}a}(z)\psi_{\mathrm{R}b}(\overline{w}) \sim 0,
\end{aligned} \tag{I.44}$$

ce qui permet de retrouver les propagateurs (I.40) (la fonction à deux points doit s´annuler à l´infini, si bien que les termes réguliers ne contribuent pas). Les OPE encodent également les relations de commutation entre opérateurs : en intégrant soigneusement (I.44) sur tout l´espace, à temps fixé, on retrouve les commutateurs canoniques à temps égaux (I.34).

Bosonisation abélienne

L´équivalence entre les théories continues du boson libre et du fermion libre à 1+1 dimensions, à la base de la technique de bosonisation abélienne [12], a une longue

[12] En référence au groupe de symétrie U(1), abélienne, des théories libres de boson et de fermion.

histoire. Pour une revue du développement historique de la bosonisation, on pourra consulter [36]. La première représentation d´un champ fermionique en terme d´une superposition cohérente d´excitations bosoniques été remarquée pour la première fois simultanément par Mattis d´une part [37] et Luther et Peschel d´autre part [38] en 1974. De manière parallèle et indépendante, cette équivalence a été établie dans le contexte de la physique des hautes énergies par Coleman [39] et Mandelstam [40]. On ne peut pas oublier dans le développement de la bosonisation la contribution de Haldane [41, 5], qui donne aux relations entre champs bosonique et fermionique un sens opératoriel.

De manière pratique, la bosonisation permet de “transformer” une théorie fermionique en théorie bosonique, et reciproquement ; il s´agit d´un changement de base non local dans les opérateurs, qui permet de reformuler plus simplement la théorie en interaction au voisinage d´un point fixe. De nombreuses présentations complètes de la technique de la bosonisation existent dans la littérature [33, 42]. Nous exposons ici brièvement nos conventions.

Chaque espèce a de fermion sera représentée par des champs bosoniques chiraux $\left(\phi_{\mathrm{R(L)}a}\right)_{a=1\ldots4}$ et des facteurs de Klein $(\eta_a)_{a=1\ldots4}$, selon :

$$\begin{aligned}\psi_{\mathrm{R}a} &= \frac{\eta_a}{\sqrt{2\pi a_0}}\,\exp\left(i\sqrt{4\pi}\,\phi_{\mathrm{R}a}\right),\\ \psi_{\mathrm{L}a} &= \frac{\eta_a}{\sqrt{2\pi a_0}}\,\exp\left(-i\sqrt{4\pi}\,\phi_{\mathrm{L}a}\right).\end{aligned} \tag{I.45}$$

Ces relations sont des égalités entre opérateurs. Ces bosons sont contraints à vérifier certaines relations :

$$[\phi_{\mathrm{R}a}(x),\phi_{\mathrm{L}b}(y)] = \delta_{ab}\frac{i}{4}\,,\qquad [\phi_{\mathrm{P}a}(x),\phi_{\mathrm{P}b}(y)] = \frac{i\mathrm{P}\delta_{ab}}{2}\left[\mathrm{H}(x-y)-\frac{1}{2}\right] \tag{I.46}$$

où H est la fonction de Heaviside et où la convention $\mathrm{P}=\mathrm{R},\mathrm{L}=+,-$ sera utilisée dans toute la suite. Les facteurs de Klein vérifient quant à eux :

$$\{\eta_a,\eta_b\} = 2\delta_{ab}\,,\qquad \eta_a^\dagger = \eta_a\,,\qquad [\eta_a,\phi_{\mathrm{P}b}(x)] = 0. \tag{I.47}$$

Les relations (I.45,I.46,I.47) découlent de la construction suivante : les modes de Fourier $\rho_{q,\mathrm{P}a} = \frac{1}{\sqrt{L}}\sum_k \psi^\dagger_{k+q,\mathrm{P}a}\psi_{k,\mathrm{P}a}$ de la densité locale du fermion $\psi_{\mathrm{P}a}$ sont presque des objets bosoniques, puisqu´ils vérifient la relation

$$[\rho_{q,\mathrm{P}a},\rho_{q',\mathrm{P}'a'}] = \frac{q}{L}\delta(q+q')\delta_{a,a'}\delta_{\mathrm{P},\mathrm{P}'}. \tag{I.48}$$

On construit le champ bosonique libre $\phi_{\mathrm{P}a}$, de modes de création $b^\dagger_{q,\mathrm{P}a} = \sqrt{L/q}\,\rho_{q,\mathrm{P}a}$ définis pour $q > 0$. Il est décomposé en une partie de mode zéro et une partie fluctuante selon :

$$\begin{aligned}
\phi_{\mathrm{P}a}(x) &= \phi^{(0)}_{\mathrm{P}a}(x) + \widetilde{\phi}_{\mathrm{P}a}(x) \\
\phi^{(0)}_{\mathrm{P}a}(x) &= -\mathrm{P}\frac{\theta_{\mathrm{P}a}}{\sqrt{4\pi}} + \frac{\sqrt{\pi}}{L}\hat{N}_{\mathrm{P}a}\, x - \frac{\sqrt{\pi}}{4}\hat{N}_{a,\check{\mathrm{P}}} \qquad \text{(I.49)} \\
\widetilde{\phi}_{\mathrm{P}a}(x) &= \sum_{q>0} \frac{1}{\sqrt{2qL}}\left(b_{q,\mathrm{P}a}e^{-iqx} + b^\dagger_{q,\mathrm{P}a}e^{iqx}\right) \qquad \text{(I.50)}
\end{aligned}$$

où les impulsions sont quantifées selon $q \in \frac{2\pi}{L}\mathbb{Z}$ et où on a défini $\check{\mathrm{R}} = \mathrm{L}$ et $\check{\mathrm{L}} = \mathrm{R}$. La partie fluctuante est usuelle pour un champ bosonique libre, les modes vérifiant l´égalité canonique :

$$\left[b_{q,\mathrm{P}a}, b^\dagger_{q',\mathrm{P}'a'}\right] = \delta_{q,q'}\delta_{a,a'}\delta_{\mathrm{P},\mathrm{P}'}. \qquad \text{(I.51)}$$

Dans la partie de mode zéro, on reconnaît l´opérateur nombre de particule $\hat{N}$. Le champ θ lui est conjugué :

$$\left[\theta_{\mathrm{P}a}, \hat{N}_{\mathrm{P}'a'}\right] = i\,\delta_{a,a'}\delta_{\mathrm{P},\mathrm{P}'}, \qquad \text{(I.52)}$$

de sorte que la représentation (I.45) assure que ψ abaisse bien le nombre de fermions d´une unité. Le dernier terme de (I.49) est une convention assurant l´anticommutation de $\psi_{a\mathrm{R}}$ et $\psi_{a\mathrm{L}}$. Notons que certains auteurs préfèrent définir des facteurs de Klein qui contiennent l´opérateur d´échelle $e^{i\sqrt{4\pi}\theta}$, de la forme $F \sim \eta e^{i\sqrt{4\pi}\theta}$, qui sont beaucoup moins dangereux d´emploi que l´opérateur θ [13]. Nos conventions sont cependant consistantes. Tous les commutateurs qui n´ont pas été mentionnés sont nuls.

Les symétries U(1) $\psi_{\mathrm{P}a} \to e^{i\varphi}\psi_{\mathrm{P}a}$ sont représentées sur les bosons par $\phi_{\mathrm{P}a} \to \phi_{\mathrm{P}a} + \mathrm{P}\varphi/\sqrt{4\pi}$. De plus l´invariance (réminiscente de la compacité du groupe U(1)) des formules de bosonisation (I.45) sous la transformation $\phi_{\mathrm{P}a} \to \phi_{\mathrm{P}a} + \sqrt{\pi}$, montre que les champs bosoniques $\phi_{\mathrm{P}a}$ ne sont définis qu´à $\sqrt{\pi}$ près : ils sont compactifiés. L´opération $\phi_{\mathrm{P}a} \to \phi_{\mathrm{P}a} + q_{\mathrm{P}a}\sqrt{\pi}$ ($q_{\mathrm{P}a} \in \mathbb{Z}$) n´est pas physique, puisqu´elle laisse invariants les fermions $\psi_{\mathrm{P}a}$. Cette symétrie de jauge, non physique, qui apparaît naturellement lors de la bosonisation, devra laisser invariant tous les opérateurs "physiques" construits à partir des champs $\phi_{\mathrm{P}a}$.

[13]L´opérateur θ est un opérateur compact, et seules les fonctions 2π-périodiques de θ ont un sens physique, les autres faisant sortir de l´espace de Fock des fermions. Ceci est intimement relié à l´invariance de jauge discrète introduite plus loin.

La dynamique des bosons est donnée par la forme bosonisée de (I.35) :

$$\mathcal{H}_0 = v_{\mathrm{F}} \sum_a \left[(\partial_x \phi_{\mathrm{R}a})^2 + (\partial_x \phi_{\mathrm{L}a})^2 \right] = \frac{v_{\mathrm{F}}}{2} \sum_a \left[(\partial_x \Phi_a)^2 + (\partial_x \Theta_a)^2 \right], \tag{I.53}$$

où on a introduit le champ total Φ et son dual Θ :

$$\Phi_a = \phi_{\mathrm{L}a} + \phi_{\mathrm{R}a}, \qquad \Theta_a = \phi_{\mathrm{L}a} - \phi_{\mathrm{R}a}. \tag{I.54}$$

Dans les coordonnées complexes z et $\overline{z}$ (I.38), les champs $\phi_{\mathrm{L}a}$ ($\phi_{\mathrm{R}a}$) sont respectivement holomorphe et antiholomorphe, leurs propagateurs étant :

$$\begin{aligned} \langle \phi_{\mathrm{L}a}(z) \phi_{\mathrm{L}b}(w) \rangle &= -\frac{\delta_{ab}}{4\pi} \ln(z-w), \\ \langle \phi_{\mathrm{R}a}(\overline{z}) \phi_{\mathrm{R}b}(\overline{w}) \rangle &= -\frac{\delta_{ab}}{4\pi} \ln(\overline{z}-\overline{w}), \\ \langle \phi_{\mathrm{L}a}(z) \phi_{\mathrm{R}b}(\overline{w}) \rangle &= 0. \end{aligned} \tag{I.55}$$

La partie uniforme de la densité locale de fermions, mesurée par rapport à la mer de Fermi, s´exprime simplement comme le gradient des champs bosoniques :

$$\rho_a^{(0)}(x) = :\psi_{\mathrm{R}a}^\dagger(x)\psi_{\mathrm{R}a}(x): + :\psi_{\mathrm{L}a}^\dagger(x)\psi_{\mathrm{L}a}(x): = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \partial_x \Phi_a(x). \tag{I.56}$$

L´opérateur nombre de fermions :

$$\hat{N}_a = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \int_0^L dx\, \rho_a^{(0)}(x) = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\Phi_a(L) - \Phi_a(0) \right) \tag{I.57}$$

est représenté dans la théorie bosonique comme une quantité topologique : pour une configuration de champ donnée, son nombre d´enroulement $\Phi_a(L) - \Phi_a(0)$, qui est un multiple de $\sqrt{\pi}$ à cause de la compactification de $\phi_{\mathrm{P}a}$, est la charge associée à l´invariance U(1) $\Theta_a \to \Theta_a - \varphi/\sqrt{\pi}$ [14].

Comme les charges sont linéaires en les champs Φ_a, il est judicieux d´effectuer une transformation canonique sur les champs bosoniques :

$$\Phi_\alpha = A_{\alpha a} \Phi_a, \qquad \alpha = c, s, t, st, \tag{I.58}$$

où la matrice unitaire A a été définie dans (I.24). On définit naturellement de même de nouveaux champs Θ_α et $\phi_{\mathrm{P}\alpha}$. Les nombres quantiques $(\mathtt{n}_\alpha)_{\alpha=c,s,t,st}$ seront alors simplement les valeurs propres des opérateurs nombre d´enroulement :

$$\hat{N}_\alpha = \frac{1}{\sqrt{\pi}} \left(\Phi_\alpha(L) - \Phi_\alpha(0) \right). \tag{I.59}$$

[14] Notons que dans la théorie libre, il existe une autre invariance $\widetilde{\mathrm{U}(1)}$: $\Phi_a \to \Phi_a + \widetilde{\alpha}$, et donc une autre quantité conservée (le nombre d´enroulement du champ dual), qui est le courant total des fermions a. Si cette invariance $\widetilde{\mathrm{U}(1)}$ est génériquement brisée par les interactions, nous verrons qu´il arrive qu´à basse énergie, cette symétrie soit restaurée, et qu´en conséquence, le courant total soit conservé.

Dans cette transformation, la densité de hamiltonien libre (I.53) devient :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_0 &= \mathcal{H}_{0c} + \mathcal{H}_{0s}, \\
\mathcal{H}_{0c} &= \frac{v_{\mathrm{F}}}{2} \left[(\partial_x \Phi_c)^2 + (\partial_x \Theta_c)^2 \right], && \text{(I.60)} \\
\mathcal{H}_{0s} &= \frac{v_{\mathrm{F}}}{2} \sum_{\alpha=s,t,st} \left[(\partial_x \Phi_\alpha)^2 + (\partial_x \Theta_\alpha)^2 \right]. && \text{(I.61)}
\end{aligned}$$

Ces nouveaux champs isolent les fluctuations de la charge totale des fluctuations de pur spin. Dans la suite, les termes secteur de spin et de charge se réfèreront respectivement aux excitations collectives des champs $(\Phi_\alpha)_{\alpha=s,t,st}$ et du champ Φ_c. Cette distinction, bien entendu, fera sens pourvu que les fluctuations de spin et de charge soient découplées. Dans les opérations de symétrie (I.11,I.12), les rotations de SU(4) n´affectent que les champs $(\Phi_\alpha)_{\alpha=s,t,st}$, tandis que les rotations U(1) ne touchent que le champ Φ_c. Cependant, alors que la symétrie U(1) liée à la conservation de la charge électrique est représentée linéairement sur le boson de charge ($\Phi_c \to \Phi_c$, $\Theta_c \to \Theta_c - \varphi/\sqrt{\pi}$), les bosons constituent une représentation non linéaire et compliquée de la symétrie SU(4). Ainsi, seules les transformations autour des générateurs de Cartan $\mathcal{U} = e^{i\lambda_\alpha \hat{N}_\alpha}$, paramétrées par le vecteur $(\lambda_\alpha)_{\alpha=s,t,st}$, se représentent simplement par $\Phi_\alpha \to \Phi_\alpha$, $\Theta_\alpha \to \Theta_\alpha - \lambda_\alpha/\sqrt{\pi}$, sur les bosons [15]. Cette difficulté, liée au choix arbitraire de la base des générateurs de Cartan qui est nécessaire pour la définition des bosons Φ_α, peut être contournée par la bosonisation non abélienne, qui n´introduit pas d´arbitraire et où la symétrie SU(4) se représente de manière beaucoup plus simple [43, 44].

Courants, forme de Sugawara

Il existe une autre façon de décrire le point fixe $U = 0$ de notre théorie continue, qui a l´avantage de rendre la symétrie SU(4) plus manifeste, et d´utiliser le fait que l´hamiltonien $(I.60, I.61)$ est celui d´une théorie critique conforme bien connue, le modèle de Wess Zumino Novikov Witten (WZNW) $\mathrm{U}(4)_1$.

Les opérateurs de spin locaux (I.15) et la charge locale (I.13) deviennent dans la limite continue des densités locales de spin et de charge, qui admettent un développement du type (I.36). On définit les *courants* chiraux comme les parties uniformes de ces densités. Le courant de charge

$$\mathcal{J}^0_{\mathrm{P}} = \frac{1}{2} : \psi^\dagger_{\mathrm{P}a} \psi_{\mathrm{P}a} :, \tag{I.62}$$

[15]Les autres rotations, par exemple autour de l´axe $E_\beta + E_{-\beta}$ où β est une racine de SU(4), se représentent de façon beaucoup plus compliquée : le générateur en est $\int_0^L dx \, \left[\cos(\sqrt{4\pi}\beta^\alpha \phi_{\mathrm{R}\alpha})(x) + \cos(\sqrt{4\pi}\beta^\alpha \phi_{\mathrm{L}\alpha})(x) \right]$.

et les courants de spin

$$\mathcal{J}_{\mathrm{P}}^{A} = \psi_{\mathrm{P}a}^{\dagger} \mathcal{T}_{ab}^{A} \psi_{\mathrm{P}b}, \tag{I.63}$$

qui vérifient $\partial \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^{A} = \overline{\partial} \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{A} = 0$, sont les générateurs des transformations locales de $\mathrm{SU}(4))|_{\mathrm{L}} \times \mathrm{SU}(4)|_{\mathrm{R}}$. Le courant de charge a une expression très simple :

$$\mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{0} = \frac{i}{\sqrt{\pi}} \partial \phi_{\mathrm{L}c}\,, \qquad \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^{0} = -\frac{i}{\sqrt{\pi}} \overline{\partial} \phi_{\mathrm{R}c}. \tag{I.64}$$

Les courants de spin ont des expressions plus compliquées (non linéaires) en terme des bosons. Nous introduirons dans la section suivante de nouveaux fermions qui permettront de les représenter simplement. Ces courants satisfont aux OPE suivantes [16] :

$$\begin{aligned}
\mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{A}(z) \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{B}(w) &\sim \frac{i f_{C}^{AB}}{2\pi(z-w)}\, \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{C}(z) + \frac{k\, \delta^{AB}}{4\pi^2 (z-w)^2}, \\
\mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{0}(z) \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{0}(w) &\sim \frac{1}{4\pi^2 (z-w)^2}, \\
\mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{0}(z) \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{A}(w) &\sim 0,
\end{aligned} \tag{I.65}$$

avec des expressions similaires pour le secteur droit, z, w étant remplacés par $\overline{z}, \overline{w}$. L´entier $k = 1$ est le niveau du modèle de WZNW. Les OPE entre secteurs droit et gauche sont nulles.

Ces courants permettent de réécrire les hamiltoniens libres sous la forme :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{0c} &= \pi v_{\mathrm{F}} \left(: \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^{0} \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^{0} : + : \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{0} \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{0} : \right), \\
\mathcal{H}_{0s} &= \frac{\pi v_{\mathrm{F}}}{5} \sum_{A=1}^{15} \left(: \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^{A} \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^{A} : + : \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{A} \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{A} : \right).
\end{aligned} \tag{I.66}$$

L´hamiltonien $\mathcal{H}_{0s}$ n´est autre que la forme de Sugawara pour le hamiltonien associé au modèle WZNW $\mathrm{SU}(4)_1$, modèle conforme qui possède une charge centrale (mesure du nombre de modes critiques) $c = 3$. L´hamiltonien $\mathcal{H}_{0c}$ est également l´hamiltonien d´un modèle critique avec symétrie U(1), de charge centrale $c = 1$.

Cette représentation hamiltonienne, introduite dans les années 60 par Sugawara et Sommerfield [45, 46], est à compléter par les commutateurs à temps égaux, équivalents aux OPE (I.66) :

$$\begin{aligned}
\left[\mathcal{J}_{\mathrm{P}}^{A}(x,t), \mathcal{J}_{\mathrm{P'}}^{B}(y,t) \right] &= 2i\pi\ \delta_{\mathrm{PP'}} \left[f_{C}^{AB} \mathcal{J}_{\mathrm{P}}^{C}(x,t) \delta(x-y) + \mathrm{P}\, k \delta^{AB} \delta'(x-y) \right], \\
\left[\mathcal{J}_{\mathrm{P}}^{0}(x,t), \mathcal{J}_{\mathrm{P'}}^{0}(y,t) \right] &= 2i\pi\ \mathrm{P} \delta_{\mathrm{PP'}} \delta'(x-y), \\
\left[\mathcal{J}_{\mathrm{P}}^{0}(x,t), \mathcal{J}_{\mathrm{P'}}^{A}(y,t) \right] &= 0.
\end{aligned} \tag{I.67}$$

[16] Dans les conventions habituelles des conformistes, la normalisation pour les courants est plutôt : $\widetilde{\mathcal{J}}^{A} = 2\pi\, \mathcal{J}^{A}$.

où $\mathrm{P} = \mathrm{R}, \mathrm{L} = +, -$. Ces relations définissent l´algèbre de Kac-Moody (on peut consulter par exemple l´ouvrage [47], chapitre 9C). Notons la présence du terme ultralocal $\delta'(x-y)$, appelé anomalie de Schwinger, qui est un effet purement quantique.

Refermionisation

Il existe une une autre description des fluctuations de basse énergie, en terme de nouveaux fermions de Dirac chiraux, les symétries et les excitations collectives du modèle s´interprètant simplement dans ces fermions. Ces fermions consistent en un fermion de pure charge, le coopéron, qui porte une charge $2e$, et en trois fermions de pur spin. La raison profonde de l´existence des fermions de pur spin est l´équivalence entre les algèbres de Lie $\mathfrak{su}(4)$ et $\mathfrak{so}(6)$.

Fermions de Dirac Les fermions de Dirac sont associés simplement aux bosons Φ_α par des formules inverses de (I.45) :

$$\Psi_{\mathrm{P}\alpha} = \frac{\eta_\alpha}{\sqrt{2\pi a_0}} \exp\left(i\mathrm{P}\sqrt{4\pi}\,\phi_{\mathrm{P}\alpha}\right), \qquad \alpha = c, s, t, st \tag{I.68}$$

où ont été introduits de nouveaux facteurs de Klein η_α. Les hamiltoniens (I.60,I.61) deviennent :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{0c} &= -iv_{\mathrm{F}}\left(\Psi^\dagger_{\mathrm{R}c}\partial_x\Psi_{\mathrm{R}c} - \Psi^\dagger_{\mathrm{L}c}\partial_x\Psi_{\mathrm{L}c}\right), \\ \mathcal{H}_{0s} &= -iv_{\mathrm{F}}\sum_{\alpha=s,t,st}\left(\Psi^\dagger_{\mathrm{R}\alpha}\partial_x\Psi_{\mathrm{R}\alpha} - \Psi^\dagger_{\mathrm{L}\alpha}\partial_x\Psi_{\mathrm{L}\alpha}\right). \end{aligned} \tag{I.69}$$

Notons que ces fermions Ψ_α et les fermions de départ ψ_a sont mutuellement non locaux. De plus, les nouveaux fermions ne sont pas invariants de jauge, ce qui implique que les fluctuations de ces champs seront fractionnaires en terme des fermions de départ. Réciproquement, un électron se décomposera sur plusieurs excitations des fermions Ψ_α.

Les transformations U(1) (I.11) deviennent simplement :

$$\Psi_{\mathrm{P}c}(x) \to e^{2i\varphi}\Psi_{\mathrm{P}c}(x), \tag{I.70}$$

laissant inchangés les fermions $(\Psi_{\mathrm{P}\alpha})_{\alpha=s,t,st}$. Les trois modes critiques du modèle de WZNW $SU(4)_1$ correspondent aux trois fermions de spin $(\Psi_{\mathrm{P}\alpha})_{\alpha=s,t,st}$.

Fermions de Majorana Nous allons définir des fermions de Majorana, qui ont déjà été introduits dans les problèmes d´échelles faiblement couplées par Shelton Nersesyan et Tsvelik [18, 48, 28] pour leurs multiples avantages : ils se transforment simplement dans les opérations de symétrie ; ils décrivent le point fixe du modèle d´Ising critique, dont les opérateurs d´ordre et de désordre, non locaux en terme des fermions, interviennent dans l´expression des opérateurs primaires des modèles de WZNW que nous rencontrerons ; ils permettent de mener des calculs non perturbatifs, comme des calculs de fonctions de corrélation ; ce sont les champs naturels pour représenter le modèle de Gross Neveu [26], modèle intégrable qui interviendra à plusieurs reprises comme théorie effective à basse énergie.

Les transformations de SU(4) (I.12) n´affectent que les champs $(\Psi_{\mathrm{P}\alpha})_{\alpha=s,t,st}$, mais sont représentées plus simplement si l´on décompose les fermions de Dirac en leurs composantes hermitique et antihermitique en introduisant des fermions de Majorana (les indices sont choisis par commodité ultérieure) :

$$\begin{aligned}\xi^2_{\mathrm{P}} + i\xi^1_{\mathrm{P}} &= \sqrt{2}\,\Psi_{\mathrm{P}s},\\ \xi^5_{\mathrm{P}} + i\xi^4_{\mathrm{P}} &= \sqrt{2}\,\Psi_{\mathrm{P}t},\\ \xi^6_{\mathrm{P}} + i\xi^3_{\mathrm{P}} &= \sqrt{2}\,\Psi_{\mathrm{P}st}.\end{aligned} \tag{I.71}$$

Les 6 fermions de Majorana $(\xi^a)_{a=1\ldots6}$, qui ont été initialement introduits pour l´étude du point SU(4) dans la référence [24], se transforment alors dans la représentation de dimension 6 de SU(4), qui s´identifie à la représentation vectorielle (ou naturelle) de SO(6) (le fait qu´elle soit autoconjuguée rend possible la représentation réelle en terme de fermions de Majorana, qui vérifient $\xi^{a\dagger}_{\mathrm{P}} = \xi^a_{\mathrm{P}}$). Pour les 15 courants de spin (I.63), on peut choisir une base $\mathcal{J}^{ab}_{\mathrm{P}}$ dans laquelle ils sont représentés simplement à l´aide des champs $(\xi^a_{\mathrm{P}})_{a=1\ldots6}$:

$$\mathcal{J}^{ab}_{\mathrm{P}} = i\xi^a_{\mathrm{P}}\xi^b_{\mathrm{P}}\,, \qquad 1 \le a < b \le 6. \tag{I.72}$$

Cette propriété est remarquable : alors que la relation entre les fermions de départ $(\psi_{\mathrm{P}a})_{a=1\ldots4}$ et les fermions de Majorana $(\xi^a_{\mathrm{P}})_{a=1\ldots6}$ est non linéaire et non locale, la relation entre les bilinéaires de ces fermions est locale et linéaire.

Le hamiltonien de ces fermions de Majorana est :

$$\mathcal{H}_{0s} = -\frac{iv_{\mathrm{F}}}{2}\sum_{a=1}^{6}\left(\xi^a_{\mathrm{R}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{R}} - \xi^a_{\mathrm{L}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{L}}\right). \tag{I.73}$$

Le hamiltonien d´un seul fermion de Majorana $-\frac{iv}{2}\left(\xi_{\mathrm{R}}\partial_x\xi_{\mathrm{R}} - \xi_{\mathrm{L}}\partial_x\xi_{\mathrm{L}}\right)$ décrit, dans la limite continue, la chaîne d´Ising quantique en champ transverse à son point critique, ou, de manière équivalente, le modèle d´Ising classique à deux dimensions à la température critique [49]. Le hamiltonien (I.73) est donc celui de 6 modèle d´Ising critiques découplés.

Les opérateurs d´ordre σ_a (limite continue de la variable d´Ising) et de désordre μ_a (limite continue de la variable d´Ising duale) associés au modèle d´Ising a ne sont pas locaux en terme des fermions ξ^a ; cependant, une représentation bosonique peut en être donnée [50] :

$$\begin{aligned} \sigma_1\sigma_2 &\propto :\sin\left(\sqrt{\pi}\Phi_s\right):, \qquad \mu_1\mu_2 \propto :\cos\left(\sqrt{\pi}\Phi_s\right):, \\ \mu_1\sigma_2 &\propto :\sin\left(\sqrt{\pi}\Theta_s\right):, \qquad \sigma_1\mu_2 \propto :\cos\left(\sqrt{\pi}\Theta_s\right):, \end{aligned} \tag{I.74}$$

avec des relations similaires pour les autres modèles d´Ising. Ces relations seront d´une grande utilité pour le calcul de fonctions de corrélation.

I.2.2 Limite continue de l´interaction

Nous allons prendre la limite continue du terme d´interaction coulombienne sur le réseau, par rapport au point fixe ultraviolet $U = 0$. Cette procédure n´est strictement valable que lorsque $U \ll t$. Le modèle de Hubbard SU(4) (I.9) sera alors représenté dans le continu par le hamiltonien

$$\begin{aligned} H &= H^* + H_{\mathrm{I}}, \\ H_{\mathrm{I}} &= \int_0^L dx\,\mathcal{H}_{\mathrm{I}} = g_i \int_0^L dx\,\mathcal{O}_i(x), \end{aligned} \tag{I.75}$$

où le hamiltonien H^* est celui décrivant le point fixe ultraviolet. Il s´agit d´une théorie conforme perturbée par des opérateurs locaux $\mathcal{O}_i(x)$, de dimensions d´échelle $\Delta_i = h_i + \overline{h}_i$. Notons que H^* ne s´identifie pas forcément au hamiltonien H_0 : il suffit qu´il décrive un point fixe. Notamment, dans notre cas, nous verrons que pour certaines zones de l´espace des paramètres, une partie de l´interaction pourra être inclue dans H^*. H_{I} est alors défini comme $H - H^*$.

Sous le groupe de renormalisation, qui mène à une théorie effective à basse énergie, les constantes de couplages évoluent en fonction du cut off ultraviolet a^{-1} selon, au premier ordre [51] :

$$\beta_{g_i} \equiv \frac{dg_i}{d\ln(a/a_0)} = (2 - \Delta_i) g_i \tag{I.76}$$

(sans sommation dans cette dernière égalité). Les opérateurs inessentiels (avec $\Delta_i > 2$) voient leur constante de couplage tendre vers 0 dans la limite infrarouge : ils n´ont pas d´effet sur les propriétés à longue distance du système, si bien que nous les écarterons. Au contraire, les couplages essentiels (avec $\Delta_i < 2$) croissent, et écartent le modèle du point fixe ultraviolet. Dans le cas d´un couplage marginal (avec $\Delta_i = 2$), la fonction β (I.76) n´est pas suffisante pour conclure. Le comportement de g_i sera en fait logarithmique en a/a_0, et les opérateurs marginaux, que l´on conservera, pourront être essentiels ou inessentiels à basse énergie.

Hamiltonien à faible couplage $U \ll t$

La densité hamiltonienne $\mathcal{H}_U$, limite continue de l´opérateur $U\sum_{a<b} n_{j,a}n_{j,b}$ se décompose selon (I.36) sur plusieurs harmoniques :

$$\mathcal{H}_U = \mathcal{H}_U^{(0)} + \left(e^{2ik_{\mathrm{F}}x}\,\mathcal{H}_U^{(2k_{\mathrm{F}})} + \text{h.c.}\right) + \left(e^{4ik_{\mathrm{F}}x}\,\mathcal{H}_U^{(4k_{\mathrm{F}})} + \text{h.c.}\right). \tag{I.77}$$

Les harmoniques $\mathcal{H}_U^{(m\,k_{\mathrm{F}})}$, $m \neq 0$, sont en général des opérateurs oscillant fortement à l´échelle de la maille du réseau, et leur contribution à l´hamiltonien total, obtenue en intégrant la densité hamiltonienne sur tout l´espace, est négligeable. Cependant, au voisinage de certains remplissages particuliers, commensurables, les oscillations peuvent disparaître et ces harmoniques jouer un rôle important dans la théorie effective. Cette situation se présentera dès que $mk_{\mathrm{F}} = 2\pi$, c´est-à-dire $n = 8/m$.

Partie uniforme Commençons par présenter l´hamiltonien continu lorsque *aucun* des opérateurs oscillants n´intervient (il suffit de se placer à un remplissage $n \neq 8/m$). La partie uniforme comporte plusieurs termes :

$$\mathcal{H}_U^{(0)} = \frac{3U}{2\pi}\,(\partial_x\Phi_c)^2 + i\,\frac{U}{4\pi}\,\sum_{a=1}^{6}(\xi_{\mathrm{R}}^a\partial_x\xi_{\mathrm{R}}^a - \xi_{\mathrm{L}}^a\partial_x\xi_{\mathrm{L}}^a) - U\sum_{1\leq a<b\leq 6}\kappa^a\kappa^b \tag{I.78}$$

où l´on a introduit les opérateurs densité d´énergie

$$i\kappa^a = i\xi_{\mathrm{R}}^a\xi_{\mathrm{L}}^a \tag{I.79}$$

associés aux 6 modèles d´Ising a.

L´opérateur $\mathcal{H}_U^{(0)}$ a le bon goût d´être la somme de deux hamiltoniens, qui dépendent respectivement des champs de charge et de spin. Comme c´est également le cas pour le hamiltonien libre (I.60,I.61), on peut définir un hamiltonien total de charge et de spin :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_s \\
\mathcal{H}_c &= \frac{v_c}{2}\left[(\partial_x\Phi_c)^2 + (\partial_x\Theta_c)^2\right] + 2g_c\,\partial_x\phi_{\mathrm{R}c}\partial_x\phi_{\mathrm{L}c}, && \text{(I.80)}\\
\mathcal{H}_s &= -\frac{iv_s}{2}\sum_{a=1}^{6}(\xi_{\mathrm{R}}^a\partial_x\xi_{\mathrm{R}}^a - \xi_{\mathrm{L}}^a\partial_x\xi_{\mathrm{L}}^a) + 2\pi g_s\sum_{1\leq a<b\leq 6}\kappa^a\kappa^b. && \text{(I.81)}
\end{aligned}$$

Les constantes de couplage qui interviennent dans le hamiltonien sont données, au premier ordre en U/t, par :

$$
\begin{aligned}
v_c &= v_{\mathrm{F}} + g_c\,, \qquad v_s = v_{\mathrm{F}} + g_s, \\
g_c &= \frac{3U}{2\pi}\,, \qquad g_s = -\frac{U}{2\pi}.
\end{aligned} \tag{I.82}
$$

Il est remarquable que les degrés de liberté de spin et de charge n´interagissent pas lorsque les termes oscillants de l´hamiltonien peuvent être négligés. En conséquence, les états propres de l´hamiltonien total se factorisent en une partie de spin et une partie de charge. Cette situation se présente également dans le modèle de Hubbard SU(2).

L´interaction dans le secteur de charge peut être traitée exactement, puisqu´on peut l´absorber dans le terme cinétique des bosons par une transformation canonique :

$$
\mathcal{H}_c = \frac{u_c}{2}\left[\left(\partial_x\widetilde{\Phi}_c\right)^2 + \left(\partial_x\widetilde{\Theta}_c\right)^2\right], \tag{I.83}
$$

$$
\widetilde{\Phi}_c = \frac{\Phi_c}{\sqrt{K_c}}\,, \qquad \widetilde{\Theta}_c = \sqrt{K_c}\,\Theta_c. \tag{I.84}
$$

En terme des fermions Ψ_c, il s´agit du hamiltonien de Tomanaga Luttinger []. Le boson $\widetilde{\Phi}_c$ est critique, l´effet du couplage g_c se manifestant dans les exposants des fonctions de corrélations, qui sont non universels et dépendent continuement de K_c. Les paramètres de Luttinger sont donnés par :

$$
u_c = v_{\mathrm{F}}\left(1 + \frac{2g_c}{v_{\mathrm{F}}}\right)^{1/2}, \quad K_c = \left(1 + \frac{2g_c}{v_{\mathrm{F}}}\right)^{-1/2}. \tag{I.85}
$$

Le fait d´obtenir deux vitesses de charge différentes $v_c \neq u_c$ dans (I.80) et (I.83) est naturel : dans (I.80), on développe autour du point fixe des bosons libres, tandis que dans (I.83), on est au point fixe du liquide de Luttinger. Ces deux points fixes ne coïncident que dans la limite $U/t \to 0$, et le choix de l´un ou de l´autre sera guidé par des considérations physiques. Il est clair qu´en l´absence de couplage spin charge, le point fixe de Luttinger s´impose.

Dans le secteur de spin, l´effet de l´interaction coulombienne est de renormaliser la vitesse, et de produire une interaction marginale. Il s´agit d´une interaction courant-courant, comme on peut le voir sur la forme de Sugawara :

$$
\mathcal{H}_s = \frac{\pi v_{\mathrm{F}}}{5}\sum_{A=1}^{15}\left(:\mathcal{J}^A_{\mathrm{R}}\mathcal{J}^A_{\mathrm{R}}: + :\mathcal{J}^A_{\mathrm{L}}\mathcal{J}^A_{\mathrm{L}}:\right) + 2\pi g_s \sum_{A=1}^{15}\mathcal{J}^A_{\mathrm{R}}\mathcal{J}^A_{\mathrm{L}}. \tag{I.86}
$$

Partie oscillante Le terme oscillant à $2k_{\rm F}$ sera toujours négligé dans cet étude : il ne joue un rôle que lorsque $k_{\rm F}$ est voisin de π, c´est-à-dire à la limite de remplissage nul, pour lequel la théorie continue perd son sens.

En revanche, le terme osillant à $4k_{\rm F}$ pourra jouer un rôle au voisinage du demi remplissage $n = 2$, où $k_{\rm F}$ est voisin de $\pi/2$. Explicitement, on a :

$$e^{4ik_{\rm F}x}\,\mathcal{H}_U^{(4k_{\rm F})} + \text{h.c.} = -i\,\frac{U}{\pi}\,\cos\left(\sqrt{4\pi}\Phi_c + 4k_{\rm F}x\right)\sum_{a=1}^{6}\kappa^a. \tag{I.87}$$

Il s´agit encore d´un opérateur marginal, qui a la propriété importante de coupler les secteurs de spin et de charge. Ce terme d´Umklapp, qui ne conserve l´impulsion qu´à $4k_{\rm F}$ près, est nouveau par rapport à la chaîne de Hubbard SU(2), où le couplage spin-charge est interdit par la symétrie de translation d´un site sur le réseau, et où l´opérateur d´Umklapp ne touche que la charge. Comme Affleck l´a montré [52], un tel couplage entre la charge et le spin apparaît dans toutes les chaînes de spin à symétrie SU(2m), et au remplissage n = m, pour m > 1, ce qui exclut la chaîne SU(2).

Nous devrons donc, au voisinage du demi remplissage, ajouter au hamiltonien continu (I.80,I.81) le hamiltonien de couplage spin-charge

$$\mathcal{H}_{sc} = -2i\,g_{sc}\,\cos\left(\sqrt{4\pi}\Phi_c + 4k_{\rm F}x\right)\sum_{a=1}^{6}\kappa^a, \tag{I.88}$$

où le couplage g_{sc} est donné par :

$$g_{sc} = \frac{U}{2\pi}. \tag{I.89}$$

Le hamiltonien de couplage spin-charge $\mathcal{H}_{sc}$ ne peut pas être représenté en terme des courants de SU(4)$_1\times$U(1). Néanmoins, nous verrons plus loin (section III.1.1) qu´il est possible de le décrire comme une interaction courant-courant à condition de considérer les courants de SO(8)$_1$, en utilisant le plongement SU(4)$\times$U(1) $\subset$ SO(8).

Stabilité de la théorie effective

Le passage à la limite continue doit être vu comme un processus de renormalisation dans l´espace réel ("blocs de spin"), qui permet d´arriver à une théorie effective continue à une échelle de quelques multiples de la maille du réseau. A mesure que la taille des blocs croit, de nouveaux opérateurs apparaissent, qui devraient être en principe retenus. Cependant, la plupart d´entre eux sont inessentiels, et leur constante de couplage décroit très rapidement au cours des itérations du groupe de renormalisation, si bien que nous pourrons les négliger. Dans ce qui précède, nous avons établi la forme de l´hamiltonien au premier ordre en U/t, qui ne retient qu´une partie des opérateurs générés dans ce processus.

Notons que retenir les opérateurs marginaux ou essentiels par rapport au point fixe ultraviolet non interagissant n´est en principe pas suffisant. En effet, certains opérateurs peuvent voir leur dimension d´échelle changer au cours du processus de renormalisation ; des opérateurs “dangereusement inessentiels” au point fixe ultraviolet pourront devenir essentiels dans l´infrarouge. D´une manière générale, tous les opérateurs de la théorie continue respectant la symétrie du modèle initial apparaitront et doivent être considérés, et éventuellement écartés s´il s´avère qu´ils sont inessentiels aux points fixes ultraviolet *et* infrarouge.

Une autre contrainte sur les opérateurs apparaissant est qu´il doivent pouvoir se construire en terme des fermions sur le réseau ; en particulier ils ne doivent pas faire sortir de l´espace de Fock des fermions ! Cette contrainte importante est prise en compte par une symétrie de jauge non physique, que devront respecter tous les opérateurs physiques. Nous allons voir que l´ensemble de ces contraintes de symétrie n´autorise que deux familles d´opérateurs, dont très peu seront essentiels.

Les représentations des symétries discrètes de translation d´un site $\mathcal{T}_{a_0}$, de parité $\mathcal{P}_s$ et de la conjugaison de charge $\mathcal{C}$ sont résumées dans le tableau suivant :

			$\alpha = s, t, st$		
	$\Phi_c(x)$	$\Theta_c(x)$	$\Phi_\alpha(x)$	$\Theta_\alpha(x)$	
$\mathcal{T}_{a_0}$	$\Phi_c(x) + \frac{2k_F}{\sqrt{\pi}}$	$\Theta_c(x)$	$\Phi_\alpha(x)$	$\Theta_\alpha(x)$	
$\mathcal{P}_s$	$-\Phi_c(-x)$	$\Theta_c(-x)$	$-\Phi_\alpha(-x)$	$\Theta_\alpha(x)$	
$\mathcal{C}$	$-\Phi_c(x)$	$-\Theta_c(x)$	$-\Phi_\alpha(x)$	$-\Theta_\alpha(x)$	$\}$ et $k_F \to \pi - k_F$

Le groupe de symétrie de jauge discrète est $\mathbb{Z}^8$. Cependant, quelques uns de ses éléments suffiront à notre propos. Ils consistent en :

$$\mathcal{G}_0\text{:}\quad \Phi_\alpha(x) \to \Phi_\alpha(x) + \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \qquad \Theta_\alpha(x) \to \Theta_\alpha(x) + \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \qquad \forall\alpha \tag{I.90}$$

$$\mathcal{G}_{\beta\gamma}\text{:}\quad \Phi_\alpha(x) \to \begin{cases} \Phi_\alpha(x) + \sqrt{\pi} \\ \Phi_\alpha(x) \end{cases}, \quad \Theta_\alpha(x) \to \begin{cases} \Theta_\alpha(x) + \sqrt{\pi} & \alpha = \beta, \gamma \\ \Theta_\alpha(x) & \alpha \neq \beta, \gamma \end{cases}, \tag{I.91}$$

Intéressons-nous à présent aux symétries continues, secteur par secteur :

Secteur de spin Dans le secteur de spin, le point fixe ultraviolet est le modèle de WZNW $\mathrm{SU}(4)_1$, si bien qu´on peut décomposer tous les opérateurs sur les primaires de WZNW de $\mathrm{SU}(4)_1$ et leurs descendants. Ces primaires seront notés $\Phi_{\lambda_{\mathrm{L}},\lambda_{\mathrm{R}}}$ [17], où il est entendu qu´ils se transforment dans la représentation $\lambda_{\mathrm{L(R)}}$ sous les transformations de $\mathrm{SU}(4)|_{\mathrm{L(R)}}$. Ces propriétés de transformations sont encodées dans l´OPE :

$$
\begin{aligned}
\mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{A}(z)\,\Phi_{\lambda_{\mathrm{L}},\lambda_{\mathrm{R}}}(w,\overline{w}) &\sim -\frac{T^{A}_{\lambda_{\mathrm{L}}}\,\Phi_{\lambda_{\mathrm{L}}\lambda_{\mathrm{R}}}(w,\overline{w})}{z-w}, \\
\mathcal{J}_{\mathrm{R}}^{A}(\overline{z})\,\Phi_{\lambda_{\mathrm{L}}\lambda_{\mathrm{R}}}(w,\overline{w}) &\sim \frac{\Phi_{\lambda_{\mathrm{L}}\lambda_{\mathrm{R}}}(w,\overline{w})\,T^{A}_{\lambda_{\mathrm{R}}}}{\overline{z}-\overline{w}},
\end{aligned}
\tag{I.92}
$$

où les $T^{A}_{\lambda_{\mathrm{L(R)}}}$ sont les générateurs agissant dans la représentation $\lambda_{\mathrm{L(R)}}$ de SU(4). Il faut entendre ces OPE comme suit : le champ Φ est un tenseur $(\Phi_{\lambda_{\mathrm{L}}\lambda_{\mathrm{R}}})^{ab}_{a=1\ldots\dim(\lambda_{\mathrm{L}}),b=1\ldots\dim(\lambda_{\mathrm{R}})}$, et le produit avec les T^A est un produit matriciel.

Les descendants de ces champs primaires ayant des dimensions d´échelle supérieures, il nous suffira ici de considérer les primaires. Les primaires de $\mathrm{SU}(4)_1$ sont au nombre de 3, chacun correspondant à une des trois représentations fondamentales de SU(4), de tableaux d´Young comportant une seule colonne et une, deux ou trois boîtes [16]. Les opérateurs primaires de $\mathrm{SU}(4)_1$ de spin conforme $h-\overline{h}$ nul possibles sont de deux types :

• On peut choisir $(\lambda_{\mathrm{L}},\lambda_{\mathrm{R}}) \in \left\{\square, \begin{smallmatrix}\square\\\square\\\square\end{smallmatrix}\right\}$ (où on a indiqué les représentations fondamentale et antifondamentale par leurs tableaux d´Young, cf. appendice A). Ces opérateurs primaires sont non locaux en termes des fermions Ψ_α, mais peuvent s´exprimer dans les opérateurs d´ordre et de désordre des modèles d´Ising. Ces primaires ont pour dimensions conformes $h=\overline{h}=\frac{3}{8}$, si bien qu´ils seront représentés par le produit de 6 opérateurs d´ordre ou de désordre. Une relation non locale existe avec les fermions de départ ψ_a :

$$
\left(\Phi_{\begin{smallmatrix}\square\\\square\\\square\end{smallmatrix},\square}\right)_{ab} = e^{-i\sqrt{\pi}\Phi_c}\,\psi^{\dagger}_{\mathrm{L}a}\psi_{\mathrm{R}b}\,, \qquad \Phi_{\square,\begin{smallmatrix}\square\\\square\\\square\end{smallmatrix}} = \left(\Phi_{\begin{smallmatrix}\square\\\square\\\square\end{smallmatrix},\square}\right)^{\dagger}. \tag{I.93}
$$

Si l´on cherche à fabriquer un singulet sous les transformations de SU(4) à partir de ces primaires, on peut former par exemple

$$
2\pi\,\mathrm{Tr}\left(\Phi_{\begin{smallmatrix}\square\\\square\\\square\end{smallmatrix},\square}\right) = \prod_{\alpha=s,t,st} \sin\sqrt{\pi}\Phi_\alpha + i\prod_{\alpha=s,t,st}\cos\sqrt{\pi}\Phi_\alpha, \tag{I.94}
$$

Cet opérateur, de dimension d´échelle $\frac{3}{4}$ n´est pas invariants sous l´opération de jauge discrète $\mathcal{G}_0$ (il est facile de se convaincre à partir de (I.93) que $\Phi_{\begin{smallmatrix}\square\\\square\\\square\end{smallmatrix},\square} \xrightarrow{\mathcal{G}_0} -i\,\Phi_{\begin{smallmatrix}\square\\\square\\\square\end{smallmatrix},\square}$), si

[17] Ces primaires $\Phi_{\lambda_{\mathrm{L}},\lambda_{\mathrm{R}}}$ ne doivent pas être confondus avec les champs bosoniques Φ_a et Φ_α !

bien que nous devons l´écarter. En considérant la fusion de deux de ces primaires, par exemple $\mathrm{Tr}\left(\Phi^2_{\substack{\square\\\square},\square}\right)$, on retrouve l´opérateur marginal SU(4) invariant $\mathcal{J}^A_{\mathrm{R}}\mathcal{J}^A_{\mathrm{L}}$.

• L´autre choix possible est $\lambda_{\mathrm{L}} = \lambda_{\mathrm{R}} = \substack{\square\\\square}$. Ce primaire admet une expression simple en fonctions des fermions de Majorana : il s´agit du tenseur de rang 2 de composantes $(\Phi_{\substack{\square\\\square},\substack{\square\\\square}})^{ab} = i\xi^a_{\mathrm{R}}\xi^b_{\mathrm{L}}$. Sa trace $\mathrm{Tr}\,(\Phi_{\substack{\square\\\square},\substack{\square\\\square}}) = i\sum_a \kappa^a$ est un terme de masse pour les fermions de Majorana. Cependant, cet opérateur change de signe sous $\mathcal{G}_0$, et nous l´écarterons. Le seul bilinéaire singulet de SU(4) que l´on peut former avec $\Phi_{\substack{\square\\\square},\substack{\square\\\square}}$ est $\mathrm{Tr}\left(\Phi^2_{\substack{\square\\\square},\substack{\square\\\square}}\right) \sim \mathcal{J}^A_{\mathrm{R}}\mathcal{J}^A_{\mathrm{L}}$, opérateur marginal que l´on a déjà inclu.

La théorie en spin est donc stable vis à vis des ordres supérieurs du développement en U/t, *pourvu que spin et charge soient découplés.*

Secteur de charge Dans le secteur de charge, la symétrie U(1) n´autorise que des opérateurs de la forme $V(\Phi_c)$. La symétrie de jauge $\mathcal{G}_0$ implique que V doit être une fonction périodique, donc décomposable sur les opérateurs de vertex $e^{i\beta\Phi_c}$. L´invariance sous $\mathcal{G}_0$, par parité et par translation d´un site requiert finalement que V soit de la forme :

$$V^q_m = \cos\left(mq\sqrt{16\pi}\,\Phi_c\right)\,, \qquad m \in \mathbb{N} \tag{I.95}$$

où l´entier q est défini pour un remplissage rationnel par :

$$n = \frac{p}{q}\,, \qquad p \text{ et } q \text{ premiers entre eux.} \tag{I.96}$$

Ces opérateurs décrivent dans la limite continue des processus d´Umklapp, qui ne conservent l´impulsion totale qu´à un multiple entier près de l´impulsion de Fermi k_{F}. Leur dimension d´échelle au point fixe $U = 0$ est $\Delta_m = 4m^2q^2 \geq 4$, si bien qu´ils sont naïvement inessentiels. Néanmoins, si l´on envisage de perturber autour du point fixe liquide de Luttinger (I.83), le terme de Umklapp se réécrit :

$$V^q_m = \cos\left(mq\sqrt{16\pi K_c}\,\widetilde{\Phi}_c\right) \tag{I.97}$$

et sa dimension d´échelle est modifiée en : $\widetilde{\Delta}_m = 4m^2q^2K_c$. Ainsi, en présence de fortes interactions (lorsque $K_c < 1/2m^2q^2$), V^q_m devient essentiel.

Notons que l´opérateur d´Umklapp de dimension d´échelle minimale, obtenu pour les remplissages n entiers, est $\cos\left(\sqrt{16\pi}\Phi_c\right)$ et apparaît au deuxième ordre des perturbations, dans la fusion de $H^{(4k_{\mathrm{F}})}_U$ avec lui même. Cependant, il n´existe pas de diagramme de Feynman, d´ordre g^2_{sc}, en terme des fermions de départ ψ_a. Ceci vient du fait que l´on doit contracter sur les degrés de liberté de spin seulement.

Couplages spin-charge Pour les opérateurs couplant spin et charge, des arguments similaires permettent de montrer que les seuls opérateurs permis sont :

$$W_m^{2q+1} = i \cos\Big((2q+1)(2m+1)\sqrt{4\pi}\Phi_c\Big) \sum_{a=1}^{6} \kappa^a \,, \qquad m \in \mathbb{N}, \tag{I.98}$$

où cette fois la densité est de la forme :

$$n = \frac{2p}{2q+1}\,, \qquad p \text{ et } 2q+1 \text{ premiers entre eux.} \tag{I.99}$$

Il s´agit encore d´opérateurs d´Umklapp, de dimension d´échelle $\Delta'_m = 1 + (2q+1)^2(2m+1)^2$ au point fixe $U = 0$, et $\widetilde{\Delta}'_m = 1 + (2q+1)^2(2m+1)^2 K_c$ au point fixe de Luttinger.

La théorie continue décrivant à basse énergie le modèle de Hubbard SU(4) dépend sensiblement du remplissage : ainsi, le couplage entre degrés de liberté de spin et de charge n´apparaît qu´au voisinage du demi remplissage. De plus, les opérateurs d´Umklapp ne touchant que le secteur de charge sont susceptibles de jouer un grand rôle pour certains remplissages commensurables, au moins à forte répulsion coulombienne. Ceci nous conduira dans la suite à étudier distinctement deux zones du diagramme des phases : le quart de remplissage ($n = 1$) et son voisinage, puis le demi remplissage ($n = 2$) et son voisinage.

Chapitre II

Etude en dehors du demi remplissage

Nous nous intéressons dans ce chapitre au modèle de Hubbard au quart de remplissage (un électron par site en moyenne), ainsi qu´au voisinage du quart de remplissage.

Lorsque l´on s´écarte suffisamment du demi remplissage ($n = 2$ et $k_{\mathrm{F}} = \pi/2a_0$), le terme de couplage entre degrés de liberté de spin et de charge (I.88) oscille fortement, et il est donc prévisible qu´il ne joue aucun rôle à basse énergie. Cet argument de faible couplage est strictement valable à $U \ll t$. Dans ce chapitre, nous nous restreignons précisément à la région du diagramme des phases où ce terme est inessentiel, région qui définit l´expression “en dehors du demi remplissage”. Le régime du quart de remplissage a déjà été étudié en détail [25, 24], et nous présentons ces résultats par souci d´exhausitivité. Il s´avère que le comportement dans le secteur de spin peut être atteint à partir du développement de faible couplage. Ceci est notamment possible grâce au découplage des degrés de liberté de spin et de charge, à *tous* les ordres de la théorie de perturbation. Le groupe de renormalisation à une boucle sera utilisé à faible couplage pour déduire la nature de la théorie effective. A fort couplage, une autre approche sera utilisée, qui suggèrera une continuité entre les régimes de faible et fort couplage.

Le comportement du modèle lorsqu´on le dope par des trous ou des électrons sera ensuite étudié dans la limite de faible dopage (voisinage immédiat du quart de remplissage), ainsi qu´à fort dopage. Nous verrons que la théorie en spin est identique à celle proposée dans les références [25, 24].

II.1 Le quart de remplissage

II.1.1 Limite de fort couplage

Commençons par nous intéresser à l´hamiltonien de Hubbard SU(4) (I.9) dans la limite particulière $U \gg t$. Lorsque $t = 0$, le fondamental de H_U a une dégénérescence très élevée, et consiste en tous les états comportant exactement un électron par site. L´ensemble de ces états simplement occupés sera noté $\mathcal{F}_1$. Le hamiltonien cinétique H_0 lève cette dégénérescence, et induit un hamiltonien effectif agissant dans $\mathcal{F}_1$. Les autres états propres de H_U ont une énergie au moins égale à U, et n´interviendront pas dans les propriétés de basse énergie.

Puisque H_0 appliqué sur un état simplement occupé produit des états comportant un site doublement occupé, au premier ordre en t, H_0 ne lève pas la dégénérescence dans les états de $\mathcal{F}_1$. Il faut appliquer la théorie de perturbation au deuxième ordre en t/U pour obtenir l´hamiltonien effectif souhaité : on considère donc les processus virtuels qui font intervenir des états doublement occupés comme états intermédiaires. Précisément, le hamiltonien effectif au deuxième ordre en t/U est donné par :

$$H_{\text{eff}} = -\mathcal{P}^1 \, H_0 \, (1 - \mathcal{P}^1) \, \frac{1}{H_U} \, (1 - \mathcal{P}^1) \, H_0 \, \mathcal{P}^1 \tag{II.1}$$

où $\mathcal{P}^1$ est le projecteur sur $\mathcal{F}_1$. H_{eff} doit être un hamiltonien d´échange, respectant la symétrie SU(4), et le calcul montre qu´il s´agit du hamiltonien de Heisenberg SU(4) antiferromagnétique :

$$H_{\text{eff}} = J \sum_{i,A} \mathcal{S}_i^A \mathcal{S}_{i+1}^A + \text{const.}, \tag{II.2}$$

où les opérateurs de spin $\mathcal{S}_i^A$ sont ceux définis dans (I.15), et où le couplage vaut : $J = 2t^2/U$. Comme les états sont simplement occupés, ces spins agissent sur la représentation fondamentale de SU(4), de tableau d´Young $\square$ (cette représentation est ici l´espace de dimension 4 à un électron par site).

Le problème défini par le hamiltonien (II.2) a été résolu grâce à la technique du Bethe Ansatz par Sutherland [53], qui a donné une solution au problème plus général défini par le hamiltonien de Heisenberg antiferromagnétique SU(n), les spins agissant dans la représentation fondamentale. Ces modèles comportent $\mathrm{n}-1$ branches d´excitations critiques, et développent un ordre à quasi longue portée. Comme Affleck l´a montré [54], ils sont dans la classe d´universalité du modèle conforme de WZNW $\mathrm{SU(n)}_1$, avec charge centrale $c = \mathrm{n} - 1$. Ce fait permet de connaître les expressions asymptotiques des fonctions de corrélation spin-spin. Il est difficile de donner une image physique simple (en terme d´un motif local) décrivant l´état fondamental : il s´agit d´un singulet total de spin SU(n), fortement corrélé, c´est-à-dire superposition (cohérente) d´un grand nombre d´états de Fock “purs” $\prod_i c^\dagger_{i,a_i}|0\rangle$. Les premières excitations (sans gap) se transforment dans la représentation fondamentale de SU(n). Ces excitations sont la généralisation naturelle des spinons de la chaîne de Heisenberg antiferromagnétique SU(2).

Nous allons voir que la limite de faible couplage, en perturbation autour du point $U = 0$ où le système est métallique, permet de décrire convenablement ce régime de fort couplage, et donne une représentation naturelle des opérateurs de la théorie effective $SU(4)_1$ en terme des fermions sur le réseau.

II.1.2 Faible couplage

L´hamiltonien continu décrivant la théorie lorque $U \ll t$ a été établi dans le chapitre I. Rapellons son expression en terme du boson de charge Φ_c et des fermions de Majorana de spin $(\xi^a)_{a=1\ldots6}$:

$$H = \int_0^L dx\, \left(\mathcal{H}_c + \mathcal{H}_s\right), \tag{II.3}$$

$$\mathcal{H}_c = \frac{u_c}{2}\left[\frac{1}{K_c}\left(\partial_x\Phi_c\right)^2 + K_c\left(\partial_x\Theta_c\right)^2\right], \tag{II.4}$$

$$\mathcal{H}_s = -\frac{iv_s}{2}\sum_{a=1}^{6}\left(\xi^a_{\mathrm{R}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{R}} - \xi^a_{\mathrm{L}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{L}}\right) + 2\pi g_s \sum_{1\le a<b\le 6}\kappa^a\kappa^b, \tag{II.5}$$

les couplages étant donnés par :

$$K_c = \left(1+\frac{3U}{\pi v_{\mathrm{F}}}\right)^{-1/2}, \quad u_c = v_{\mathrm{F}}\left(1+\frac{3U}{\pi v_{\mathrm{F}}}\right)^{1/2}, \quad g_s = -\frac{U}{2\pi}, \quad v_s = v_{\mathrm{F}} + g_s. \tag{II.6}$$

Il est la somme d´un hamiltonien de spin et d´un hamiltonien de charge, qui commutent [24]. Il y a donc une véritable séparation spin - charge. Cette séparation spin - charge est assez familière à une dimension ; ainsi, par exemple, le modèle de Hubbard à une bande exhibe également cette propriété, qui signifie qu´un électron dans le système en interaction perd sa nature de particule, puisque les excitations du système sont des quasiparticules de spin nul portant une charge (appelés holons), et d´autres, électriquement neutres, portant un spin $\frac{1}{2}$ (les spinons) [32, 33]. Notons que cette propriété est ici directement obtenue grâce au changement de base (I.58), qui sépare les degrés de liberté de spin et de charge. Ce changement de base est très compliqué, non local, si on l´explicite dans les fermions, et c´est justement le grand intérêt de la bosonisation que de permettre un tel changement de base. Originellement, la séparation spin - charge dans la théorie libre a été établie en utilisant la bosonisation non abélienne par Affleck [54], dans le but de décrire des chaînes de spin quantiques à partir de modèles de fermions : en effet, on peut voir une chaîne de spin (et cette image a même souvent un sens physique) comme un système de fermions dans lequel il existe un processus physique responsable du gel des fluctuations de charge, de sorte que les degrés de liberté effectifs sont les spins.

Secteur de spin

Le secteur de spin est décrit par le modèle conforme de WZNW $\mathrm{SU}(4)_1$ perturbé par une interaction marginale courant-courant :

$$\mathcal{H}_s = \frac{\pi v_{\mathrm{F}}}{5} \sum_{A=1}^{15} \left(: \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^A \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^A : + : \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^A \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^A : \right) + 2\pi g_s \sum_{A=1}^{15} \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^A \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^A. \tag{II.7}$$

La fonction β du groupe de renormalisation pour la constante de couplage g_s permet d´obtenir la théorie effective à basse énergie. A une boucle, elle est donnée par :

$$\beta_{g_s} = 4\, g_s^2. \tag{II.8}$$

Comme la condition initiale $g_s(a_0)$ est négative d´après (II.6), l´interaction courant-courant est inessentielle, si bien que le secteur de spin est décrit à basse énergie par le modèle de WZNW $\mathrm{SU}(4)_1$, le même modèle qu´à fort couplage. L´étude du faible couplage fournit en outre la relation entre les opérateurs fermioniques de départ et les opérateurs primaires de $\mathrm{SU}(4)_1$.

La théorie continue n´est strictement valide qu´à faible couplage. Cependant, des arguments qualitatifs permettent d´étendre sa validité à toute valeur de U. L´analyse des opérateurs autorisés par les symétries (section I.2.2) exclut tout opérateur autre que l´interaction marginale courant-courant, et la condition initiale (II.6) pour g_s est négative à toute valeur de U. Il existe bien sûr des corrections à (II.6), qui sont d´ordre supérieur en U/t. Ces corrections apparaissent lorsque des blocs de spin sont construits pour obtenir la théorie continue, ce qui s´apparente à un processus de renormalisation. Or le groupe de renormalisation prédit justement que g_s décroit en valeur absolue (cf. Eq. II.8), et cette conclusion ne serait pas affectée si l´on considérait les ordres supérieurs dans le développement en boucles. Cet argument heuristique suggère que la théorie en spin reste critique à toute valeur de U, et qu´il existe une continuité entre le régime de faible et de fort couplage. Cette continuité est admise depuis longtemps [54, 52].

Les simulations numériques par Monte Carlo quantique confirment ce fait [25], en ne montrant aucune évidence d´une ouverture de gap dans le secteur de spin, le gap de spin $\Delta_s(L)$ s´extrapolant à zéro à la limite thermodynamique. Le seul effet de l´interaction dans le secteur de spin, à basse énergie, est une renormalisation finie de la vitesse de spin.

Secteur de charge

Le secteur de charge est décrit par le hamiltonien de Luttinger (II.4) où les paramètres de Luttinger K_c, u_c sont donnés par (II.6). Les degrés de liberté de charge sont critiques, au moins à suffisamment faible interaction coulombienne U. L´interaction courant-courant $\mathcal{J}^0_{\mathrm{R}}\mathcal{J}^0_{\mathrm{L}}$ a pour effet de modifier les exposants critiques, non universels, qui sont maintenant des fonctions continues de K_c, donc de U. A faible U, le modèle de Hubbard SU(4) est un métal, avec des exposants anormaux reminiscents d´un comportement de liquide de Luttinger [6].

Les régimes de faible couplage et de fort couplage diffèrent donc essentiellement par la charge, qui est critique lorsque $U \ll t$ et qui est gelée lorsque $U \gg t$. Il doit exister un processus, à un couplage intermédiaire, qui gèle les degrés de liberté de charge. Or, le remplissage étant commensurable, les opérateurs de Umklapp (I.95) sont présents. Le processus de Umklapp le plus essentiel est ici

$$V_1^1 = \cos\left(\sqrt{16\pi}\,\Phi_c\right). \tag{II.9}$$

Après la transformation de Bogoliubov (I.84), le hamiltonien du secteur de charge prend la forme :

$$\mathcal{H}_c = \frac{u_c}{2}\left[\left(\partial_x\widetilde{\Phi}_c\right)^2 + \left(\partial_x\widetilde{\Theta}_c\right)^2\right] + y\cos\left(\sqrt{16\pi K_c}\,\widetilde{\Phi}_c\right). \tag{II.10}$$

La physique décrite par le hamiltonien de sine Gordon (II.10) est bien connue, et dépend crucialement de la valeur de K_c, qui fixe la dimension d´échelle du potentiel de sine Gordon : au point fixe de Luttinger, cette dimension d´échelle est $\widetilde{\Delta} = 4K_c$. Si l´opérateur de Umklapp est inessentiel ($K_c > 1/2$), la théorie est critique, décrite par le point fixe $y = 0$. Lorsque $K_c < 1/2$, l´opérateur de Umklapp devient essentiel, la symétrie discrète $\widetilde{\Phi}_c \to \widetilde{\Phi}_c + p\sqrt{\frac{\pi}{4K_c}},\ p \in \mathbb{Z}$, est brisée et la théorie est massive. Cette théorie est intégrable [55], et son spectre [56, 57] comporte une paire soliton et antisoliton conjugués de charge (qui interpolent entre deux vides dégénérés du modèle), ainsi que des modes respiratoires (“breathers”), états liés soliton-antisoliton, qui apparaissent lorsque $K_c < 1/4$.

La relation entre K_c et U (II.6) prédit naïvement que V_1^1 devient essentiel pour $U > \pi v_{\mathrm{F}} \approx 4.4\,t$. Cependant, la relation (II.6) n´est strictement valable qu´à faible couplage, et le problème de savoir si K_c atteint la valeur critique 1/2 est non perturbatif.

Des simulations du système par la méthode de Monte Carlo quantique permettent de répondre affirmativement à cette question : il existe une valeur critique $U_c \approx 2.8\,t$ pour laquelle K_c atteint la valeur 1/2, et où le modèle subit une transition vers une phase isolante [25]. Cette transition de phase est du type Kosterlitz-Thouless [58], et le gap de charge au voisinage de la transition suit la loi $\Delta_c(U) \sim e^{-A/\sqrt{U-U_c}}$ [1]. Une manière commode de se représenter ce qu´il advient du champ de charge est l´image semi-classique : dans la phase de Mott, le champ de charge se gèle à l´un des minima du potentiel de sine Gordon (II.9). Ces minimas sont distants de $\sqrt{\pi}/2$ et nous choisirons pour la suite $\langle\widetilde{\Phi}_c\rangle = 0 = \langle\Phi_c\rangle$ (les différents choix possibles sont reliés par la transformation de jauge $\mathcal{G}_0$).

Il est important de noter que l´absence de couplage spin-charge dans la théorie continue a pour conséquence que cette transition dans le secteur de charge n´affecte pas les degrés de liberté de spin. En particulier, les ordres en spin seront les mêmes dans la phase isolante et dans la phase métallique.

Les excitations chargées les plus basses en énergie seront les solitons du modèle de sine Gordon, portant une charge e mais pas de spin. Un tel état n´est pas invariant sous les transformations de jauge discrètes. Pour en faire un état physique (aux nombres quantiques n_a entiers), il faudra l´habiller d´un spinon du modèle de WZNW SU(4)$_1$. Comme ces spinons sont critiques, le gap à une particule Δ_1 mesure bien la masse du soliton de sine Gordon.

II.1.3 Fonctions de corrélation

Opérateurs de spin

Les opérateurs de spin locaux (I.15) admettent dans la limite continue un développement sur plusieurs harmoniques, du type (I.36). La partie unforme des densités de spin a déjà été considérée ; il s´agit de la somme des courants gauches et droits

[1] Notons qu´une version intégrable du modèle de Hubbard SU(4) existe [59] : dans cette version, l´espace de Fock est limité aux états comportant au plus deux électrons par site. Une étude détaillée de ce modèle par Ansatz de Bethe [60] prédit une transition du *premier* ordre à une valeur critique de l´interaction coulombienne $U_c/t = 5.956\ldots$. Ces différences sont attribuables à l´interaction effective à longue portée induite par la contrainte sur l´espace de Fock.

(Eq. I.63). Les parties oscillant à $\pm 2k_{\mathrm{F}}$ sont respectivement :

$$\mathcal{N}^A = \psi^\dagger_{\mathrm{L}a} \mathcal{T}^A_{ab} \psi_{\mathrm{R}b}\,, \qquad \mathcal{N}^{A\dagger} = \psi^\dagger_{\mathrm{R}a} \mathcal{T}^A_{ab} \psi_{\mathrm{L}b}. \tag{II.11}$$

D´après (I.93), ces densités à $2k_{\mathrm{F}}$ s´expriment en terme des deux primaires $\Phi_{\begin{smallmatrix}\Box\\\Box\end{smallmatrix},\Box}$ et $\Phi_{\Box,\begin{smallmatrix}\Box\\\Box\end{smallmatrix}}$ de $\mathrm{SU}(4)_1$ selon :

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}^A &= e^{i\sqrt{\pi}\Phi_c}\, \mathrm{Tr}\left(T^A_{\Box}\, \Phi_{\Box,\begin{smallmatrix}\Box\\\Box\end{smallmatrix}}\right), \\
\mathcal{N}^{A\dagger} &= e^{-i\sqrt{\pi}\Phi_c}\, \mathrm{Tr}\left(T^A_{\Box}\, \Phi_{\begin{smallmatrix}\Box\\\Box\end{smallmatrix},\Box}\right).
\end{aligned} \tag{II.12}$$

Or le modèle de WZNW $\mathrm{SU}(4)_1$ contient trois primaires, qui sont définis par leur covariance sous les transformations $\mathrm{SU}(4)|_{\mathrm{L}} \times \mathrm{SU}(4)|_{\mathrm{R}}$, ce qu´expriment les OPE (I.92). Chacun de ces champs primaires permet de définir un opérateur de spin, c´est-à-dire se transformant dans la représentation adjointe sous les transformations du groupe SU(4) diagonal $\mathrm{SU}(4)|_{\mathrm{L}} \times \mathrm{SU}(4)|_{\mathrm{R}}|_{\mathrm{diag}}$, qui agissent simultanément dans le secteur gauche et droit.

Pour des raisons de symétrie, ces opérateurs de spin doivent entrer dans l´expression des densités de spin, si bien qu´une partie de la densité de spin doit s´exprimer en terme du primaire non encore considéré, à savoir $\Phi_{\begin{smallmatrix}\Box\\\Box\end{smallmatrix},\begin{smallmatrix}\Box\\\Box\end{smallmatrix}}$. La limite continue du modèle de Hubbard que nous avons prise ne fait pas apparaître cette contribution à la densité de spin. Une manière de faire apparaître ces opérateurs n^A est de considérer l´OPE de la densité hamiltonienne oscillant à $4k_{\mathrm{F}}$ avec les courants :

$$n^A \sim \left(\mathcal{J}^A_{\mathrm{R}} + \mathcal{J}^A_{\mathrm{L}}\right)\left(e^{4ik_{\mathrm{F}}x}\mathcal{H}^{(4k_{\mathrm{F}})} + \mathrm{h.c.}\right). \tag{II.13}$$

Les n^A obtenus de la sorte ont automatiquement les bonnes propriétés de symétrie et respectent l´invariance de jauge discrète. En indexant une base de $\mathfrak{su}(4)$ par les paires $1 \leq a < b \leq 6$, on a explicitement :

$$n^{ab} = iB\, \cos\left(\sqrt{4\pi}\Phi_c + 4k_{\mathrm{F}}x\right)\, \left(\xi^a_{\mathrm{R}}\xi^b_{\mathrm{L}} - \xi^b_{\mathrm{R}}\xi^a_{\mathrm{L}}\right), \tag{II.14}$$

où B est une constante réelle non universelle. On reconnaît dans cette expression la partie de pur spin construite sur le primaire de $\mathrm{SU}(4)_1$: $\mathrm{Tr}\left(T^A_{\begin{smallmatrix}\Box\\\Box\end{smallmatrix}}\, \Phi_{\begin{smallmatrix}\Box\\\Box\end{smallmatrix},\begin{smallmatrix}\Box\\\Box\end{smallmatrix}}\right)$. Notons que cette densité à $4k_{\mathrm{F}}$ n´est pas obtenue par la limite continue naïve des opérateurs de spin (qui sont des bilinéaires de fermions), et apparaît du fait de l´interaction.

L´expression complète des densités de spin est finalement :

$$\mathcal{S}^A(x) \approx \mathcal{J}^A_{\mathrm{R}}(x) + \mathcal{J}^A_{\mathrm{L}}(x) + e^{2ik_{\mathrm{F}}x}\, \mathcal{N}^A(x) + e^{-2ik_{\mathrm{F}}x}\, \mathcal{N}^{A\dagger}(x) + n^A(x). \tag{II.15}$$

On voit que pour leurs parties oscillantes, les densités de spin dépendent du champ de charge. On pourrait bien sûr retirer cette dépendance dans la charge, en définissant par exemple $\hat{n}^{ab} = i\left(\xi_{\rm R}^a \xi_{\rm L}^b - \xi_{\rm R}^b \xi_{\rm L}^a\right)$, mais au prix de perdre l´invariance sous la symétrie de jauge discrète : l´opérateur $\hat{n}^A$ n´est pas physique puisqu´il fait sortir de l´espace de Fock des fermions sur le réseau. Nous conserverons donc précieusement cette dépendance dans la charge.

Notons enfin que les expressions formelles (II.12) pour les densités oscillant à $2k_{\rm F}$ présentent l´intérêt de faire clairement apparaître la relation aux primaires de $\mathrm{SU}(4)_1$; il est néanmoins possible d´en avoir une expression explicite en terme, par exemple, des opérateurs d´ordre et de désordre des 6 modèles d´Ising.

Fonctions de corrélation

La connaissance de la théorie effective dans la limite de basse énergie permet de calculer sans problème les expressions asymptotiques (dans la limite des grandes distances et des grands temps) des fonctions de corrélation. Nous nous intéresserons à la fonction de Green à une particule définie par :

$$G_{ab}(x,\tau) = \mathrm{T}_\tau \left\langle c^\dagger_{j,a}(\tau) c_{0,b}(0) \right\rangle , \qquad x = ja_0, \tag{II.16}$$

ainsi qu´à la fonction de corrélation spin-spin :

$$M^{AB}(x,\tau) = \mathrm{T}_\tau \left\langle \mathcal{S}^A_j(\tau) \mathcal{S}^B_0(0) \right\rangle , \tag{II.17}$$

où T_τ est le symbole qui ordonne en temps euclidien.

Naturellement, celles-ci dépendent de la phase que l´on considère. La méthode employée pour leur calcul est claire : les opérateurs sont exprimés dans les champs de basse énergie, dont on connaît les fonctions de corrélation asymptotiques.

• phase métallique :

La fonction de corrélation G_{ab} est diagonale dans les indices a, b, en raison de l´invariance SU(4) de la théorie.

$$\begin{aligned} G_{ab}(x,\tau) &= \frac{\delta_{ab}}{2\pi} \left(u_c^2\tau^2 + x^2\right)^{-\alpha/2} \\ &\times \left[\frac{e^{ik_{\rm F}x}}{\left(u_c\tau + ix\right)^{1/4}\left(v_s\tau + ix\right)^{3/4}} + \frac{e^{-ik_{\rm F}x}}{\left(u_c\tau - ix\right)^{1/4}\left(v_s\tau - ix\right)^{3/4}} \right] \end{aligned} \tag{II.18}$$

l´exposant α étant donné par :

$$\alpha = \frac{(K_c - 1)^2}{8K_c}.$$

La fonction de corrélation spin-spin se décompose sur plusieurs vecteurs d´onde :

$$\begin{aligned} M^{AB}(x,\tau) &= \frac{\delta^{AB}}{2\pi^2} \left[M^{(0)}(x,\tau) + \cos(2k_{\mathrm{F}}x)\, M^{(2k_{\mathrm{F}})}(x,\tau) \right. \\ &\qquad \left. + \cos(4k_{\mathrm{F}}x)\, M^{(4k_{\mathrm{F}})}(x,\tau) \right] \end{aligned} \tag{II.19}$$

avec

$$\begin{aligned} M^{(0)}(x,\tau) &= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{(v_s\tau + ix)^2} + \frac{1}{(v_s\tau - ix)^2}\right], \\ M^{(2k_{\mathrm{F}})}(x,\tau) &= \frac{1}{\left(u_c^2\tau^2 + x^2\right)^{K_c/4}\left(v_s^2\tau^2 + x^2\right)^{3/4}}, \\ M^{(4k_{\mathrm{F}})}(x,\tau) &= \frac{B^2}{\left(u_c^2\tau^2 + x^2\right)^{K_c}\left(v_s^2\tau^2 + x^2\right)}. \end{aligned} \tag{II.20}$$

• <u>phase isolante</u> :

La fonction de corrélation G_{ab}, du fait du terme d´Umklapp essentiel dans le secteur de charge, décroît maintenant de manière exponentielle, ce qui reflète le caractère isolant du modèle :

$$G_{ab}(x,\tau) \sim \delta_{ab}\, e^{-\sqrt{x^2+u_c^2\tau^2}/\xi_c} \tag{II.21}$$

où la longueur de corrélation de charge est de l´ordre de grandeur de l´inverse de la masse du soliton de sine-Gordon $\xi_c \sim \Delta_1^{-1}$.

Les opérateurs de spin dans la phase isolante peuvent être réécrits en terme des champs de spin seulement, les parties faisant intervenir le champ de charge se gelant à leur valeur moyenne [2]. La fonction de corrélation spin-spin admet toujours la décomposition (II.19) et les différentes composantes sont à présent :

$$\begin{aligned} M^{(0)}(x,\tau) &= \frac{1}{2}\left[\frac{1}{(v_s\tau + ix)^2} + \frac{1}{(v_s\tau - ix)^2}\right] \\ M^{(2k_{\mathrm{F}})}(x,\tau) &= \frac{|A|^2}{\left(v_s^2\tau^2 + x^2\right)^{3/4}} \\ M^{(4k_{\mathrm{F}})}(x,\tau) &= \frac{B'^2}{v_s^2\tau^2 + x^2} \end{aligned} \tag{II.22}$$

[2] Bien entendu, la fonction de corrélation obtenue sera valable pour des distances typiques grandes devant la longueur de corrélation de charge ξ_c.

où des quantités non universelles A, B ont été introduites et sont données par :

$$A = \left\langle e^{i\sqrt{\pi}\Phi_c} \right\rangle_{\text{S.G.}}, \qquad B' = B \left\langle \cos\left(\sqrt{4\pi}\Phi_c\right) \right\rangle_{\text{S.G.}}, \tag{II.23}$$

les valeurs moyennes étant prises dans le modèle de sine Gordon (II.10).

L´exposant $\frac{3}{4}$ de la partie oscillant à $2k_{\text{F}}$ de la fontion de corrélation spin-spin, conséquence directe de l´appartenance à la classe d´universalité du modèle de WZNW $SU(4)_1$, a été confirmé par des simulations numériques Monte Carlo quantique [61].

Quelle que soit la phase, le terme dominant à longue distance de la fonction de corrélation spin-spin oscille à $2k_{\text{F}} = \pi/2$, ce qui montre que le fondamental à une périodicité de quatre mailles du réseau. Ce fait s´interprète simplement : quatre sites sont nécessaires pour bâtir un singulet de SU(4).

II.2 Autour du quart de remplissage

II.2.1 Faible dopage

Afin d´étudier le comportement du modèle sous dopage, nous travaillerons cette fois dans l´ensemble grand canonique, en ajoutant à l´hamiltonien de Hubbard SU(4) (I.9) un terme de potentiel chimique couplé à la charge totale et contrôlant le remplissage :

$$H_{\text{dop}} = -\mu \sum_{i=1}^{N} \sum_{a=1}^{4} n_{i,a}. \tag{II.24}$$

Ce nouveau terme, proportionnel à la charge totale, commute avec l´hamiltonien de Hubbard SU(4). Son expression bosonisée est :

$$H_{\text{dop}} = \int_0^L dx\, \mathcal{H}_{\text{dop}} = -\frac{2\mu}{\sqrt{\pi}} \int_0^L dx\, \partial_x \Phi_c. \tag{II.25}$$

On peut vérifier que la composante oscillant à $2k_{\text{F}}$ de $\mathcal{H}_{\text{dop}}$ ne génère aucun opérateur essentiel par OPE avec la partie oscillant à $2k_{\text{F}}$ de la densité hamiltonienne, si bien que nous tiendrons (II.25) pour le seul opérateur introduit par le dopage.

Les degrés de liberté de spin étant découplés de la charge au voisinage du quart de remplissage, la théorie en spin n´est pas affectée par le dopage, et demeure décrite à basse énergie par le modèle de WZNW $SU(4)_1$.

Le secteur de charge, quant à lui, devrait sous l´effet du dopage voir son gap se fermer dans la phase de Mott, et développer de l´incommensuration. Cette transition commensurable - incommensurable est analogue à celle que l´on observe dans un systéme de spin sous champ magnétique [62]. Dans notre notre cas, le potentiel chimique μ joue le rôle du champ magnétique, et le boson de charge Φ_c celui du boson décrivant les fluctuations magnétiques d´une chaîne de spin $\frac{1}{2}$. Afin de mettre en évidence cette transition, effectuons le changement de variable :

$$\hat{\Phi}_c(x) = \widetilde{\Phi}_c(x) - \frac{2\mu}{u_c}\sqrt{\frac{K_c}{\pi}}\; x\,, \qquad \hat{\Theta}_c(x) = \widetilde{\Theta}_c(x), \tag{II.26}$$

qui permet de réécrire le hamiltonien du secteur de charge (II.10) comme :

$$\mathcal{H}_c = \frac{u_c}{2}\left[\left(\partial_x\hat{\Phi}_c\right)^2 + \left(\partial_x\hat{\Theta}_c\right)^2\right] + y\cos\left(\sqrt{16\pi K_c}\,\hat{\Phi}_c + qx\right) + \text{const.} \tag{II.27}$$

où $q = 8\mu K_c/u_c$.

Modification de la phase métallique

Dans la phase métallique, l´opérateur d´Umklapp est inessentiel, si bien que dans la limite infrarouge, le couplage y tend vers 0. Le hamiltonien du secteur de charge est un hamiltonien libre pour le champ $\hat{\Phi}_c$, montrant que la charge totale est modifiée. En effet, $\left\langle \partial_x\hat{\Phi}_c \right\rangle = 0$ entraîne d´après (I.84) et (II.26) que la densité moyenne s´écarte du quart de remplissage selon :

$$n - 1 = \frac{2}{L\sqrt{\pi}}\int_0^L dx\,\partial_x\Phi_c = \frac{4K_c}{\pi u_c}\,\mu. \tag{II.28}$$

Qualitativement, la théorie à basse énergie est donc la même, le seul effet du dopage étant de générer de l´incommensuration. L´impulsion de Fermi est à présent :

$$k_{\text{F}}a_0 = \frac{\pi}{4} + \frac{K_c}{u_c}\,\mu. \tag{II.29}$$

Modification de la phase de Mott

Le terme de potentiel chimique (II.25) a tendance à favoriser le développement d´une valeur moyenne non nulle pour la charge locale $\partial_x\Phi_c$, comme il a été constaté dans la phase métallique. Ce terme entre donc en compétition, dans la phase de Mott, avec le terme d´Umklapp essentiel qui tend à geler le champ Φ_c dans un minimum du potentiel (II.9).

Le résultat de cette compétition est bien connu : pour une valeur finie μ_c du potentiel chimique, égal à la masse Δ du soliton de sine Gordon, une transition de phase a lieu, qui rend critiques les fluctuations des degrés de liberté de charge.

Cette transition de phase est connue sous le nom de transition commmensurable-incommensurable [63, 64, 65, 66], puisque qu´elle s´accompagne d´une modification du vecteur d´onde de Fermi.

Ceci s´interprête simplement : sous l´effet du potentiel chimique, chaque état propre du hamiltonien voit son énergie modifée d´une quantité : $\delta E = -\mu Q$, où Q est la charge électrique de l´état, mesurée en unité de la charge élémentaire de l´électron. Lorsque μ augmente, certains états solitoniques du modèle de sine Gordon finissent par voir leur énergie croiser le niveau de Fermi : la mer de Fermi change (elle incorpore de nouvelles particules), la charge totale du système et donc le vecteur de Fermi k_{F} changent, et des excitations chargées, sans gap, apparaissent au voisinage des nouveaux points de Fermi.

La forme de la masse des solitons de sine Gordon au voisinage de la transition est :

$$\Delta(\mu) = \mu_c - \mu\,, \qquad \mu < \mu_c, \tag{II.30}$$

tandis que la densité (et donc l´incommensuration, mesurée par l´écart de k_{F} à $\pi/4$) varie, au voisinage de la transition, selon [66] :

$$n - 1 \sim \sqrt{\mu^2 - \mu_c^2}\,, \qquad \mu > \mu_c. \tag{II.31}$$

Cette situation est très similaire à celle du modèle de Hubbard à une bande au voisinage de ce qu´il est convenu d´appeler le demi remplissage (un électron par site).

Le hamiltonien effectif pour la charge dans cette phase incommensurable est :

$$\mathcal{H}_c = \frac{\widetilde{u}_c}{2}\left[\frac{1}{\widetilde{K}_c}\left(\partial_x\Phi_c\right)^2 + \widetilde{K}_c\left(\partial_x\Theta_c\right)^2\right], \tag{II.32}$$

où les paramètres renormalisés $\widetilde{K}_c$ et $\widetilde{u}_c$ dépendent continuement de μ. Le calcul de ces paramètres renormalisés est difficile lorsque l´on s´éloigne de la transition, en raison de l´interaction. Cependant, au voisinage de cette dernière, on peut montrer [66, 62] que le paramètre effectif de Luttinger $\widetilde{K}_c$ se comporte comme :

$$\widetilde{K}_c = \frac{1}{4}\left(1 - \gamma\,\frac{u_c(n-1)\sinh(2\alpha)}{\Delta}\right), \tag{II.33}$$

où γ est une constante numérique, et où le paramètre α est défini par : $\alpha = -\frac{1}{2}\ln(2K_c)$. Notons qu´à la transition, $\widetilde{K}_c$ tend vers la valeur universelle $\frac{1}{2}$, si bien que la continuité avec la phase métallique est assurée.

Fonctions de corrélation

L´ordre en spin est le même qu´au quart de remplissage. Les fonctions de corrélation (II.18) et (II.20) obtenues au quart de remplissage dans la phase métallique sont encore valables, l´impulsion de Fermi étant maintenant incommensurable à π, et les paramètres de Luttinger u_c et K_c devant être remplacés par $\widetilde{K}_c$ et $\widetilde{u}_c$.

II.2.2 Fort dopage

Nous nous intéressons à présent au modèle loin du quart de remplissage (tout en se maintenant suffisamment loin du demi remplissage). Plutôt que de perturber autour le modèle au quart de remplissage par un terme de potentiel chimique, nous attaquons le problème directement dans l´ensemble canonique en nous plaçant à une densité quelconque n.

La limite continue fournit naïvement pour $U \ll t$ le hamiltonien continu donné par (II.3), (II.4) et (II.5), dont la limite à basse énergie est encore une théorie où degrés de liberté de charge et de spin sont découplés, respectivement décrits par le hamiltonien de Luttinger et le modèle de WZNW SU$(4)_1$. Cependant, la question se pose de nouveau de savoir si des opérateurs d´Umklapp (I.95) et (I.98), qui seront générés à des ordres supérieurs lors de la limite continue, doivent être pris en compte.

Une fois encore, tout repose sur la valeur non perturbative du paramètre de Luttinger $K_c(U)$, dont on attend qu´il soit une fonction décroissante de U. Les opérateurs d´Umklapp (I.95) et (I.98) sont d´autant plus susceptibles de devenir essentiels que le dénominateur q de la densité rationnelle $n = p/q$ est petit :

• Intéressons-nous tout d´abord aux termes de Umklapp qui ne touchent que le secteur de charge. Le terme de Umklapp le moins inessentiel, susceptible de provoquer une transition de Mott dans le secteur de charge est :

$$V_1^q = \cos\left(\sqrt{16\pi q^2 K_c}\,\widetilde{\Phi}_c\right), \tag{II.34}$$

de dimension d´échelle $\widetilde{\Delta} = 4q^2 K_c$ au point fixe de Luttinger. La valeur critique de K_c en deçà de laquelle (II.34) est essentiel est :

$$K_c^* = \frac{1}{2q^2}, \tag{II.35}$$

si bien que si $q > 1$, $K_c^* \leq \frac{1}{8}$ (les cas $q = 1$ sont le quart de remplissage, déjà considéré, et le demi remplissage, qui fait l´objet du chapitre suivant).

• Les autres opérateurs de Umklapp à considérer couplent spin et charge. Si q est pair, ces opérateurs sont interdits (cf. équations (I.98,I.99)). Si q est impair et p

pair, des termes de Umklapp qui couplent spin et charge sont autorisés. Le moins inessentiel d´entre eux est :

$$W_m^q = \cos\left(\sqrt{4\pi q^2 K_c}\,\widetilde{\Phi}_c\right)\sum_{a=1}^{6}\kappa^a, \tag{II.36}$$

de dimension d´échelle $\widetilde{\Delta} = 1 + q^2 K_c$ au point fixe de Luttinger. La valeur critique de K_c en deçà de laquelle ces opérateurs sont relevants est :

$$K_c^* = \frac{1}{q^2}, \tag{II.37}$$

si bien que $K_c^* \leq \frac{1}{9}$ pour $q \neq 1$.

C´est pourquoi les densités les plus “dangereuses” pour l´apparition de ces termes de Umklapp sont $n = \frac{1}{2}, \frac{3}{2}, \frac{5}{2}, \frac{7}{2}$. Les deux dernières densités se déduisent des deux premières par la transformation particule-trou. Frahm *et al.* ont montré que dans la version intégrable du modèle de Hubbard SU(4), où l´on restreint l´espace de Fock aux états ayant au plus deux électrons par site, aucune transition n´avait lieu à des densités $n \neq 1$ [60] (dans cette version le cas $n = 2$ est trivial). Comme cette version est d´autant plus proche du véritable modèle de Hubbard SU(4) que n est loin de la valeur 2, nous avons choisi de simuler le modèle de Hubbard SU(4) au remplissage $n = \frac{3}{2}$, grâce à la méthode de Monte Carlo quantique à température nulle développée par Michel Caffarel et Roland Assaraf. L´algorithme utilisé est présenté en détail dans les références [25, 67]. Le lecteur désireux de connaître les quantités précisément calculées peut se reporter à la section III.1.4. Ces simulations au remplissage $n = 1.5$ indiquent que le système demeure critique, aucune évidence d´ouverture de gap n´étant notée, aussi bien dans le secteur de spin que dans le secteur de charge. De plus, ces calculs montrent que le paramètre de Luttinger K_c sature à la valeur $K_c^\infty \approx 0.3$ dans la limite $U/t \to \infty$, si bien que d´après l´analyse des opérateurs de Umklapp de la section I.2.2, ces opérateurs demeurent inessentiels. Il y a donc consistance avec les prédictions théoriques basées sur la théorie continue. Ceci est en accord avec les résultats obtenus par Frahm et Schadschneider sur la variante intégrable mais non locale du modèle de Hubbard SU(4) [60] : ces auteurs montrent que dans ce modèle, K_c décroit régulièrement en fonction de U et sature à la valeur $K_c^\infty = \frac{1}{4}$ dans la limite $U/t \to \infty$.

Tout porte à croire qu´à des densités de la forme $n = p/q$ avec $q \geq 3$ impair et p pair, il n´y aura pas de transition : pour les densités de cette forme les plus dangereuses, $n = \frac{2m}{3}$, avec $m = 1, 2, 4, 5$, la valeur critique de K_c en deçà de laquelle

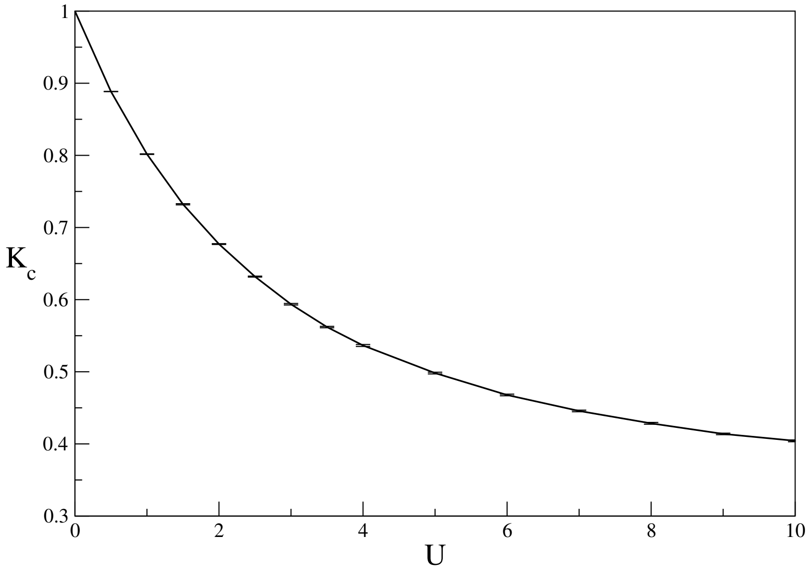


FIG. II.1: Le paramètre de Luttinger K_c pour le remplissage $n = \frac{3}{2}$ (extrapolation à la limite thermodynamique à partir des tailles $L = 16, 24, 32$).

l´approche continue prédit une transition est $K_c^* = \frac{1}{9}$. Or dans la version intégrable et non locale du modèle de Hubbard SU(4), le K_c est borné inférieurement par $\frac{1}{4}$. Cette déformation du modèle de Hubbard SU(4) étant d´autant plus proche du véritable modèle de Hubbard que la densité est faible, une hypothèse raisonnable de monotonie de la valeur de saturation $K_c^\infty(n)$ lorsque l´on varie la densité n, indique que $K_c^\infty(\frac{2m}{3}) > K_c^\infty(1.5) \approx 0.3$.

Compte tenu de ces arguments, nous ferons la conjecture que la théorie effective est la même dans toute la zone du diagramme des phases $n \neq 1$, pourvu que l´on reste suffisamment loin du demi remplissage : spin et charge sont découplés, et la théorie effective est le produit d´un liquide de Luttinger pour le secteur de charge par le modèle WZNW $\mathrm{SU}(4)_1$ pour le spin. Pour valider cette conjecture, des simulations du modèle de Hubbard SU(4) à d´autres densités sont nécessaires. Ces simulations sont en cours. Une fois de plus, la situation au voisinage du quart de remplissage est similaire à celle du modèle de Hubbard SU(2), pour lequel le dopage autour du demi remplissage n´a pour effet que de rendre le système métallique.

Chapitre III

Etude du demi remplissage

La dégénérescence des bandes de conduction permet d´envisager des situations plus variées que ne l´autorise le cas non dégénéré. En particulier, dans le modèle de Hubbard à une bande, la statistique de Fermi rend le modèle trivial (isolant de bande) lorsque la densité moyenne est de deux électrons par site, ne laissant qu´une densité - le demi remplissage, avec un électron par site - pour laquelle des effets importants de commensurabilité se manifestent. Pour le modèle de Hubbard SU(4), en plus du quart de remplissage aux propriétés assez similaires à celles du modèle de Hubbard SU(2) au demi remplissage, il est possible de fixer la densité moyenne à deux électrons par site. Au voisinage de cette densité (demi remplissage), les propriétés diffèrent fortement de celles du modèle de Hubbard SU(2).

La chaîne de Hubbard SU(4) au demi remplissage peut être considérée comme une échelle, dont les montants sont des modèles de Hubbard SU(2) au demi remplissage, avec des interactions interchaînes particulières. Or il a été montré que même à faible couplage interchaîne, une telle échelle présente un gap de spin [68, 69, 70], un gap de charge étant de toute façon généré par un terme de Umklapp intrachaîne. En outre, ce gap de spin subsiste sous faible dopage. Nous attendons donc que le modèle de Hubbard SU(4) au demi remplissage soit un liquide de spin isolant, qui se distingue des liquides de spin qu´on observe dans la chaîne de Hubbard SU(2). Nous verrons que cette phase de liquide de spin, spontanément dimérisée, qui apparaît sans qu´aucune symétrie continue ne soit brisée (et en l´absence de frustration), est un effet entièrement du à la dégénérescence orbitale. Le mécanisme microscopique responsable de la dimérisation est le couplage des degrés de liberté de spin et de charge. Les termes de Umklapp à $8k_{\mathrm{F}}$ jouent également un rôle déterminant à forte répulsion coulombienne U.

Nous allons dériver une théorie effective pour le modèle de Hubbard SU(4) au demi remplissage. De manière remarquable, ces théories effectives seront des modèles intégrables dans de vastes régimes des paramètres.

III.1 Le demi remplissage

Limite de fort couplage

Comme au quart de remplissage, il est possible à $U \gg t$ d´obtenir une théorie effective portant sur les états fondamentaux dégénérés de l´hamiltonien de Hubbard dans la limite $t \to 0$. Lorque $t = 0$, les fondamentaux de (I.9) consistent en l´ensemble des états qui comportent exactement deux électrons par site. Si l´on note $\mathcal{F}_2$ ce sous-espace de Fock, et si l´on introduit $\mathcal{P}^2$, projecteur sur $\mathcal{F}_2$, le hamiltonien effectif agissant sur $\mathcal{F}_2$ au deuxième ordre en t/U est donné par une formule analogue à (II.1), $\mathcal{P}^2$ étant substitué à $\mathcal{P}^1$:

$$H_{\text{eff}} = -\mathcal{P}^2\, H_0\, (1 - \mathcal{P}^2)\, \frac{1}{H_U - U}\, (1 - \mathcal{P}^2)\, H_0\, \mathcal{P}^2. \tag{III.1}$$

Le hamiltonien effectif sera encore un modèle de spin :

$$H_{\text{eff}} = J \sum_{i,A} \mathcal{S}_i^A \mathcal{S}_{i+1}^A + \text{const.}, \tag{III.2}$$

où les opérateurs de spin $\mathcal{S}_i^A$, définis par (I.15), agissent maintenant sur la représentation de dimension 6 de SU(4) formée des six états antisymétriques à deux électrons $\left(c_a^\dagger c_b^\dagger \left|0\right\rangle\right)_{1\leq a<b\leq 4}$, de tableau d´Young $\begin{smallmatrix}\square\\[-2pt]\square\end{smallmatrix}$. Il s´agit en fait de l´hamiltonien du modèle de Heisenberg antiferromagnétique SO(6) opérant sur la représentation fondamentale de SO(6). La constante de couplage de ce hamiltonien est $J = 4t^2/U$. Notons que comme les opérateurs de spin n´agissent pas dans la représentation fondamentale de SU(4), il est possible d´avoir un terme biquadratique en spin. Ce terme, généré au quatrième ordre de la théorie de perturbation en t/U, est :

$$\delta H_{\text{eff}} = J_2 \sum_i \left(\sum_A \mathcal{S}_i^A \mathcal{S}_{i+1}^A \right)^2 , \qquad J_2 = \mathcal{O}(t^4/U^3). \tag{III.3}$$

Contrairement au hamiltonien d´Heisenberg antiferromagnétique (II.2) agissant sur la représentation fondamentale de SU(4), il n´est pas intégrable. De plus, Affleck a montré que les chaînes de spin SU(N) pour les représentations antisymétriques (de tableau d´Young à une seule colonne) sont génériquement gapées, à l´exception de la représentation fondamentale, qui nous avons considérée dans la section II.1.1. La raison en est que la limite continue de ces modèles de spin fournit un modèle de WZNW SU$(N)_1$, qui n´est pas suffisamment protégé par les symétries : des opérateurs relevants sont permis, qui ouvrent un gap [52]. Dans le cas du demi remplissage $n = N/2$ (pour N pair), l´opérateur responsable de l´ouverture du gap couple spin et charge. Des travaux de Marston *et al.*, utilisant le développement de grand N [71], et un calcul variationnel, dû à Affleck *et al.* [72] indiquent que le fondamental de (III.2) est dimérisé, doublement dégénéré (la symétrie de translation d´un site sur le réseau est spontanément brisée). Une image du fondamental est donnée dans la figure III.1. Conformément au théorème de Lieb-Schultz-Mattis [73], les premières excitations sont massives, le gap à ces excitations étant de l´ordre de grandeur de J.

Des simulations numériques par la méthode DMRG confirment cette dimérisation [74].

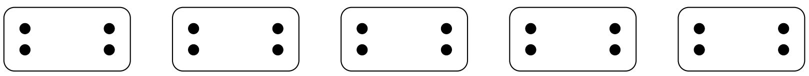


FIG. III.1: L´un des deux fondamentaux du modèle de Heisenberg SO(6). Les “dimères” comprennent quatre électrons.

Notons que cette situation ne se présente pas dans le cas du modèle de Heisenberg SU(2), pour lequel les degrés de liberté de spin sont critiques pour toute interaction coulombienne $U > 0$, et où la dimérisation n´est pas spontanée : elle apparaîtra par exemple si l´on introduit un terme explicite de dimérisation dans le hamiltonien, ou bien sous un champ magnétique alterné ; une manière d´obtenir de la dimérisation spontanée est d´introduire de la frustration, comme par exemple dans la chaîne de Majumdar Ghosh [19]. Nous allons voir que la différence avec le modèle de Hubbard à une bande se manifeste également à faible couplage $U \ll t$.

Les études précédemment citées de la chaîne de Heisenberg SO(6) ont déterminé la nature de son fondamental. Cependant, sa théorie effective à basse énergie n´a pas été établie, et en particulier, la nature des excitations de plus basse énergie, qui fixent les propriétés dynamiques à basse énergie, demeurent inconnues. L´obtention d´une théorie effective pour les degrés de liberté de spin à $U \gg t$ est moins immédiate que dans le cas du quart de remplissage, où spin et charge sont déjà découplés dans l´ultraviolet, et où le régime de Heisenberg est clairement défini. Au demi remplissage, le “régime de Heisenberg SO(6)” sera défini comme la région des paramètres où la théorie effective à basse énergie est identique à celle de l´hamiltonien (III.2). Le couplage spin-charge pose la question de l´existence d´une valeur critique de U au delà de laquelle s´étendrait le régime de Heisenberg SO(6). Nous verrons qu´un critère plus fin que $\xi_c \ll \xi_s$ (ξ_c et ξ_s sont respectivement les longueurs de corrélation dans le secteur de charge et de spin), basé sur la forme du spectre à basse énergie, peut être établi pour définir le régime de Heisenberg SO(6).

Dans la suite, nous allons établir la forme de la théorie effective, à faible couplage, puis nous l´étendrons à fort couplage. Contrairement au quart de remplissage, où nous disposions du point fixe $SU(4)_1$ même pour $U \gg t$, la théorie ne sera pas suffisamment contrainte à fort couplage pour être déterminée complètement. Dans cette situation plus délicate, nous aurons recours aux simulations numériques par Monte Carlo quantique qui fourniront des contraintes supplémentaires.

III.1.1 Théorie continue

Le hamiltonien continu décrivant le modèle de Hubbard au demi remplissage à basse énergie a été obtenu dans le chapitre I, Eqs.(I.80,I.81,I.88). Nous rappelons ici son expression :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_{sc} && \text{(III.4)}\\
\mathcal{H}_c &= \frac{v_c}{2}\left[(\partial_x \Phi_c)^2 + (\partial_x \Theta_c)^2\right] + 2g_c\, \partial_x \phi_{\mathrm{R}c} \partial_x \phi_{\mathrm{L}c}, && \text{(III.5)}\\
\mathcal{H}_s &= -\frac{i v_s}{2} \sum_{a=1}^{6} (\xi_{\mathrm{R}}^a \partial_x \xi_{\mathrm{R}}^a - \xi_{\mathrm{L}}^a \partial_x \xi_{\mathrm{L}}^a) + 2\pi g_s \sum_{1 \le a < b \le 6} \kappa^a \kappa^b, && \text{(III.6)}\\
\mathcal{H}_{sc} &= -2i\, g_{sc} \cos\left(\sqrt{4\pi}\Phi_c\right) \sum_{a=1}^{6} \kappa^a. && \text{(III.7)}
\end{aligned}$$

où les couplages sont donnés à $U \ll t$ par :

$$\begin{aligned}
g_c &= \frac{3U}{2\pi}, \quad g_s = -\frac{U}{2\pi}, \quad g_{sc} = \frac{U}{2\pi},\\
v_c &= v_{\mathrm{F}} + g_c, \quad v_s = v_{\mathrm{F}} + g_s. && \text{(III.8)}
\end{aligned}$$

Il consiste en la somme d´un hamiltonien de charge (III.5), d´un hamiltonien de spin (III.6), et d´un hamiltonien couplant spin et charge (III.7). Ce dernier terme, qui oscille fortement au quart de remplissage, devient uniforme au demi remplissage et supprime la séparation entre degrés de liberté de spin et de charge. Il joue un grand rôle, puisqu´en son absence, la théorie est critique (comme au quart de remplissage), alors que nous attendons une phase massive en sa présence.

Notons qu´afin de pouvoir contrôler les différents couplages dans un processus de renormalisation, nous choisirons pour la charge de perturber autour du point fixe du boson libre Φ_c (défini par (III.5) avec $g_c = 0$), de sorte que tous les couplages sont marginaux. En effet, si l´on perturbe autour du point fixe de Luttinger (I.83), l´opérateur (III.7) qui couple spin et charge est essentiel, de dimension d´échelle $1 + K_c < 2$.

Groupe de renormalisation à une boucle

La fonction β du groupe de renormalisation à une boucle pour les constantes de couplage g_c, g_s, g_{sc} est [71] :

$$\begin{aligned}
\dot{g}_c &= 6g_{sc}^2, \\
\dot{g}_s &= 2g_{sc}^2 + 4g_s^2, \\
\dot{g}_{sc} &= g_{sc}\left(g_c + 5g_s\right),
\end{aligned} \tag{III.9}$$

où les vitesses ont été absorbées dans les constantes de couplage par la redéfinition $g_\alpha \to g_\alpha/v$. L´intégration numérique de ces équations de flot avec les conditions initiales (III.8) révèle que tous les couplages divergent à une échelle finie ξ. Cette divergence permet d´affirmer que certains degrés de liberté deviennent massifs, l´ordre de grandeur de la masse étant $\xi^{-1} \sim t\, e^{-t/U}$; en revanche, elle ne renseigne absolument pas sur la nature de la théorie effective à basse énergie.

Le flot des constantes de couplage défini par cette fonction β à une boucle présente une propriété intéressante : toutes les constantes de couplage divergent en même temps, leurs rapports tendant vers 1. Le rayon $g_c = g_c = g_{sc}$ est attractif. Sur ce rayon, le hamiltonien est celui du modèle Gross Neveu SO(8) (voir ci après), la symétrie SU(4)×U(1) étant élargie à basse énergie à SO(8). L´intérêt d´un tel phénomène est clair : le modèle de Gross Neveu SO(8) étant intégrable, une description précise des excitations de basse énergie peut en être déduite [75, 76].

Ce phénomène "d´élargissement de symétrie" [1] à SO(8) dans les échelles a été remarqué pour la première fois par Lin *et al.* pour les échelles de Hubbard dans la limite de faible couplage [77] (interactions faibles devant le terme cinétique). Les auteurs de la référence [77] en déduisent qu´à basse énergie, la symétrie de la théorie effective est élargie à SO(8), et identifient la théorie effective au modèle de Gross Neveu SO(8). Le raisonnement, basé sur la fonction β à une boucle, est cependant purement perturbatif, et la question de savoir si cet élargissement de symétrie indiqué

[1] On parle aussi de *restauration* de symétrie.

par le flot de renormalisation à une boucle implique que le modèle est bien décrit par la théorie effective symétrique n´a pas de réponse univoque ; pour certains modèles intégrables, on peut montrer que l´élargissement de symétrie a effectivement lieu [78, 79].

Ici, le modèle à symétrie brisée n´est pas intégrable et l´élargissement de symétrie n´a un sens que dans la limite d´interaction nulle $U/t \to 0$, les rapports des constantes de couplage pouvant être arbitrairement proches de 1 alors que le flot du groupe de renormalisation n´est pas encore sorti du régime perturbatif $g_a \ll 1$.

Cependant, ce calcul à une boucle ne permet absolument de conclure dès lors que U/t n´est plus infinitésimal. Tout d´abord, rien n´interdit que des corrections d´ordre supérieur viennent détruire l´élargissement de symétrie [2]. Ensuite, la relation (I.85) entre K_c et g_c implique $K_c \to 0$ lorque g_c diverge, si bien que les opérateurs d´Umklapp (I.95) dans le secteur de charge ne sont pas négligeables : en perturbant plutôt autour du point fixe de Luttinger (I.83), on s´aperçoit que la théorie est dominée par le terme d´Umklapp (I.95), si bien que la théorie de perturbation autour du point fixe du boson libre Φ_c pour la charge semble inconsistant. Enfin, à supposer que l´élargissement de symétrie ait effectivement lieu, le calcul à une boucle ne donne aucune indication sur l´extension de la phase d´élargissement de symétrie.

Le comportement de la théorie dès que U/t n´est plus infinitésimal est donc un problème essentiellement non perturbatif. La forme de la théorie effective sera en fait le résultat d´une compétition entre le couplage spin charge (III.7) qui est responsable de l´ouverture d´un gap pour *tous* les degrés de liberté et permet l´élargissement de symétrie, et l´opérateur de Umklapp le plus essentiel, qui brise la symétrie SO(8) en SU(4)×U(1) et qui est un excellent candidat pour rendre compte de la forte anisotropie spin/charge que l´on attend à $U \gg t$.

La symétrie SO(8)

Afin d´identifier correctement la théorie effective, une méthode non perturbative serait la bienvenue. Or, il a été montré par Gerganov *et al.* [80, 81], qu´il est possible de calculer la fonction β resommée à tous les ordres de perturbation, au premier ordre en $1/k$ (k étant le niveau) pour certaines théories conformes perturbées par des interactions marginales courant-courant. De manière explicite, étant donnée une algèbre de courants $\mathcal{J}^a_{\mathrm{P}}$ et le modèle de WZNW associé, de hamiltonien

$$\mathcal{H}_0 = \gamma\,[: \mathcal{J}^a_{\mathrm{R}} \mathcal{J}^a_{\mathrm{R}} : + : \mathcal{J}^a_{\mathrm{L}} \mathcal{J}^a_{\mathrm{L}} :]\,, \tag{III.10}$$

[2] Dans la limite d´interaction nulle $U/t \to 0$, le rôle de ces corrections est négligeable.

où γ est une normalisation dépendant du groupe et du niveau, Gerganov *et al.* considèrent une perturbation courant-courant marginale

$$\mathcal{H}_{\text{int}} = g_\alpha \mathcal{O}_\alpha \,, \qquad \mathcal{O}_\alpha = d_\alpha^{ab} \mathcal{J}_{\text{R}}^a \mathcal{J}_{\text{L}}^b, \tag{III.11}$$

définie par un certain nombre de matrices d_α, qui brise l´invariance conforme de (III.10).

Gerganov *et al.* utilisent ensuite une prescription de renormalisation particulière, qui revient à négliger toutes les parties finies des contre termes dans le développement en boucle [80]. Dans cette prescription, et en ne retenant que les graphes dominants dans la limite $k \to \infty$, il est possible de dégager trois conditions nécessaires et suffisantes pour la renormalisabilité de la théorie, puis, si la théorie est renormalisable, de resommer les contributions de ces boucles à tous les ordres, la fonction obtenue β s´exprimant de manière compacte en fonction de tenseurs définis par les coefficients intervenant dans un nombre fini d´OPE (voir annexe B).

Il semble au premier abord que le hamiltonien continu (III.4) n´entre pas dans la classe des modèles considérés dans la référence [80], l´interaction spin-charge (III.7) n´étant pas exprimable en terme des courants de $\text{SU}(4)_1$ et des courants U(1) de charge. Cependant, la partie libre de cet hamiltonien, donnée par (I.35), possède une symétrie plus grande encore que SU(4)×U(1), à savoir SO(8). Plus précisément, la symétrie de l´hamiltonien libre est $\text{SO}(8)|_{\text{R}} \times \text{SO}(8)|_{\text{L}}$, dont les courants sont donnés par :

$$\begin{aligned} &\psi_{\text{P}a}^\dagger \psi_{\text{P}b} \,, && 1 \le a, b \le 4 \\ \psi_{\text{P}a}\psi_{\text{P}b} \,, \quad &\psi_{\text{P}a}^\dagger \psi_{\text{P}b}^\dagger \,, && 1 \le a < b \le 4 \end{aligned} \tag{III.12}$$

et l´hamiltonien libre est en fait l´hamiltonien du modèle de WZNW $\text{SO}(8)_1$. De manière à rendre plus transparente cette symétrie, introduisons deux champs de Majorana $\xi_{\text{P}}^7, \xi_{\text{P}}^8$ pour réécrire le champ de Dirac $\Psi_{\text{P}c}$ (I.68) comme :

$$\Psi_{\text{P}c} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left(\xi_{\text{P}}^7 + i \xi_{\text{P}}^8 \right). \tag{III.13}$$

L´algèbre $\mathfrak{so}(8)$ comporte 28 générateurs (voir annexe A.1.2) ; les 28 courants de $\text{SO}(8)|_{\text{P}}$ sont alors simplement donnés par :

$$\mathcal{J}_{\text{P}}^{ab} = i \xi_{\text{P}}^a \xi_{\text{P}}^b \,, \qquad 1 \le a < b \le 8. \tag{III.14}$$

Les générateurs de Cartan de SO(8) sont au nombre de 4, et nous choisirons pour ces générateurs les 3 Cartans de SU(4) et la charge totale U(1). Il est remarquable que le rang de SO(8) soit égal à celui de SU(4)×U(1), ce qui permet de décrire les états de SO(8) par les nombres quantiques de SU(4)×U(1).

Dans ces champs de Majorana, le hamiltonien libre (I.35) devient :

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{iv_{\mathrm{F}}}{2}\sum_{a=1}^{8}\left(\xi^a_{\mathrm{R}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{R}} - \xi^a_{\mathrm{L}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{L}}\right). \tag{III.15}$$

En présence d´interaction, le hamiltonien (III.4) s´exprime dans ces champs comme :

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}_{\mathrm{int}} + \delta\mathcal{H}_0, && \text{(III.16)}\\
\mathcal{H}_{\mathrm{int}} &= 2\pi g_c\kappa^7\kappa^8 + 2\pi g_s\sum_{1\le a<b\le 6}\kappa^a\kappa^b + 2\pi g_{sc}\left(\kappa^7+\kappa^8\right)\sum_{a=1}^{6}\kappa^a, && \text{(III.17)}\\
\delta\mathcal{H}_0 &= -\frac{i\,\delta v_c}{2}\sum_{a=7}^{8}\left(\xi^a_{\mathrm{R}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{R}} - \xi^a_{\mathrm{L}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{L}}\right) - \frac{i\,\delta v_s}{2}\sum_{a=1}^{6}\left(\xi^a_{\mathrm{R}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{R}} - \xi^a_{\mathrm{L}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{L}}\right), && \text{(III.18)}
\end{aligned}$$

où les couplages sont données par (III.8). Les anisotropies de vitesse sont $\delta v_a = v_a - v_{\mathrm{F}} = g_a$, $a = c, s$. Lorsque $g_c = g_s = g_{sc}$, ce hamiltonien est celui du modèle de Gross Neveu SO(8). De plus, lorsque $\delta v_c = \delta v_s$, il entre dans la classe des modèles étudiés par Gerganov *et al.* [3].

Fonction β resommée

Malheureusement, l´approche de Gerganov *et al.* ne permet pas de tenir compte des anisotropies de vitesse. Nous allons donc commencer par les négliger [4], et utiliser le formalisme exposé dans [80] pour calculer la fonction β resommée à tous les ordres de perturbation pour les couplages g_c, g_s, g_{sc}. A notre connaissance, ce formalisme n´a pas été appliqué au problème de l´élargissement de symétrie dans un modèle non intégrable. Le calcul de cette fonction β est exposé dans ses grandes lignes dans l´annexe B, et mène à :

$$\begin{aligned}
\dot{g}_c &= 24\,(g_c-2)^2\left(\frac{g_{sc}}{g_{sc}^2-4}\right)^2,\\
\dot{g}_s &= 16\left(\frac{g_s}{g_s+2}\right)^2 + 8\,(g_s-2)^2\left(\frac{g_{sc}}{g_{sc}^2-4}\right)^2,\\
\dot{g}_{sc} &= \frac{4g_{sc}}{4-g_{sc}^2}\left[12-\left(g_{sc}^2+4\right)\left(\frac{1}{g_c+2}+\frac{5}{g_s+2}\right)\right],
\end{aligned} \tag{III.19}$$

[3] En effet, $\mathcal{H}_{\mathrm{int}}$ est une interaction marginale courant-courant : on a d´après (III.14) : $\kappa^a\kappa^b = \mathcal{J}^{ab}_{\mathrm{R}}\mathcal{J}^{ab}_{\mathrm{L}}$.

[4] Ces anisotropies sont de toute façon négligées dans le calcul à une boucle. Même si on s´attend à ce qu´elles jouent un rôle pour $U \sim t$, nous allons voir qu´en leur absence, le formalisme de Gerganov *et al.* permet déjà de tirer un certain nombre de conclusions concernant l´élargissement de symétrie.

où les constantes de couplages ont été redéfinies selon $g_\alpha \to g_\alpha/v$, v étant une échelle de vitesse de l´ordre de v_{F}.

Cette fonction β est obtenue comme somme d´une série entière, qui a manifestement un rayon de convergence égal à 2 pour chacune de ses variables g_α. Lui donner une signification au delà de ce rayon de convergence est malaisé. Aussi, nous nous bornerons à l´utiliser de manière très qualitative au delà de son rayon de convergence.

Remarquons tout d´abord que son développement à l´ordre $\mathcal{O}(g_\alpha^2)$ reproduit la fonction β à une boucle (III.9). Comme autre test minimal de sa validité, on peut s´intéresser à la ligne isotropique $g_c = g_s = g_{sc}$ correspondant au modèle de Gross Neveu SO(8). La fonction β (III.19) est compatible avec le résultat à deux boucles (universel), présenté dans la référence [82].

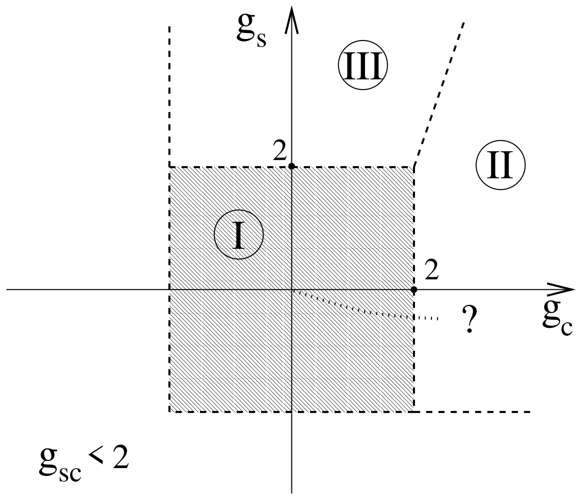


Fig. III.2: Coupe à $g_{sc} =$ const. < 2 du diagramme de flot qualitatif de la fonction β (III.19). La phase (I) est la phase d´élargissement de symétrie : le point singulier $g_\alpha^* = 2$ est atteint à une échelle finie. Les phases (II) et (III) se caractérisent respectivement par la divergence à une échelle finie du couplage g_c (g_s). Le modèle de Hubbard SU(4) se situe sur la ligne pointillée. Le formalisme de Gerganov *et al.* ne permet pas de conclure hors de la région (I).

Le flot des constantes de couplage défini par (III.19) révèle une structure riche. Nous en donnons ici une description dans la zone qui nous intéresse (voir figure III.2). Si l´on se restreint à la ligne correspondant au modèle de Hubbard SU(4), deux régimes qualitativement différents apparaissent :

Phase à symétrie élargie : Le champ de vecteur défini par la fonction β (III.19) est singulier [5] au point isotropique $g_s^* = g_c^* = g_{sc}^* = 2$. Ce point est attractif, et avec les conditions initiales (III.8), le flot du groupe de renormalisation atteint ce point à une échelle finie ξ^*, pourvu que $g_c(a_0) < 2$ (voir figure III.3). Ce comportement n´est pas affecté par la renormalisation inévitable des conditions initiales (III.8) dès que U/t n´est plus infinitésimal : le bassin d´attraction du point isotropique couvre une large zone de l´espace des paramètres $g_a(a_0)$ (région (I) sur la figure III.2). A ce point isotropique, le hamiltonien effectif voit sa symétrie SU(4)×U(1) s´élargir à SO(8).

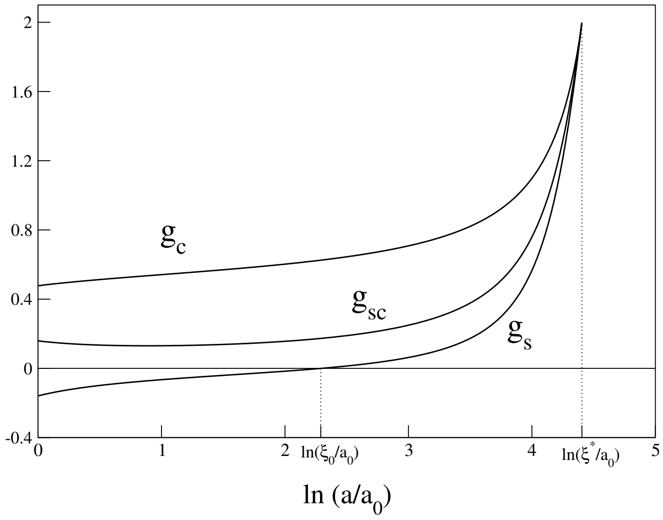


FIG. III.3: Flot typique des constantes de couplages dans la région (I). Les conditions initiales sont celles données par la limite continue du modèle de Hubbard pour $U = 2\,t$.

Le flot des constantes de couplage dans ce régime présente la particularité d´être très "lent" : le gap étant ouvert par des opérateurs marginaux, de nombreuses itérations du groupe de renormalisation sont nécessaires avant d´atteindre le régime massif. En particulier, la constante de couplage g_s dans le secteur de spin reste négative jusqu´à une échelle ξ_0 qui est de l´ordre de grandeur de ξ^*, si bien qu´à petit U, ξ_0 diverge ($\xi_0 \sim e^{t/U}$). Pour des échelles $\xi < \xi_0$, le système semblera critique, et ce fait se manifestera dans les effets de taille finie (voir les résultats numériques dans la section III.1.4).

[5] Sur la ligne isotropique $g_c = g_s = g_{sc}$ correspondant au modèle de Gross Neveu SO(8), cette singularité disparaît.

Phase de fort couplage : Dès que $g_c(a_0) > 2$ (région (II) sur la figure III.2), le flot défini par la fonction β resommée change drastiquement d´allure : g_c diverge à une échelle finie, les autres couplages demeurant finis (voir figure III.4).

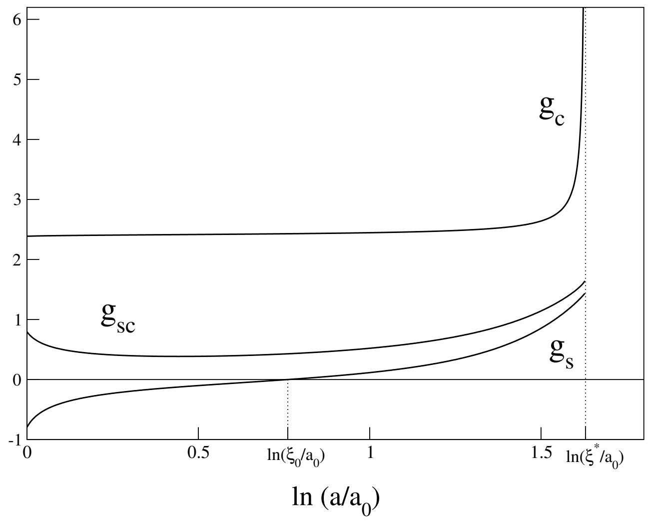


FIG. III.4: Flot typique des constantes de couplages dans la région (II). Les conditions initiales sont celles données par la limite continue du modèle de Hubbard pour $U = 10\,t$.

Deux réserves importantes doivent être émises à propos de ce comportement prédit par la fonction β : tout d´abord, le flot dans cette région est déterminé par la fonction β (III.19) *au delà* du pôle $g_c = 2$, et la question de la validité de la fonction β en dehors de son disque de convergence se pose. Ensuite, à supposer que la fonction β ait un sens pour $g_c(a_0) > 2$, la divergence de g_c n´est pas consistante avec les hypothèses permettant d´obtenir la fonction β : celle-ci prédit une phase de fort couplage pour le secteur de charge, si bien que les opérateurs de Umklapp (I.95) dans le secteur de charge ne sont plus négligeables. Or, la prescription de renormalisation utilisée pour ce calcul de fonction β néglige leurs effets : la fonction β (III.19) n´est plus valide. Ce fait est intéressant : le formalisme de Gerganov *et al.* fixe une borne supérieure au domaine d´élargissement de symétrie, même s´il néglige les effets de tous les opérateurs en dehors des interactions marginales courant-courant.

Dans cette phase de fort couplage, nous verrons qu´une autre méthode devra être utilisée afin d´obtenir la théorie effective à basse énergie, basée sur le fait que les échelles d´énergie caractéristiques pour les degrés de liberté de spin et de charge sont très différentes à suffisamment forte répulsion coulombienne.

III.1.2 Régime SO(8)

Dans cette phase, les constantes de couplage rejoignent le point isotropique $g_c^* = g_s^* = g_{sc}^* = 2$ à une échelle finie ξ^*. Contrairement au calcul à une boucle, la fonction β (III.19) permet de fixer une borne au domaine d´élargissement de symétrie. Commençons par estimer l´extension de ce domaine en terme des paramètres microscopiques U et t : la fonction β (III.19) prédit une telle phase tant que $g_c(a_0) < 2$. Lorsque $g_c(a_0) > 2$, l´anisotropie initiale est trop forte pour que l´élargissement de symétrie puisse avoir lieu, et la constante de couplage g_c évolue indépendamment des autres constantes de couplage : il y a découplage effectif des degrés de liberté de spin et de charge. La valeur U_{dec} de U à laquelle ce découplage a lieu peut être estimée, dans le cadre de notre fonction β, par l´équation très simple :

$$g_c(a_0, U_{\text{dec}}) = 2v_{\text{F}}. \tag{III.20}$$

La relation entre $g_c(a_0)$ et U n´est pas universelle, si bien que la valeur U_{dec} de l´interaction coulombienne au delà de laquelle $g_c(a_0) > 2$ n´est pas accessible. Pour en obtenir un ordre de grandeur, la relation (III.8) sera suffisante : on trouve $U_{\text{dec}} = \frac{4\pi v_{\text{F}}}{3} \approx 8.4\,t$. L´extension de la phase d´élargissement de symétrie prédite par cette estimation est considérable. Il convient cependant d´être prudent sur le sens de U_{dec}, la relation (III.8) étant certainement fortement renormalisée. Plus fondamentalement, U_{dec} ne fixe qu´une borne supérieure au domaine d´élargissement de symétrie : comme nous le verrons plus loin, il existe d´autres mécanismes responsables de la brisure de la symétrie SO(8).

Comme il a déjà été remarqué, la théorie au point isotropique possède une symétrie étendue SO(8), et le hamiltonien est celui du modèle de Gross Neveu SO(8) [26] :

$$\mathcal{H}_{\text{GN}} = -\frac{iv}{2}\sum_{a=1}^{8}(\xi_{\text{R}}^a\partial_x\xi_{\text{R}}^a - \xi_{\text{L}}^a\partial_x\xi_{\text{L}}^a) + 4\pi\, v \sum_{1\leq a<b\leq 8}\kappa^a\kappa^b. \tag{III.21}$$

Ce modèle est intégrable [57, 83], et permet donc l´identification des excitations de plus basse énergie du hamiltonien de Hubbard SU(4), qui sont toutes massives. L´échelle de masse est $m \propto (\xi^*)^{-1}$, ce qui fournit $m \propto t\, e^{-t/U}$ lorsque $U \ll t$. Il est remarquable que, du fait de l´élargissement de symétrie, les degrés de liberté de spin et de charge jouent exactement le même rôle.

Spectre du modèle de Gross Neveu SO(8)

Détaillons le contenu en particules du modèle de Gross Neveu SO(8) : il comporte 3 octets de particules de masse m, un 28-uplet d´états liés de masse $\sqrt{3}\,m$, et un singulet de masse $\sqrt{3}\,m$ [84, 83, 57, 77]. Comme nous l´avons déjà remarqué, le rang de SO(8) est égal à celui de SU(4)×U(1), si bien que nous pourrons étiqueter les états des représentations de SO(8) par les nombres quantiques $[\mathtt{n}_c, \mathtt{n}_s, \mathtt{n}_t, \mathtt{n}_{st}]$; de plus, chaque représentation de SO(8) pourra se décomposer en représentations $(\mathtt{n}_c, \lambda)$ de SU(4)×U(1), $2\mathtt{n}_c$ étant la charge électrique et λ une représentation de SU(4). Les différentes représentations auxquelles appartiennent les particules du modèle de Gross Neveu SO(8) sont présentées plus précisément dans l´annexe A.1.2.

Parmi les 3 octets, on distingue le fermion fondamental, qui se transforme dans la représentation vectorielle de SO(8), notée 8_{F} (voir figure A.3.a). Cet octet contient en particulier une particule de charge pure $2e$, ne portant pas de spin : le coopéron [77], ainsi nommée en raison de ses nombres quantiques $[1, 0, 0, 0]$ identiques à ceux d´une paire de Cooper. En plus du coopéron et de l´anti-coopéron, cet octet contient six particules électriquement neutres, se transformant dans la représentation antisymétrique de SU(4). Ces 6 états ont pour nombres quantiques $[0, \pm 1, 0, 0]$ (et permutations sur les indices $\alpha = s, t, st$).

Les deux autres octets se transforment dans les deux représentations spinorielles de SO(8). Ce sont des kinks (leurs nombres quantiques sont demi entiers : $\mathtt{n}_\alpha = \pm 1/2$, $\alpha = c, s, t, st$), et l´on distinguera l´octet des kinks pairs de l´octet des kinks impairs selon que les nombres quantiques des états comportent respectivement un nombre pair ou impair de $-1/2$. Ces deux octets seront notés repectivement 8^+_{K} et 8^-_{K}, et leurs poids sont présentés dans la figure A.3.b et A.3.c. L´octet des kinks pairs a mêmes nombres quantiques que les fermions sur le réseau $c_a, c^\dagger_a$.

Enfin, les 28 états liés se transforment dans la représentation adjointe de SO(8) (voir figure A.4). Ils tirent leur nom du fait qu´ils peuvent être vus indifféremment comme des états liés de deux fermions fondamentaux, de deux kinks pairs, ou de deux kinks impairs. Il en est de même du singulet. Notons que parmi ces 28 états liés, 15 états, de charge électrique nulle, se transforment dans la représentation adjointe de SU(4) (on peut s´en rendre compte en se reportant à la figure A.2.b).

Le fait que les trois octets aient même masse découle directement d´une symétrie de trialité [85] du diagramme de Dynkin de SO(8), qui transforme ces octets l´un dans l´autre. Cette trialité laisse invariante la représentation adjointe et le singulet. La figure III.5 résume le contenu en particules élémentaires du modèle de Gross Neveu

SO(8).

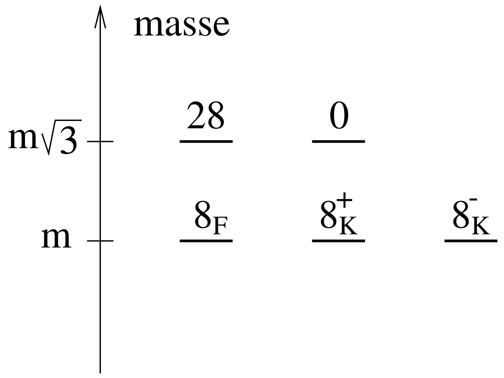


FIG. III.5: Les cinq multiplets du spectre du modèle de Gross Neveu SO(8). Les états liés de l´adjointe sont désignés par “28” et le singulet par “0”.

Caractérisation de la phase

La génération dynamique d´une masse dans le modèle de Gross Neveu s´accompagne de la brisure spontanée de la symétrie $\mathbb{Z}_2$: $\kappa^a \to -\kappa^a$ (l´opérateur $\sum_{a=1}^{8} \kappa^a$ prend une valeur moyenne non nulle). Cependant, cette symétrie correspond dans notre cas à la symétrie de jauge $\mathcal{G}_0$ (I.90), de sorte que les deux fondamentaux dégénérés de (III.21), qui se déduisent l´un de l´autre par cette symétrie $\mathbb{Z}_2$, doivent être identifiés. Nous allons voir que le fondamental est pourtant bien dégénéré.

Il est plus simple de caractériser les fondamentaux en terme des bosons Φ_α. En utilisant la relation $i\pi \sum_{a=1}^{8} \kappa^a = \sum_{\alpha=c,s,t,st} \cos\left(\sqrt{4\pi}\Phi_\alpha\right)$, les fondamentaux s´obtiennent pour $\langle\Phi_\alpha\rangle = p_\alpha\sqrt{\pi}$, $p_\alpha \in \mathbb{Z}$ (les autres choix possibles $\langle\Phi_\alpha\rangle = (p_\alpha+\frac{1}{2})\sqrt{\pi}$ s´en déduisent par l´opération de jauge $\mathcal{G}_0$). Les opérations de jauge $\mathcal{G}_{\alpha\beta}$ (I.91) réduisent ces fondamentaux à deux [6] , qu´on peut choisir comme :

$$\begin{aligned} &|\Omega_+\rangle\!: \;\; \langle\Phi_\alpha\rangle = 0 \qquad \forall\alpha \\ &|\Omega_-\rangle\!: \;\; \langle\Phi_c\rangle = 0\,, \qquad \langle\Phi_\alpha\rangle = \sqrt{\pi} \qquad \forall\alpha = s, t, st. \end{aligned} \tag{III.22}$$

[6]Ces deux fondamentaux ne sont pas distinguables en terme des fermions ξ_{P}^a. Il faut se souvenir que la correspondance entre les fermions de départ $\psi_{\mathrm{P}a}$ et les fermions de Majorana ξ_{P}^a (équations I.45,I.68I.71,) n´est pas fidèle : de la même manière que les opérations de jauge laissent invariants les fermions de départ, il existe des opérations laissant invariants les fermions de Majorana mais ayant un effet sur les fermions de départ. Ces opérations, ayant une signification physique, consistent en les redéfinitions des champs : $\phi_{\mathrm{P}\alpha} \to \phi_{\mathrm{P}\alpha} + p_{\mathrm{P}\alpha}\sqrt{\pi}$, $p_{\mathrm{P}\alpha} \in \mathbb{Z}$. La translation d´un site sur le réseau est l´une de ces opérations.

On constate alors que l´opérateur

$$\mathcal{O}_{\text{SP}} = \frac{(-1)^i}{2} \sum_a \left(c^\dagger_{i,a} c_{i+1,a} + \text{h.c.} \right) , \tag{III.23}$$

qui mesure la formation locale de singulets, prend une valeur moyenne non nulle, comme le montre sa forme bosonisée :

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_{\text{SP}} &= \frac{4}{\pi} \big(\cos\sqrt{\pi}\Phi_c \cos\sqrt{\pi}\Phi_s \cos\sqrt{\pi}\Phi_t \cos\sqrt{\pi}\Phi_{st} \\ &\qquad + \sin\sqrt{\pi}\Phi_c \sin\sqrt{\pi}\Phi_s \sin\sqrt{\pi}\Phi_t \sin\sqrt{\pi}\Phi_{st} \big) . \end{aligned} \tag{III.24}$$

La phase est donc de type spin Peierls, avec un fondamental doublement dégénéré qui brise l´invariance par translation d´un site. Cette phase est l´une des quatre phases SO(8) que l´on trouve à faible couplage dans les échelles de Hubbard [77], les trois autres étant les phases D-Mott, S-Mott, et CDW.

Les kinks de cette dimérisation (excitations qui interpolent d´un fondamental à l´autre) sont de deux types : les kinks impairs 8_{K}^- et les fermions 8_{F} du modèle de Gross Neveu SO(8). Contrairement à la dimérisation dans le modèle de Hubbard à une bande, il existe d´autres excitations, de “spin entier” [7] pour SU(4), qui sont certains états liés du 28-uplet. Nous allons voir que leur existence a pour conséquence que le facteur de structure de spin possède un pic étroit autour de $k = 0$, à l´énergie $\omega = \sqrt{3}\, m$.

Le facteur de structure de spin a la définition suivante :

$$S^{AB}(q,\omega) = \int dx\, d\tau\, e^{-iqx+i\omega\tau}\ \text{T}_\tau \left\langle \mathcal{S}^A(x,\tau)\, \mathcal{S}^B(0,0) \right\rangle . \tag{III.25}$$

où les spins $\mathcal{S}^A$ sont ceux de SU(4). En insérant dans la valeur moyenne la relation de fermeture $1 = \sum_\xi |\xi\rangle\langle\xi|$ où les $|\xi\rangle$ sont les états propres de l´hamiltonien, la fonction de corrélation spin-spin qui intervient dans (III.25) se décompose sur les facteurs de forme des opérateurs de spin :

$$\left\langle \mathcal{S}^A(x,\tau)\, \mathcal{S}^B(0,0) \right\rangle = \sum_{|\xi\rangle} \left\langle 0 \left| \mathcal{S}^A(x,\tau) \right| \xi \right\rangle \left\langle \xi \left| \mathcal{S}^B(0,0) \right| 0 \right\rangle . \tag{III.26}$$

Or le facteur de forme $\left\langle 0 \left| \mathcal{S}^A(x,\tau) \right| \xi \right\rangle$ n´est pas nul à la condition que la représentation de SU(4) à laquelle appartient l´état $|\xi\rangle$ appartienne à la classe de congruence de

[7] La généralisation d´une représentation de spin entier au cas où le rang du groupe de symétrie est strictement supérieur à un est l´appartenance à la classe de congruence de l´adjointe. Des détails sont donnés dans l´annexe A.2.

la représentation adjointe (pour une démonstration précise de cette règle de sélection, voir annexe A.2). La décomposition du 28-uplet en représentation irréductibles de SU(4)×U(1) fait justement apparaître l´adjointe de SU(4), si bien que les états du 28-uplet d´états liés apporteront une contribution.

Nous parlerons d´excitations de spin *cohérentes* dans cette situation où le facteur de structure de spin montre un pic bien défini, reminiscent de l´existence de quasi-particules de spin entier. Cette situation s´oppose à l´incohérence, pour laquelle les seules contributions à (III.25) viennent d´états $|\xi\rangle$ qui sont des états de diffusion de particules plus élémentaires, et où le facteur de structure ne montre qu´un fond diffus. Ces deux situations peuvent être distinguées dans un système réel par des expériences de diffusion de neutrons qui permettent d´accéder au facteur de structure de spin [8].

La cohérence des excitations de spin dans une phase *dimérisée* est un fait nouveau par rapport à la chaîne SU(2). Cette cohérence est directement liée à l´interaction spin-charge ; comme nous le verrons dans l´étude du régime de Heisenberg SO(6) (fort couplage), elle peut s´interpréter comme la conséquence d´une interaction *attractive* dans le secteur de spin conduisant à la formation d´états liés se transformant dans l´adjointe. Il existe bien sûr aussi un fond incohérent à partir de $\omega = 2m$ dans le facteur de structure de spin, dû par exemple aux états $|\xi\rangle$ de diffusion de deux particules de la représentation 8_{F} (le produit $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}\otimes\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}$ fait apparaître l´adjointe $\begin{smallmatrix}\square&\square\\\square&\\\square&\end{smallmatrix}$).

Le modèle de Hubbard SU(4) au demi remplissage est donc un liquide de spin dimérisé, et cohérent, ceci d´une double manière. D´une part les excitations de spin sont cohérentes, dans le sens que le spectre de basse énergie comprend une branche magnon. D´autre part, malgré l´interaction, l´électron conserve sa nature de quasi-particule : les états de l´octet des kinks pair ont les nombres quantiques de l´électron. Rappelons que dans le modèle de Hubbard SU(2), la situation est très différente, l´électron se fractionnalisant en holon et spinon dans tout le diagramme des phases.

Ces caractéristiques qualitatives de la phase SO(8) seront robustes à l´introduction d´anisotropies résiduelles, puisqu´il s´agit de propriétés liées au contenu en particule de la théorie. Ce régime “SO(8)” se prolongera jusqu´à ce que les anisotropies l´emportent et détruisent le spectre du modèle de Gross Neveu SO(8), ce qui produira au delà d´une valeur critique U_{c1} de la répulsion coulombienne. Nous verrons que dans le régime $U \gg U_{c1}$, le spectre change qualitativement.

[8]Dans la chaîne de spin SU(2) $s = \frac{1}{2}$, l´incohérence des magnons, états de diffusion de deux spinons sans masse, a été observée expérimentalement [13, 14].

Stabilité de l´élargissement de symétrie

Le flot des constantes de couplage dans la phase d´élargissement de symétrie $U < U_{\text{dec}}$ prédit que l´interaction marginale courant-courant acquiert une symétrie SO(8) à l´échelle ξ^*. Ceci ne signifie pas nécessairement que la théorie à cette échelle est SO(8)-symétrique. En effet, cet élargissement de symétrie doit être compris dans le cadre du groupe de renormalisation, dont les itérations successives dans cette phase tendent à réduire l´anisotropie : l´élargissement de symétrie est un phénomène *asymptotique*, la symétrie étant élargie exactement après un nombre infini d´itérations. La situation peut en ceci être rapprochée du cas d´un flot critique, pour lequel la théorie est asymptotiquement conforme dans la limite infrarouge [9]. Si le flot de renormalisation est interrompu, la symétrie est approximativement élargie. C´est ce qui se produit dans un système critique à taille ou température finie. Dans notre cas, c´est l´échelle de masse $m \propto \xi^*$ dynamiquement générée qui arrête le flot du groupe de renormalisation, et les anisotropies résiduelles doivent être prises en compte. Il est nécessaire de tester la stabilité de la théorie symétrique vis à vis des anisotropies résiduelles. Notre stratégie sera similaire à celle employée pour l´étude de la stabilité d´un point critique : nous inclurons tous les opérateurs permis par la symétrie du problème et étudierons l´effet de ces opérateurs.

Nous représenterons donc les anisotropies résiduelles par un ensemble d´opérateurs $\mathcal{O}_i$ brisant la symétrie SO(8) en SU(4)×U(1), de sorte que la théorie effective à l´échelle ξ^* est donnée par le hamiltonien :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_{\text{GN}} + \sum_i \lambda_i^* \mathcal{O}_i. \qquad \text{(III.27)}$$

Avec la prescription de renormalisation de Gerganov *et al.*, l´effet des opérateurs marginaux courant-courant est complètement pris en compte -à la différence du calcul à une boucle, où l´élargissement de symétrie a lieu à des termes marginaux (petits) près- si bien que les $\mathcal{O}_i$ représentent d´une part des opérateurs inessentiels au point fixe $\text{SO}(8)_1$, tel le terme de Umklapp à $8k_{\text{F}}$ dans le secteur de charge

$$V_1^1 = \cos\left(\sqrt{16\pi}\,\Phi_c\right), \qquad \text{(III.28)}$$

et d´autre part des termes d´anisotropie de vitesse (III.18).

[9] D´une autre manière, un flot vers une théorie critique constitue un élargissement de symétrie : si la théorie ultraviolette possède par exemple une invariance U(1) de générateur (conservé) $N = N_{\text{R}} + N_{\text{L}}$, les générateurs chiraux N_{L} et N_{R} sont asymptotiquement conservés dans la limite infrarouge.

Les effets de ces anisotropies résiduelles peuvent être en principe évalués par un calcul de facteur de forme dans le modèle de Gross Neveu SO(8), les anisotropies étant traitées en perturbation autour du point symétrique. Un tel calcul sort largement du cadre de cette thèse ; on peut néanmoins en anticiper le résultat. On peut faire l´hypothèse raisonnable que la série de perturbation en λ_i^* possède un rayon de convergence fini $\lambda_i^c \neq 0$. Le contraire signifierait que la moindre perturbation au modèle de Gross Neveu SO(8) détruirait complètement la structure de la théorie. Sous cette hypothèse de l´existence d´un rayon de convergence fini, le spectre du hamiltonien (III.27) à l´intérieur du disque de convergence sera une déformation adiabatique du spectre du modèle de Gross Neveu SO(8). Les anisotropies lèveront la dégénérescence des niveaux d´énergie E au sein de chaque multiplet de SO(8), selon, au premier ordre en λ_i :

$$\frac{\delta E}{E} \sim \mathcal{O}(\lambda_i^*). \tag{III.29}$$

La symétrie SO(8) n´est donc qu´approximative, mais permet de classer les excitations élémentaires du modèle. Nous présentons dans la figure III.6 le schéma de brisure des multiplets de SO(8) en multiplets de SU(4)×U(1). L´octet du fermion fondamental se scinde en un sextuplet de SO(6), de charge nulle, et le coopéron et son anti-particule forment deux singulets de spin, de charges respectives $2e$ et $-2e$. Les octets de kinks ne sont pas brisés, tandis que les états liés admettent une brisure plus compliquée sous SU(4)×U(1).

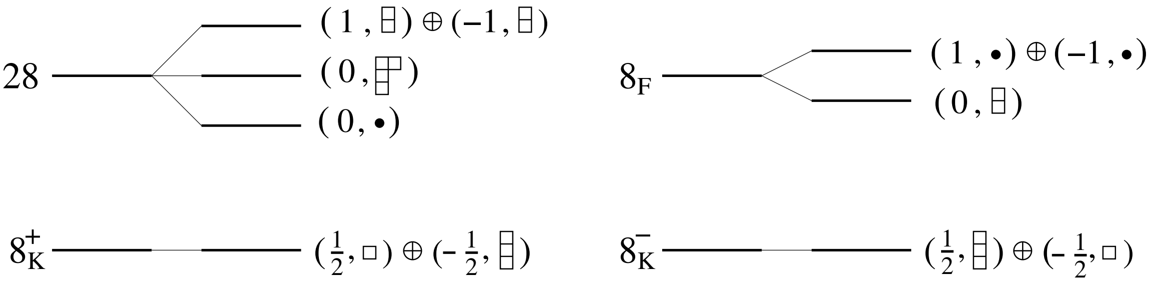


FIG. III.6: brisure des multiplets de SO(8) sous SU(4)×U(1). 8_{F} désigne l´octet de fermions, 8_{K}^+ (8_{K}^-) l´octet des kinks pairs (impairs). Les multiplets de SU(4)×U(1) sont notés $(\mathtt{n}_c, \lambda)$, où $q = 2\mathtt{n}_c$ est la charge électrique en unité de la charge de l´électron et λ une représentation de SU(4) (le symbole $\bullet$ désigne le singulet).

Dans la suite nous nous restreignons à l´étude des perturbations anisotropiques $\mathcal{O}_i$ de spin conforme nul. Pour estimer les intensités λ_i^* des anisotropies résiduelles, on peut utiliser une simple loi d´échelle. Si les intensités des anisotropies ne sont pas trop importantes, on peut faire l´hypothèse d´un découplage des équations d´évolution des constantes de couplage dans le flot du groupe de renormalisation ; plus précisément, nous supposerons que les anisotropies ne modifient pas la fonction β des couplages marginaux $(g_\alpha)_{\alpha=c,s,st}$. En revanche, nous autoriserons la fonction β pour les anisotropies λ_i à dépendre des couplages marginaux. Explicitement, si l´on note Δ_i la dimension d´échelle de l´opérateur $\mathcal{O}_i$, la fonction β pour le couplage λ_i est :

$$\beta_{\lambda_i} = (2 - \Delta_i)\, \lambda_i, \tag{III.30}$$

qui s´intègre en :

$$\lambda_i^* = \lambda_i^0 \;\exp \int_{a_0}^{\xi^*} \frac{da}{a}(2 - \Delta_i), \tag{III.31}$$

où λ_i^0 est l´anisotropie nue. Il convient à présent de faire une distinction parmi les opérateurs $\mathcal{O}_i$ inessentiels au point fixe $\mathrm{SO}(8)_1$. Les opérateurs $\mathcal{O}_i$ qui ne touchent que le secteur de spin ne voient pas leur dimension d´échelle changer au cours du flot de renormalisation, celle-ci étant protégée par l´invariance SO(6), et l´équation (III.31) indique que leur constante de couplage diminue fortement au cours du flot. En revanche, les opérateurs touchant la charge peuvent voir leur dimension d´échelle diminuer au cours du flot, et ainsi être responsable de déviations plus importantes au point isotropique. En effet, en raison de l´interaction courant-courant dans le secteur de charge, le rayon du boson de charge est changé, si bien que l´opérateur de Umklapp (III.28), qui est le plus dangereux, acquiert une dimension d´échelle $\widetilde{\Delta} = 4K_c = 4/\sqrt{1 + \frac{2g_c}{v}}$ par rapport au point fixe de Luttinger [10]. En conséquence, la valeur critique λ_i^c sera atteinte plus vite pour l´opérateur de Umklapp (III.28), qui sera éventuellement responsable de la fin du régime SO(8).

Faible répulsion coulombienne $U \ll U_{\mathbf{dec}}$ La constante de couplage nue λ_i^0 admet un développement en puissances de U. Par exemple, pour le terme de Umklapp à $8k_{\mathrm{F}}$ (III.28), généré au deuxième ordre des perturbations [11], on a $\lambda_i^0(U) = U^2 + \mathcal{O}(U^3)$. D´après (III.29) et (III.31), la scission des niveaux d´énergie est estimée à :

$$\frac{\delta E}{E} \sim \left(\frac{U}{t}\right)^2 \; e^{-2t/U} \tag{III.32}$$

La déviation à SO(8) est donc *exponentiellement* petite lorsque $U/t \to 0$. Remarquons qu´une scission de niveaux plus importante serait observée en présence d´opérateurs inessentiels brisant SO(8) avec une constante de couplage indépendante V.

[10] Ce fait est directement lié à la présence d´un facteur U(1) dans le schéma de brisure de symétrie.

[11] L´opérateur de Umklapp (III.28) apparaît dans la fusion de $\mathcal{H}_{sc}$ avec lui-même.

Forte répulsion coulombienne $U \lesssim U_{\mathbf{dec}}$ Deux situations peuvent se présenter :

• Ou bien il existe une valeur critique $U_{c1} \leq U_{\text{dec}}$ de la répulsion coulombienne pour laquelle la constante de couplage de l´opérateur de Umklapp (III.28), à l´échelle ξ^*, atteint le rayon de convergence de la série de perturbation autour du point isotropique : $\lambda^*(U_{c1}) = \lambda^c$. Dans ce cas, l´élargissement de symétrie a lieu pour $U < U_{c1}$. Pour $U > U_{c1}$, la série de perturbation ne converge plus, et l´on attend donc que le spectre de (III.27) ne soit plus une déformation du spectre du modèle de Gross Neveu SO(8) : le contenu en particule change.

• Ou bien $\lambda_i^* < \lambda_i^c$ pour tout $U < U_{\text{dec}}$, et l´élargissement de symétrie a lieu pour tout $U < U_{\text{dec}}$. Dans ce cas, nous définirons $U_{c1} = U_{\text{dec}}$.

Nous ne sommes pas en mesure de conclure en faveur de l´une ou l´autre de ces situations. On peut en revanche retenir que l´extension de la phase d´élargissement de symétrie n´est pas forcément aussi grande que celle prévue naïvement par le flot de la fonction β resommée (III.19). En outre, la présence des opérateurs de Umklapp dans le secteur de charge, dont la dimension d´échelle change au cours du flot de renormalisation pour atteindre la valeur $\widetilde{\Delta}^* = 4/\sqrt{5} \approx 1.79$ à l'échelle d´élargissement ξ^*, aura des conséquences spectrales au voisinage de U_{c1}. En effet, en vertu de (III.31), la constante de couplage de l´opérateur de Umklapp commence par diminuer au cours du flot, puis augmente. Ceci indique que la levée de dégénérescence au sein des multiplets de SO(8) sera forte au voisinage de U_{c1}.

Conclusion partielle

Le flot de la fonction β resommée met en évidence un régime d´élargissement de symétrie, pour lequel le modèle de Hubbard SU(4) est décrit à basse énergie par le modèle de Gross Neveu SO(8), perturbé par de faibles anisotropies résiduelles. Ceci permet de définir un régime SO(8), dans lequel le spectre à basse énergie est une déformation adiabatique de celui du modèle de Gross Neveu SO(8). Dans ce régime, le modèle de Hubbard est un liquide de spin isolant, avec excitations de spin *cohérentes*. Ce régime SO(8) s´étend sur une région appréciable des paramètres, la valeur critique de U au delà de laquelle l´élargissement de symétrie n´a plus lieu étant estimée à $U_{c1} \leq U_{\text{dec}} \sim 8.4\, t$.

Nous devons toutefois émettre quelques réserves quant à cette conclusion quantitative : cette valeur élevée de U_{c1} est prédite sur la base de l´approche de Gerganov *et al.* [80], qui utilisent un schéma de renormalisation assez obscur, difficile à comparer à d´autres prescriptions [12], sans contrôle de l´effet des termes suivants dans le développement en $1/k$. De plus, nous avons estimé de manière très grossière U_{c1} sur la base du premier ordre d´un développement de faible couplage. Enfin, les anisotropies de vitesse ne peuvent pas être prises en compte dans ce schéma. La raison en est qu´elles brisent l´invariance relativiste du modèle, précieuse pour la renormalisabilité. On espère cependant que ces anisotropies de vitesse, si elles engendrent une scission plus importante des multiplets de SO(8), ne viendront pas déstabiliser la théorie. Il serait très instructif de mener un calcul de facteurs de forme afin de tester cette stabilité.

Comme nous l´avons vu, le phénomène d´élargissement de symétrie soulève, malgré notre approche non perturbative, des problèmes théoriques profonds auxquels il est difficile de répondre dans le présent travail. C´est pourquoi il est nécessaire de tester de nos prédictions par des simulations numériques. Ceci sera fait dans la section III.1.4 par la méthode de Monte Carlo quantique.

III.1.3 Régime Heisenberg SO(6)

Pour $U > U_{\rm dec}$, la fonction β (III.19) n´est plus d´aucune utilité : la prescription de renormalisation utilisée n´est pas consistante avec la divergence de g_c qui interdit de négliger l´opérateur d´Umklapp (III.28). La signification de la divergence de g_c est qu´il n´est plus légitime de perturber autour du modèle (isotrope) de Gross Neveu SO(8). Nous nous placerons donc dans un premier temps loin du point où le développement perturbatif autour du modèle de Gross Neveu SO(8) perd sa validité, c´est-à-dire $U \gg U_{\rm dec}$. En anticipant un peu, les simulations numériques Q.M.C. montrent que la masse des excitations de charge diverge lorsque U croît, tandis que les excitations de spin voient leur masse diminuer après avoir atteint un maximum. Ceci suggère qu´une séparation dynamique spin-charge a lieu, et que l´on peut intégrer sur les fluctuations de charge, qui sont à très courte portée, afin d´obtenir une théorie effective sur les degrés de liberté de spin.

La formulation (III.16) et du hamiltonien n´est plus adaptée à notre propos, puisque la symétrie entre spin et charge est perdue lorsque $U > U_{\rm dec}$. Nous préfèrerons décrire la charge par le boson $\widetilde{\Phi}_c$ et son champ conjugué $\widetilde{\Theta}_c$ définis dans (I.84). Le terme de Umklapp dans le secteur de charge (III.28) doit également être pris en

[12] Par exemple, dans le cas du modèle de Thirring U(1), nous n´avons pas trouvé de difféomorphisme mettant en relation la fonction β calculée “à la Gerganov” et celle calculée par Zamolodchikov [86].

compte, si bien que le hamiltonien de charge s´exprime comme :

$$\mathcal{H}_c = \frac{u_c}{2}\left[\left(\partial_x\widetilde{\Phi}_c\right)^2 + \left(\partial_x\widetilde{\Theta}_c\right)^2\right] + y\cos\left(\sqrt{16\pi K_c}\,\widetilde{\Phi}_c\right), \tag{III.33}$$

avec le couplage spin-charge :

$$\mathcal{H}_{sc} = -2i\,g_{sc}\,\cos\left(\sqrt{4\pi K_c}\,\widetilde{\Phi}_c\right)\sum_{a=1}^{6}\kappa^a. \tag{III.34}$$

La valeur de la constante de couplage y est inconnue, inaccessible dans ce régime de fort couplage. On peut seulement affirmer, sur des bases perturbatives, qu´elle est négative. En effet, l´opérateur de Umklapp est généré au deuxième ordre des perturbations avec une constante de couplage proportionnelle à $-U^2$. De plus, la renormalisation à une boucle de y par le couplage spin-charge (III.34) tend à rendre y encore plus négative. On fera une hypothèse de continuité sur le signe de y, en supposant donc $y < 0$, même dans le régime de fort couplage qui nous intéresse. Cette hypothèse est supportée par les résultats numériques, qui montrent un comportement monotone du gap de charge en fonction de U.

Théorie à $U \gg U_{\mathbf{dec}}$

Dans ce régime de fort couplage, on peut encore distinguer deux régimes : si $\frac{1}{3} < K_c < \frac{1}{2}$, le terme de couplage spin-charge (III.34) est plus essentiel que l´opérateur d´Umklapp (III.28), tandis que pour $K_c < \frac{1}{3}$, c´est le terme d´Umklapp qui l´emporte. En outre, lors du processus de renormalisation, K_c diminue, si bien que ces deux régimes se succèdent lorsque le cut-off ultraviolet décroît. Suivre quantitativement ce processus de renormalisation reviendrait à connaître la valeur non perturbative de K_c, et à contrôler les intensités relatives des couplages y et g_{sc}, ce qui est hors de portée des méthodes dont nous disposons. L´approximation que l´on fera est la suivante : en s´intéressant à la théorie à une échelle telle que $K_c < \frac{1}{3}$, nous supposerons qu´elle est dominée par le terme de Umklapp (III.28), et nous négligerons les effets du couplage spin-charge sur le secteur de charge. Cette hypothèse est très raisonnable lorsque $U \gg U_{\text{dec}}$ puisque la longueur de corrélation ξ_c de la charge est très faible devant celle ξ_s du spin. L´intégration sur les fluctuations de charge permet de définir une action effective (locale puisque $\xi_c \ll \xi_s$) pour les degrés de liberté de spin :

$$\exp\left(-S^s_{\text{eff}}\right) = \int D[\Phi_c]\,\exp\left(-S\right), \tag{III.35}$$

où S est l´action associée au hamiltonien total (III.4). Cette intégration fournit le hamiltonien effectif suivant pour le spin :

$$\mathcal{H}^s_{\text{eff}} = -\frac{iv_s}{2}\sum_{a=1}^{6}\left(\xi^a_{\text{R}}\partial_x\xi^a_{\text{R}} - \xi^a_{\text{L}}\partial_x\xi^a_{\text{L}}\right) + i\, m_s \sum_{a=1}^{6}\kappa^a + 2\pi g_s^{\text{eff}}\sum_{1\leq a<b\leq 6}\kappa^a\kappa^b, \qquad \text{(III.36)}$$

où les fermions de Majorana du spin acquièrent un terme de masse :

$$m_s = -2\, g_{sc}\left\langle \cos\left(\sqrt{4\pi K_c}\,\widetilde{\Phi}_c\right)\right\rangle, \qquad \text{(III.37)}$$

la valeur moyenne étant prise dans le modèle de sine Gordon (III.33). Cet hamiltonien effectif décrit le secteur de spin à une échelle spatiale $\max(a_0, \xi_c)$ [13]. La constante de couplage dans le secteur de spin subit une renormalisation due au couplage spin-charge, mais celle-ci est faible :

$$g_s^{\text{eff}} = g_s + \mathcal{O}\left(\frac{g_{sc}^2}{m_c^{2-2K_c}}\right), \qquad \text{(III.38)}$$

$m_c \sim \xi_c^{-1}$ étant l´échelle d´énergie dans le secteur de charge (gap de charge). On peut se figurer simplement la petitesse de cette renormalisation de g_s : le terme de couplage spin-charge, qui est responsable de cette renormalisation, est un opérateur à très courte portée du fait de la grande masse dans le secteur de charge. Notons qu´un calcul semi-classique, où le champ de charge prendrait la valeur $\Phi_c = 0$ minimisant le potentiel (III.28), mènerait au même résultat pour le hamiltonien effectif en spin, mais ne fournirait pas la correction (III.38) à g_s.

L´hamiltonien effectif (III.36) pour le secteur de spin est l´hamiltonien du modèle de Gross Neveu SO(6) auquel on a ajouté un terme de masse. Ce modèle n´est pas intégrable, et il faut avoir recours à des approximations afin de décrire son spectre.

Une approximation possible est le développement de grand N du modèle de Gross Neveu SO($2N$) avec un terme de masse. Ce problème a été traité par Gross et Neveu [26]. Il en ressort que les valeurs relatives de la constante de couplage g_s^{eff} et de la masse m_s sont cruciales. Les auteurs de la référence [26] considèrent la fonction de

[13] Rigoureusement, on ne peut pas écrire de théorie continue pour la charge dans ce régime de fort couplage où $\xi_c \gtrsim a_0$. Cependant, les effets de la charge à basse énergie, sur les degrés de liberté de spin, peuvent être décrits en postulant pour la charge une théorie continue, que les symétries du problème contraignent à être de la forme (III.33).

Green connexe à quatre points, donnée à l´ordre dominant en $1/N$ par :

$$\begin{aligned}
\Gamma^4(k_1, k_2; k_3, k_4) &= \frac{\lambda}{N}\left[\frac{1}{1+\lambda\left(B(s, m_s^2) - B(\mu^2, m_s^2)\right)} + (s \to u)\right], \\
B(s, m_s^2) &= \left(\frac{s+4m_s^2}{s}\right)^{1/2} \ln\left(\frac{\sqrt{s+4m_s^2}+\sqrt{s}}{\sqrt{s+4m_s^2}-\sqrt{s}}\right),
\end{aligned} \tag{III.39}$$

où $\lambda = 2\pi N\, g_s^{\text{eff}}$, $k_i = (k_{i\tau}, k_{ix})$, $s = -(k_1 - k_3)^2$ et $u = -(k_1 - k_4)^2$, et μ est un cut off ultraviolet. Il est important de noter que dans notre cas, puisque nous avons intégré sur les degrés de liberté de charge, ce cut off μ est de l´ordre de grandeur du gap de charge. Dans ce calcul, la vitesse pour le secteur de spin est prise égale à un. Il est plus pratique, pour étudier Γ^4 dans le régime $-4m_s^2 < s, u < 0$, d´utiliser le prolongement analytique :

$$B(s, m_s^2) = \frac{2}{\theta}\,\text{Arctan}\,(\theta)\ , \qquad \theta = \left(\frac{|s|}{4m_s^2 - |s|}\right)^{1/2}. \tag{III.40}$$

Γ^4 a le comportement suivant (on suppose λ petit) :

• Pour $m_s > m_1 = \mu\, e^{-\pi/\lambda}$, la fonction à quatre points est régulière. Le couplage marginal n´a pour effet qu´une renormalisation de la masse m_s. Cet effet quantitatif laisse inchangé le spectre à basse énergie, qui consiste seulement en la branche des fermions fondamentaux, ayant mêmes nombres quantiques que les fermions de départ ξ_{P}^a.

• En revanche, si $m_1 > m_s > m_2 = \mu\, e^{-\pi/\lambda - 1}$, deux pôles se développent dans Γ^4 (leur masse est exactement $2m_s$ lorsque $m_s = m_1$). L´interaction marginale est suffisamment attractive, et des états liés fermion-antifermion apparaissent.

• Lorsque $m_s < m_2$, un tachyon apparaît, la masse de l´un des états liés s´annullant lorsque $m_s = m_2$. Ceci signifie que la théorie est instable. et qu´il n´est plus légitime de perturber autour du vide des fermions libres massifs ($\lambda = 0$). On entre en fait dans le régime du modèle de Gross Neveu.

Dans le modèle de Hubbard SU(4) à U fort, la valeur de g_s^{eff}, qui contrôle la physique à basse énergie, ne peut pas être fixée par notre théorie effective. Cependant, des arguments peuvent être avancés, qui suggèrent que g_s^{eff} est négative pour $U \gg U_{\text{dec}}$. En effet, si l´on ne considère que les processus spin-spin, décrits par l´opérateur marginal $\sum_{a<b} \kappa^a \kappa^b$, ceux-ci confèrent lors de la limite continue un signe négatif à g_s : ce sont ces seuls processus, qui, au quart de remplissage, déterminent g_s, et l´on a vu que dans ce cas, le secteur de spin était critique à toute valeur de U, si bien que g_s était négative à toute valeur de U. Les processus responsables de la positivité

de g_s sont donc les seuls processus spin-charge décrits par l´opérateur (III.34), qui changent le signe de g_s à faible couplage $U/t \lesssim 1$, et rendent marginale essentielle l´interaction spin-spin. Or, à mesure que U croît, la longueur de corrélation dans le secteur de charge décroît, et la renormalisation de g_s par ces processus est toujours moindre, comme le montre (III.38). On attend donc qu´à U suffisamment fort, g_s^{eff} soit négative. Cet argument heuristique peut être appuyé par un calcul de champ moyen combiné à des résultats numériques, qui montre que g_s^{eff} est négative à suffisamment fort U (voir section III.1.4).

Nous en concluons donc que le hamiltonien effectif pour le secteur de spin, à U suffisamment fort, est essentiellement équivalent à une théorie de 6 fermions de Majorana massifs, avec une faible interaction répulsive. Ce résultat nous amène à faire la conjecture que ce résultat reste vrai dans la limite $U/t \gg 1$, où la validité de la limite continue qui est à la base de notre approche peut être questionnée. Il est remarquable que le modèle de Heisenberg SO(6) (III.36), qui n´est pas intégrable, soit décrit dans la limite de basse énergie par une théorie aussi simple de fermions massifs en faible interaction.

Nous attendons que cette théorie devienne instable lorsque U est suffisamment petit, puisque pour $U < U_{c1}$ nous rentrons dans le régime SO(8). Nous définirons U_{c2} comme la valeur de la répulsion coulombienne au delà de laquelle le modèle de Hubbard SU(4) est décrit dans la limite de basse énergie par 6 fermions de Majorana massifs. On a clairement $U_{c2} \geq U_{c1}$. Nous baptiserons ce régime le régime de “Heisenberg SO(6)”. Concrètement, il est difficile de connaître la valeur de U_{c2}, mais le calcul de grand N permet de lui donner un sens : U_{c2} est la valeur de U pour laquelle l´interaction entre les 6 fermions de Majorana devient suffisamment attractive pour que des états liés apparaissent. Ceci se produit lorsque $m_s < m_1$, c´est-à-dire :

$$\frac{m_s}{v_s} < \frac{m_c}{v_c} \exp\left(-\frac{v_s}{2Ng_s^{\text{eff}}}\right), \tag{III.41}$$

où nous avons rétabli les échelles de vitesse.

Discussion du spectre

Secteur de charge nulle Comme nous l´avons vu, lorsque $U > U_{c2}$ les degrés de liberté de spin sont décrits par 6 fermions de Majorana massifs. Dans la suite, nous négligeons le terme d´interaction répulsive faible, qui a pour effet de renormaliser la masse des 6 fermions.

Le système est dimérisé. En effet, dans le fondamental le champ de charge est gelé à sa valeur semi classique $\langle \Phi_c \rangle = 0$. Dans le secteur de spin, le terme de masse donne une valeur moyenne aux opérateurs κ^a. On peut vérifier simplement que l´opérateur de spin Peierls (III.23) prend encore une valeur moyenne non nulle, si bien que l´ordre en spin est le même que dans la phase "SO(8)" : l´invariance par translation d´un site est brisée, et le fondamental est doublement dégénéré. A U suffisamment fort, lorsque les fluctuations de charge sont bien gelées, une bonne image du fondamental est donnée par la figure III.1 page 73.

Les excitations les plus basses en énergie se transforment dans la représentation antisymétrique de SU(4) de tableau d´Young $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}$. Ces excitations ne portent bien entendu que du spin. A U suffisamment fort, une image qualitative de ces excitations, qui connectent les deux fondamentaux, est donnée dans la figure III.7. On peut immédiatement en déduire, en répétant la discussion de la section III.1.2, que ces excitations contribuent au facteur de structure de spin (III.25) en un fond incohérent à partir de $\omega = 2m_s$.

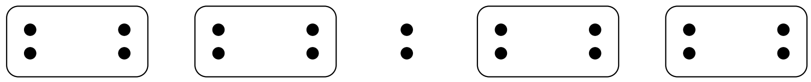


FIG. III.7: Les "kinks" de dimérisation du modèle de Heisenberg SO(6). Contrairement à la dimérisation dans SU(2), ils ne se transforment pas dans la représentation la plus basse du groupe de symétrie.

Secteur chargé Les résultats obtenus précédemment concernent le secteur de charge nulle de la théorie : on a intégré sur les fluctuations du champ de charge, dans le secteur $\mathtt{n}_c = 0$ (qui contient le fondamental du hamiltonien de sine Gordon (III.33)). Il existe cependant d´autres contributions à (III.35), qui proviennent des configurations solitoniques du champ de charge. Dans le language hamiltonien, ce sont les kinks et anti-kinks du modèle de sine Gordon. Ces (anti-)kinks portent une charge $q = 2\mathtt{n}_c = \mp 1$ et sont échangés par la transformation particule-trou. Nous nous limitons au secteur $q = -1$. Le fondamental du hamiltonien de sine Gordon dans le secteur de charge $q = -1$ est l´anti-kink au repos, que l´on notera $|\kappa_c^-\rangle$. A U fort, la masse M du kink est très grande, si bien que cet état est très haut en énergie ; mais il décrit, dans l´approximation semi-classique, la partie de charge du fondamental du système auquel on a retiré un électron. Ces états interviendront également dans le bas du spectre lorsqu´on dopera par des trous.

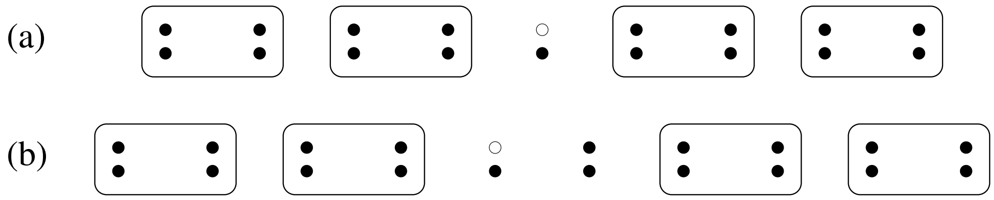


FIG. III.8: Les états reminiscents des kinks pairs et impairs du modèle de Gross Neveu SO(8) (on a représenté seulement les états de charge $\mathtt{n}_c = -\frac{1}{2}$). L´état (a) se tranforme dans la représentation fondamentale, et connecte les deux fondamentaux dégénérés de la dimérisation. L´état (b) se transforme dans la représentation anti-fondamentale, et a les nombres quantiques des fermions sur le réseau. Il ne connecte pas les deux fondamentaux.

En reprenant l´intégration (III.35) sur les configurations du champ Φ_c vérifiant $\Phi_c(L) - \Phi_c(0) = \sqrt{\pi}/2$, on obtient le hamiltonien effectif :

$$\mathcal{H}^s_{\text{eff}} = -\frac{iv_s}{2}\sum_{a=1}^{6}(\xi^a_{\text{R}}\partial_x\xi^a_{\text{R}} - \xi^a_{\text{L}}\partial_x\xi^a_{\text{L}}) + i\, m_s(x)\sum_{a=1}^{6}\kappa^a + 2\pi g_s^{\text{eff}}\sum_{1\leq a<b\leq 6}\kappa^a\kappa^b, \qquad \text{(III.42)}$$

où la masse $m_s(x) = \left\langle \cos\sqrt{4\pi}\Phi_c \right\rangle_{\mathtt{n}_c=-\frac{1}{2}}$ des fermions de Majorana est maintenant dépendante de la position. Semi-classiquement, un soliton du modèle de sine Gordon correspond à une configuration de champ interpolant entre deux vides ; on peut choisir $\Phi_c(0) = 0$, $\Phi_c(L) = \sqrt{\pi}/2$, si bien que la masse $m_s(x)$ change de signe à la position x_0 du soliton. On peut alors montrer qu´un état localisé en x_0, d´énergie nulle, (un "mode zéro") se développe dans le secteur fermionique [87, 88] [14]. Cet état localisé, dont la construction est détaillée dans l´annexe C, a des nombres quantiques fractionnaires par rapport aux fermions de Majorana, puisqu´il se transforme dans la représentation fondamentale $\square$ ou anti-fondamentale $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}$ de SU(4).

Le spectre de plus basse énergie de ce secteur chargé consiste donc, dans l´approximation semi-classique, en les états $|\kappa_c^-\rangle \otimes |\varphi\rangle$ et $|\kappa_c^-\rangle \otimes |\overline{\varphi}\rangle$ ou la partie de spin est le mode zéro φ (respectivement $\overline{\varphi}$) se transformant dans $\square$ (respectivement $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}$). Ils appartiennent aux représentations $\left(-\frac{1}{2}, \square\right)$ (respectivement $\left(-\frac{1}{2}, \begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}\right)$), de U(1)×SU(4). Une représentation graphique de ces états est donnée dans la figure III.8. On remarque que les états $|\kappa_c^-\rangle \otimes |\overline{\varphi}\rangle$ ont les nombres quantiques des fermions c_a sur le réseau et donc de la moitié des états de l´octet des kinks pairs 8^+_{K} de SO(8), tandis que les états $|\kappa_c^-\rangle \otimes |\varphi\rangle$ ont les nombres quantiques de la moitié des

[14] La situation est très similaire à celle du transpolyacéthylène, où des états de charge électrique demi entière apparaissent en raison de l´existence d´un secteur solitonique pour le champ décrivant les déformations de la molécule [89, 90].

états de l´octet des kinks impairs 8_K^- de SO(8). L´autre moitié des états appartient au secteur chargé $\mathtt{n}_c = +\frac{1}{2}$. Il est tentant de voir ces états comme reminiscents du régime SO(8), c´est-à-dire de penser qu´il y a continuité entre les octets de kinks du modèle de Gross Neveu SO(8) à U faible et ces états du secteur chargé dans le régime Heisenberg SO(6).

Notons que cette description des états chargés est qualitative, le secteur de charge étant représenté par un modèle de sine Gordon avec une masse très grande devant le cut off “naturel” de la matière condensée, a_0^{-1}, à fort U, et les fluctuations de charge devenant probablement non négligeables lorsque U se rapproche de U_{c2} ; elle permet néanmoins de se faire une idée des excitations.

D´autres états ? Les états liés du 28-uplet et du singulet du modèle de Gross Neveu SO(8) disparaissent du spectre pour $U > U_{c2}$. L´interprétation de ce fait est la suivante : ces états liés existent grâce à l´interaction attractive de Gross Neveu, et cette interaction, due au couplage spin-charge, disparaît à fort U. L´absence d´états liés se transformant dans l´adjointe de SU(4) pour $U > U_{c2}$ a des conséquences sur le facteur de structure de spin (III.25). En effet, les seules quasi-particules de charge nulle sont maintenant les fermions de Majorana se transformant dans la représentation vectorielle de SO(6), et ne sont pas de “spin entier” (voir note 7 page 85 et l´annexe A.2). Le pic bien défini dans le facteur de structure de spin disparaît donc pour $U > U_{c2}$, et il ne reste qu´un fond diffus correspondant à la contribution des états de diffusion de deux fermions de Majorana. Dans la littérature, on rencontre parfois l´expression “magnons incohérents” pour signifier que les seuls états de “spin entier” sont des états de diffusion de quasi-particules de “spin fractionnaire”. La phase de fort couplage se distingue donc de la phase “SO(8)” par l´absence d´excitations de spin cohérentes, ce qui se manifeste dans le facteur de structure de spin. Notons que cette distinction est plus fine que celle qu´on établit entre deux types d´ordres : il s´agit d´une propriété dynamique de la théorie.

Le coopéron et l´anti-coopéron, qui apparaitraient de toute façon dans le haut du spectre en raison de leur charge électrique $q = \pm 2$, disparaissent comme quasi particules, puisque le soliton du modèle de sine Gordon possède une charge $q = 1$: le coopéron et l´anti-coopéron sont maintenant des états de diffusion ; l´anti-coopéron apparaît par exemple lors de la diffusion d´un état $|\kappa_c^-\rangle \otimes |\varphi\rangle$ sur un état $|\kappa_c^-\rangle \otimes |\overline{\varphi}\rangle$.

Les arguments précédemment exposés permettent de penser à un scenario possible de reconstruction de ces états du modèle de Gross Neveu SO(8) au voisinage de U_{c2}.

L´interaction attractive dans le secteur de spin est susceptible d´engendrer ces états comme états liés des quasi-particules dans le régime Heisenberg SO(6). Par exemple, l´anti-coopéron pourrait se comprendre comme un état formé de deux solitons du modèle de sine Gordon liés par l´interaction entre les modes zéros, selon :

$$\left(-\frac{1}{2}, \square\right) \otimes \left(-\frac{1}{2}, \begin{array}{|c|}\hline \\ \hline \\ \hline\end{array}\right) \to (-1, \bullet) \oplus \ldots \tag{III.43}$$

De la même manière, les états liés des fermions sont susceptibles de reconstituer, par exemple, les états du 28-uplet se transformant dans l´adjointe de SU(4) :

$$\left(0, \begin{array}{|c|}\hline \\ \hline \\ \hline\end{array}\right) \otimes \left(0, \begin{array}{|c|}\hline \\ \hline \\ \hline\end{array}\right) \to (0, \bullet) \oplus \left(0, \begin{array}{|c|c|}\hline & \\ \hline \\ \cline{1-1}\end{array}\right) \oplus \ldots \tag{III.44}$$

Il est clair qu´une étude théorique beaucoup plus approfondie est nécessaire pour justifier un tel scenario.

Conclusion partielle

Nous avons donc distingué deux régimes dans le comportement à basse énergie du modèle de Hubbard SU(4) à demi remplissage. A petit U ($U < U_{c1}$), le modèle est décrit par le modèle de Gross Neveu SO(8). Le fondamental est dimérisé, de type spin Peierls, et toutes les excitations possèdent un gap de même ordre de grandeur m. Malgré cette dimérisation, les excitations de spin sont cohérentes. Dans ce régime SO(8), il existe à basse énergie une seule échelle d´énergie m, qui est donnée dans la limite $U \ll t$ par $m \sim t\, e^{-t/U}$. Les degrés de liberté de spin et de charge jouent un rôle identique, même si de faibles perturbations viennent lever la dégénérescence des multiplets de SO(8).

Lorsque U augmente, l´échelle d´energie de la charge augmente beaucoup plus vite que l´échelle d´énergie du spin. Le formalisme que nous avons employé permet de déterminer une échelle U_{dec} de la répulsion coulombienne, estimée à $U_{\text{dec}} \sim 8\, t$, au delà de laquelle les degrés de liberté de spin et de charge se découplent.

Au delà, le système est décrit à basse énergie par 6 fermions de Majorana massifs, en faible interaction. Cette interaction devient répulsive à grand U, ce qui permet d´affirmer que le spectre ne contient pas d´états liés pour $U > U_{c2}$. Le fondamental est encore dimérisé, mais dans ce régime SO(6), les excitations de spin sont incohérentes.

Notons que dans les deux régimes $U < U_{c1}$ et $U > U_{c2}$, le modèle de Hubbard au demi remplissage est décrit à basse énergie par des théories effectives quasi intégrables.

Notre approche ne permet pas de quantifier l´étendue du régime de "crossover" $U_{c1} < U < U_{c2}$; en particulier, la situation $U_{c1} = U_{c2}$ n´est pas exclue. Ces résultats sont résumés dans la figure III.9.

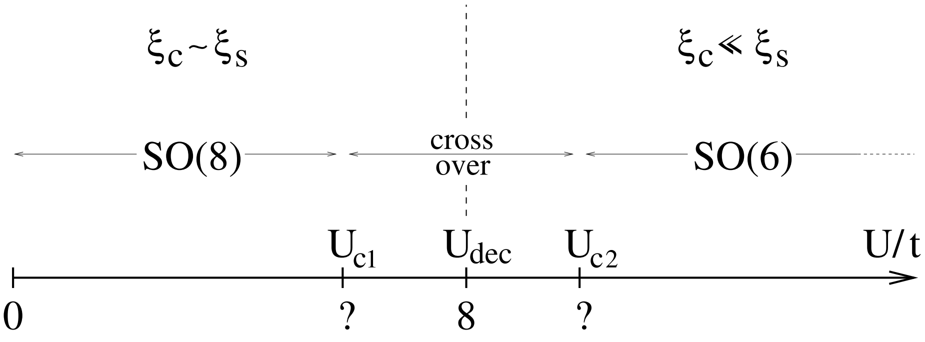


FIG. III.9: Diagramme des phases du modèle de Hubbard SU(4) au demi remplissage.

III.1.4 Résultats numériques

L´étude théorique du modèle de Hubbard SU(4) au demi remplissage a établi un certain nombre de prédictions : tout d´abord, l´existence d´une phase, à petit U, où la symétrie est élargie à SO(8) et pour laquelle la théorie effective à basse énergie est le modèle de Gross Neveu SO(8). Cette phase s´étend jusqu´à la valeur $U = U_{c1}$, point où la symétrie SO(8) (même approximative) est détruite par un opérateur d´Umklapp dominant.

Ensuite, l´existence d´une phase, à fort U, où le modèle est essentiellement équivalent à basse énergie à une théorie de fermions libres massifs. Cette phase s´étend dans la région $U > U_{c2}$ des paramètres. En deçà de U_{c2}, on attend la formation d´états liés dans le spectre. Le régime $U_{c1} < U < U_{c2}$ est un régime de “cross-over”, qui doit interpoler entre les deux régimes “intégrables” précédemment rappelés. Nous allons confronter ces prédictions à des simulations numériques du modèle.

La méthode utilisée pour les simulations numériques est le Monte Carlo quantique à température nulle, et nous nous contenterons ici d´esquisser très brièvement son principe. Le bue de cette méthode est de calculer l´énergie de l´état fondamental d´un hamiltonien donné. Une fonction d´onde d´essai Ψ_0 est choisie, la plus proche possible de la vraie fonction d´onde du fondamental (en pratique, une méthode variationnelle est employée). Un opérateur filtre construit à partir du hamiltonien est ensuite appliqué recursivement à Ψ_0 de manière à en extraire la composante sur l´état fondamental. Etant donnée la taille gigantesque des espaces de Fock mis en jeu, l´application du filtre doit être effectuée de manière stochastique. Typiquement, pour le modèle de Hubbard SU(4) qui comporte $2^4 = 16$ états par site, il est possible de simuler des systèmes dont la taille est de l´ordre de 60 sites. Pour un exposé détaillé de cette méthode, on pourra consulter les références [67, 25].

Résultats

La méthode Monte Carlo quantique à température nulle utilisée pour les simulations du modèle de Hubbard SU(4) permet le calcul de l´énergie de l´état fondamental du système dans un secteur de nombre quantique fixé (nombre fixé de particules). Explicitement, cette méthode donne accès à l´énergie $E_0(\mathtt{N}_{1\uparrow}, \mathtt{N}_{1\downarrow}, \mathtt{N}_{2\uparrow}, \mathtt{N}_{2\downarrow})$ du fondamental du modèle avec $\mathtt{N}_a$ électrons de la couleur a (rappelons que les 4 quantités $\mathtt{N}_a$ sont conservées). Nous allons nous intéresser aux gaps dans différents secteurs de nombre quantique pour un système de taille L. Le nombre total de particule est $\mathtt{N}_{\mathrm{F}} = \sum_a \mathtt{N}_a$, et la densité moyenne est $n = \mathtt{N}_{\mathrm{F}}/L$. Lorsque l´on choisit le nombre total de particules $\mathtt{N}_{\mathrm{F}}$ multiple de 4, le fondamental dans le secteur à $\mathtt{N}_{\mathrm{F}}$ particules est un singulet de spin et est obtenu pour $\mathtt{N}_a = \mathtt{N}_{\mathrm{F}}/4$. L´énergie de cet état

$$E_0(\mathtt{N}_{\mathrm{F}}) = E_0(\mathtt{N}_{\mathrm{F}}/4, \mathtt{N}_{\mathrm{F}}/4, \mathtt{N}_{\mathrm{F}}/4, \mathtt{N}_{\mathrm{F}}/4) \tag{III.45}$$

constituera notre énergie de référence pour la définition des gaps. Une excitation de nombres quantiques $\mathtt{m} = (m_a)$ est créée en ajoutant m_a électron de la couleur a à la configuration fondamentale $\mathtt{N}_a = \mathtt{N}_{\mathrm{F}}/4$. Cet état excité possède une énergie que nous noterons $E(\mathtt{N}_{\mathrm{F}} + \mathtt{m})$. Nous définirons conformément à l´usage le gap dans le secteur $\mathtt{m}$ à taille L par :

$$\Delta_{\mathtt{m}} = \frac{1}{2}\Big(E(\mathtt{N}_{\mathrm{F}} + \mathtt{m}) + E(\mathtt{N}_{\mathrm{F}} - \mathtt{m}) - 2E_0(\mathtt{N}_{\mathrm{F}})\Big). \tag{III.46}$$

Ces gaps s´identifient avec les gaps de la théorie continue dans la limite thermodynamique $L \to \infty$. En pratique, ils seront calculés pour des tailles $L = 8, 16, 32, 48, 64$ puis extrapolés.

Les trois gaps que nous avons choisis pour les simulations du modèle de Hubbard SU(4) au demi remplissage sont le gap à une particule Δ_{1000}, un gap de charge Δ_{1111} ainsi qu´un gap de spin Δ_{1-100}. Les nombres quantiques usuels de SO(8) $(m_\alpha)_{\alpha=c,s,t,st}$ pour ces excitations s´obtiennent simplement comme $m_\alpha = A_{\alpha a} m_a$, A étant la matrice de passage définie en (I.24). On vérifie ainsi que le gap à une particule $\Delta_1 \equiv \Delta_{1000}$ est le gap au multiplet 8_{K}^+ des kinks pairs de SO(8), que le gap de spin $\Delta_s \equiv \Delta_{1-100}$ est le gap à l´un des états liés du 28-uplet de SO(8), tandis que $\Delta_c \equiv \frac{1}{2}\Delta_{1111}$ est le gap au coopéron, l´état singulet en spin et de charge $2e$ du multiplet 8_{F} de SO(8). Notons qu´il n´est pas possible de calculer directement le gap du coopéron, cette excitation étant fractionnaire en terme des fermions sur le réseau.

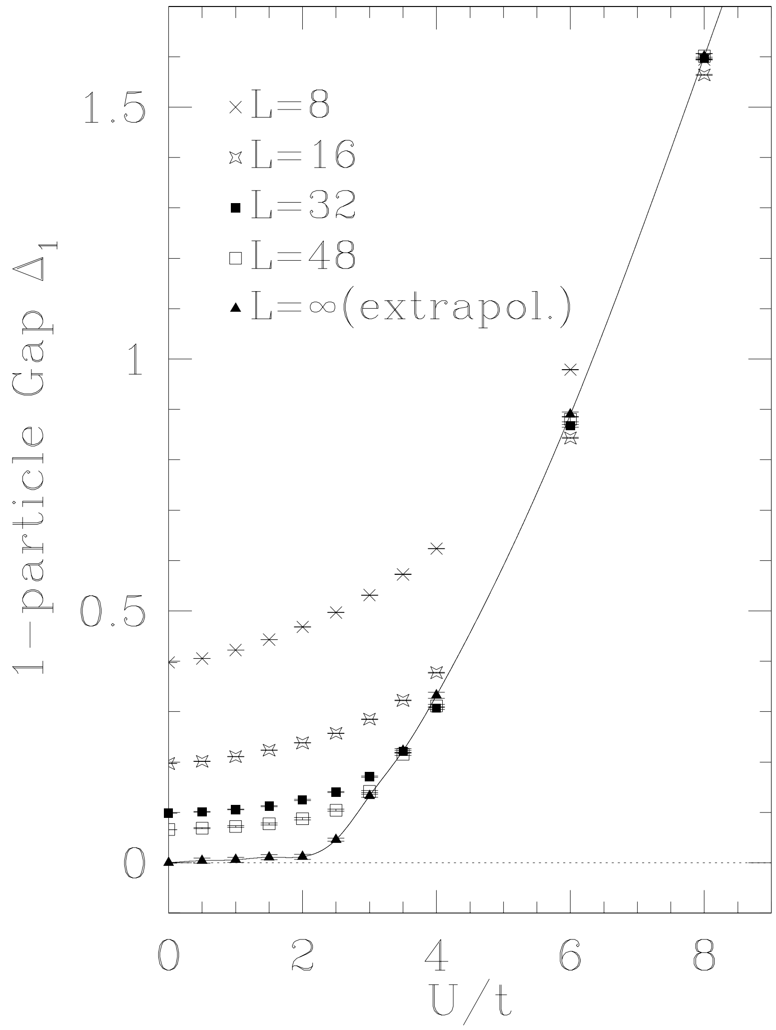


FIG. III.10: Le gap à une particule aux tailles $L = 8, 16, 32, 48$ et son extrapolation à la limite thermodynamique.

Gap à une particule La figure III.10 présente le gap à une particule calculé à différentes tailles ainsi que l´extrapolation à la limite thermodynamique. Le gap à taille finie présente un comportement typique d´un système gapé, le gap augmentant avec U à toute taille et diminuant lorsque la taille augmente. Une remarque sur la précision des simulations numériques s´impose : les énergies sont obtenues avec une précision absolue remarquable de 10^{-5}. Naturellement, la précision est moindre pour l´extrapolation : elle est de 10^{-2} en valeur absolue.

Ceci nous permet de résoudre le gap à partir de $U = t$. En deça l´erreur est comparable ou supérieure au gap. La petitesse du gap à petit U est un fait notoire de la génération dynamique du gap : puisque les interactions responsables de l´ouverture du gap sont marginales, le gap à petit U suit la loi $\Delta_1(U) \sim e^{-t/U}$. Même s´il n´est pas possible de résoudre le gap pour $U < t$, la forme du gap est compatible avec une ouverture dès $U = 0^+$.

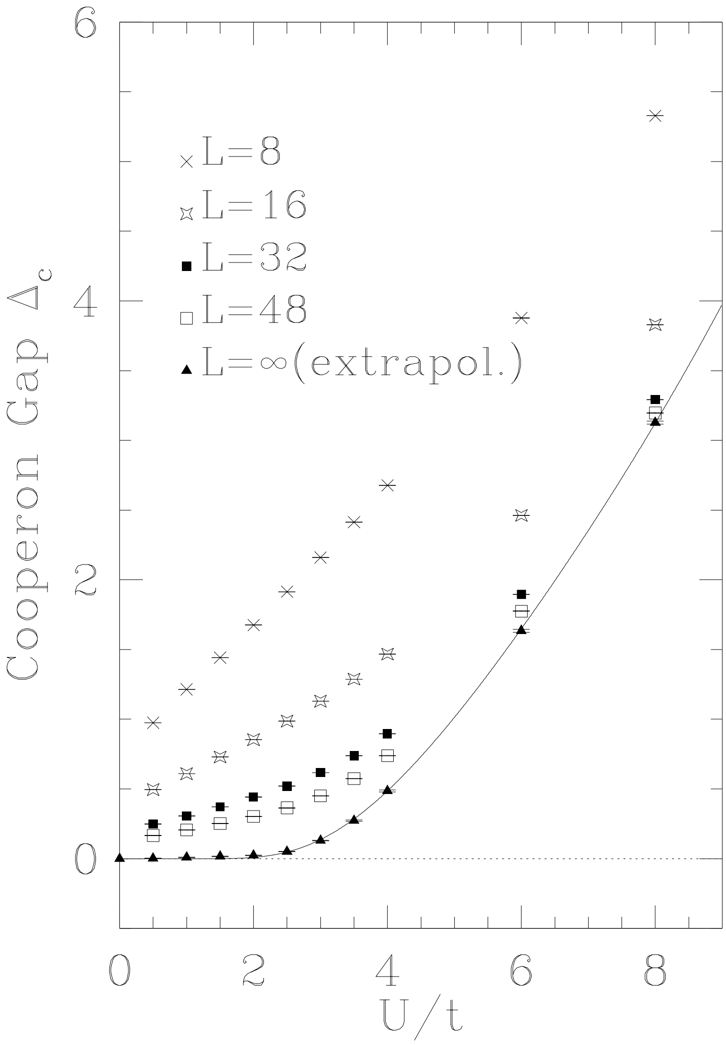


FIG. III.11: Le gap de coopéron aux tailles $L = 8, 16, 32, 48$ et son extrapolation à la limite thermodynamique.

Gap de coopéron Le gap de coopéron s´ouvre de manière similaire (figure III.11). Il est également possible de le résoudre à partir de $U = t$, et la forme est encore compatible avec l´ouverture d´un gap de coopéron dès $U = 0^+$.

Gap de spin Le comportement du gap de spin diffère qualitativement des deux autres. La figure III.12 présente le gap de spin extrapolé à partir des tailles $L = 8, 16, 32, 48$ et 64 pour certains points.

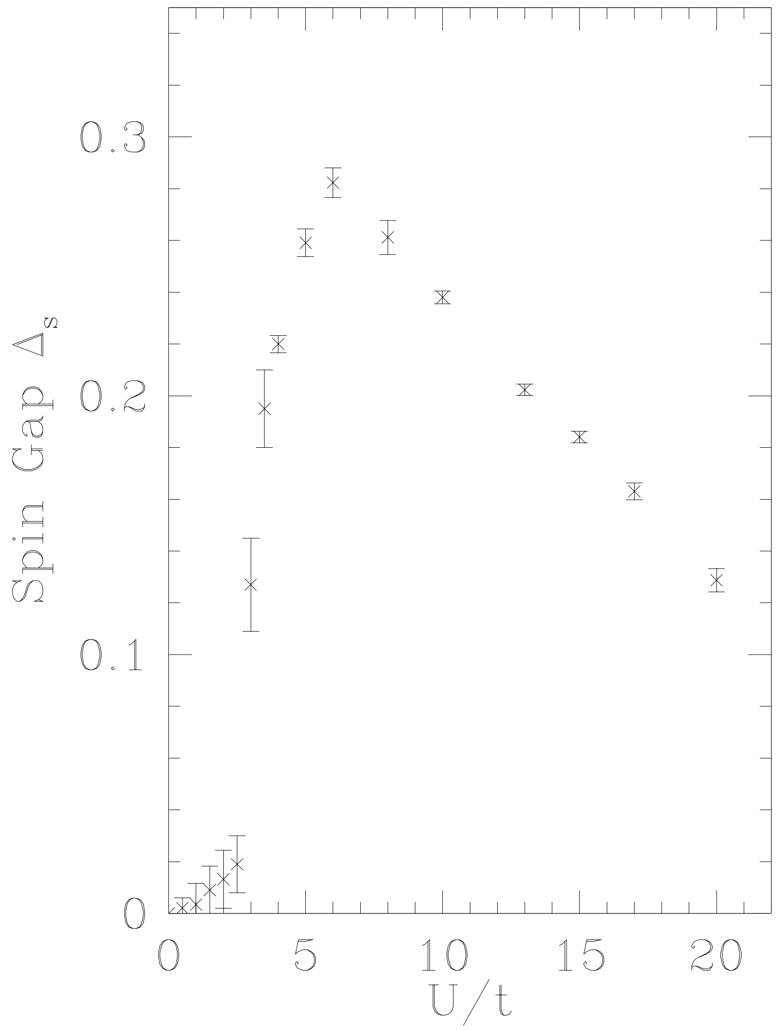


Fig. III.12: Le gap de spin extrapolé à la limite thermodynamique.

Le gap de spin montre un maximum prononcé pour $U \sim 6\,t$. L´analyse théorique de la section précédente permet de comprendre qualitativement cette forme. En effet, à petit U nous attendons la génération dynamique d´un gap dans le modèle de Gross Neveu SO(8). Si la figure III.12 ne donne aucune indication en faveur d´un élargissement de la symétrie, l´ouverture du gap à petit est en revanche parfaitement compatible avec une loi en $e^{-t/U}$. Le gap de spin est résolu à partir de $U = 1.5\,t$ seulement, en raison d´une moins bonne convergence en taille par rapport aux gaps de coopéron et à une particule.

A fort U, le modèle doit être équivalent d´après le développement en t/U à un modèle de Heisenberg antiferromagnétique pour des spin de SO(6) dans la représentation fondamentale, l´échange J étant $4t^2/U$. La décroissance du gap de spin en fonction de U pour $U > 6\,t$ est donc compatible avec l´analyse théorique. On peut chercher à quantifier cet argument en exploitant la simulation par DMRG de ce modèle de Heisenberg SO(6) antiferromagnétique par Onufriev *et al.* [74]. Ces auteurs trouvent que le gap du modèle est $\xi_s^{-1} = (0.6 \pm 0.1)J$, et la loi $\Delta_s = (2.4 \pm 0.4)/U$ est compatible avec nos résultats numériques.

Revenons à présent sur la mauvaise convergence du gap de spin à petit U comparativement aux gaps de coopéron et à une particule. La figure III.13 présente le gap de spin à taille finie. Tandis que le comportement à fort U est typique d´un système gapé et ne nécessite pas de commentaire, la forme du gap à petit U est inhabituelle : le gap de spin à taille finie fixée $\Delta_s(U, L)$ commence par décroître, présente un minimum pour $U = U_{\min}(L)$, puis croît comme pour un système gapé : tout se passe, pour $U < U_{\min}(L)$, comme si le système était critique. Ce fait s´interprète dans le cadre du groupe de renormalisation : nous avons vu dans la section précédente que la constante de couplage nue en spin est *négative*, comme dans un système critique. Le couplage spin-charge entraîne ce couplage vers des valeurs positives, ce qui résulte en l´ouverture d´un gap dans tous les secteurs. Cependant, il faut un certain nombre d´itérations du groupe de renormalisation pour que cet entraînement des degrés de liberté de spin vers une phase massive se fasse sentir : ceci définit une échelle $\xi_0(U)$ pour laquelle le couplage en spin change de signe (voir figure III.3 page 80). Nous interprétons donc la fonction ξ_0 comme l´inverse de la fonction $U_{\min}$: $\xi_0(U_{\min}(L)) = L$.

Rapport des gaps L´analyse théorique permet de faire de fortes prédictions concernant les rapports que les différents gaps entretiennent. En effet, dans le modèle de Gross Neveu SO(8), dont on attend qu´il soit la théorie effective du modèle de Hubbard SU(4) à petit U, au moins de manière approchée, les valeurs sont contraintes à

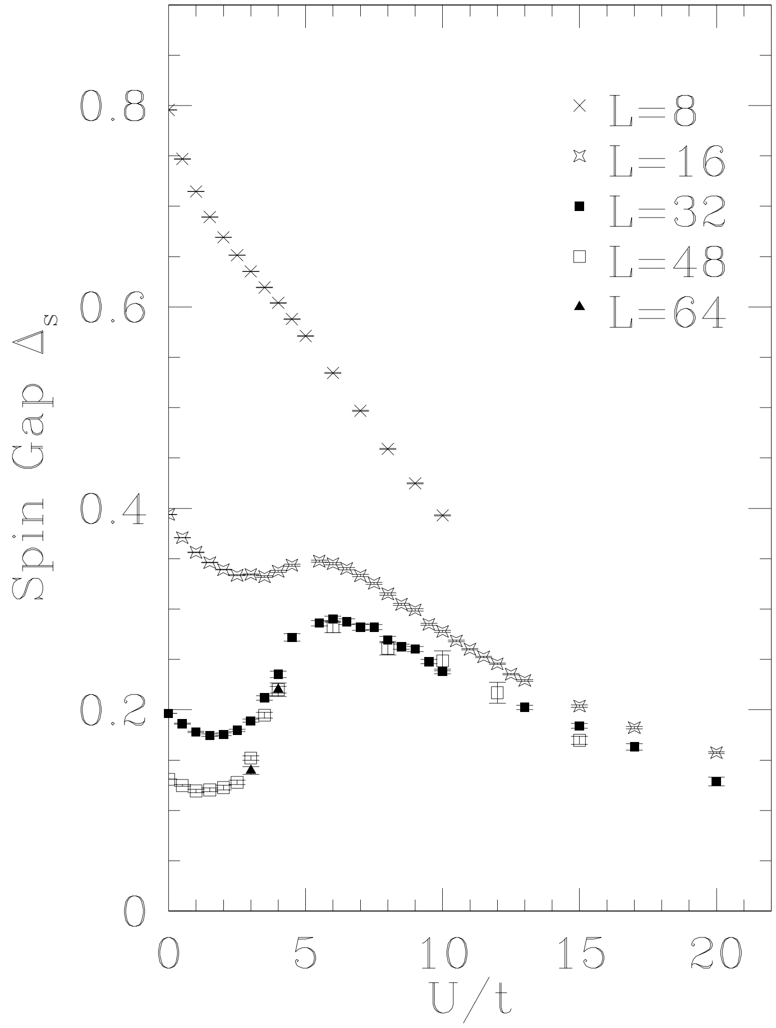


FIG. III.13: Le gap de spin aux tailles $L = 8, 16, 32, 48$ et 64 pour certains points.

vérifier :

$$\Delta_1/\Delta_c\Big|_{\mathrm{SO}(8)} = 1\,, \qquad \Delta_s/\Delta_c\Big|_{\mathrm{SO}(8)} = \sqrt{3}. \tag{III.47}$$

D´autre part, à fort U où il y a découplage des degrés de liberté de charge et de spin, nous attendons :

$$\Delta_1/\Delta_c\Big|_{\mathrm{SO}(6)} = \frac{1}{2}\,, \qquad \Delta_s/\Delta_c\Big|_{\mathrm{SO}(6)} = 0. \tag{III.48}$$

Nous avons calculé ces rapports, pour lesquels, malheureusement, l´erreur est grande à petit U, en raison de la petitesse des gaps. Nous présentons ici des résultats préliminaires, des calculs plus poussés et très coûteux en temps étant en cours.

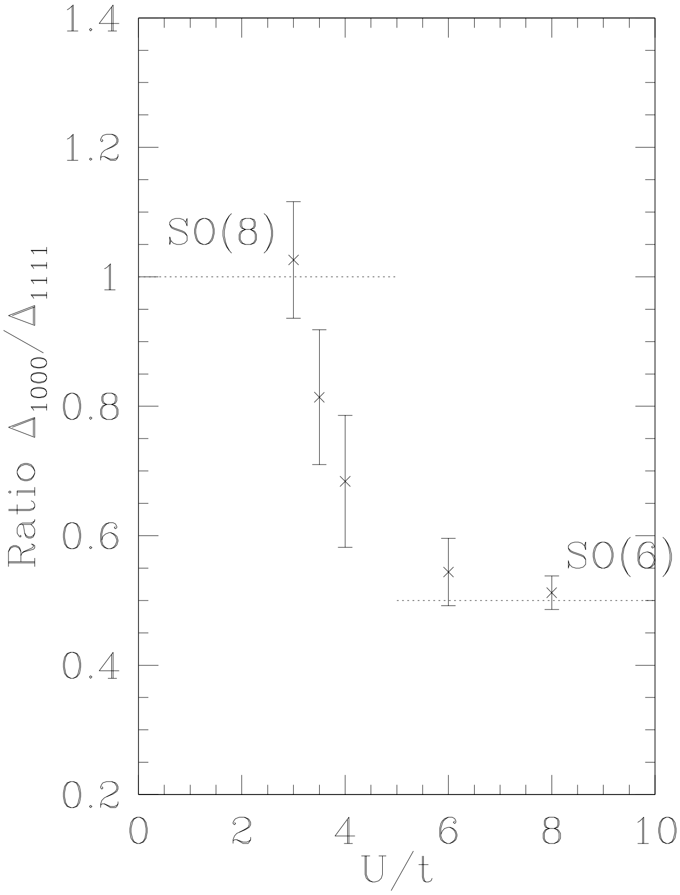


FIG. III.14: Rapport du gap à une particule au gap de coopéron.

La figure III.14 présente le rapport Δ_1/Δ_c. La valeur prédite par le modèle de Gross Neveu SO(8) est observée (dans les barres d´erreur) jusqu´à $U = 3\,t$, tandis que la valeur prédite pour le régime de Heisenberg SO(6) est atteinte à partir de $U = 6\,t$. Si nous interprétons une valeur de $\frac{\Delta_1}{\Delta_c}$ supérieure à $\frac{1}{2}$ comme la formation d´un état lié, continuation adiabatique du coopéron du modèle de Gross Neveu SO(8), la figure III.14 permet en outre d´affirmer que cet état lié subsiste au moins jusqu´à $U = 4\,t$, une interpolation à l´oeil suggèrant plutôt $5\,t$. Ceci semble indiquer que le spectre du modèle de Gross Neveu SO(8) existe encore au moins partiellement, et suggère naturellement, dans les notations de l´analyse théorique, que $U_{c1} \gtrsim 4.5\,t$. Notons que la valeur des différents gaps de la théorie, pour cette répulsion coulombienne, diffère fortement des valeurs SO(8). De plus, la théorie est déjà loin de la limite d´échelle $\Delta \ll 1$: pour $U = 4\,t$, $\Delta_1 = 0.64 \pm 0.02$, $\Delta_c = 0.85 \pm 0.01$ et $\Delta_s = 0.38 \pm 0.02$.

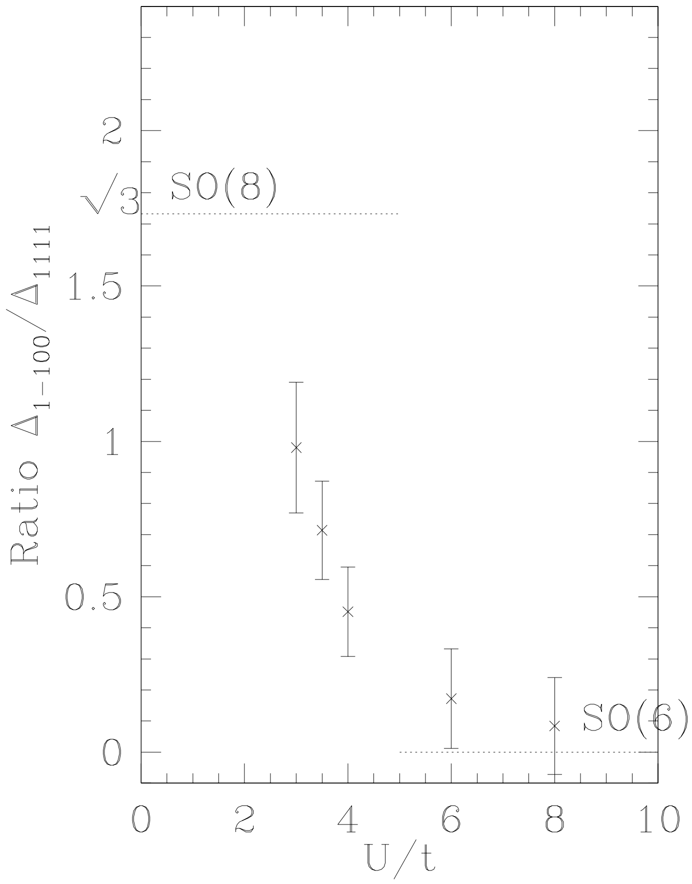


FIG. III.15: Rapport du gap de spin au gap de coopéron.

La figure III.15 présente le rapport Δ_s/Δ_c. Ce rapport est moins concluant que le précédent en raison de la mauvaise convergence du gap de spin à petit U. Cependant une tendance à se rapprocher de la valeur prédite par l´élargissement de symétrie est très nette.

L´analyse numérique est donc consistante avec l´existence d´un régime SO(8) étendu bien au delà du régime perturbatif d´une part, et d´autre part nettement en dehors de la limite d´échelle. En outre, l´estimation de $U_{\rm dec} \sim 8\,t$ de la partie théorique est probablement exagérée. Il faudrait pour compléter cette analyse une estimation numérique de U_{c2}, qui marque la disparition des états liés se transformant dans l´adjointe de SU(4) du spectre du modèle. Un calcul numérique instructif serait celui de l´énergie de liaison de deux états de pur spin, se transformant dans l´octet des fermions de SO(8), à savoir $\Delta_{1-11-1} - \Delta_{1-100}$. Une alternative est fournie dans la sous section suivante, qui contraint la valeur de U_{c2} par un calcul de champ moyen.

Champ moyen

Nous nous placerons ici dans un régime de taille et de couplage U tel que $\frac{1}{3} < K_c < \frac{1}{2}$, et nous négligerons donc les effets de l´opérateur de Umklapp (III.28). Afin de prendre en compte les effets de l´interaction marginale dans le secteur de spin, nous effectuerons une approximation de grand N, et étendrons donc dans la suite la famille des 3 champs de Dirac $(\Psi_\alpha)_{\alpha=s,t,st}$ à N champs de Dirac $(\Psi_\alpha)_{\alpha=1\ldots N}$, le secteur de "spin" possédant maintenant la symétrie SO($2N$).

L´action totale est approximée dans le champ moyen, qui découple les secteurs U(1) (bosonique) et SO($2N$) (fermionique), par :

$$S \sim S_{\rm B} + S_{\rm F}, \tag{III.49}$$

les densités lagrangiennes respectives étant :

$$\begin{aligned} \mathcal{L}_{\rm B} &= \frac{1}{2}\left[\left(\partial_x\widetilde{\Phi}_c\right)^2 + \left(\partial_\tau\widetilde{\Phi}_c\right)^2\right] - 2\mu\cos\sqrt{8\pi}\beta\widetilde{\Phi}_c & \text{(III.50)} \\ \mathcal{L}_{\rm F} &= \overline{\Psi}_\alpha\left(\partial\!\!\!/ + m_0\right)\Psi_\alpha - g\left(\overline{\Psi}_\alpha\Psi_\alpha\right)^2 & \text{(III.51)} \end{aligned}$$

Les composantes chirales des fermions de Dirac ont été rangées dans un spineur $\Psi_\alpha = (\Psi_{{\rm R}\alpha}, \Psi_{{\rm L}\alpha})$, le champ $\overline{\Psi}_\alpha$ est défini comme à l´accoutumée par $\overline{\Psi}_\alpha = \Psi^\dagger_\alpha\gamma^0$, et on a utilisé $\partial\!\!\!/ = \gamma^0\partial_\tau + \gamma^1\partial_x$, où les matrices (euclidiennes) de Dirac sont $\gamma^0 = -\sigma^2, \gamma^1 = -\sigma^1$. On a également pris soin de redéfinir la direction temporelle comme $\tau \to v_s\tau$ ($\tau \to u_c\tau$) dans le secteur fermionique (bosonique), si bien que les paramètres sont :

$$m_0 = -\frac{2g_{sc}}{v_s}\left\langle\cos\sqrt{8\pi}\beta\widetilde{\Phi}_c\right\rangle_{\rm B}, \quad g = \frac{\pi g_s}{v_s}, \quad \mu = \frac{g_{sc}}{u_c}\left\langle\overline{\Psi}_\alpha\Psi_\alpha\right\rangle_{\rm F}, \quad \beta^2 = \frac{K_c}{2} \tag{III.52}$$

La partie bosonique est le modèle de sine Gordon massif, puisque l´interaction $\cos\sqrt{8\pi}\beta\widetilde{\Phi}_c$ est essentielle. Le paramètre

$$\xi = \frac{\beta^2}{1-\beta^2} \tag{III.53}$$

permet de simplifier la discussion du spectre de (III.50), qui contient une paire soliton-antisoliton $S - \overline{S}$, de masse M, et un certain nombre de breathers B_n, $n = 1, ..., p < 1/\xi$, états liés $S - \overline{S}$. Le modèle de sine Gordon (pour $\beta < 1$) est équivalent au modèle (fermionique) de Thirring massif [91]. Le fermion fondamental de ce modèle est ici le coopéron, de charge $2e$. L´intégrabilité du modèle permet de relier la masse du soliton au paramètre μ [86] :

$$\begin{aligned} M &= C_\beta \, \mu^{\frac{\xi+1}{2}}, \\ C_\beta &= 2\pi^{\frac{\xi}{2}} \, \frac{\Gamma(\frac{\xi}{2})}{\Gamma(\frac{\xi+1}{2})} \left[\frac{\Gamma(1-\beta^2)}{\Gamma(\beta^2)}\right]^{\frac{\xi+1}{2}}, \end{aligned} \tag{III.54}$$

ainsi que la valeur de $\left\langle \cos\sqrt{8\pi}\beta\widetilde{\Phi}_c \right\rangle_{\mathrm{B}} = \frac{1}{2}\frac{\partial F}{\partial \mu}$, l´énergie libre F étant connue exactement [92] :

$$\begin{aligned} \left\langle \cos\sqrt{8\pi}\beta\widetilde{\Phi}_c \right\rangle &= A_\beta \, \mu^\xi \\ A_\beta &= \frac{(1+\xi)\,\pi^{2+\xi}}{\sin(\pi\xi)\,\left(\Gamma(\frac{\xi+1}{2})\Gamma(1-\frac{\xi}{2})\right)^2} \left[\frac{\Gamma(1-\beta^2)}{\Gamma(\beta^2)}\right]^{\xi+1}. \end{aligned} \tag{III.55}$$

La partie fermionique est un modèle de Gross Neveu SO($2N$) massif, non intégrable, qui est traité par la limite de grand N. On attend une renormalisation de la masse m_0. En introduisant un champ $\sigma(x)$ couplé à $\overline{\Psi}_\alpha\Psi_\alpha$, on découple le terme quartique selon :

$$\begin{aligned} Z &= \int D[\Psi_\alpha, \overline{\Psi}_\alpha] \, e^{-S_F} = \int D[\sigma] D[\Psi, \overline{\Psi}] \, e^{-N\widetilde{S}} = \int D[\sigma] \, e^{-N\overline{S}} \\ \widetilde{\mathcal{L}} &= -\frac{1}{2}\sigma^2 + \overline{\Psi}(\partial\!\!\!/ + m_0 + G\sigma)\Psi \end{aligned} \tag{III.56}$$

où $G = \sqrt{2gN}$. L´équation au col,

$$0 = \frac{\delta \overline{S}}{\delta \sigma} = -\sigma + \frac{\delta}{\delta\sigma}\mathrm{tr}\ln(\partial\!\!\!/ + m_0 + G\sigma), \tag{III.57}$$

permet de déterminer la valeur classique de σ :

$$\sigma_c = 2G(m_0 + G\sigma_c) \int \frac{dk\, d\omega}{(2\pi)^2} \, \frac{1}{\omega^2 + k^2 + m_0^2}. \tag{III.58}$$

A cet ordre, la masse se renormalise selon $m_R = m_0 + G\sigma_c$ soit :

$$m_R - m_0 = \frac{2gN\Lambda}{\pi} \, W\Big(\frac{m_R}{\Lambda}\Big), \tag{III.59}$$

où Λ est un cut off ultraviolet et la fonction W dépend du schéma de régularisation choisi. Si on choisit un cut off dur ($-\infty < \omega < \infty, |k| < \Lambda$), on obtient $W(x) = x\,\mathrm{Asinh}(1/|x|)$.

Les équations du champ moyen se ferment grâce à :

$$\left\langle \overline{\Psi}_\alpha \Psi_\alpha \right\rangle = N \left\langle \overline{\Psi}\Psi \right\rangle = -\frac{N\Lambda}{\pi} \, W\Big(\frac{m_R}{\Lambda}\Big). \tag{III.60}$$

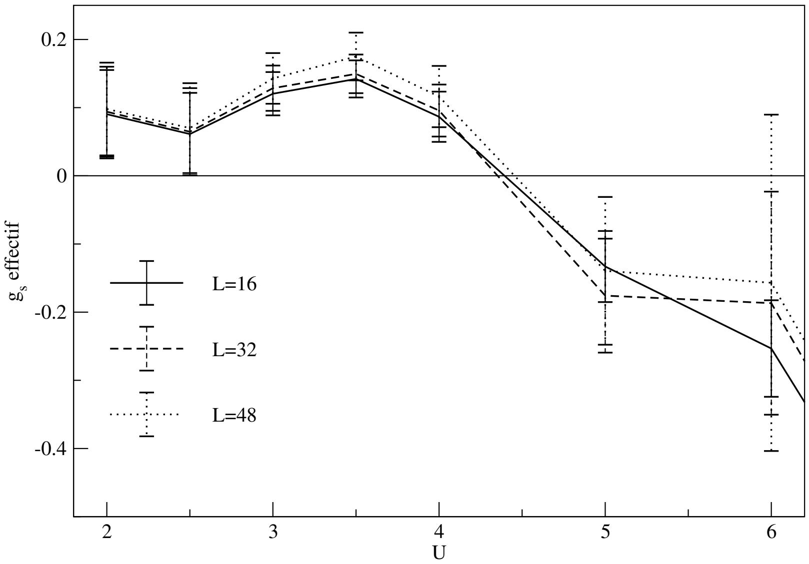


FIG. III.16: g_s calculée par la formule (III.61) du champ moyen, aux tailles $L = 16, 62, 48$.

Ces équations (III.52,III.54,III.55,III.59, III.60) sont utilisées ici pour déterminer $g_s(L)$ et $g_{sc}(L)$ à l´échelle L connaissant par le calcul Q.M.C. $u_c(L), v_s(L), \beta(L)$ ainsi que les gaps $\Delta_c = M\, u_c$ et $\Delta_s = m_R\, v_s$:

$$\overline{g}_{sc} = -\frac{\pi}{NW}\, u_c^{2\beta^2-1} \left(\frac{\overline{\Delta}_c}{C_\beta}\right)^{2-2\beta^2}, \tag{III.61}$$

$$g_s = \frac{1}{2NW}\left[\overline{\Delta}_s - \frac{\pi}{4NW}\,(1+\xi)\ \tan\left(\frac{\pi\xi}{2}\right)\ \frac{\overline{\Delta}_c^2}{u_c}\right], \tag{III.62}$$

$$W = W\left(\frac{\overline{\Delta}_s}{v_s}\right), \tag{III.63}$$

où les grandeurs $\overline{x}$ désignent les grandeurs réduites x/Λ^{Δ_x}, Δ_x étant la dimension d´échelle de x.

Les résultats apparaissent sur les figures III.16. Les constantes de couplage g_s, g_{sc} doivent être interprétées comme des constantes effectives à l´échelle L, dans le cadre du groupe de renormalisation mené exactement, à la Wilson.

Ils permettent de conclure à l´existence d´une valeur critique $U_0 \sim 4.5\,t$ au delà de laquelle g_s devient *négative*, ceci quelle que soit la taille. Ceci permet d´affirmer, pour $U > U_0$, que la théorie effective en spin est celle de fermions libres massifs, l´interaction ne se manifestant que dans une renormalisation de la masse. En

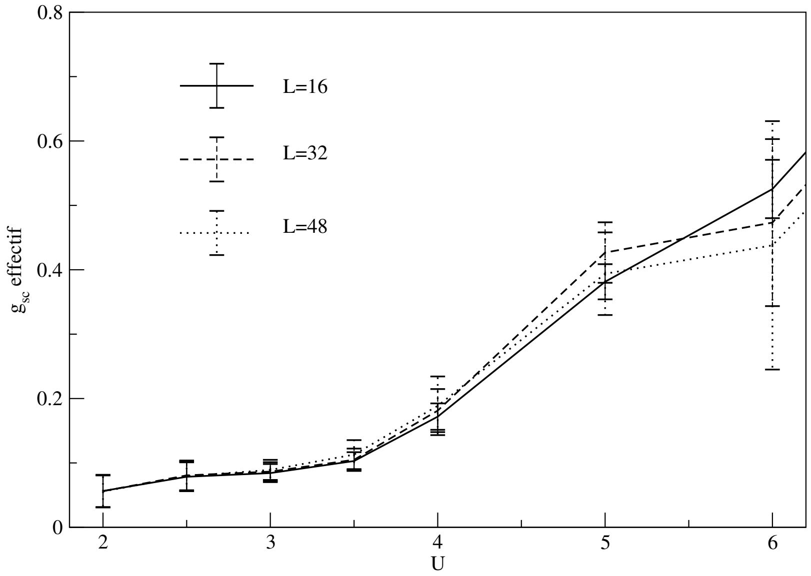


FIG. III.17: g_{sc} calculée par la formule (III.62) du champ moyen, aux tailles $L = 16, 62, 48$.

conséquence, la théorie ne contient pas d´états liés de fermions de Majorana pour pour $U > U_0$, et $U_{c2} < 4.5\,t$.

Le scenario le plus simple, compatible avec l´ensemble des données numériques, est $U_{c1} = U_{c2} \sim 4.5\,t$, c´est-à-dire que la destruction du spectre du modèle de Gross Neveu SO(8) coïncide avec le début du régime de Heisenberg SO(6).

La validité du calcul de champ moyen repose sur l´hypothèse que le couplage spin-charge g_{sc} n´est pas trop grand. La figure III.17 établit que c´est le cas, au moins au voisinage de U_0.

III.1.5 Résumé des résultats

Le modèle de Hubbard au demi remplissage est un liquide de spin isolant pour toute valeur de la répulsion coulombienne. Nous avons identifié deux régimes distincts, où le modèle est décrit par une théorie effective intégrable. Tout d´abord le régime SO(8), pour une répulsion coulombienne suffisamment faible, où le contenu en particules est celui du modèle de Gross Neveu SO(8). Dans ce régime, le liquide est cohérent, et les excitations magnétiques, orbitales et électriques sont unifiées par la symétrie SO(8) approximative. Ensuite, lorsque la répulsion coulombienne est forte, s´étend le régime de Heisenberg SO(6). Les excitations de charge sont repoussées très haut dans le spectre et la théorie effective à basse énergie est dans la classe d´universalité du modèle de Heisenberg antiferromagnétique SO(6). Dans ce régime, nous avons montré que le modèle de Hubbard SU(4) est décrit à basse énergie par 6 fermions de Majorana massifs. En conséquence, le liquide est incohérent. La conjugaison de méthodes analytiques et numériques nous a permis de dresser le diagramme des phases au demi remplissage de manière quantitative, et de situer le passage du régime SO(8) au régime de Heisenberg SO(6) à une valeur $U_c = 4.5\,t$ de la répulsion coulombienne. Dans la plus simple des hypothèses, compatible avec les résultats numériques, tous les changements spectraux qui définissent ce changement de régime se produisent simultanément.

La combinaison -dont nous devons saluer la fécondité- des efforts numériques et analytiques nous a également permis de tester le phénomène d´élargissement de symétrie de manière précise. Ainsi, la prédiction par la théorie des champs de cet élargissement pour des valeurs de la répulsion coulombienne qui sortent nettement du régime perturbatif $U \ll t$ d´une part ainsi que de la limite d´échelle $\Delta \ll a_0^{-1}$ a été comfirmée par les simulations numériques par la méthode de Monte Carlo jusqu´à $U = U_c$, où les gaps sont de l´ordre de 0.5, ce qui correspond à une longueur de corrélation de 2 mailles du réseau ! La grande robustesse du phénomène d´élargissement de symétrie légitime l´espoir de son observation expérimentale.

III.2 Autour du demi remplissage

Le dopage d´un isolant du type de celui qui a été rencontré au quart de remplissage n´offre pas beaucoup de surprises : les secteurs de charge et de spin étant découplés, la théorie en spin n´est pas affecté par le dopage. La situation est plus riche lorsque, comme au demi remplissage, les degrés de liberté de spin et de charge sont en forte interaction. Nous allons voir que ce couplage a pour conséquence que la transition métal-isolant peut induire ou non une transition dans le secteur de spin. Si elle n´en induit pas, le système présente une particularité nouvelle par rapport au cas SU(2) : on est en présence d´un liquide de spin (avec confinement des spinons et excitations magnétiques massives), métallique, sans avoir brisé la symétrie continue du modèle [15].

[15] Dans le cas du modèle de Hubbard à une bande, cette situation ne peut apparaître qu´en présence d´une interaction coulombienne *attractive* $U < 0$, ou bien dans le modèle XXZ, c´est-à-dire moyennant la brisure de la symétrie SU(2) en U(1)

III.2.1 Prédictions théoriques

Le dopage est décrit par un terme de potentiel chimique couplé à la charge totale du système, comme au quart de remplissage :

$$H_{\text{dop}} = \mu \sum_{i=1}^{N} \sum_{a=1}^{4} n_{i,a} \xrightarrow[a_0 \to 0]{} \frac{2\mu}{\sqrt{\pi}} \int_0^L dx\, \partial_x \Phi_c \tag{III.64}$$

La symétrie particule-trou (I.25), qui change Φ_c en $-\Phi_c$, autorise à n´envisager que le cas $\mu > 0$, qui tend à ajouter des trous dans le système.

Dopage de la phase "SO(8)"

Le terme de potentiel chimique (III.64) introduit une échelle supplémentaire, la longueur de dopage $\xi_d \sim \mu^{-1}$, qui doit être comparée à la longueur de corrélation de la charge ξ_c. Lorsque $\xi_d \lesssim \xi_c$, on attend une transition commensurable-incommensurable dans le secteur de charge. Nous décrirons le secteur de charge par le boson Φ_c (forme (III.4) de l´hamiltonien), le terme de potentiel chimique pouvant être absorbé par une redéfinition de ϕ_{Pc} :

$$\phi_{\text{Pc}}(x) \to \hat{\phi}_{\text{Pc}}(x) = \phi_{\text{Pc}}(x) + \frac{\mu}{\sqrt{\pi}(v_c + g_c)}\, x \tag{III.65}$$

Le hamiltonien total devient alors :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_s + \mathcal{H}_{sc} \tag{III.66}$$

$$\mathcal{H}_c = \frac{v_c}{2}\left[\left(\partial_x \hat{\Phi}_c\right)^2 + \left(\partial_x \hat{\Theta}_c\right)^2\right] + 2g_c\, \partial_x \hat{\phi}_{\text{Rc}} \partial_x \hat{\phi}_{\text{Lc}}, \tag{III.67}$$

$$\mathcal{H}_s = -\frac{iv_s}{2} \sum_{a=1}^{6} (\xi_{\text{R}}^a \partial_x \xi_{\text{R}}^a - \xi_{\text{L}}^a \partial_x \xi_{\text{L}}^a) + 2\pi g_s \sum_{1 \le a < b \le 6} \kappa^a \kappa^b, \tag{III.68}$$

$$\mathcal{H}_{sc} = -2i\, g_{sc} \cos\left(\sqrt{4\pi}\hat{\Phi}_c - qx\right) \sum_{a=1}^{6} \kappa^a. \tag{III.69}$$

où l´opérateur qui couple spin et charge oscille au vecteur d´onde $q = \frac{4\mu}{v_c + g_c}$. Les couplages nus sont encore donnés par (III.8) au premier ordre en U/t. La situation est similaire à celle du modèle XXZ sous champ magnétique [93] : tant que l´échelle spatiale à laquelle on regarde le système est petite devant la longueur de dopage, l´opérateur (III.69) oscille très lentement, et l´effet du dopage est négligeable. En revanche, dès que $a \gtrsim \xi_d$, le dopage est susceptible de jouer un rôle, l´opérateur

(III.69) oscillant fortement suggérant un découplage du boson de charge. La manière correcte d´examiner l´effet du dopage est de contrôler les constantes de couplage dans le cadre du groupe de renormalisation.

La fonction β pour le hamiltonien (III.66) ne peut pas être resommée ; nous nous contenterons de la fonction β à une boucle pour les couplages g_c, g_s, g_{sc} :

$$\begin{aligned}
\dot{g}_c &= 12\, g_{sc}^2 J_0(qa), \\
\dot{g}_s &= 4\, g_{sc}^2 J_0(qa) + 8\, g_s^2, \qquad \text{(III.70)} \\
\dot{g}_{sc} &= 2 g_{sc} \left(g_s + 5\, g_s\right) J_0(qa/2), \\
\dot{qa} &= qa + J_1(qa)\, \mathcal{O}(g_\alpha) \qquad \text{(III.71)}
\end{aligned}$$

Elle fait maintenant apparaître des fonctions de Bessel d´argument qa (où a^{-1} est le nouveau cut off ultraviolet). Ces fonctions oscillantes dépendent de la prescription choisie, mais dans tous les cas, le sens est le suivant : pour $a \ll \xi_d$, $J_0(qa) \sim 1$, et la fonction β est la même que dans le cas non dopé (III.9). En particulier, si $\xi_c \ll \xi_d$, le système atteint le régime de fort couplage avant que le dopage n´ait eu le temps d´exercer son influence, et le dopage n´a pas d´autre effet à basse énergie que de renormaliser le gap de charge.

Lorsque le dopage μ est supérieur au gap de charge ($\xi_c > \xi_d$), le régime $a \gtrsim \xi_d$ est atteint avant le régime de fort couplage, et le flot du groupe de renormalisation est très simplifié : comme $J_0(qa) \sim 0$, les secteurs de spin et de charge se découplent. La fonction β (III.70) indique qu´alors le secteur de charge a atteint un point fixe, g_c saturant à une valeur non universelle g_c^* : le secteur de charge est un liquide de Luttinger. Quant au secteur de spin, sa fonction β se simplifie en :

$$\dot{g}_s = 8\, g_s^2, \qquad \text{(III.72)}$$

si bien que son comportement à basse énergie est gouverné par le signe de g_s à l´échelle ξ_d. Il est utile à ce point point de la discussion de se rappeler le flot typique de g_s (figure III.3 page 80) : g_s est négative jusqu´à l´échelle ξ_0, où elle change de signe. A l´échelle ξ^*, le système atteint le point d´élargissement de symétrie. Trois cas se présentent (on se place dans le cas $\xi_d < \xi_c$ où le dopage a un effet sur la physique de basse énergie, si bien que nous pourrons changer de variable et décrire le système dans l´ensemble canonique par le remplissage n) :

• Pour $\xi_d < \xi_0$, la constante de couplage g_s à l´échelle ξ_d est négative : le découplage dû au potentiel chimique intervient avant que le couplage spin-charge n´ait eu le temps d´entraîner les degrés de liberté de spin vers une phase massive. Le

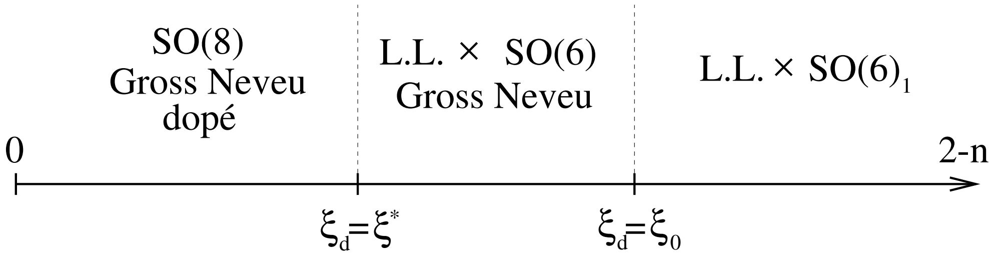


FIG. III.18: Succession des phases atteintes par le modèle de Hubbard SU(4) lorsque l´on varie le remplissage au voisinage du demi remplissage, la répulsion coulombienne U étant maintenue fixe. "L.L." désigne le liquide le Luttinger, qui décrit le secteur de charge.

flot après découplage est un flot critique, et les degrés de liberté de spin sont décrits dans la limite de basse énergie par une théorie de fermions libres ($g_s \to 0$ dans la limite infrarouge) sans masse.

• Pour $\xi_0 < \xi_d < \xi^*$, la constante de couplage g_s à l´échelle ξ_d est positive, et le découplage intervient avant l´élargissement de la symétrie. La fonction β (III.72) montre que la constante de couplage g_s diverge : le système est entraîné à fort couplage. Le modèle effectif décrivant le système à basse énergie est le modèle de Gross Neveu SO(6), dans lequel une masse est dynamiquement générée. Ce modèle est intégrable et son spectre [83, 57] ne contient que deux types de particules : des kinks et anti-kinks (se transformant dans les représentations fondamentales et anti-fondamentales de SU(4)) de masse m et des fermions (se transformant comme un vecteur de SO(6)) de masse $\sqrt{2}\,m$.

• Pour $\xi_d > \xi^*$, le découplage intervient alors que le système a déjà atteint le point d´élargissement de symétrie. L´effet du terme (III.64) dans le modèle de Gross Neveu SO(8) (III.21) est bien compris [75], le modèle restant intégrable puisque (III.64) est une quantité conservée, qui brise la symétrie SO(8) en SU(4)×U(1). Rappelons brièvement les résultats largement développés dans la référence [75]. Lorsque le potentiel chimique dépasse la valeur critique $\mu_c = \Delta_c$, les coopérons voient leur masse s´annuller, et le système devient métallique. Une séparation spin-charge est retrouvée à basse énergie, le secteur de charge étant décrit par un liquide de Luttinger. Cependant, un gap de spin subsiste (réminiscent du couplage spin-charge). La plus basse excitation dans le secteur de spin appartient au 28-uplet, et a une masse $m(\sqrt{3}-1)$.

Les trois régimes énumérés précédemment se succèdent lorsque l´on fait varier le dopage à U fixé, et sont illustrés par la figure III.18. Les deux derniers régimes se distinguent par des propriétés dynamiques : les excitations de spin sont cohérentes dans le régime SO(8) dopé, tandis que dans le régime de Gross Neveu SO(6), le dopage est suffisamment fort pour empêcher la formation d´états liés se transformant dans l´adjointe : les excitations de spin sont incohérentes. Notons que ceci donne accès à la nature de la théorie effective au voisinage de la ligne de transition vers la phase antiferromagnétiaue $SU(4)_1$: les degrés de liberté de spin ont pour théorie effective le modèle de Gross Neveu SO(6), la masse s´annullant à la transition.

Dopage de la phase "SO(6)"

Dans le régime de forte repulsion coulombienne, la situation est plus compliquée du fait de l´absence de point fixe autour duquel développer la théorie. Nous ne fournirons que des arguments heuristiques, basés sur la forme des excitations du régime Heisenberg SO(6).

Le fait que le couplage spin-charge ne soit plus l´opérateur dominant à U fort et au demi remplissage suggère, comme nous l´avons déjà remarqué, qu´un certain nombre d´états disparaît du spectre. En particulier, le coopéron, que l´on peut considérer comme état liés de deux kinks de SO(8), doit disparaître à U fort. Les premières excitations de charge sont donc des kinks de SO(8), portant une charge $\mathtt{n}_c = \frac{1}{2}$ et se transformant dans la fondamentale de SU(4) (rappelons que ces excitations (voir figure III.8) portent en effet un spin : ce sont les modes zéros non abéliens de C). Lorsque le système est dopé, l´énergie de ces kinks s´annulle, si bien que simultanément à la transition isolant-métal, le gap de spin se ferme. Il est tentant d´identifier ces excitations de spin sans masse aux spinons de la chaîne de Heisenberg SU(4) dans la représentation fondamentale.

III.2.2 Résultats numériques

Des simulations numériques par la méthode Monte Carlo quantiques ont été effectuées au remplissage $n = \frac{32}{17} \approx 1.88$. Celle-ci révèlent que le secteur de charge est critique, mais ne montrent pas de gap de spin, ce qui semble contredire l´analyse de la section précédente. Plus précisément, les simulations ayant été effectuées aux tailles $L = 17, 34, 51, 68$, elles permettent de conclure que le gap de spin, s´il est non nul, est petit (typiquement inférieur à 10^{-2}). La petitesse du gap de spin est à attribuer au fait que le remplissage $n = \frac{32}{17}$ est significativement éloigné du demi remplissage, et il est possible que la poche de liquide spin soit limitée au voisinage immédiat du demi remplissage. S´approcher davantage du demi remplissage comporte le désavantage que la taille du système simulé doit augmenter.

Pour contourner cette difficulté, je me suis intéressé à d´autres quantités que le gap de spin, en raisonnant par l´absurde. Plutôt que de montrer directement l´existence d´un gap de spin, il est possible de montrer que l´alternative, à savoir la criticalité en spin, est inconsistante avec les données numériques. Sous l´hypothèse que le système est critique, en charge et en spin, le candidat naturel pour la théorie effective est un produit du liquide de Luttinger pour la charge et du modèle de WZNW $SU(4)_1$ pour le spin. Le hamiltonien effectif à basse énergie est donc sous cette hypothèse :

$$\mathcal{H} = \frac{u_c}{2}\left[\frac{1}{K_c}\left(\partial_x \Phi_c\right)^2 + K_c\left(\partial_x \Theta_c\right)^2\right] + \frac{v_s}{2}\sum_{\alpha=s,t,st}\left[\left(\partial_x \Phi_\alpha\right)^2 + \left(\partial_x \Theta_\alpha\right)^2\right] \qquad \text{(III.73)}$$

A taille finie, l´énergie des premières excitations ne dépendra que de trois quantités non universelles : les vitesses de charge et de spin u_c et v_s, et le paramètre de Luttinger K_c. Ceci est une conséquence de l´invariance conforme du modèle effectif décrivant le modèle dans la limite infrarouge : dans un modèle conforme à taille finie, l´énergie des niveaux excités possède une forme universelle [94], qui fait intervenir la vitesse et la dimension d´échelle de l´opérateur créant l´excitation en question. Cependant, dans notre cas la situation est un peu plus compliquée du fait que les gaps calculés le sont pour des conditions aux limites bien précises. En effet, pour éviter une dégénérescence du fondamental [16], des conditions aux limites antipériodiques sont choisies lorsque le nombre de fermions est pair, périodiques lorsqu´il est impair. De manière explicite, l´énergie $E_0(\mathtt{N}_\mathrm{F} + \mathtt{m})$ du fondamental à $\mathtt{N}_a = \mathtt{N}_\mathrm{F}/4 + m_a$ fermions de couleur a, intervenant dans la définition (III.46) du gap, est calculée avec les conditions aux limites :

$$c_{i+L,a} = c_{i,a}\, e^{i\varphi_a}\,, \qquad \varphi_a = \frac{\pi}{2}\left(1 + (-1)^{\mathtt{N}_a}\right). \qquad \text{(III.74)}$$

Ces conditions aux limites modifient la forme des modes zéros des champs bosoniques selon :

$$\phi^{(0)}_{a,\mathrm{R(L)}}(x) = \mp\frac{\theta_{a,\mathrm{R(L)}}}{\sqrt{4\pi}} + \frac{\sqrt{\pi}}{L}\left[\hat{N}_{a,\mathrm{R(L)}} \mp \frac{1}{2}(1 - \varphi_a/\pi)\right] x - \frac{\sqrt{\pi}}{4}\hat{N}_{a,\mathrm{L(R)}} \qquad \text{(III.75)}$$

Les tours conformes de la théorie de densité hamiltonienne (III.73) sont étiquetés par deux quadruplets de nombres quantiques (n_a) et (j_a), valeur propre du nombre total de particule $\hat{N}_a = \hat{N}_{a,\mathrm{L}} + \hat{N}_{a,\mathrm{R}}$ et du courant total $\hat{J}_a = \hat{N}_{a,\mathrm{L}} - \hat{N}_{a,\mathrm{R}}$. L´évaluation de l´energie $E_0[\varphi_a; n_a, j_a]$ de l´état le plus bas en énergie de la tour conforme (n_a, j_a) ne pose pas de problème, seul le mode zéro contribuant dans (III.73). Cette quantité est

[16] Ceci est crucial pour la méthode de Monte Carlo quantique, qui contourne le problème du signe en effectuant une transformation de Jordan Wigner pour se ramener à un sytème de bosons de coeur dur.

plus aisément exprimée en fonction des phases $\varphi_\alpha = A_{\alpha a}\varphi_a$, $\alpha = c, s, t, st$ associées aux degrés de liberté de charge et de spin, A étant la matrice de passage (I.24). On introduit de manière similaire les (n_α) et les (j_α). Dans ces nouvelles variables, on trouve :

$$\begin{aligned} E_0[\varphi_a; n_a, j_a] &= E_0[0;0,0] + \frac{\pi v_s}{2L} \sum_{\alpha=s,t,st} \left(n_\alpha^2 + \left[j_\alpha - \frac{\varphi_\alpha}{\pi} \right]^2 \right) \\ &\quad + \frac{\pi u_c}{2L} \left(\frac{1}{K_c}\, n_c^2 + K_c\, \left[j_c + 2 - \frac{\varphi_c}{\pi} \right]^2 \right). \end{aligned} \tag{III.76}$$

Le gap $\Delta_{\mathtt{m}}$ à l´excitation de nombre quantiques (m_a), défini par (III.46), s´obtient simplement à partir de (III.74) et (III.76) comme :

$$\Delta_{\mathtt{m}} = \frac{\pi}{L} \left(\frac{u_c}{K_c} m_c^2 + v_s \sum_{\alpha=s,t,st} m_\alpha^2 \right). \tag{III.77}$$

L´annulation des termes de courants est précisément une conséquence du choix des conditions aux limites : celles-ci induisent un courant dans le système (ceci est manifeste dans l´équation III.75), qui vient s´opposer exactement au courant porté par l´excitation. Nous obtenons donc les expressions suivantes pour les gaps à une particule, de coopéron et de spin :

$$\begin{aligned} \Delta_1 &= \frac{\pi}{4L} \left(\frac{u_c}{K_c} + 3v_s \right) \\ \Delta_c &= \frac{2\pi}{L} \frac{u_c}{K_c} \\ \Delta_s &= \frac{2\pi v_s}{L} \end{aligned} \tag{III.78}$$

Une relation supplémentaire est nécessaire pour sur-déterminer les paramètres u_c, v_s et K_c. Nous avons calculé la rigidité de charge du système, réponse du système à un changement des conditions aux bords. Explicitement, on a :

$$D_c = \pi L \, \frac{\partial^2 E_0[\varphi; 0,0]}{\partial \varphi^2} = u_c \, K_c, \tag{III.79}$$

la dernière égalité provenant de (III.76).

A partir des relations (III.78) et (III.79), nous avons extrait la vitesse de spin des énergies des premiers états excités, et ceci de deux manières indépendantes. Les résultats sont présentés dans la figure III.19. Tandis qu´à petit U, l´accord est parfait, il apparaît que pour $U/t \gtrsim 4$ les résultats ne sont plus cohérents dans les barres d´erreur. L´hypothèse de criticalité pour la charge et le spin n´est donc compatible

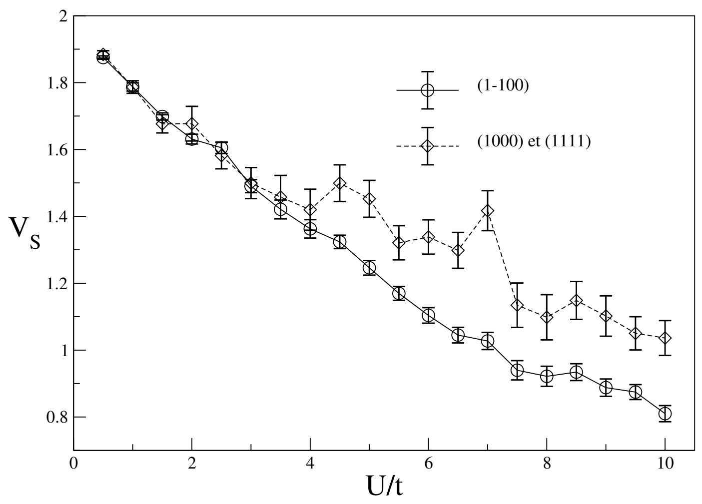


FIG. III.19: Vitesse de spin calculée à partir du gap de spin (1-100), et à partir du gap à une particule (1000) et du gap du coopéron (1111), pour le remplissage $n = \frac{32}{17}$ et à la taille $L = 34$. Ces résultats sont consistants avec l´hypothèse de criticalité jusqu´à $U \approx 4\,t$.

avec les données numériques que pour $U < 4\,t$. Au delà, puisque les degrés de liberté de charge sont critiques, nous en concluons que le secteur de spin n´est plus critique. On pourrait opposer à cet argument que de fortes corrections aux formules (III.78) sont générées par un opérateur irrelevant. Ces corrections sont au plus d´ordre $1/L \ln L$, ce qui est insuffisant pour expliquer l´effet observé. De plus, l´apparition subite de ces corrections pour $U \simeq 4\,t$ signerait la proximité d´une phase gapée en spin dans cette région.

Cette signature indirecte de l´ouverture d´un gap de spin est consistante avec l´analyse de la section précédente. Il serait intéressant de pouvoir observer le gap de spin de manière directe, et se rapprochant par exemple du demi remplissage. Le remplissage $n = \frac{32}{17}$ est malheureusement la limite que peut atteindre la méthode de Monte Carlo quantique, une densité plus proche de 2 requièrant des tailles plus importantes (la taille du système simulée doit être commensurable à la densité !). La figure III.20 présente les mêmes quantités calculées au remplissage $n = \frac{3}{2}$, et manifeste clairement la criticalité des degrés de liberté de spin.

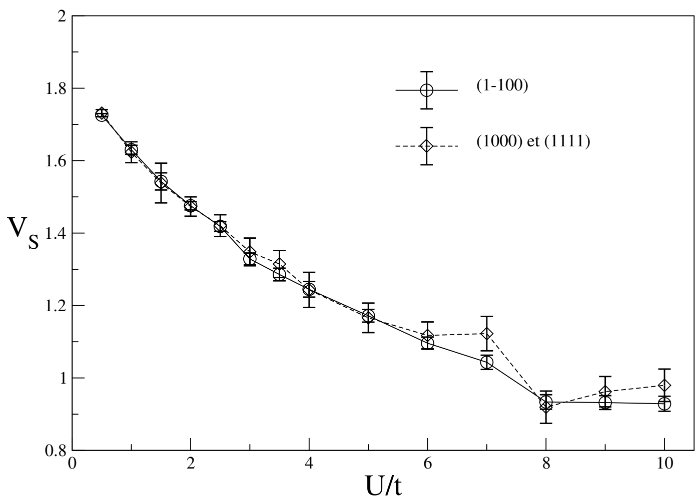


FIG. III.20: Pour comparaison avec le voisinage du demi remplissage, cette figure présente la vitesse de spin calculée de la même manière au remplissage $n = \frac{3}{2}$ à la taille $L = 32$. Les lois d´échelle critiques sont parfaitement suivies.

III.3 Diagramme des phases

L´ensemble des résultats des chapitres précédents permet de dresser le diagramme des phases du modèle de Hubbard SU(4). La figure III.21 présente une moitié de ce diagramme des phases, l´autre moitié s´en déduisant par symétrie particule-trou $n \leftrightarrow 4-n$. La première constatation, lorsque l´on compare ce diagramme des phases à celui du modèle de Hubbard à une bande, qui comporte les mêmes paramètres d´échange t et de répulsion coulombienne U, est la diversité des phases qu´il recèle. Au quart de remplissage, une transition de Mott a lieu pour une valeur finie $U \sim 2.8\,t$ de la répulsion coulombienne, phénomène qu´on peut attribuer, en comparaison avec le modèle de Hubbard à une bande, à un effet entropique de la dégénérescence orbitale. Les propriétés magnétiques du système au quart de remplissage sont similaires à celle du modèle de Hubbard à une bande au demi remplissage : le modèle est critique, le spectre étant constitué d´une branche de spinons sans masse. La séparation spin-charge à basse énergie prédite par la théorie des champs en dehors du demi remplissage est en parfait accord avec les résultats des simulations numériques par la méthode de Monte Carlo quantique. Le dopage du système à partir du quart de remplissage n´affecte que le secteur de charge, qui est alors décrit par un liquide de Luttinger.

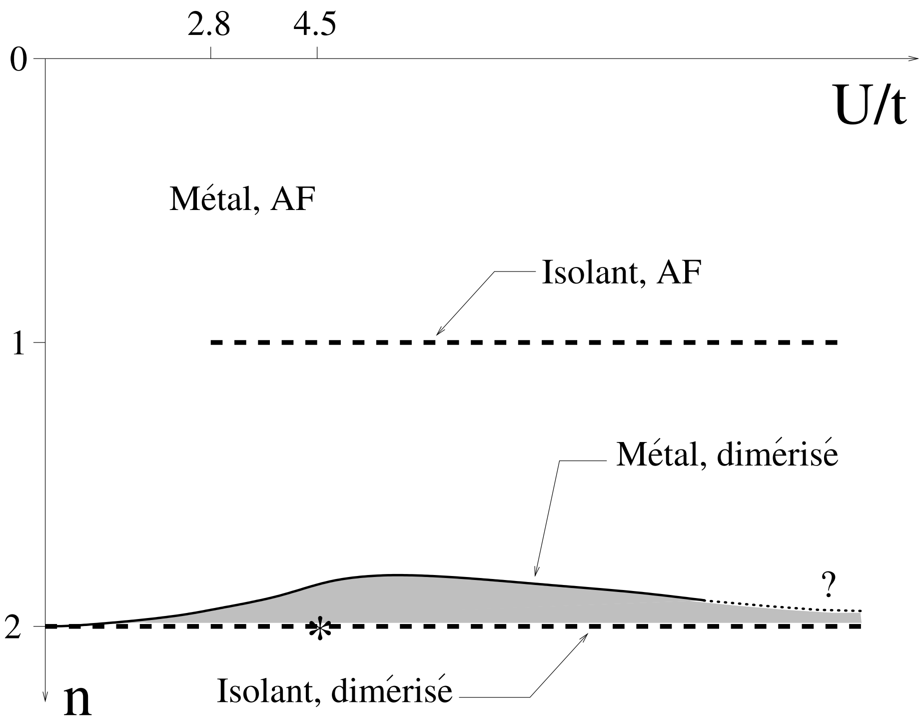


FIG. III.21: Diagramme des phases du modèle de Hubbard SU(4) dans le plan répulsion coulombienne - remplissage. Les pointillés en gras indiquent les phases isolantes de Mott. Notons la poche de liquide de spin gapé métallique au voisinage du demi remplissage, qui est l´une des grandes nouveautés par rapport au modèle de Hubbard SU(2). Une question ouverte est la forme de la ligne de transition entre cette poche et la phase métallique avec ordre antiferromagnétique à quasi longue portée à fort U. L´étoile au demi remplissage indique le point $U_c \sim 4.5\,t$ où le spectre passe de celui du modèle de Gross Neveu SO(8) à celui du régime de Heisenberg SO(6), dans le scenario le plus simple.

Dans toute cette zone du diagramme des phases (en dehors du demi remplissage), le modèle de Hubbard SU(4) est donc un liquide fortement incohérent, aussi bien du point de vue de la charge que du magnétisme.

La situation est très différente au demi remplissage et dans son voisinage. Cette région du diagramme des phases, dont les propriétés remarquables découlent fondamentalement d´un fort couplage spin-charge, n´a pas de pendant dans le modèle de Hubbard à une bande. Au demi remplissage, le modèle de Hubbard SU(4) est un isolant de Mott et un liquide de spin gapé. Ses propriétés spectrales varient cependant en fonction de la répulsion coulombienne. Nous avons établi que pour une répulsion coulombienne suffisamment faible ($U < 4.5\,t$), le modèle de Hubbard SU(4) est un liquide *cohérent*, une branche de magnons massifs étant présente dans le bas du spectre. Le confinement des spinons peut être interprété comme le résultat d´une interaction effective attractive médiée par les degrés de liberté de charge. De plus, dans cette région du diagramme des phases, que nous avons qualifiée de régime SO(8), le modèle de Hubbard SU(4) présente une cohérence électronique, dans le sens qu´il existe une quasiparticule ayant les nombres quantiques de l´électron. L´existence de cette quasiparticule -état relié adiabatiquement à l´électron non interagissant- est un fait remarquable à une dimension, où les interactions ont plutôt tendance à fractionnaliser l´électron. Cependant, en raison des fortes interactions, l´électron (habillé) massif coexiste dans le bas du spectre avec d´autres excitations, fractionnaires, si bien qu´il ne s´agit pas d´un isolant de bande. Lorsque la répulsion coulombienne est augmentée, le système entre dans le régime Heisenberg SO(6) ($U > 4.5\,t$), caractérisé par la divergence de la masse des excitations de charge, qui disparaissent du bas du spectre, et par l´incohérence des excitations magnétiques.

Le dopage du modèle au voisinage du demi remplissage et dans le régime SO(8) fait apparaître une phase intéressante de liquide de spin gapé. L´extension en densité de cette phase est probablement relativement réduite, comme l´indiquent les simulations numériques. Cependant, il est remarquable qu´un modèle aussi simple exhibe, sans qu´il soit nécessaire d´introduire de la frustration, une telle phase métallique sans ordre magnétique. Le sort, à forte répulsion coulombienne, de cette phase de liquide de spin métallique n´est pas totalement élucidé ; néanmoins des arguments heuristiques indiquent qu´elle a tendance à disparaître : dans la limite de forte répulsion coulombienne, des spinons sans masse sont libérés au moindre dopage.

La richesse du diagramme des phases du modèle de Hubbard SU(4) nous indique que malgré sa grande simplicité, ce modèle retient suffisamment de processus physiques pour avoir une utilité dans la description des effets de la dégénérescence orbitale. Ainsi, il s´agit d´un des modèles les plus simples présentant, au demi remplissage, une phase de liquide de spin gapé comme on l´attend génériquement dans l´échelle de spin à deux montants. Ce fait laisse à penser que le modèle de Hubbard SU(4) capture des propriétés génériques à la dégénérencence orbitale, au moins au demi remplissage. La question naturelle qui se pose est de savoir si le modèle de Hubbard SU(4) peut constituer un paradigme pour la description des effets de la dégénérescence orbitale. En d´autres termes, dans quelle mesure les différentes phases obtenues sont-elles représentatives d´un système à dégénérescence orbitale ? La question est donc la stabilité des phases que nous avons obtenues sous l´ajout de perturbations -physiques- brisant la symétrie -non physique- SU(4). Si la phase de liquide de spin gapé observée au demi remplissage est probablement robuste aux perturbations, on s´attend en revanche à ce que la criticalité en spin obtenue en dehors du demi remplissage ne soit pas générique, et à ce que des perturbations du modèle de Hubbard SU(4) détruisent cette phase. Les deux prochains chapitres sont consacrés à l´étude du modèle de Hubbard SU(4) perturbé par des opérateurs physiques, au quart de remplissage et dans son voisinage. Nous restreignons ainsi notre investigation aux zones du diagramme des phases où il y a séparation spin-charge à basse énergie, et nous nous concentrons sur l´étude du secteur de spin, en analysant successivement le modèle spin-orbite (chapitre IV) qui brise la symétrie SU(4) en SU(2)×SU(2), puis l´interaction de Hund (chapitre V). Ce dernier chapitre sera également l´occasion de présenter une tentative de classification des liquides de spin gapés apparaissant dans les échelles de spin à plusieurs montants, basée sur des dualités mettant en rapport différents liquides de spin gapés.

Chapitre IV

Modèle spin-orbital

Une des particularités de l´antiferromagnétisme en dimension un est l´absence d´ordre de Néel à longue portée à température nulle en raison de l´impossibilité de briser spontanément la symétrie SU(2) de rotation dans l´espace de spin. La situation générique à une dimension est ainsi d´avoir un liquide de spin. Il est néanmoins possible de stabiliser des liquides de spin de nature très différente. Une question importante est alors la classification de ces liquides de spin.

Un célèbre exemple de liquide de spin est fourni par la chaîne de Heisenberg antiferromagnétique de spin $\frac{1}{2}$ qui est exactement soluble par l´ansatz de Bethe. Le modèle ne possède pas de gap spectral et les fonctions de corrélation décroissent algébriquement avec la distance avec un exposant universel caractérisé par la théorie conforme $SU(2)_1$ possédant une charge centrale $c = 1$ [95]. Le spectre des excitations de basse énergie du modèle est décrit par un continuum sans gap paramétré par deux impulsions et peut être interprété à partir de deux excitations de spin $\frac{1}{2}$ (spinons) [96] : le magnon de l´antiferromagnétisme, excitation de spin 1, n´est plus une excitation élémentaire du problème mais se fractionnalise en deux spinons. Une signature expérimentale de ce phénomène est l´existence d´un fond incohérent dans des expériences de diffusion inélastique de neutrons due à la nature composite de l´excitation associée au retournement d´un spin. Un liquide de spin de nature très différente est la chaîne de Heisenberg antiferromagnétique de spin 1 ou l´échelle de spin $\frac{1}{2}$ à deux montants. L´état fondamental est un singulet et le système a un gap spectral appelé gap de Haldane [97, 17]. Les corrélations entre spins sont à courte portée (décroissance exponentielle à longue distance) : on a ainsi l´exemple d´un véritable liquide de spin incompressible. Les excitations élémentaires du système ne sont plus des spinons sans masse mais un triplet ($S = 1$) massif (magnons optiques).

Dans ce cas, contrairement au cas de la chaîne de spin $\frac{1}{2}$, le facteur de structure dynamique est caractérisé par la présence d´un pic intense compte tenu de la nature élémentaire de l´excitation de spin 1 : on dira dans ce cas que les excitations de spoin sont cohérentes. L´échange interchaîne $J_\perp$ de l´échelle confine ainsi les spinons originaux des chaînes de spin $\frac{1}{2}$ pour former des triplets massifs. La frustration peut également stabiliser un autre type de liquide de spin à une dimension. Un exemple de chaîne de spin frustrée est le modèle $J_1 - J_2$ qui peut être également vu comme une échelle zigzag à deux montants. Pour une valeur $J_2 > 0.52\, J_1$, un nouveau type de liquide de spin apparaît [20], caractérisé par la coexistence de dimérisation et d´incommensuration. Dans cette phase, l´état fondamental est doublement dégénéré (la symétrie de translation est spontanément brisée) et les excitations de basse énergie sont des spinons massifs déconfinés ayant un vecteur d´onde incommensurable.

Je me suis intéressé à ce problème de la classification des liquides de spin à une dimension. Une question importante est de savoir si la dégénérescence orbitale peut représenter un nouveau mécanisme stabilisant un liquide de spin unidimensionnel exotique. A cet égard, j´ai étudié le diagramme de phase du modèle spin-orbital défini par le hamiltonien suivant :

$$H_{\mathrm{spin-orbital}} = J_1 \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + J_2 \sum_i \vec{T}_i \cdot \vec{T}_{i+1} + K \sum_i \left(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}\right)\left(\vec{T}_i \cdot \vec{T}_{i+1}\right). \quad \text{(IV.1)}$$

Ce modèle a été en fait introduit par Pati *et al.* [98] pour décrire les propriétés magnétiques du composé quasi-unidimensionnel $Na_2Ti_2Sb_2O$ [99] qui possède un gap de spin. Le modèle (IV.1) est un hamiltonien effectif de type Heisenberg généralisé [27] faisant intervenir un opérateur de spin $\frac{1}{2}$ ($\vec{S}$), associé aux degrés de liberté magnétiques, et un opérateur de pseudospin $\frac{1}{2}$ ($\vec{T}$) afin de prendre en compte les degrés de liberté orbitaux associés à la dégénérescence orbitale du composé. Il est possible également d´interpréter le hamiltonien (IV.1) comme celui d´une échelle à deux montants constituée de deux chaînes de spin $\frac{1}{2}$ couplées par un terme biquadratique de constante de couplage K. Ce modèle a été introduit dans le cas $J_1 = J_2$ par Nersesyan et Tsvelik [28] et le terme interchaîne biquadratique peut résulter de la présence d´un couplage spin-phonons. Une question naturelle est donc de savoir si la présence de ces degrés orbitaux ou ce couplage biquadratique peut donner lieu à nouvel état de liquide de spin à une dimension.

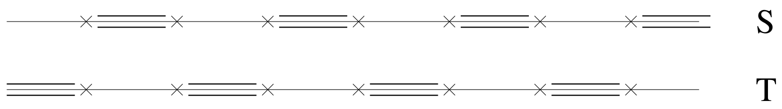
Dans la limite continue le long de la ligne $|K| \ll J_1 = J_2$, le hamiltonien (IV.1) a une invariance SU(2)×SU(2) et il est décrit par un modèle de quatre fermions de

Majorana $\xi^a_{R,L}$ massifs [28] associés à la symétrie SO(4) :

$$\mathcal{H}_{\text{spin-orbital}} \simeq -\frac{iv}{2}\sum_{a=1}^{4}\left(\xi^a_R \partial_x \xi^a_R - \xi^a_L \partial_x \xi^a_L\right) - im\sum_{a=1}^{4}\xi^a_R \xi^a_L, \qquad \text{(IV.2)}$$

avec $m \sim K$. L´état fondamental du système est doublement dégénéré et présente une dimérisation alternée telle que $\left\langle (-1)^i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \right\rangle = -\left\langle (-1)^i \vec{T}_i \cdot \vec{T}_{i+1} \right\rangle \neq 0$ [28]. Les deux fondamentaux correspondants à cette dimérisation sont représentés sur la figure IV.1.

(a)



(b)

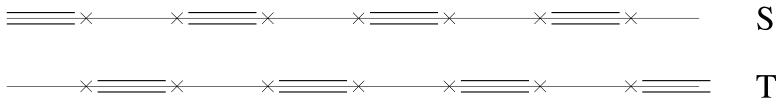


Fig. IV.1: Représentation schématique des deux fondamentaux de l´échelle de spin biquadratique en couplage faible caractérisés par une dimérisation alternée. Les doubles traits symbolisent un dimère.

Les excitations de basse énergie du modèle sont construites à partir des kinks massifs de dimérisation de chaque chaîne. Compte tenu de la structure alternée de la dimérisation pour ce système, les premières excitations ne portent pas un spin $\frac{1}{2}$ mais un spin entier ($S = 1$ et $S = 0$) et sont construites à partir d´une paire des kinks précédents de spin $\frac{1}{2}$. Un exemple d´une telle excitation de spin 1 est illustré par la figure IV.2. Le modèle spin-orbital (IV.1) est ainsi un liquide de spin incompressible différent de celui de la chaîne de spin un ou de l´échelle de spin $\frac{1}{2}$ à deux montants avec couplage interchaîne antiferromagnétique. Dans tous ces liquides de spin, les excitations de basse énergie possèdent un gap et portent un même nombre quantique $S = 1$ mais le modèle spin-orbital se distingue par le fait que ces excitations ne sont pas élémentaires mais formées de deux kinks de spin $\frac{1}{2}$. En particulier, cette différence va se manifester au niveau de la forme du facteur de structure dynamique du modèle qui est caractérisé par l´absence de pic étroit signalant un mode élémentaire de spin 1.

Nous avons ainsi un liquide de spin avec un gap qui diffère crucialement de celui de la chaîne de spin un ou de l´échelle à deux montants au niveau des propriétés dynamiques tout en ayant une thermodynamique à basse température similaire. A cet égard, ce liquide de spin, associé à la dimérisation alternée de la figure (IV.1), a été baptisé liquide de spin de type non-Haldane par Nersesyan et Tsvelik [28]. Signalons finalement, pour être complet, que les excitations (figure IV.2) du modèle spin-orbital ont été étudiées par une approche variationnelle par Kolezhuk et Mikeska [100] et que le cas anisotrope ($J_1 \neq J_2$) a été traité dans le couplage faible par Orignac *et al.* [101].

Une partie de mon activité, au début de ma thèse, a été d´analyser si le modèle spin-orbital (IV.1) pouvait avoir d´autres phases liquides de spin possibles en dehors de cette phase non-Haldane du couplage faible. En particulier, un point fort intéressant est que ce modèle, contrairement au cas de l´échelle, peut être également analysé dans le régime de couplage intermédiaire $J_{1,2} \sim K$ à partir d´une description continue.

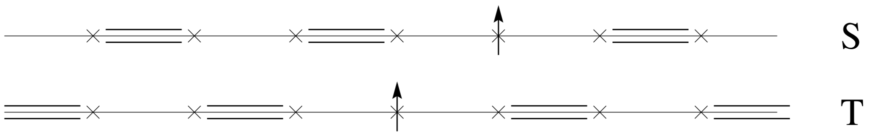


FIG. IV.2: Excitation de spin 1 de l´échelle de spin biquadratique en couplage faible, formée d´une paire de kinks de dimérisation de chaque chaîne.

En effet, le hamiltonien (IV.1) pour $J_1 = J_2 = K/4$ peut se réécrire sous la forme d´un produit d´un opérateur de permutation à deux corps dans l´espace de spin et d´un second dans le secteur orbital :

$$\mathcal{H}_{\text{spin-orbital}} = J_1 \sum_i \left(2\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + \frac{1}{2}\right)\left(2\vec{T}_i \cdot \vec{T}_{i+1} + \frac{1}{2}\right) = J_1 \sum_i P_{i,i+1}^{(S=1/2)}\; P_{i,i+1}^{(T=1/2)}. \tag{IV.3}$$

Le modèle spin-orbital, en ce point particulier, possède alors une symétrie étendue SU(4) qui unifie les degrés de liberté de spin et orbitaux [102, 103]. Plus précisement, le hamiltonien (IV.3) prend la forme suivante en fonction des quinze générateurs T^A de SU(4) appartenant à la représentation fondamentale :

$$\mathcal{H}_{\text{spin-orbital}} = J_1 \sum_i \sum_{A=1}^{15} T_i^A T_{i+1}^A + \text{constante}. \tag{IV.4}$$

Ce modèle, que nous avons rencontré dans le chapitre II, est le modèle de Heisenberg SU(4) dans la représentation fondamentale. Rappelons qu´il est exactement soluble par l´ansatz de Bethe et que son spectre consiste en trois modes (spinons généralisés) critiques [53]. La nature de la théorie critique a été déterminée par Affleck [95, 54, 52] et appartient à la classe d´universalité du modèle WZNW $\mathrm{SU}(4)_1$ caractérisé par une charge centrale $c = 3$. L´existence de ce point critique avec une symétrie SU(4) permet ainsi d´étudier le diagramme de phase du modèle spin-orbital (IV.1) directement dans le régime de couplage intermédiaire $J_{1,2} \sim K$ par une approche continue. Il est important de noter que ce point critique SU(4) de charge centrale $c = 3$ ne peut pas être atteint, d´après le théorème c de Zamolodchikov [104], par une trajectoire du groupe de renormalisation partant du point critique de découplage des deux chaînes caractérisé par une charge centrale plus faible $c = 2$. La stratégie que Azaria *et al.* [24] ont alors utilisée est de partir du modèle de Hubbard avec une symétrie SU(4) au quart de remplissage et d´effectuer une approche de bosonisation abélienne. Après intégration des libertés de charge, il est alors possible d´obtenir les expressions continues des densités de spin et d´orbitale [1]. On peut ainsi analyser le schéma de brisure SU(4) $\rightarrow$ SU(2)$\times$SU(2) afin de déterminer les propriétés physiques du modèle (IV.1) dans le voisinage du point SU(4). Je me suis précisement intéressé à ce problème et j´ai étudié l´effet d´une anisotropie au niveau des échanges $J_1 \neq J_2$ dans le voisinage immédiat du point SU(4) [2]. La théorie effective de basse énergie du modèle spin-orbital (IV.1) au voisinage du point SU(4) est alors donnée par (voir les détails dans l´article ci-joint) :

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}} &= -\frac{iv_s}{2}\left(\vec{\xi}_{sR}\cdot\partial_x\vec{\xi}_{sR} - \vec{\xi}_{sL}\cdot\partial_x\vec{\xi}_{sL}\right) - \frac{iv_o}{2}\left(\vec{\xi}_{oR}\cdot\partial_x\vec{\xi}_{oR} - \vec{\xi}_{oL}\cdot\partial_x\vec{\xi}_{oL}\right) \\ &+ g_1\left(\vec{\xi}_{sR}\cdot\vec{\xi}_{sL}\right)^2 + g_2\left(\vec{\xi}_{oR}\cdot\vec{\xi}_{oL}\right)^2 + g_3\left(\vec{\xi}_{sR}\cdot\vec{\xi}_{sL}\right)\left(\vec{\xi}_{oR}\cdot\vec{\xi}_{oL}\right), \end{aligned} \tag{IV.5}$$

où $\vec{\xi}_{sR,L}$ et $\vec{\xi}_{oR,L}$ sont deux triplets de fermions de Majorana agissant respectivement dans le secteur de spin et le secteur orbital. L´interaction dans l´équation (IV.5) est marginale et consiste en deux modèles Gross-Neveu [26] avec une symétrie SO(3) couplés marginalement. Ce modèle n´étant pas intégrable, j´ai alors effectué une étude de groupe de renormalisation à une boucle qui révèle la présence de deux phases de nature différente.

[1] J´ai, en particulier, présenté les détails de cette approche dans le chapitre II sur le modèle de Hubbard SU(4) au quart de remplissage.

[2] Azaria *et al.* [24] avait uniquement étudié le diagramme de phase du modèle autour du point SU(4) par cette approche de théorie des champs dans le cas où une symétrie Z_2 supplémentaire était présente correspondant à l´échange entre les deux montants ($J_1 = J_2$) ou bien entre les degrés de liberté de spin et orbital.

D´une part, une phase avec une criticalité étendue appartenant à la classe d´universalité $SU(4)_1$ avec une charge centrale $c = 3$. Les fonctions de corrélation décroissent algébriquement avec la distance avec un exposant 3/2 et possèdent des oscillations avec une période de quatre sites ($2k_F = \pi/2a_0$).

D´autre part, une phase avec un gap spectral caractérisée par une dimérisation alternée similaire à celle du couplage faible (figure IV.1). Pour une anisotropie $J_1 \neq J_2$ pas trop importante, cette phase massive possède une symétrie SU(4) approchée qui est restaurée par les interactions. En effet, en oubliant l´anisotropie de vitesse dans l´équation (IV.5), les équations de récursion du groupe de renormalisation à une boucle montrent que les constantes de couplage convergent, dans la limite des grandes distances, vers une ligne très spéciale de haute symétrie :

$$\mathcal{H}_{\mathrm{IR}} \simeq -\frac{iv_*}{2} \sum_{a=1}^{6} (\xi_R^a \partial_x \xi_R^a - \xi_L^a \partial_x \xi_L^a) + g_* \left(\sum_{a=1}^{6} \xi_R^a \xi_L^a \right)^2 , \tag{IV.6}$$

avec $g_* > 0$. Ce hamiltonien est celui du modèle de Gross-Neveu à symétrie SO(6). Ce modèle est intégrable, et possède un gap spectral pour $g_* > 0$. Son spectre d´excitation consiste en un fermion fondamental avec une masse M et des kinks et anti-kinks de masse $m_{\mathrm{kink}} = M/\sqrt{2}$ [57]. Le modèle initial (IV.5), invariant sous SU(2)×SU(2), acquiert ainsi dans l´infrarouge une symétrie élargie SO(6) $\simeq$ SU(4). Les degrés de liberté de spin et d´orbitale sont donc unifiés et décrits par un même multiplet à six composantes. Ce phénomène d´élargissement de symétrie est similaire à celui observé, vers le groupe SO(8), dans le cas de l´échelle de Hubbard à deux montants [77] au demi-remplissage ou celui du modèle de Hubbard SU(4) au demi-remplissage exposé dans le chapitre III. L´intégrabilité du modèle effectif dans l´infrarouge permet d´extraire de nombreuses informations sur le spectre et les fonctions de corrélation du modèle de départ comme dans le cas de SO(8) [77, 75, 76].

Il est néanmoins naturel de questionner l´existence d´une restauration de symétrie à partir d´une approche perturbative à une boucle en absence d´un point fixe infrarouge stable. Dans le cas de notre problème, le modèle de Gross-Neveu couplé (IV.5) n´est pas intégrable et l´existence d´une restauration approximative de la symétrie SO(6) peut être justifiée par deux arguments. D´une part, j´ai obtenu que le flot du groupe de renormalisation à une boucle, dans une région dans le voisinage immédiat du point SU(4), est très semblable à celui du modèle de Thirring avec une symétrie U(1) dans la phase où le flot n´est pas asymptotique libre dans l´ultraviolet (phase C dans la référence [78]). L´analyse de la solution exacte de ce dernier modèle [105, 78] dans cette phase révèle que les quantités physiques dépendent faiblement de l´anisotropie : les corrections au cas isotrope sont exponentiellement petites. On peut ainsi croire à la restauration de la symétrie SO(6) de manière approximative pour le modèle spin-orbital. Le deuxième argument provient du calcul des fonctions β du modèle (IV.5) à tous les ordres en utilisant l´approche développée par Gerganov, Leclair et Moriconi [80, 81]. Ces auteurs ont déterminé la fonction β d´un modèle avec des interactions anisotropes de type courant-courant dans un certain schéma de prescription minimal comme je l´ai déjà mentionné dans le chapitre III. Le modèle (IV.5) peut également s´interprété comme une interaction courant-courant anisotrope associée au schéma de brisure SO(6) $\rightarrow$ SO(3)$\times$ SO(3). J´ai appliqué cette approche de Gerganov *et al.* [80, 81] dans ce cadre (voir annexe B) et obtenu l´existence d´une région où la symétrie SO(6) est bien restaurée par les interactions.

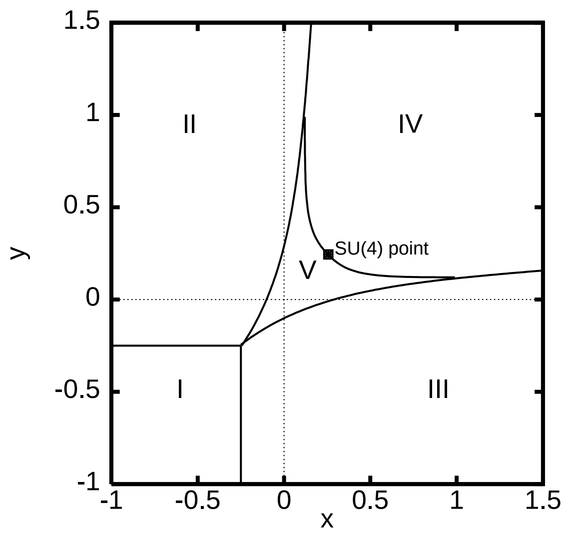


FIG. IV.3: Diagramme de phase du modèle spin-orbital obtenu par DMRG [106] ; $x = J_2/K$ et $y = J_1/K$.

Le diagramme de phase du modèle spin-orbital (IV.1) a été obtenu numériquement par des calculs de DMRG [107, 106] et il est présenté dans la figure IV.3. La phase I est une phase ferromagnétique pour les degrés de liberté de spin et orbitaux. Dans la phase II, les degrés de liberté orbitaux s´ordonnent ferromagnétiquement alors que ceux de spin sont critiques (criticalité d´une chaîne de spin $\frac{1}{2}$) et vice versa dans la phase III. La phase IV est la phase de dimérisation alternée de la figure (IV.1) tandis que la phase V correspond à une région critique avec une charge centrale $c = 3$. L´existence de cette criticalité étendue dans *toute une phase* et non en un point est remarquable. Elle résulte en particulier de la compétition entre les fluctuations quantiques et la frustration du modèle (IV.1) quand $K > 0$. Initialement, le diagramme de phase du modèle spin-orbital (IV.1) a été obtenu par DMRG par Pati *et al.* [98]. La phase critique V était réduite dans cette étude à une simple ligne avec $J_1 = J_2$. L´article d´ Azaria *et al.* [24] expliquait l´existence de cette criticalité dans le cas $J_1 = J_2$ par l´approche de bosonisation. Une autre étude de DMRG [107] a clairement montré l´existence de cette phase de criticalité étendue et a présenté le diagramme de phase de la figure IV.3. Cette phase a été expliquée théoriquement dans deux études indépendantes et simultanées : celle de Itoi, Qin et Affleck [106] et mon travail brièvement résumé ici et présenté dans l´article ci-joint. Il faut également souligner que Itoi *et al.* [106] ont effectué une étude de DMRG qui est en parfait accord avec les résultats de la référence [107] et donc en contradiction avec Pati *et al.* [98].

Je me suis également intéressé à l´effet d´un champ magnétique, se couplant directement aux degrés de liberté de spin, sur le diagramme de phase du modèle de spin-orbital au voisinage du point SU(4) [3]. Par une approche de groupe de renormalisation à une boucle, j´ai alors montré que le champ magnétique se couple indirectement aux degrés liberté orbitaux par l´intermédiaire du couplage spin-orbital du modèle (IV.1). La théorie effective de basse énergie se sépare en deux parties, une standard de type liquide de Luttinger pour les degrés de liberté de spin, et une seconde, faisant intervenir les degrés de liberté orbitaux notamment, qui correspond à un modèle de Gross-Neveu avec une symétrie SO(4) :

$$\mathcal{H}_{\mathrm{H}} \simeq -\frac{iv_*}{2} \sum_{a=1}^{4} \left(\xi_R^a \partial_x \xi_R^a - \xi_L^a \partial_x \xi_L^a\right) + g_*(H) \left(\sum_{a=1}^{4} \xi_R^a \xi_L^a\right)^2, \qquad \text{(IV.7)}$$

avec une constante de couplage g_* dont le signe peut être adjusté en fonction du champ appliqué. La forme de cette théorie effective de basse énergie dans le modèle spin-orbital sous champ au voisinage du point SU(4) a également été obtenue de façon simultanée par Lee et Lee [108]. Le champ magnétique appliqué sur les degrés de liberté de spin peut ainsi avoir une influence importante sur les degrés orbitaux en donnant lieu à une transition de phase quantique dans le secteur orbital en particulier quand la constante de couplage g_* change de signe. Il serait ainsi intéressant de mettre en évidence cet effet, par exemple numériquement.

[3] L´effet d´un champ magnétique dans le modèle de spin-orbital (IV.1) dans le couplage faible $J_{1,2} \ll K$ a été étudié par Orignac, Citro et Andrei [101] avec en particulier la stabilisation sous champ d´une phase critique de type Luttinger à deux composantes avec une charge centrale $c = 2$.

Effect of symmetry-breaking perturbations in the one-dimensional SU(4) spin-orbital model

P. Azaria and E. Boulat
Laboratoire de Physique Théorique des Liquides, Université Pierre et Marie Curie, 4 Place Jussieu, 75252 Paris, France

P. Lecheminant
Laboratoire de Physique Théorique et Modélisation, Université de Cergy–Pontoise, 5 Mail Gay-Lussac, Neuville sur Oise, 95301 Cergy–Pontoise Cedex, France

(Received 18 October 1999; revised manuscript received 22 December 1999)

We study the effect of symmetry-breaking perturbations in the one-dimensional SU(4) spin-orbital model. We allow the exchange in spin (J_1) and orbital (J_2) channel to be different and thus reduce the symmetry to $SU(2)\otimes SU(2)$. A magnetic field h along the S^z direction is also applied. Using the formalism developed by Azaria *et al.* [Phys. Rev. Lett. **83**, 624 (1999)] we extend their analysis of the isotropic $J_1=J_2$, $h=0$ case and obtain the low-energy effective theory near the SU(4) point in the generic case $J_1\neq J_2$, $h\neq 0$. In zero magnetic field, we retrieve the same qualitative low-energy physics as in the isotropic case. In particular, the isotropic massless behavior found on the line $J_1=J_2<K/4$ extends in a large anisotropic region. We discover, however, that the anisotropy plays its trick in allowing nontrivial scaling behaviors of the physical quantities. For example, the mass gap M has two different scaling behaviors depending on the anisotropy. In addition, we show that in some regions, the anisotropy is responsible for anomalous finite-size effects and may change qualitatively the shape of the computed critical line in a finite system. When a magnetic field is present the effect of the anisotropy is striking. In addition to the usual commensurate-incommensurate phase transition that occurs in the spin sector of the theory, we find that the field may induce a second transition of the KT type in the remaining degrees of freedom to which it does *not* couple directly. In this sector, we find that the effective theory is that of an SO(4) Gross-Neveu model with an h-dependent coupling that may change its sign as h varies.

I. INTRODUCTION

In past years, there has been an intense interest devoted to one-dimensional spin-orbital models.[1] The main reason stems from the recent discovery of the new quasi-one-dimensional spin gapped materials $Na_2Ti_2Sb_2O$ (Ref. 2) and NaV_2O_5.[3] It is believed that the unusual magnetic properties observed in these compounds should be explained by a simple two-band Hubbard models at *quarter* filling. At this filling, and in the large Coulomb repulsion the effective Hamiltonian simplifies greatly and is equivalent to a model of two interacting spin one-half Heisenberg models:[4,5]

$$\mathcal{H}=\sum_i J_1\vec{S}_i\cdot\vec{S}_{i+1}+J_2\vec{T}_i\cdot\vec{T}_{i+1}+K(\vec{S}_i\cdot\vec{S}_{i+1})(\vec{T}_i\cdot\vec{T}_{i+1}), \tag{1}$$

where $\vec{S}_i$ and $\vec{T}_i$ are spin-1/2 operators that represent spin and orbital degrees of freedom at each site i and $J_{1(2)}$ and K are positive. It is important to notice that Eq. (1) is not only SU(2) invariant in $\vec{S}$ space but also in $\vec{T}$ space. For generic couplings $J_{1(2)}$ and K, the Hamiltonian (1) is $SU(2)_s\otimes SU(2)_t$ symmetric. Two particular cases are of interest. First, when $J_1=J_2$ there is an additional Z_2 symmetry in the exchange between $\vec{S}_i$ and $\vec{T}_i$. The other important case is when $J_1=J_2=K/4$ in which case the Hamiltonian is SU(4) invariant.[6] In fact, the Hamiltonian (1) is a simplified version of the most general case. Indeed, depending on the microscopic couplings, there can be other terms that break the SU(2) symmetry in both spin and orbital sectors. The choice of studying Eq. (1) is dictated by the fact that since it retains some symmetries it is a simple starting point from which one can expect to gain some insight before tackling with the more general case. In this respect, the model (1) describes the simplest physically relevant symmetry breaking pattern $SU(4)\rightarrow SU(2)_s\otimes SU(2)_t$.

The Hamiltonian (1) can be interpreted in terms of a two-leg spin ladder coupled by a four spins interaction. Such an interaction can be generated either by phonons or, in the doped state, by conventional Coulomb repulsion between the holes.[7] Some of the properties of Eq. (1) are well established in the *weak* coupling limit. In the limit $K\ll J_{1(2)}$, the Hamiltonian (1) describes a non-Haldane spin liquid where magnon excitations are incoherent.[7]

The strong coupling regime, $K\sim J_{1(2)}$, has just begun to be investigated.[5,6,8–10] From the theoretical point of view the situation is awkward. Indeed, as stated above, at the special point $J_1=J_2=K/4$, the Hamiltonian (1) has an enlarged SU(4) symmetry[6] and is exactly solvable by the Bethe ansatz.[11] The model is critical with *three* gapless bosonic modes and flows in the infrared towards the Wess-Zumino-Novikov-Witten (WZNW) model $SU(4)_1$.[12] It is conformally invariant with the central charge $c=3$. Therefore, there should be a *qualitative* change in the physical behavior of Eq. (1) when going from small to large K. From the theoretical point of view this situation is striking since this means that one cannot go continuously from weak to strong coupling. This is a manifestation of the Zamolodchikov c-theorem[13] that states that starting at $K=0$ with two decoupled $S=1/2$ chains with the central charge $c=2$ (two gapless bosonic modes) one cannot flow, in the renormalization group (RG) sense, towards the SU(4) point which has $c=3$ (three gapless bosonic modes). Very recently, a new approach to tackle with the strong coupling regime has been developed by Azaria *et al.*[14] The idea is to start from the strong coupling fixed point $\mathrm{SU}(4)_1$ and to perturb around it.

This strategy has been applied to the symmetric line $J = J_1 = J_2$. It was shown that when $J < K/4$ a small deviation from the SU(4) point is irrelevant and thus the low energy physics is governed by the $\mathrm{SU}(4)_1$ fixed point. In contrast, when $J > K/4$ the interaction is relevant and a gap opens in the spectrum. The system dimerizes with alternating spin and orbital singlets. In addition it was argued that the SU(4) symmetry was restored at long distance and that the low energy effective Hamiltonian was that of the SO(6) Gross-Neveu (GN) model. The low-lying *coherent* excitations were then shown to be fermions that transform as an antisymmetric tensor of rank two of SU(4). These excitations are coherent with wave vector near $\pi/2$.

The purpose of this work is to extend the analysis to the asymmetric case ($J_1 \neq J_2$) and to inquire how anisotropy modifies the low energy physics described above. This paper is organized as follows. In Sec. II we present the tools that are necessary to explore the vicinity of the $\mathrm{SU}(4)_1$ fixed point and derive the effective low-energy theory associated with Eq. (1). A detailed renormalization group analysis is then presented in Sec. III. We obtain the phase diagram in the plane (J_1, J_2) and discuss the asymptotic behaviors of the mass gap M. A discussion on crossover effects linked to the anisotropy is also presented. In Sec. IV we investigate the effect of a magnetic field on the anisotropic model. Finally in Sec. V we summarize our results and present some technical details relative to the computation of the mass gap in the Appendix.

II. THE LOW ENERGY EFFECTIVE FIELD THEORY

A. The SU(4) Heisenberg chain

Our approach is very similar to the description of the $S = 1/2$ Heisenberg spin chain at low energy from the spin sector of the repulsive Hubbard model at half filling.[12] To this end, let us introduce the SU(4) Hubbard model with $U > 0$:

$$\mathcal{H}_U = \sum_{ia\sigma} (-t c^\dagger_{i+1a\sigma} c_{ia\sigma} + \mathrm{H.c.}) + \frac{U}{2} \sum_{iab\sigma\sigma'} n_{ia\sigma} n_{ib\sigma'} (1 - \delta_{ab}\delta_{\sigma\sigma'}). \tag{2}$$

Here $c^\dagger_{ia\sigma}$ denotes electron creation with channel (orbital) $a = 1,2$ and spin $\sigma = \uparrow, \downarrow$ at the ith site. The occupation number is defined by $n_{ia\sigma} = c^\dagger_{ia\sigma} c_{ia\sigma}$. In the limit of large positive U, and at *quarter* filling, it is not difficult to show that Eq. (2) reduces to Eq. (1) with the identification

$$\vec{S}_i = \frac{1}{2} \sum_a c^\dagger_{ia\alpha} \vec{\sigma}_{\alpha\beta} c_{ia\beta},$$

$$\vec{T}_i = \frac{1}{2} \sum_\alpha c^\dagger_{ia\alpha} \vec{\tau}_{ab} c_{ib\alpha}, \tag{3}$$

where $\vec{\sigma}$ (respectively $\vec{\tau}$) are the Pauli matrices acting in the spin (respectively orbital) space. The low energy physics can be described in terms of right movers $R_{a\sigma}$ and left movers $L_{a\sigma}$ fermions which correspond to the lattice fermion $c_{ia\sigma}$ in the continuum limit:

$$\frac{c_{ia\sigma}}{\sqrt{a_0}} \simeq R_{a\sigma}(x)\exp(ik_F x) + L_{a\sigma}(x)\exp(-ik_F x), \quad x = ia_0, \tag{4}$$

where a_0 is the lattice spacing and the Fermi wave vector is defined by $k_F = \pi/4a_0$. At this point we bosonize and introduce four chiral bosonic fields $\Phi_{a\sigma R,L}$ using the Abelian bosonization of Dirac fermions:[15]

$$R_{a\sigma} = \frac{\kappa_{a\sigma}}{\sqrt{2\pi a_0}} \exp(i\sqrt{4\pi}\Phi_{a\sigma R}),$$

$$L_{a\sigma} = \frac{\kappa_{a\sigma}}{\sqrt{2\pi a_0}} \exp(-i\sqrt{4\pi}\Phi_{a\sigma L}), \tag{5}$$

where the bosonic fields satisfy the following commutation relation:

$$[\Phi_{a\sigma R}, \Phi_{b\sigma' L}] = \frac{i}{4} \delta_{ab}\delta_{\sigma\sigma'} \tag{6}$$

so that $\{R_{a\sigma}(x), L_{a\sigma}(y)\} = 0$. The anticommutation between fermions with different spin-channel indexes is insured by the presence of Klein factors (here Majorana fermions) $\kappa_{a\sigma}$ with the following anticommutation rule:

$$\{\kappa_{a\sigma}, \kappa_{b\sigma'}\} = 2\delta_{ab}\delta_{\sigma\sigma'}. \tag{7}$$

As in the solution of the two-channel Kondo effect by Abelian bosonization[16] it is suitable to introduce the physically transparent basis:

$$\Phi_c = \frac{1}{2}(\Phi_{1\uparrow} + \Phi_{1\downarrow} + \Phi_{2\uparrow} + \Phi_{2\downarrow}),$$

$$\Phi_s = \frac{1}{2}(\Phi_{1\uparrow} - \Phi_{1\downarrow} + \Phi_{2\uparrow} - \Phi_{2\downarrow}),$$

$$\Phi_f = \frac{1}{2}(\Phi_{1\uparrow} + \Phi_{1\downarrow} - \Phi_{2\uparrow} - \Phi_{2\downarrow}),$$

$$\Phi_{sf} = \frac{1}{2}(\Phi_{1\uparrow} - \Phi_{1\downarrow} - \Phi_{2\uparrow} + \Phi_{2\downarrow}). \tag{8}$$

In this new basis, the total charge degree of freedom is described by the bosonic field Φ_c while the other "spin-orbital" degrees of freedom, are faithfully bosonized by the three bosonic fields $\Phi_s, \Phi_f, \Phi_{sf}$. It is now straightforward to obtain the continuum limit of the Hubbard Hamiltonian (2):

$$\mathcal{H}_U = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_{sf}, \tag{9}$$

where

$$\mathcal{H}_c=\frac{v_F}{2}((\partial_x\Phi_c)^2+(\partial_x\Theta_c)^2)+\frac{3Ua_0}{2\pi}(\partial_x\Phi_c)^2, \quad (10)$$

and

$$\mathcal{H}_{sf}=\sum_{a=s,f,sf}\left(\frac{v_F}{2}((\partial_x\Phi_a)^2+(\partial_x\Theta_a)^2)-\frac{Ua_0}{2\pi}(\partial_x\Phi_a)^2\right)$$
$$+\frac{U}{\pi^2 a_0}(\cos\sqrt{4\pi}\Phi_s\cos\sqrt{4\pi}\Phi_f$$
$$+\cos\sqrt{4\pi}\Phi_f\cos\sqrt{4\pi}\Phi_{sf}$$
$$+\cos\sqrt{4\pi}\Phi_s\cos\sqrt{4\pi}\Phi_{sf}). \quad (11)$$

As in the SU(2) Heisenberg chain, spin and charge degrees of freedom separate. Notice however that at this order in U there are no umklapp terms in the charge sector since we are at quarter filling and the $4k_F$ contribution to the effective Hamiltonian oscillates. Umklapp terms will arise at higher order in perturbation theory and will be responsible for a Mott transition at a finite value of $U=U_c$.[17] Assuming that $U\gg U_c$, we focus now on the spin-orbital sector.

The interaction term in $\mathcal{H}_{sf}$ has scaling dimension 2 and is therefore marginal. This term is nothing but the SU(4) current-current interaction. The 15 $SU(4)_1$ currents $\mathcal{J}_R^a$ and $\mathcal{J}_L^a$ can be expressed in terms of the three bosonic fields Φ_s, Φ_f and Φ_{sf} and the spin-orbital part of the Hamiltonian (9) takes the form

$$\mathcal{H}_{sf}=\frac{2\pi v_s}{5}\sum_{a=1,15}(\mathcal{J}_R^a\mathcal{J}_R^a+\mathcal{J}_L^a\mathcal{J}_L^a)+2g_s\sum_{a=1,15}\mathcal{J}_R^a\mathcal{J}_L^a, \quad (12)$$

where

$$g_s=-Ua_0,$$
$$v_s=v_F-Ua_0/2\pi. \quad (13)$$

The first term in Eq. (12) is just the Sugawara form of the $SU(4)_1$ WZNW model while the second term is the marginal current-current interaction. When $U>0$, $g_s<0$, the current-current interaction $\mathcal{J}_R^a\mathcal{J}_L^a$ is thus irrelevant, as a consequence the spin orbital sector is described by the $SU(4)_1$ WZNW model.[12]

B. Majorana representation and the SO(6) Gross-Neveu model

As first emphasized by Shelton *et al.*[18] in their study of the two-leg spin-1/2 ladders it is very convenient to formulate spin ladder problems in terms of real (Majorana) fermions. This can be done by refermionizing the three bosonic fields Φ_s, Φ_f, and Φ_{sf}. Let us introduce the six Majorana fermions $\xi^a, a=1-6$ as follows:

$$(\xi^1+i\xi^2)_{R(L)}=\frac{\eta_1}{\sqrt{\pi a_0}}\exp(\pm i\sqrt{4\pi}\Phi_{sR(L)}), \quad (14)$$

$$(\xi^3+i\xi^4)_{R(L)}=\frac{\eta_2}{\sqrt{\pi a_0}}\exp(\pm i\sqrt{4\pi}\Phi_{fR(L)}),$$

$$(\xi^5+i\xi^6)_{R(L)}=\frac{\eta_3}{\sqrt{\pi a_0}}\exp(\pm i\sqrt{4\pi}\Phi_{sfR(L)}),$$

$$\partial_x\Phi_s=i\sqrt{\pi}(\xi_R^1\xi_R^2+\xi_L^1\xi_L^2),$$

$$\partial_x\Phi_f=i\sqrt{\pi}(\xi_R^3\xi_R^4+\xi_L^3\xi_L^4),$$

$$\partial_x\Phi_{sf}=i\sqrt{\pi}(\xi_R^5\xi_R^6+\xi_L^5\xi_L^6),$$

where η_i are Klein factors. With all these relations at hand, one can rewrite the Hamiltonian (11) in terms of six Majorana fermions:

$$\mathcal{H}_{sf}=-\frac{iv_s}{2}\sum_{a=1}^{6}(\xi_R^a\partial_x\xi_R^a-\xi_L^a\partial_x\xi_L^a)+g_s\sum_{i<j}\kappa_i\kappa_j, \quad (15)$$

where we have introduced the energy density of the different Ising models: $i\epsilon_a=\kappa_a=\xi_R^a\xi_L^a$. The Hamiltonian (15) is nothing but that of the SO(6) GN model with a marginally *irrelevant* interaction when $U>0$. Thus in the far infrared the six Majorana fermions decouple and remain massless. This is the $SO(6)_1$ fixed point.

The above result assumes that U is small and the question that naturally arises is whether it can be extended to large values of U where Eq. (2) reduces to Eq. (1). For exactly the same reasons as for the SU(2) Heisenberg chain the answer is positive. We know from the exact solution that the SU(4) model is critical with three massless bosonic modes or equivalently six massless Majorana fermions. We know from conformal field theory that the fixed point Hamiltonian can only be the $SU(4)_1\sim SO(6)_1$ WZNW model. The marginal interaction $\Sigma_{i<j}\kappa_i\kappa_j$ is the only one that respects both the SO(6) symmetry as well as translation invariance. Therefore in the vicinity of the fixed point the SU(4) Heisenberg model will be given by

$$\mathcal{H}=-\frac{iu_s}{2}\sum_{a=1}^{6}(\xi_R^a\partial_x\xi_R^a-\xi_L^a\partial_x\xi_L^a)+2G_3\sum_{i<j}\kappa_i\kappa_j, \quad (16)$$

where the spin velocity u_s and the coupling $G_3<0$ are unknown and nonuniversal parameter that could be extracted from the exact solution. The only thing that happens when going from small U to large U is a renormalization of the g_s and v_s.

The Majorana description used here is extremely useful to understand the symmetry properties of our model. Indeed, for example, one can define the spin and orbital triplets:

$$\vec{\xi}_{sR(L)}=(\xi^2,\xi^1,\xi^6)_{R(L)},$$
$$\vec{\xi}_{tR(L)}=(\xi^4,\xi^3,\xi^5)_{R(L)}. \quad (17)$$

These quantities transform like a vector under spin $SO(3)_s$ and orbital $SO(3)_t$ rotations. These correspond to the $SU(2)_s$ and $SU(2)_t$ transformations acting on the operators $\vec{S}$ and $\vec{T}$, respectively.

To get a complete description of the $SO(6)_1$ fixed point one needs the continuum expressions for the effective spin and orbital densities in terms of the Majorana fermions:

$$\vec{S}=\vec{J}_{sR}+\vec{J}_{sL}+\exp(i\pi x/2a_0)\vec{\mathcal{N}}_s+\text{H.c.}+(-1)^{x/a_0}\vec{n}_s(x),$$

$$\vec{T}=\vec{J}_{tR}+\vec{J}_{tL}+\exp(i\pi x/2a_0)\vec{\mathcal{N}}_t+\text{H.c.}+(-1)^{x/a_0}\vec{n}_t(x), \tag{18}$$

where $\vec{J}_{s,t}$ is the uniform, $k=0$, part and $\vec{\mathcal{N}}_{s,t}$ and $\vec{n}_{s,t}$ are the $2k_F=\pi/2a_0$ and $4k_F=\pi/a_0$ contributions. Notice that in contrast with the SU(2) Heisenberg chain, the spin density has three oscillating components. The reason for this comes from conformal field theory. Indeed the different oscillating components of the spin density are *primary* fields of the $SU(4)_1$ WZNW model. There are three of them with scaling dimensions (3/4,1,3/4).[19] They all belong to the representations (building blocks) of SU(4) with Young tableau consisting of a $(a=1,2,3)$ boxes and one column. In particular the staggered components at $4k_F=\pi$, $\vec{n}_{s,t}$, are components of an antisymmetric tensor of rank 2.

The uniform components express in terms of the Majorana fermions as follows:

$$\vec{J}_{sR(L)}=-\frac{i}{2}\vec{\xi}_{sR(L)}\wedge\vec{\xi}_{sR(L)},$$

$$\vec{J}_{tR(L)}=-\frac{i}{2}\vec{\xi}_{tR(L)}\wedge\vec{\xi}_{tR(L)}. \tag{19}$$

Notice that in contrast with the SU(2) Heisenberg chain, the uniform part of the spin densities are $SU(2)_2$ currents. The expressions for the $4k_F=\pi/a_0$ densities are given by

$$\vec{n}_s=iB\vec{\xi}_{sR}\wedge\vec{\xi}_{sL},$$

$$\vec{n}_t=iB\vec{\xi}_{tR}\wedge\vec{\xi}_{tL}, \tag{20}$$

where B is a nonuniversal constant. Their scaling dimension at the $SO(6)_1$ fixed point is $\Delta_\pi=1$. Both densities (19) and (20) are rather simple when expressed in terms of the Majorana fermions. This is not the case with the $2k_F=\pi/2a_0$ densities $\vec{\mathcal{N}}_{s,t}$ that are nonlocal in the Majorana fermions ξ^a. Indeed they involve order and disorder operators σ_a and μ_a of the six Ising models that are associated with the six Majorana fermions. The expressions of both $\vec{\mathcal{N}}_{s,t}$ are lengthy and we shall give here only the z component that will be sufficient for our purpose:

$$\mathcal{N}_s^z=A(i\mu_1\mu_2\sigma_3\sigma_4\sigma_5\sigma_6+\sigma_1\sigma_2\mu_3\mu_4\mu_5\mu_6),$$

$$\mathcal{N}_t^z=A(i\sigma_1\sigma_2\mu_3\mu_4\sigma_5\sigma_6+\mu_1\mu_2\sigma_3\sigma_4\mu_5\mu_6), \tag{21}$$

where A is also a nonuniversal constant. Since at the free fermion point, the order and disorder operators have scaling dimension 1/8, the $2k_F$ densities $\vec{\mathcal{N}}_{s,t}$ have the scaling dimension $\Delta_{\pi/2}=3/4$.

This completes the continuum description at the SU(4) point. The theory is critical and flows to the $SO(6)_1$ fixed point. There is a marginally irrelevant correction whose magnitude is nonuniversal and is given by the unknown coupling $G_3<0$. This is in complete agreement with the non-Abelian bosonization approach of Affleck.[12] With the continuum expressions of the spin and orbital operators at the SU(4) point in terms of the six Majorana fermions and the associated Ising models we shall be able to investigate the properties of Eq. (1) close to the SU(4) symmetric model. But before moving to this point, let us stress that the effective theory depends on three unknown parameters A and B and G_3 which can be in principle extracted from numerical studies. In the following, we shall assume that the above description still holds for small deviations of the SU(4) point. The only modification being a renormalization of the nonuniversal constants A, B and G_3.

C. The $SU(2)\otimes SU(2)$ symmetry-breaking perturbation

We shall now derive the effective low energy theory associated with Eq. (1) for arbitrary values of J_1 and J_2 close to the SU(4) invariant point given by $J_1=J_2=K/4$. To this end, let us parametrize the couplings as follows:

$$J_1=\frac{K}{4}+G_1,$$

$$J_2=\frac{K}{4}+G_2, \tag{22}$$

where both G_1 and G_2 are much smaller than K. The Hamiltonian (1) can then be written as

$$\mathcal{H}=\mathcal{H}_{SU(4)}+G_1\sum_i \vec{S}_i\cdot\vec{S}_{i+1}+G_2\sum_i \vec{T}_i\cdot\vec{T}_{i+1}. \tag{23}$$

Using the low energy description of the spin-orbital operators (19), (20), and (21), one can expand Eq. (23) around the $SO(6)_1$ fixed point:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}=&-\frac{iu_s}{2}(\vec{\xi}_{sR}\cdot\partial_x\vec{\xi}_{sR}-\vec{\xi}_{sL}\cdot\partial_x\vec{\xi}_{sL})+g_1(\kappa_1+\kappa_2+\kappa_6)^2\\&-\frac{iu_t}{2}(\vec{\xi}_{tR}\cdot\partial_x\vec{\xi}_{tR}-\vec{\xi}_{tL}\cdot\partial_x\vec{\xi}_{tL})+g_2(\kappa_3+\kappa_4+\kappa_5)^2\\&+2G_3(\kappa_1+\kappa_2+\kappa_6)(\kappa_3+\kappa_4+\kappa_5),\end{aligned} \tag{24}$$

where

$$g_1=G_1+G_3,$$

$$g_2=G_2+G_3, \tag{25}$$

and the two renormalized velocities u_s and u_t are given by

$$u_s=v_s+2G_1/\pi,$$

$$u_t=v_s+2G_2/\pi. \tag{26}$$

In the above equations and in the remaining of this paper, we include the effect of the $4k_F$ components of the spin and orbital densities in a redefinition of the couplings: $G_{(1,2)}\rightarrow(1+B^2)G_{(1,2)}$. The Hamiltonian (24) describes two marginally coupled SO(3) Gross-Neveu models: one in the spin channel described by the three Majorana $\vec{\xi}_s$ and one in the orbital channel described by the three Majorana $\vec{\xi}_t$. The situation at hand is to be contrasted another time with the one encountered in the study of spin ladders. In the latter models deviation from criticality leads, in general, to relevant perturbation and a gap always opens independently of the sign of the couplings. There are however notable exceptions where frustration plays its trick. This is the case of some three-leg frustrated ladders where for some particular values of the couplings only marginal interaction remains in the effective action. As a result a nontrivial critical state, the so-called ''chirally stabilized'' liquid, shows off.[20] In the model the situation is even more striking since we find only marginal interactions in a finite region of the couplings. This is mainly due to the fact that the frustation is maximal in the strong coupling region. A direct consequence of the marginality of all the interactions is that we expect the phase diagram to result from a delicate balance between the different terms entering in Eq. (24). This is why it is now worth discussing the effect of the three different terms in Eq. (24).

Consider first the case where $G_3=0$. Then we are left with the two decoupled $\mathrm{SO}(3)_s$ and $\mathrm{SO}(3)_t$ GN models which are exactly solvable. At issue is the sign of G_1 and G_2. When $G_1>0$ and $G_2>0$ a gap opens in both spin and orbital channels. The spectrum consists of kinks and antikinks (there are no fermions).[21] When $G_1<0$ and $G_2<0$, the interaction is irrelevant and the model flows towards the isotropic $\mathrm{SO}(6)_1\sim\mathrm{SU}(4)_1$ fixed point with the central charge $c=3$. When $G_1G_2<0$ one of the SO(3) GN models will become massive while the other one will flow towards the $\mathrm{SO}(3)_1$ fixed point. The Hamiltonian will remain critical with *three* massless Majorana fermions leaving the whole system with the central charge $c=3/2$.

Now the physically relevant question is whether or not this scheme survives a small negative G_3. Indeed, it would be not correct to neglect the last term in Eq. (24). First of all, from the point of view of the lattice Hamiltonian (23), the Hamiltonian (24) has to be thought as the effective Hamiltonian obtained by integrating out high energy modes up to a scale where one sits close enough to the $\mathrm{SO}(6)_1$ fixed point where the continuum limit can be taken. Thus, generically G_3 is not zero. The second reason is that all other interactions are *marginal*. In such a case, it is well known that operators that are naively irrelevant may become dangerous and strongly modify the physics in the infrared. Therefore, even though $G_3<0$, one has to keep it and analyze with care Eq. (24) with all couplings different from zero. As we shall see, the strong tendency to the $\mathrm{SO}(3)_1$ criticality in the regions $G_1G_2<0$ will be spoiled in most of the parameter space. There will be though still a finite region where the Hamiltonian will be critical but with an approximate SO(6) symmetry.

III. RENORMALIZATION GROUP ANALYSIS

A. The renormalization group flow

The RG equations for the couplings entering in Eq. (24) are given at leading order by

$$\dot{g}_1=\frac{1}{\pi u_s}g_1^2+\frac{3}{\pi u_t}G_3^2,$$

$$\dot{g}_2=\frac{1}{\pi u_t}g_2^2+\frac{3}{\pi u_s}G_3^2,$$

$$\dot{G}_3=\frac{2G_3}{\pi}\left(\frac{g_1}{u_s}+\frac{g_2}{u_t}\right). \tag{27}$$

In the above equation, $\dot{G}$ means $\partial G/\partial t$ where $t=\log(\lambda)$ is the RG scale. It is more convenient to express the set of Eqs. (27) in terms of the couplings that enter in the lattice Hamiltonian (23):

$$\dot{G}_1=G_1^2-2G_2G_3,$$

$$\dot{G}_2=G_2^2-2G_1G_3,$$

$$\dot{G}_3=2G_3(G_1+G_2+2G_3), \tag{28}$$

where, for simplicity we have made the following redefinition:

$$G_1\rightarrow 1/\pi\sqrt{u_su_t}(\alpha G_1-(1-\alpha)G_3),$$

$$G_2\rightarrow 1/\pi\sqrt{u_su_t}(1/\alpha G_2-(1-1/\alpha)G_3),$$

$$G_3\rightarrow 1/\pi\sqrt{u_su_t}G_3, \tag{29}$$

with $\alpha=\sqrt{u_t/u_s}$. At the leading order, the velocities u_s and u_t also renormalize:

$$\dot{u}_s=-6u_sG_3^2\mathcal{I}\left(\frac{u_t}{u_s}\right),$$

$$\dot{u}_t=-6u_tG_3^2\mathcal{I}\left(\frac{u_s}{u_t}\right), \tag{30}$$

where

$$\mathcal{I}(x)=\frac{1-x}{1+x}. \tag{31}$$

The RG equations (28) and (30) can be exactly solved and reduce to a single differential equation. To show this let us introduce the following variables:

$$\mu=G_1G_2+G_1G_3+G_2G_3,$$

$$d=G_1-G_2,$$

$$s=G_1+G_2+2G_3. \tag{32}$$

Equation (28) and (30) greatly simplify to

$$\dot{\mu}=\mu s,$$

$$\dot{d}=ds,$$

$$\dot{G}_3=2G_3 s, \tag{33}$$

and

$$\dot{u}_s-\dot{u}_t=-6G_3^2(u_s-u_t),$$

$$u_s u_t=\text{const.} \tag{34}$$

While the meaning of both s and d is clear, the physical interpretation of the variable μ is not straightforward. As we shall see in the following, μ measures the departure from criticality.

The solution of both Eqs. (33) and (34) are then easily obtained:

$$\mu(t)=\mu(0)X(t),$$

$$d(t)=d(0)X(t),$$

$$G_3(t)=G_3(0)X^2(t),$$

$$(u_s-u_t)(t)=(u_s-u_t)(0)\exp\left(-6G_3^2(0)\int_0^t X^4(\tau)d\tau\right),$$

$$(u_s u_t)(t)=(u_s u_t)(0), \tag{35}$$

where

$$X(t)=\exp\int_0^t s(\tau)d\tau \tag{36}$$

is the solution of the differential equation:

$$\left(\frac{\dot{X}}{X}\right)^2=P(X). \tag{37}$$

In the latter equation $P(X)$ is a fourth order polynomial that depends on the initial conditions of the flow:

$$P(X)=4G_3^2(0)X^4+d^2(0)X^2+4\mu(0)X. \tag{38}$$

Once the solution $X(t)$ of Eq. (37) is known, the behavior of the RG flow is completely determined. In particular the time evolution of couplings $G_1(t)$ and $G_2(t)$ is given by

$$G_{(1,2)}(t)=\frac{1}{2}(\epsilon(s)\sqrt{P[X(t)]}-2G_3(0)X^2(t)\pm d(0)X(t)), \tag{39}$$

where $\epsilon(s)=\text{sign}(s)$.

As in the XXZ model we distinguish *three* different phases A, B, and C that are separated by the two surfaces defined by $\mu=0$.

The A phase. There one has $\mu(0)>0$ and $s(0)>0$ and $X(t)\to\infty$ as $t\to\infty$ [see Fig. 1(a)]. All couplings are relevant and a gap opens in the spectrum. In addition, the velocities $u_s(t)$ and $u_t(t)$ goes to a fixed value $u_s^*=u_t^*$. Looking in more details in the large t behavior of the couplings, one finds that $G_1(t)\sim G_2(t)\sim -2G_3(t)$ so that the effective interaction in the far infrared takes the suggestive form: $\sim[(\kappa_1+\kappa_2+\kappa_6)-(\kappa_3+\kappa_4+\kappa_5)]^2$ which after the transformation $\vec{\xi}_{sR}\to\vec{\xi}_{sR}$, $\vec{\xi}_{sL}\to-\vec{\xi}_{sL}$ acquires a manifestely SO(6) invariant form $\sim(\Sigma_1^6\kappa_a)^2$. One may therefore be tempted to conclude that the SO(6) symmetry is restored in the far infrared and that the low energy spectrum of the Hamiltonian would be approximatively that of the SO(6) GN model. However, as pointed out by Azaria, Lecheminant, and Tsvelik,[22] one cannot conclude on the basis of perturbation theory alone. In fact looking at the flow in the infrared is not sufficient and can be misleading. The point is that in the A phase, since $X(t)\to 0$ as $t\to-\infty$ all couplings go to zero in the ultraviolet and the theory is asymptotically free. From the field theoretical point of view this means that a well defined renormalized theory with *three* different renormalized couplings G_{1R}, G_{2R}, and G_{3R} exists.[24] Therefore, it is most likely that the SO(6) symmetry is *not* restored in the A phase. The situation here is very similar to the XXZ model where in the A phase (the Ising region), though there is an apparent SU(2) symmetry restoration in the far infrared, the *exact* solution tells us that this is not the case.[23]

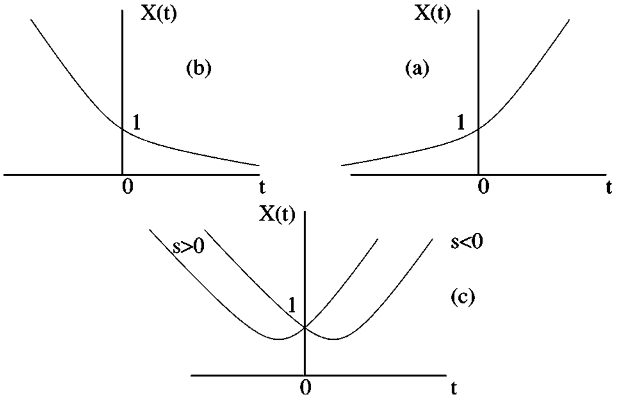


FIG. 1. RG flows for the variable $X(t)$ in the different phases A, B, and C. In the phase C, $X(t)$ reaches a minimum value X^* at a scale t^*. When $s(0)<0$, the minimum is reached for a physical time $t^*>0$.

The B phase. There one has $\mu(0)>0$ and $s(0)<0$ and the flow in the X variable is reversed [Fig. 1(b)]. All couplings goes to zero in the infrared and the interaction is irrelevant. The six Majorana fermions are massless and the model is critical with the central charge $c=6\times 1/2=3$. However, for generic values of the initial conditions $[d(0)\neq 0]$, the fixed point Hamiltonian does not have the SO(6) symmetry. Indeed, the velocities in both spin and orbital sector have different fixed point values $u_s^*\neq u_t^*$ so that the symmetry at the fixed point is $\text{SO}(3)_s\otimes\text{SO}(3)_t$. It is only on the symmetric line ($G_1=G_2$) that the fixed point symmetry is SO(6).

The C phase. There one has $\mu(0)<0$ and s can have both signs. As seen in Fig. 1(c), $X(t)\to\infty$ when both $t\to\pm\infty$. The theory is not asymptotically free neither in the infrared *nor* in the ultraviolet. Though one certainly expects that a gap opens in the spectrum, perturbation theory is pathological.[24] Indeed, from the field theoretical point of view, the lack of asymptotic freedom in the ultraviolet implies that a well defined renormalized theory with *three* different couplings G_{1R}, G_{2R} and G_{3R} does not exist. The low energy physics in such a situation is a highly nontrivial and essentially nonperturbative problem and one is left to make a sensible conjecture.

As in the A phase discussed above, in the far infrared $G_1(t) \sim G_2(t) \sim -2G_3(t)$ as well as $u_s^* = u_t^*$ so one may wonder again whether the SO(6) symmetry is approximatively restored or not. We stress that the situation at hand here is very different to what happens in the A phase since the theory is *not* asymptotically free in the ultraviolet. This may have important consequences for the low energy physics. Indeed it is well known that the divergency of some couplings at high energy is reminiscent of the fact that some *part* of the interaction is *irrelevant* at low energy. Of course, perturbation theory alone cannot tell us *which* part of the interaction is irrelevant and at present all what we have at hand to make a reasonable hypothesis is our perturbative results. The simplest scenario is that the SO(6) symmetry is approximatively restored provided the initial conditions are not too anisotropic (see however subsection C). As a support of this conjecture let us mention that this is what happens in the C phase of the *XXZ* model where the Bethe ansatz solution tells us that the SU(2) symmetry is restored up to exponentially small corrections.[23] We are of course aware that our hypothesis is highly questionable but it is the simplest one and could in principle be tested either numerically or experimentally. Indeed, the immediate consequence of the possible SO(6) restoration is that the effective low energy effective theory of the Hamiltonian (1) in the C phase is approximatively that of the SO(6) GN model:

$$\mathcal{H} = -\frac{iu^*}{2} \sum_{a=1}^{6} (\xi_R^a \partial_x \xi_R^a - \xi_L^a \partial_x \xi_L^a) + G \sum_{i<j} \kappa_i \kappa_j , \quad (40)$$

where the *effective* coupling G is positive. The model (40) is integrable. Its spectrum is known and consists of the fundamental fermion, with mass M, together with a kink of mass $m = M/\sqrt{2}$.[21] At this point the question that naturally arises is how this enlarged SO(6) symmetry reflects in the spin and orbital correlation functions. The answer to this important question requires the computation of the exact dynamical correlation functions in the SO(6) restored massive phase. This could be accomplished in principle by the form factors approach as in the frustrated two leg ladder considered in Ref. 25. However this task is even more difficult for the SO(6) case and goes beyond the scope of this paper.

B. Phase diagram

Let us now sum up our results and present the phase diagram associated with Hamiltonian (24). As even at the SU(4) symmetric point the coupling G_3 is not zero, the best way to visualize the phase diagram is to fix the value of G_3 and to look in the plane (G_1, G_2). As one can see from Fig. 2, there are two curves separating the three regions A, B and C which are given by the equation

$$\mu = G_1 G_2 + G_1 G_3 + G_2 G_3 = 0. \quad (41)$$

In the region B all models are critical with approximate SO(6) symmetry. The spectrum consists into six massless Majorana fermions with different velocities in both spin and orbital sectors. As one crosses the critical line Σ one enters in a fully massive phase (C phase) with an approximate SO(6) symmetry. For large positive values of the couplings G_1 and G_2 one may finally enter the region A. Notice that

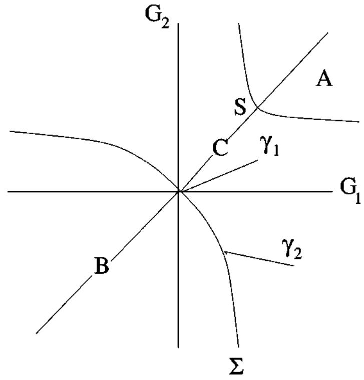


FIG. 2. Phase diagram for anisotropic couplings in the plane (G_1, G_2) at a fixed value of G_3. The massless phase B is separated from the massive C phase by the critical line Σ. The special point S on the symmetric line which is at the border between the C and the A phases is SO(6) symmetric with $G_1 = G_2 = -2G_3$. We plot also the two trajectories labeled γ_1 and γ_2 for which the scaling of the mass gap has two different qualitative behaviors.

there is no phase transition between the A phase and the C phase since both phases are massive but rather a smooth cross over.

The most important feature of our phase diagram is that the two regions with $G_1 G_2 < 0$ which would have been massless in the absence of G_3 do not survive an arbitrarily small value of G_3. Therefore the $c = 3/2$ phases discussed in the previous section are not stable. Though the whole region is essentially massive there are still room for criticality since the B phase extends in both quadrants $G_1 G_2 < 0$. From Eq. (41) the width of the critical region is of the order $|G_3|$. Therefore the main effect of G_3 is to drive the system either to a fully massive phase (phase C) or to a fully massless phase (phase B), both with an approximate SO(6) symmetry. Of course, the phase diagram as depicted in the Fig. 2 is strictly valid in the small G limit. In particular higher order corrections may modify the shape of the critical curve Σ. We stress however, that its behavior in the vicinity of the SU(4) point at $G_1 = G_2 = 0$ is given by our one loop result. In particular the fact that Σ crosses the symmetric line with a right angle will not change as one includes higher order in perturbation theory. However, as one goes to large deviations from the SU(4) point our effective theory will not apply since for large enough positive (respectively negative) G_1 and negative (respectively positive) G_2 the orbital (respectively spin) degrees of freedom order ferromagnetically.[5,10]

C. Effect of the anisotropy

At this point one may wonder whether the anisotropy has no effect at all in the physical quantities. Apart from the velocity anisotropy in the B phase, one may still expect some nontrivial effect of the anisotropy in the C phase. Indeed, after all even though both $c = 3/2$ phases are unstable there should be some significant signature of the presence of the $SO(3)_1$ fixed point in the scaling of the physical quantities and in the finite size scaling. The very reason for this is that the SO(6) symmetry is restored dynamically with help of a *marginal* operator.

Crossover and finite size scaling. Let us look at the RG flow in more details. The regions of interest are those with

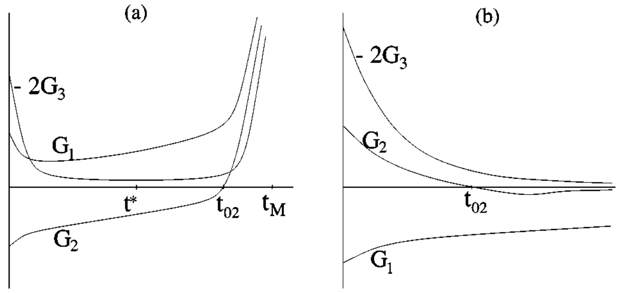


FIG. 3. Qualitative RG evolution of the coupling constants in regions where $G_1(0)G_2(0)<0$ and where the crossover ''time'' defined by $G_2(t_{02})=0$ exists.

$G_1G_2<0$ in which, as discussed in the previous section, if not for G_3 one of the coupling would have been irrelevant. Then either the spin or the orbital degrees of freedom would have remained massless. In the following we shall concentrate on the orbital degrees of freedom. All the results that will be given can be straightforwardly extended to the spin degrees of freedom.

Consider first initial conditions slightly above the phase B in the lower right quadrant with $G_1G_2<0$ (see Fig. 2). We are then in the phase C with $G_1(0)>0$ and $G_2(0)<0$. As seen in the Fig. 3(a), the flow can be splitted into two ''time'' slices.

At first $|G_3|$ strongly decreases and remains almost constant. Then, both spin and orbital degrees of freedom weakly interact since $|G_{(1,2)}|\gg|G_3|$. In the meantime, the coupling G_2 increases and changes its sign at a time t_{02} where it vanishes. At ''times'' $t<t_{02}$ the orbital degrees of freedom do not know yet they shall enter in a massive phase and the system is on the influence of the $\mathrm{SO}(3)_1$ fixed point. Finally, as $t\rightarrow t_M$ all the couplings blow up and one enters in the strong coupling region. The physical interpretation of this phenomenon is clear: it is the spin degrees of freedom that drive the orbital degrees of freedom away from criticality and it takes roughly $\exp(t_{02})$ RG iterations for the orbital sector to escape from the basin of attraction of the $\mathrm{SO}(3)_1$ fixed point.

The other interesting region is the portion of the B phase delimited by the critical curve Σ and the G_2 axis in upper left quadrant of Fig. 2. There $G_1(0)<0$ and $G_2(0)>0$. As seen in Fig. 3(b), it is the spin degrees of freedom that drive the orbital ones to criticality. The coupling G_2 changes its sign and vanishes at a time t_{02} and goes to zero in the limit $t\rightarrow\infty$. In both cases, the crossover ''time'' t_{02} is given by the implicit equation:

$$X(t_{02})=\sqrt{\frac{\mu(0)}{d(0)G_3(0)}}. \tag{42}$$

Of course a similar discussion holds for the coupling G_1 and defines another crossover time t_{01} which is defined by the implicit equation:

$$X(t_{01})=\sqrt{\frac{-\mu(0)}{d(0)G_3(0)}}. \tag{43}$$

We plot in Fig. 4 the iso-t_{02} and iso-t_{01} curves in the plane (G_1,G_2).

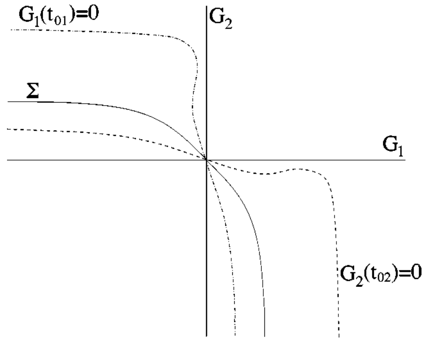


FIG. 4. Iso-t_0 curves in the plane (G_1,G_2); the dashed line corresponds to an iso-t_{02} associated with the orbital degrees of freedom whereas the dashed dotted line is an iso-t_{01} associated with the spin degrees of freedom. Σ denotes the critical line.

We stress that this crossover phenomenon may have important practical consequences in numerical simulations. Indeed, in a finite system of size L, the critical region will seem to extend towards the iso-t_{01} with $t_{01}=\ln L$ in the region $G_1<0$, $G_2>0$ and towards the iso-t_{02} with $t_{02}=\ln L$ in the region $G_1>0$, $G_2<0$. The low lying spectrum will look like if either the spin or the orbital degrees of freedom would have been massless. It is important to notice that these two pseudocritical lines bend upwards in contrast with the critical line Σ.

The mass gap. The anisotropy has also nontrivial effect on the mass gap of the system. To see this we have computed the mass gap M with help of the RG equations (28). As well known, the gap M is defined as the scale where perturbation theory breaks down. More precisely it is given by the scale $t_M=\ln(1/Ma_0)$ at which the couplings blow up:

$$X(t_M)=\infty. \tag{44}$$

The above implicit equation can be solved but the resulting analytical expression is too cumbersome to be quoted here. Details are given in the Appendix and we shall content ourselves by its asymptotic behaviors as one approaches the critical surface Σ.

We find two qualitatively different behaviors depending on the way one approaches Σ. When one approaches Σ at the SU(4) point $(G_1=G_2=0)$ we find

$$M\sim\Lambda\exp(-C(\gamma_1)/\Delta^{2/3}), \tag{45}$$

where $\Delta=\sqrt{G_1^2+G_2^2}\rightarrow 0$ and the constant $C(\gamma_1)$ depends on the trajectory labeled γ_1 in the Fig. 2. On the other hand, as one approaches Σ at any other point the asymptotic behavior of the gap is different:

$$M\sim\Lambda\exp(-C(\gamma_2)/\Delta), \tag{46}$$

where now Δ is the Euclidean distance of the critical surface. As above $C(\gamma_2)$ depends on the curve labeled γ_2 in Fig. 2. There are two other marginal cases as one approaches Σ tangentially: the exponents of Δ in both Eqs. (45) and (46) are doubled. We see that the gap is generically *larger* in the regions with *small* anisotropy. To visualize this phenomenon we present in Fig. 5 the isogap curves in the plane (G_1,G_2). We observe that at a given distance Δ from the critical line Σ the gap increases as one moves towards the symmetric re-

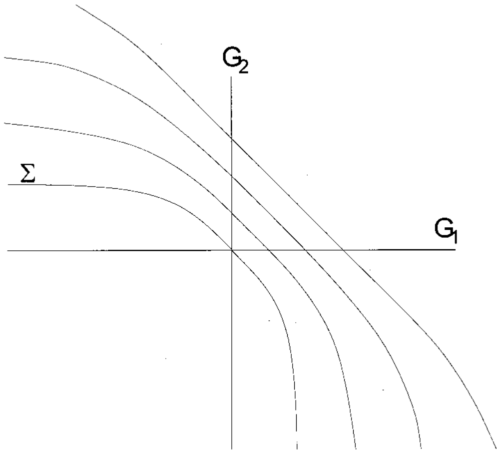


FIG. 5. Isogap curves in the plane (G_1,G_2); Σ denotes the critical line.

gion $(G_1 \sim G_2)$ and is maximum on the symmetric line $(G_1 = G_2)$. Similarly, to keep the value of the gap to some constant M one has to move away from Σ as one leaves the symmetric region.

Effect of anisotropy on the SO(6) symmetry restoration. We conclude this section by looking at the effect of the anisotropy on the SO(6) symmetry restoration in the C phase. As discussed above, in the C phase the couplings G_1 and G_2 tend to $-2G_3$ in the far infrared (i.e., as $t \to t_M$) so that the effective Hamiltonian has an apparent SO(6) symmetry. Looking in more detail at the asymptotic behavior of the couplings $G_1(t)$ and $G_2(t)$ we find that

$$G_{(1,2)}(t) \sim -2G_3(0)X^2(t) \pm \frac{d(0)}{2}X(t). \tag{47}$$

Therefore, as when $t \to t_M$, $X(t) \to \infty$, there remains a subdominant infrared singularity when $d(0) \neq 0$. We thus expect some corrections to the SO(6) behavior. To get an estimate of these corrections we make the reasonable hypothesis that, when the anisotropy is small enough, the effective theory will be given by an SO(6) GN model with a small symmetry-breaking perturbation proportional to

$$\mathcal{H} \sim -\frac{iu^*}{2}\sum_{a=1}^{6}(\xi_R^a \partial_x \xi_R^a - \xi_L^a \partial_x \xi_L^a) + G\sum_{i<j}\kappa_i\kappa_j + \lambda((\kappa_3+\kappa_4+\kappa_5)^2 - (\kappa_1+\kappa_2+\kappa_6)^2), \tag{48}$$

where $\lambda \ll G$. Of course we do not know the value of the effective coupling λ, but it is sufficient for our purpose that it is small enough which will be the case if $d(0)$ is small. From Eq. (48) one can get an estimate of the mass splitting in both the spin and orbital sectors:

$$\frac{M_s}{M_t} \sim 1 + \lambda \ln(1/Ma_0). \tag{49}$$

Therefore, we expect the SO(6) symmetry will hold approximatively only for small enough gap and anisotropy. The above argument is of course far from being rigorous but it helps to get an idea of the effect of the anisotropy in the symmetry restoration process. This should serve as a warning that, once again, one should be careful with the conclusions drawn from perturbation theory.

IV. EFFECT OF A MAGNETIC FIELD

In contrast with the SU(2) Heisenberg chain there is no unique way to apply a magnetic field in the SU(4) model. Indeed, while in the SU(2) case there is, apart from the total spin, only one conserved charges S^z in the SU(4) model there are *three* of them. These are the three Cartan generators of the SU(4) Lie algebra. In this work we have chosen for the three commuting generators:

$$H^1 = S^z, \quad H^2 = T^z, \quad \text{and} \quad H^3 = 2S^zT^z. \tag{50}$$

Other choices are possible but Eq. (50) is the one that is physically relevant to our problem. We thus see that one is at liberty to apply a magnetic field in any ''direction'' in the Cartan basis (50). However, if one relies on the physical interpretation of both operators $\vec{S}$ and $\vec{T}$ as spin and orbital operators, a magnetic field only couples to $H^1 = S^z$. The resulting Hamiltonian thus writes

$$\mathcal{H}_h = \sum_i J_1 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + J_2 \vec{T}_i \cdot \vec{T}_{i+1} + K(\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1})(\vec{T}_i \cdot \vec{T}_{i+1}) + h\sum_i S_i^z. \tag{51}$$

The magnetic field breaks the SU(4) symmetry down to $SU(2) \otimes U(1)$. For a sufficiently large value of $h > h_o$ the spin degrees of freedom align parallel to the field and the remaining degrees of freedom will decouple. More interesting is the situation when h is small. In this case, one may expand Eq. (51) around the $SU(4)_1$ fixed point, as in previous section, and study its effects in perturbation. For small values of h, the effective low energy Hamiltonian associated with Eq. (51) can be easily derived using the expression of the spin operator S^z in terms of the Majorana fermions as given by Eqs. (19), (20), and (21). Dropping all oscillating terms, the only contribution comes from the uniform part of the spin density and the effect of the magnetic field is just to add to the Hamiltonian (24) the interaction $\mathcal{H}_Z = ih(\xi_R^1\xi_R^2 + \xi_L^1\xi_L^2)$ and the low-energy Hamiltonian thus writes

$$\mathcal{H}_h = -\frac{iu_s}{2}(\vec{\xi}_{sR} \cdot \partial_x \vec{\xi}_{sR} - \vec{\xi}_{sL} \cdot \partial_x \vec{\xi}_{sL}) + g_1(\kappa_1+\kappa_2+\kappa_6)^2 - \frac{iu_t}{2}(\vec{\xi}_{tR} \cdot \partial_x \vec{\xi}_{tR} - \vec{\xi}_{tL} \cdot \partial_x \vec{\xi}_{tL}) + g_2(\kappa_3+\kappa_4+\kappa_5)^2 + 2G_3(\kappa_1+\kappa_2+\kappa_6)(\kappa_3+\kappa_4+\kappa_5) + ih(\xi_R^1\xi_R^2 + \xi_L^1\xi_L^2), \tag{52}$$

where we recall that

$$g_1 = G_1 + G_3,$$

$$g_2=G_2+G_3. \tag{53}$$

A. Renormalization group analysis

The situation at hand is similar to that of the XXZ model in a field.[26] There exists a magnetic length λ_h below which the magnetic field has no substantial effect on the physics. However as the scale $\lambda \gg \lambda_h$, the field strongly modifies the low energy behavior. Indeed, in this regime, as we shall see below, the two Majorana fermions ξ^1 and ξ^2 completely decouple from the four others. The best way to see this is to bosonize the ''1-2'' sector of the Hamiltonian (52) with help of Eq. (14). The resulting Hamiltonian becomes

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_h=&\frac{v_\phi}{2}\left(\frac{1}{K}(\partial_x\Phi_s)^2+K(\partial_x\Theta_s)^2\right)\\&-\frac{iv_6}{2}(\xi_R^6\partial_x\xi_R^6-\xi_L^6\partial_x\xi_L^6)-\frac{iv_t}{2}(\vec{\xi}_{tR}\cdot\partial_x\vec{\xi}_{tR}-\vec{\xi}_{tL}\cdot\partial_x\vec{\xi}_{tL})\\&+2f_2(\kappa_3\kappa_4+\kappa_3\kappa_5+\kappa_4\kappa_5)+2f_3\kappa_6(\kappa_3+\kappa_4+\kappa_5)\\&-\frac{2if_4}{\pi a_0}\cos(\sqrt{4\pi}\Phi_s+2qx)(\kappa_3+\kappa_4+\kappa_5)\\&-\frac{2if_5}{\pi a_0}\cos(\sqrt{4\pi}\Phi_s+2qx)\kappa_6,\end{aligned} \tag{54}$$

where

$$\begin{aligned}K&=1-\frac{g_1}{\pi u_s},\\v_\phi&=u_s+\frac{g_1}{\pi},\\q&=-\frac{Kh}{v_\phi}.\end{aligned} \tag{55}$$

In the above Hamiltonian, we have introduced new velocities and coupling constants with bare values: $v_6=u_s$, $v_t=u_t$, $f_2=g_2$, $f_3=f_4=G_3$ and $f_5=g_1$ corresponding to the operators that are stable under renormalization. As readily seen, the cosine terms involving Φ_s will start to oscillate with wave vector $q\sim h$. Therefore, at sufficiently large magnetic field the two last terms in Eq. (54) can be dropped and the bosonic field Φ_s completely decouples. When a gap is present, i.e., when one sits in the C phase at $h=0$, there exists a critical field $h_c\sim M$ below which the field has little effects on the low energy physics. As h increases and becomes greater than h_c, the spin sector undergoes a commensurate-incommensurate transition of the JNPT type[27] to an incommensurate massless phase with central charge $c_s=1$. In contrast, in the absence of a gap, i.e., when one sits in the B phase at $h=0$, the spin sector always decouples at sufficiently low energies. Of course, this decoupling procedure has to be understood in the framework of the renormalization group. To this end we have computed the one loop recursion relation associated with the Hamiltonian (54). Neglecting the velocity renormalization we obtain

$$\begin{aligned}\dot{K}&=-(3f_4^2+f_5^2)J_0(2q),\\\dot{q}&=q-(3f_4^2+f_5^2)J_1(2q),\\\dot{f}_2&=f_2^2+f_3^2+2f_4^2J_0(2q),\\\dot{f}_3&=2f_2f_3+2f_4f_5J_0(2q),\\\dot{f}_4&=(1-K)f_4+(2f_2f_4+f_3f_5)(1+J_0(2q))/2,\\\dot{f}_5&=(1-K)f_5+3f_3f_4(1+J_0(2q))/2,\end{aligned} \tag{56}$$

where the couplings have been rescaled as $f\rightarrow f/\pi v^*$, v^* being a velocity scale, and $J_{(0,1)}(x)$ are the Bessel functions of the first and second kinds. Apart from the inherent anisotropy in our problem, the above equations resemble that of the XXZ model in a field.[26] We see on Eqs. (56) that when $q(t)\sim\pi$ the two Bessel functions start to oscillate and the renormalization coming from both the f_4 and f_5 terms is stopped. This defines the magnetic length λ_h as $q(t_h)=\pi$ ($t_h=\ln\lambda_h$) where the spin degrees of freedom decouple from the rest of the interaction (as well known, there is no unique way to define the magnetic length but we have checked that other reasonable choices do not affect qualitatively the physics). At this point, it is worth stressing that in the massive phase, t_h must be much smaller than t_M, the scale at which perturbation theory breaks down. This means, of course, that $h>M$ as discussed above.

At times $t>t_h$, the couplings f_4 and f_5 do not participate in the RG equations of the couplings K, q, f_2 and f_3 and Eqs. (56) reduce to

$$\begin{aligned}\dot{K}&=0,\\\dot{q}&=q\end{aligned} \tag{57}$$

and

$$\begin{aligned}\dot{f}_2&=f_2^2+f_3^2,\\\dot{f}_3&=2f_2f_3.\end{aligned} \tag{58}$$

This means that in the regime $t>t_h$ the Hamiltonian (54) decouples:

$$\mathcal{H}_h=\mathcal{H}_s+\mathcal{H}_\perp, \tag{59}$$

where

$$\mathcal{H}_s=\frac{v_\phi}{2}\left(\frac{1}{K}(\partial_x\Phi_s)^2+K(\partial_x\Theta_s)^2\right) \tag{60}$$

and

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_\perp=&-\frac{iv_6}{2}(\xi_R^6\partial_x\xi_R^6-\xi_L^6\partial_x\xi_L^6)-\frac{iv_t}{2}(\vec{\xi}_{tR}\cdot\partial_x\vec{\xi}_{tR}-\vec{\xi}_{tL}\cdot\partial_x\vec{\xi}_{tL})\\&+2f_2(\kappa_3\kappa_4+\kappa_3\kappa_5+\kappa_4\kappa_5)+2f_3\kappa_6(\kappa_3+\kappa_4+\kappa_5),\end{aligned} \tag{61}$$

where K, v_ϕ, v_6, v_t, f_2 and f_3 are the *effective* couplings at the magnetic length λ_h.

Let us first concentrate on the spin sector as given by Eq. (60). The Hamiltonian (60) is that of a Luttinger liquid with stiffness K. The spin sector is thus massless and contributes to a central charge $c_s=1$. In addition, the correlation functions involving the field Φ_s will be incommensurate with h-dependent wave vector q. From Eqs. (21) one sees that the incommensurability will reflect in both the spin and orbital correlation functions.

We focus now on the remaining part of the interaction. The Hamiltonian $\mathcal{H}_\perp$ describes the interaction between the orbital sector with the remaining spin-orbital Z_2 degree of freedom (ξ^6) of the spin sector. The low energy physics in this sector is nontrivial and at issue is the behavior of the RG flow associated with Eq. (58) where the initial conditions have to be taken at the magnetic length with $f_2(t_h)$ and $f_3(t_h)$ at $t_h=\ln(\lambda_h)$.

These equations are trivially solved. Indeed, upon introducing the new variables

$$f_\pm=f_2\pm f_3, \tag{62}$$

Eqs. (58) decouple:

$$\dot{f}_\pm=f_\pm^2. \tag{63}$$

As in the previous section, we distinguish between three phases A, B, and C depending on the initial conditions of the flow.

The A phase. This is when $f_+(t_h)>0$ and $f_-(t_h)>0$. Both couplings are relevant and a gap opens in the spectrum. Moreover, since the theory is asymptotically free in the ultraviolet there are two length scales in the problem: $m_\pm \sim \exp-(\pi/f_\pm(t_h))$.

The B phase. There $f_+(t_h)<0$ and $f_-(t_h)<0$. The couplings are irrelevant and the four Majorana fermions become massless leaving the theory with the central charge $c_\perp=2$. The fixed point has only an approximate SO(4) symmetry since there remains a velocity anisotropy. Indeed, as in the zero field case, in general $v_t^*\neq v_6^*$. The generic symmetry of the fixed point is thus rather $SO(3)\otimes Z_2$.

The C phase. Finally is the C phase where $f_-(t_h)>0$ and $f_+(t_h)<0$. Then $f_-(t)$ is relevant and $f_+(t)$ will go to zero in the infrared. Therefore, as in the previous section, one may conjecture that the SO(4) symmetry is approximately restored. In the far infrared the effective Hamiltonian is that of the SO(4) Gross-Neveu model:

$$\mathcal{H}_\perp=-\frac{iu}{2}\sum_{a=3}^{6}(\xi_R^a\partial_x\xi_R^a-\xi_L^a\partial_x\xi_L^a)+f_-(t_h)\sum_{i<j}\kappa_i\kappa_j, \tag{64}$$

which is integrable. Its spectrum consists only on kinks and antikinks with mass $m\sim\exp-(\pi/f_-(t_h))$.[21]

Notice, and this will be important for the discussion that will follow, that in both the phases B and C the effective theories are given (up to a velocity anisotropy) by Eq. (64) with the difference that $f_-(t_h)$ is *negative* in the phase B (so that the interaction is irrelevant) while it is *positive* in the phase C.

B. Phase diagram

It is clear from the discussion given above that the values of the effective couplings at the magnetic length are crucial. Of course, the existence of the commensurate-incommensurate transition in the spin sector depends only on the mass gap M of the zero field Hamiltonian. What is more interesting, is what happens in the remaining orbital and spin-orbital sectors described by the Majorana fermions ξ^3,ξ^4,ξ^5,ξ^6. As we shall see now the anisotropy will play its tricks. Indeed, what is into question is the sign of the coupling $f_-(t_h)$ *at* the magnetic length. Returning to the original variables, one finds that $f_-=G_2$. We saw in the preceding section that in zero magnetic field the time evolution of G_2 was very sensitive to the presence of the $SO(3)_1$ fixed point in the orbital sector and could change its sign at a time t_{02} depending on the the initial conditions [see Fig. 3(a) and Fig. 3(b)]. The presence of a field h does not affect qualitatively this feature and provides for a renormalization of t_{02} which becomes h-dependent: $t_{02}\rightarrow t_{02}(h)$. We consider now two cases.

First is when one sits in the B phase between the G_1 axis and the critical surface Σ, with $G_1<0$ (see Fig. 2). At zero magnetic field the system is critical with the central charge $c=3$. There f_- is positive and decreases as t increases vanishes at some RG time $t_{02}(h)$ and then changes sign. Now if $t_h<t_{02}(h)$, $f_-(t_h)$ will be still positive and a gap will open in the orbital and spin-orbital sector according to Eq. (64). On the other hand, if $t_h>t_{02}(h)$ then $f_-(t_h)<0$ and there is no gap. This means that there exists a critical value of the field h_{c0} above which a gap opens. The portion of critical surface Σ in the region $G_1<0$ is thus unstable. The physical interpretation of this result is clear. In zero field, it was the spin degrees of freedom that drived the orbital degrees of freedom to criticality. When the field is large enough, its effect is to decouple a part of the spin degrees of freedom *before* the remaining fluctuations had a chance to enter the basin of attraction of the $SO(4)_1$ fixed point. Thus, the effect of the magnetic field in this region is to reduce the extension of the phase B.

The other interesting region is when one sits in the C phase just above the critical surface Σ in the lower right quadrant of Fig. 2, i.e., when $G_1>0$ and $G_2<0$. There G_2 is negative but is driven to positive values by the spin degrees of freedom. It changes sign at a time $t_{02}(h)$ where it vanishes. Now if $t_h<t_{02}(h)$, $f_-(t_h)$ will be still negative while if $t_h>t_{02}(h)$, $f_-(t_h)$ will be positive. Therefore there exists a critical field h_{c0} below which the orbital and spin-orbital sectors will be still massive. Above h_{c0}, the gap will close. Again, the physical reason why the gap vanishes above h_{c0} is that, the spin degrees of freedom did not have enough time to drive the orbital sector to strong coupling. We therefore conclude that the B phase has a tendency to extend in the region $G_1>0$, $G_2<0$ when a field is present.

To summarize, we expect two kinds of transition as one varies the magnetic field. When the theory is massive at $h=0$, as one increases h there will be a first transition in the spin sector to an incommensurate phase with the central charge $c_s=1$. The remaining degrees of freedom will be still massive but are described by the SO(4) GN model. The coherent fermionic excitations of the SO(6) GN model disappear from the spectrum and the only massive excitations that remain are the kinks of the SO(4) GN model. Consequently all excitations will be incoherent. What happens as one increases h further strongly depends on the anisotropy. If $G_2>0$ the magnetic field just renormalizes the mass of the SO(4) kinks, the spectrum is still massive. The total central charge of the model is thus $c=c_s+c_\perp=1$. However, when $G_2<0$, there is a *second* phase transition at a field h_{c0} of the Kosterlitz-Thouless (KT) type[28] to a commensurate massless phase with $c_\perp=2$. Both spin and orbital degrees of freedom are massless and the total central charge is $c=c_s+c_\perp=3$.

Notice that there will be three different velocities: $v_6^* \neq v_\phi^* \neq v_t^*$ so that the symmetry at the fixed point is not SO(6) but rather $\mathrm{SO}(3)\otimes \mathrm{U}(1)\otimes Z_2$.

When there is no gap at zero field the spin sector is always critical with incommensurate correlation functions. What happens for the spin-orbital and orbital degrees of freedom depends again strongly on the anisotropy. When $G_2<0$ they remain massless and the total central charge is thus $c=3$. However, if $G_2>0$, there will be a KT type phase transition at a critical field h_{c0} to a *massive* phase with approximate SO(4) symmetry.

We stress that the mechanism that leads to the KT type phase transition at the magnetic field h_{c0} is highly nontrivial since the magnetic field does *not* couple directly to both the orbital and the spin-orbital degrees of freedom.

V. CONCLUSIONS

In the present work we have studied the effect of symmetry-breaking perturbations in the one-dimensional SU(4) spin-orbital model. Using the low energy effective field theory developed in Ref. 14, we have investigated the phase diagram of the $\mathrm{SU}(2)\otimes\mathrm{SU}(2)$ model where the exchange in both the spin (J_1) and the orbital (J_2) sectors are different. We found that the different phases of the symmetric $J_1=J_2$ line extend to the case $J_1\neq J_2$. In particular the massless phase, governed by the $\mathrm{SO}(6)_1$ fixed point, extends to a finite region in the plane (J_1,J_2) around the SU(4) point $(J_1=K/4,J_2=K/4)$. Similarly, in the vicinity of the critical surface, the massive phase has also an approximate SO(6) symmetry provided the anisotropy is not too large. In this phase, as in the isotropic case, the system spontaneously breaks translational invariance and dimerizes with alternate spin and orbital singlets.[14] Both spin and orbital excitation are coherent at wave vector $k=\pi/2$. All these results remain valid in the vicinity of the SU(4) point. The question that naturally arises is what happens when K decreases. Indeed, in the limit $K\ll J_{(1,2)}$ one enters in the weak coupling limit where magnon excitations are incoherent at wave vector $k=\pi$.[7] In the simplest scenario, as discussed in Ref. 14, one expects that the coherent peak at $k=\pi/2$ in the dynamical susceptibility will disapear at a critical value of $K=K_D$. Such a special point where an oscillating component of the correlation function disappears is a disorder point[29] and therefore, we do not expect a phase transition at K_D but rather a smooth crossover.

Although these results could have been anticipated on the basis of the previous study of the symmetric case,[14] since the interactions are marginal, the anisotropy reveals itself in a nontrivial scaling of the physical quantities. Indeed, we have shown that the anisotropy plays its tricks in two particular regions of the phase diagram with $G_1G_2<0$, where $G_{(1,2)}=J_{(1,2)}-K/4$ measures the departure from the SU(4) point. In these regions, both spin and orbital degrees of freedom compete. For instance, when $G_1>0$ and $G_2<0$, the spin sector tends to open a gap while the orbital one wants to remain massless. Since both sectors interact marginally, at issue is a delicate balance between the strength of the interactions: it is one kind of degree of freedom that drives the other to its favorite behavior. In particular, this is the reason why the massless phase extends in the region with either $G_1>0$ or $G_2>0$. In any case, the whole system ultimately becomes either fully massless or fully massive. The crucial point is that since the interactions are only marginal, it may take a very long time, in the renormalization group sense, to reach the asymptotic low energy regime. This has important consequences.

First of all is the nontrivial behavior of the mass gap of the system. We found that the gap M is generically smaller in the regions with large anisotropy, i.e., in the two quadrants $G_1G_2<0$ above the critical curve Σ. This is due precisely to the strong tendency to massless behavior in these regions. As a consequence the gap M has two qualitatively different scaling behaviors as one approaches Σ either from the symmetric region or the asymmetric one (the trajectories labeled γ_1 and γ_2 in Fig. 2): $M\sim\exp(-C_1/\Delta^{2/3})$ and $M\sim\exp(-C_2/\Delta)$.

Second is the finite size scaling. Since the gap opens exponentially it is very difficult to localize accurately the critical line Σ in a finite system. In the current model the situation is even more askward in the regions $G_1G_2<0$. Indeed, in a finite system of size L, the critical region will seem to extend and the pseudocritical lines will be given by the two iso-t_{01} and iso-t_{02} curves, with $t_{0(1,2)}=\ln L$, that have the opposite curvature than the true critical line Σ (see Fig. 4.). In this pseudocritical region, either the spin or the orbital degrees of freedom will look massless. The phase diagram in zero magnetic field as obtained by very recent DMRG calculations[10,30] is in qualitative agreement with our RG analysis. However, the critical line obtained in these numerical computations has the opposite curvature that the one loop result Σ. Our interpretation of this fact is that what has been observed are the two iso-$t_{0(1,2)}$ curves. This reflects once again the nontrivial finite size scaling induced by the anisotropy.

Finally, is the effect of a magnetic field. The magnetic field affects the spin degrees of freedom in the usual way. In the massless phase it leads to incommensuration in the spin sector while when a gap is present, a commensurate-incommensurate transition can occur at a critical field. However, what happens to the remaining degrees of freedom strongly depends on the anisotropy. In the region, where both degrees of freedom do not compete, i.e., when $G_1G_2>0$, the remaining orbital and spin-orbital sector remains either massless or massive with an approximate SO(4) symmetry. On the other hand, the most stricking effect occurs when the spin and orbital fluctuations compete, i.e., for $G_1G_2<0$. In this region the field reinforces the effect of the orbital degrees of freedom and can induce a second phase transition, of the KT type, for a sufficiently large field, from massive to massless approximate SO(4) behavior. The origin of this nontrivial effect of the magnetic field stems from the interplay of the presence of orbital degeneracy and anisotropy. We hope that this transition will be observed in further experiments on quasi-one-dimensional spin gapped materials with orbital degeneracy.

Note added. After this work was completed, we became aware of a work by Itoi *et al.*[30] who also predict the extension of the massless phase in the anisotropic region.

APPENDIX

In this appendix, we shall compute the mass gap M in the phase C, and obtain the asymptotics of M in the vicinity of the critical surface Σ. As well known, within perturbation theory the gap defines the scale $t_M=\ln(1/Ma_0)$ where all the couplings blow up. Clearly, t_M is given by the equation

$$X(t_M)=\infty. \tag{A1}$$

Integrating Eq. (37) and recalling the dynamic of X in the phase C we find

$$t_M=\left(\int_{X^\star}^{\infty}+\epsilon\int_1^{X^\star}\right)\frac{dX}{X\sqrt{P(X)}}, \tag{A2}$$

where $\epsilon=\text{sign}(s)$; $P(X)$ is given by Eq. (38) and has only two reals roots 0 and $X^\star\leqslant 1$. In the following s, μ and G_3 have to be understood as initial conditions.

Performing the integrals we obtain

$$\begin{aligned} t_M=&\sqrt{\frac{p}{|\mu|}}[E(\alpha(0),k)-\epsilon E(\alpha(1),k)]\\ &+\frac{1}{2}\sqrt{\frac{p}{|\mu|}}\left(\frac{u^\star}{p}-1\right)(F[\alpha(0),k]-\epsilon F[\alpha(1),k])\\ &-\frac{G_3}{\mu}\left[\frac{1}{p+u^\star}-\frac{s}{2|G_3|(p+u^\star-1)}\right], \end{aligned} \tag{A3}$$

where F and E the elliptic functions of the first and the second kind, respectively, with parameters

$$\alpha(u)=2\arctan\sqrt{\frac{u^\star-u}{p}},$$

$$k=\sqrt{\frac{p+u^\star-G_3^2/2\mu u^{\star 2}}{2p}}, \tag{A4}$$

$u^\star$ and p^2 being given by

$$u^\star=1/X^\star,$$

$$p^2=u^{\star 2}-\frac{2G_3^2}{\mu u^\star}. \tag{A5}$$

Developing t_M around a point (G_{1c},G_{2c},G_{3c}) belonging to the critical surface Σ between the phases B and C (see Fig. 2), we obtain the asymptotics

$$M\sim\Lambda\exp(-C(\gamma_1)/\Delta^{2/3})\quad\text{if}\quad G_1^c=G_2^c=0,$$

$$M\sim\Lambda\exp-C(\gamma_2)/\Delta\quad\text{if}\quad G_1^c\neq G_2^c, \tag{A6}$$

where Δ is the Euclidian distance from Σ. The two constants $C(\gamma_1)$ and $C(\gamma_2)$ are given by

$$C(\gamma_1)=0.6845\quad G_{3c}^{-1/3}(\cos\theta)^{-2/3},$$

$$C(\gamma_2)=([1+2G_{3c}^2/(G_{1c}-G_{2c})^2]\cos^2\theta)^{-1/2}, \tag{A7}$$

where θ is the angle to the normal of Σ.

[1] K. I. Kugel and D. I. Khomskii, Usp. Fiz. Nauk [Sov. Phys. Usp. **25**, 231 (1982)].

[2] E. Axtell *et al.*, J. Solid State Chem. **134**, 423 (1997).

[3] M. Isobe and Y. Udea, J. Phys. Soc. Jpn. **65**, 1178 (1996); Y. Fujii *et al.*, *ibid.* **66**, 326 (1997).

[4] D. P. Arovas and A. Auerbach, Phys. Rev. B **52**, 10 114 (1995).

[5] S. Pati, R. R. P. Singh, and D. I. Khomskii, Phys. Rev. Lett. **81**, 5406 (1998).

[6] Y. Q. Li, M. Ma, D. N. Shi, and F. C. Zhang, Phys. Rev. Lett. **81**, 3527 (1998).

[7] A. A. Nersesyan and A. M. Tsvelik, Phys. Rev. Lett. **78**, 3939 (1997).

[8] Y. Yamashita, N. Shibata, and K. Ueda, Phys. Rev. B **58**, 9114 (1998).

[9] B. Frischmuth, F. Mila, and M. Troyer, Phys. Rev. Lett. **82**, 835 (1999).

[10] Y. Yamashita, N. Shibata, and K. Ueda, J. Phys. Soc. Jpn. **69**, 242 (2000).

[11] G. V. Uimin, Pis'ma Zh. Éksp. Teor. Fiz. [JETP Lett. **12**, 225 (1970)]; C. K. Lai, J. Math. Phys. **15**, 1675 (1974); B. Sutherland, Phys. Rev. B **12**, 3795 (1975).

[12] I. Affleck, Nucl. Phys. B **265**, 409 (1986); **305**, 582 (1988).

[13] A. B. Zamolodchikov, Pis'ma Zh. Éksp. Teor. Fiz. [JETP Lett. **43**, 730 (1986)].

[14] P. Azaria, A. O. Gogolin, P. Lecheminant, and A. A. Nersesyan, Phys. Rev. Lett. **83**, 624 (1999).

[15] For a review, see, for instance, A. M. Tsvelik, *Quantum Field Theory in Condensed Matter Physics* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1995); A. O. Gogolin, A. A. Nersesyan, and A. M. Tsvelik, *Bosonization and Strongly Correlated Systems* (Cambridge University Press, Cambridge, England, 1998).

[16] V. J. Emery and S. A. Kivelson, Phys. Rev. B **46**, 10 812 (1992).

[17] R. Assaraf, P. Azaria, M. Caffarel, and P. Lecheminant, Phys. Rev. B **60**, 2299 (1999).

[18] D. G. Shelton, A. A. Nersesyan, and A. M. Tsvelik, Phys. Rev. B **53**, 8521 (1996).

[19] P. Di Francesco, P. Mathieu, and D. Sénéchal, *Conformal Field Theory* (Springer-Verlag, Berlin, 1997).

[20] P. Azaria, P. Lecheminant, and A. A. Nersesyan, Phys. Rev. B **58**, R8881 (1998).

[21] A. A. Zamolodchikov and A. B. Zamolodchikov, Ann. Phys. (N.Y.) **120**, 253 (1979).

[22] P. Azaria, P. Lecheminant, and A. M. Tsvelik, cond-mat/9806099 (unpublished).

[23] G. I. Japaridze, A. A. Nersesyan, and P. B. Wiegmann, Nucl. Phys. B **230**, 511 (1984).

[24] J. Zinn-Justin, *Quantum Field Theory and Critical Phenomena*

(Oxford Science Publication, New York, 1989).
[25] D. Allen, F. Essler, and A. A. Nersesyan, cond-mat/9907303 (unpublished).
[26] T. Giamarchi and H. J. Schulz, J. Phys. (Paris) **49**, 819 (1988).
[27] G. I. Japaridze and A. A. Nersesyan, Pis'ma Zh. Éksp. Teor. Fiz. [JETP Lett. **27**, 334 (1978)]; V. L. Pokrovsky and A. L. Talapov, Phys. Rev. Lett. **42**, 65 (1979).
[28] Notice that the transition does not have the usual SO(2) symmetry for the standard KT transition but rather an SO(4) symmetry. This generalization of the KT transition for a non-Abelian group has been discussed for instance by C. Itoi and M. H. Kato, Phys. Rev. B **55**, 8295 (1997).
[29] J. Stephenson, J. Math. Phys. **11**, 420 (1970).
[30] C. Itoi, S. Qin, and I. Affleck, cond-mat/9910109 (unpublished).

Chapitre V

Symétrie élargie et classification des phases

L´étude du modèle spin-orbital (chapitre IV) a fait apparaître la possibilité de stabiliser un liquide de spin gapé par la dégénérescence orbitale : au voisinage du point à symétrie SU(4), et loin du demi remplissage, s´étend une phase où toutes les excitations de spin et d´orbitale sont gapées, le fondamental présentant une dimérisation alternée. Notons qu´il a été nécessaire de briser la symétrie SU(4) en SU(2)$\times$SU(2) pour obtenir un gap spectral de spin. Une question naturelle qui se pose alors est celle de la nature des phases obtenues lorsque les interactions brisent encore davantage la symétrie SU(4). De manière plus générale, existe-t-il un moyen de classer les différents liquides de spin gapés que peut porter l´échelle de Hubbard à plusieurs montants ?

Une réponse partielle à cette question a été fournie, dans le cas où deux montants sont présents et au demi remplissage, par Lin *et al.* [77] et Konik *et al.* [75, 76]. Ces auteurs étudient l´échelle de Hubbard dans la limite de faible couplage et trouvent génériquement un liquide de spin gapé à symétrie élargie SO(8) dans l´infrarouge, qui peut exister sous quatre formes. Ces quatre liquides de spin diffèrent par la nature de l´ordre local du fondamental. Ils ont cependant en commun d´être des isolants, la symétrie SO(8) unifiant excitations de spin, charge et orbital dans des multiplets massifs, en conséquence d´une forte interaction spin-charge.

Je me suis intéressé à la classification des liquides de spin gapés apparaissant dans l´échelle de Hubbard dans le cas où la séparation spin-charge est assurée à basse énergie, c´est-à-dire suffisamment loin du demi remplissage. Dans cette situation, il est possible de définir un ordre de "pur spin", indépendamment de la nature isolante ou conductrice du système, en éliminant par une projection les degrés de liberté de charge. De plus, notre méthode ne nous limitera pas au faible couplage : la séparation spin-charge permet, au quart de remplissage, d´obtenir directement dans une limite de forte répulsion coulombienne un modèle de spin. Ce modèle de Heisenberg généralisé peut être étudié dans un voisinage du point critique à symétrie maximale SU(4), dans le même esprit que pour le modèle spin-orbital du chapitre IV.

L'étude des liquides de spin apparaissant dans la deux-chaîne en dehors du demi remplissage a été initiée par H. Schulz [109] : génériquement, un élargissement de la symétrie au groupe SO(6) $\simeq$ SU(4) se produit à basse énergie au sens du groupe de renormalisation. Ce groupe SO(6), qui unifie degrés de liberté de spin et orbitaux - tout comme dans le modèle de Hubbard SU(4) - est un sous-groupe du groupe SO(8) de symétrie infrarouge de la deux-chaîne au demi remplissage. Ici, en raison de la séparation spin-charge, les degrés de liberté de charge se découplent et l´élargissement à SO(8) est interdit. Malgré ces différences, quatre phases de liquide de spin gapé à symétrie SO(6) apparaissent encore.

Frappé par l´existence de plusieurs phases à symétrie élargie, en nombre fini, je me suis intéressé à la structure sous-jacente à la présence de ces différentes variétés de liquides de spin gapés. Il se trouve qu´une manière de mettre en évidence cette structure est d´exploiter certaines subtilités dans le phénomène d´élargissement de symétrie, ce qui fera l´objet de la première partie du chapitre. Dans un cadre assez général, nous décrivons comment l´élargissement de symétrie, contraint par les symétries initiales du modèle sur réseau (les symétries "physiques"), permet de classer les différentes phases à symétrie élargie. Dans une deuxième partie, nous appliquons cette méthode à l´étude d´un modèle sur réseau, l´échelle à deux montants identiques possédant l´invariance SU(2) dans l´espace du spin et U(1) dans l´espace d´isospin. Ceci nous permettra de dégager l´idée d´un "liquide de spin SO(6)", qui capture les propriétés physiques essentielles de cette échelle de Hubbard au voisinage du point SU(4)-symétrique, c´est-à-dire lorsque la dégénérescence orbitale joue son plus grand rôle.

V.1 Cas général

V.1.1 Elargissement de symétrie

Nous avons déjà rencontré à deux reprises le phénomène d´élargissement de symétrie dans des théories conformes (modèles de WZNW) perturbées par des interactions courant-courant : dans le modèle de Hubbard SU(4) au demi remplissage (où la symétrie est élargie à SO(8) lorsque l´interaction coulombienne n´est pas trop importante), et dans le modèle spin orbital (où la symétrie est élargie à SO(6) dans la phase C).

Ce fait est en fait générique, et dès que les interactions brisent la symétrie SU(4) - pourvu que la théorie des champs résultante consiste en une théorie conforme perturbée par des interactions courant-courant -, la possibilité est ouverte d´un élargissement de la symétrie à basse énergie. Notons l´importance de la marginalité des perturbations : c´est bien parce que d´une part, les différents termes d´interaction sont du "même ordre de grandeur", au sens du groupe de renormalisation, et que d´autre part l´évolution de couplages marginaux dans le flot du groupe de renormalisation est une compétition délicate entre ces différents termes, qu´un élargissement de symétrie est possible, sans qu´il soit nécessaire d´ajuster de manière fine les couplages nus.

L´intérêt d´un tel phenomène est clair : le secteur basse énergie de la théorie est décrit par une théorie plus symétrique, donc plus simple. Dans les cas que nous rencontrerons, la théorie la plus symétrique sera même intégrable, si bien que l´élargissement de symétrie aura pour conséquence la connaissance précise du spectre de basse énergie. Un autre intérêt, moins immédiat, de l´élargissement de symétrie, est qu´il fournit un moyen de classer les différents types de phases accessibles à un modèle sur réseau.

Dans la suite nous considérerons pour commencer un modèle défini par l´action :

$$S = S_0 + S_{\text{int}} \tag{V.1}$$

où S_0 est l´action du modèle de WZNW au niveau k construit sur le groupe de Lie G, les courants de ce modèle étant $\mathcal{J}_{\text{P}}^A$, $A = 1, ..., N_G$ où N_G est la dimension de l´algèbre $\mathfrak{g}$. L´interaction est de la forme :

$$S_{\text{int}} = \int d^2x\, \mathcal{L}_{\text{int}} = \int \frac{d^2x}{\pi k}\, g_\alpha \mathcal{O}_\alpha. \tag{V.2}$$

Les opérateurs marginaux $\mathcal{O}_\alpha$, qui brisent l´invariance conforme de S_0, sont supposés être des formes quadratiques des courants $\mathcal{J}_{\text{P}}^A$ du modèle de WZNW :

$$\mathcal{O}_\alpha = \mathcal{J}_{\text{R}}^A\, d^\alpha_{AB}\, \mathcal{J}_{\text{L}}^B, \tag{V.3}$$

définies par un certain nombre de matrices d^α. Nous nous restreindrons à des modèles chiraux invariants, si bien que les matrices d^α sont symétriques et réelles [1]. En pratique, ces matrices d^α sont déterminées par le groupe d´invariance H (qui est le groupe d´invariance physique) de l´action totale S.

[1]Nous choisissons une base réelle et orthonormée pour les courants $\mathcal{J}_{\text{P}}^A$.

Il existe donc deux groupes de symétrie : G est le groupe d´invariance "maximal" associé aux degrés de liberté microscopiques. Plus précisément, l´action libre S_0 possède une symétrie $\mathrm{G}|_{\mathrm{R}} \times \mathrm{G}|_{\mathrm{L}}$, dont les générateurs locaux sont les $\mathcal{J}_{\mathrm{P}}^{A}$. Le groupe d´invariance de la théorie nue en interaction est $\mathrm{H} = (\mathrm{H}|_{\mathrm{R}} \times \mathrm{H}|_{\mathrm{L}})_{\mathrm{diag}}$, et si nous notons N_H la dimension de l´algèbre $\mathfrak{h}$, on pourra choisir les N_H générateurs locaux de H comme les $\mathcal{J}_{\mathrm{R}}^{A} + \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{A}$, $A = 1, ..., N_H$.

L´action (V.1) acquiert en outre une symétrie élargie G lorsque l´interaction (V.2) est construite sur l´opérateur de Casimir de G, c´est-à-dire lorsque $g_\alpha \mathcal{O}_\alpha \propto \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^{A} \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{A}$. Ceci est réalisé sur un certain rayon dans l´espace des g_α, le rayon isotropique.

Le flot du groupe de renormalisation à une boucle pour le modèle (V.1) montre que, pour un large ensemble des conditions initiales $g_\alpha(a_0)$, les couplages divergent à une échelle finie ξ^*, tout en tendant vers le rayon isotropique. Ce fait est bien connu pour le modèle de Thirring U(1) dans les phases de fort couplage, pour lequel le fonction β indique un élargissement de la symétrie à SU(2). Il a été remarqué, et exploité, pour des modèles possédant un groupe de symétrie G des degrés de liberté microscopiques plus gros [77, 110]. Les critiques que l´on peut formuler quant à ces conclusions basées sur un calcul à une boucle peuvent être partiellement contournées en utilisant une fonction β resommée à tous les ordres de perturbation [80] dans un développement en $1/k$, qui montre encore un élargissement de la symétrie à basse énergie. Pour cette fonction β resommée, l´élargissement de symétrie est intimement lié à la présence de pôles qui attirent le flot vers un point isotropique.

On peut schématiser le phénomène d´élargissement de symétrie de la manière suivante :

$$\mathrm{G}|_{\mathrm{R}} \times \mathrm{G}|_{\mathrm{L}} \xrightarrow{\text{interaction}} \mathrm{H} = (\mathrm{H}|_{\mathrm{R}} \times \mathrm{H}|_{\mathrm{L}})_{\mathrm{diag}} \xrightarrow{\text{R.G.}} \mathrm{G}. \tag{V.4}$$

Le sens de cet élargissement, qui a été largement discuté dans le chapitre III, est que le modèle possède à basse énergie une symétrie approximative G, le spectre étant une déformation adiabatique de celui de la théorie isotropique.

V.1.2 Dualités

Nous allons nous intéresser ici à une autre propriété de l´élargissement de symétrie : le schéma (V.4) qui décrit l´élargissement de symétrie n´est pas vraiment complet, l´élargissement pouvant avoir lieu de plusieurs manières. En effet, il y a plusieurs façons de plonger H dans G, si bien que le point d´arrivée du schéma (V.4) est plutôt le groupe $\mathrm{G}^* = \big(\widetilde{\mathrm{G}}|_{\mathrm{R}} \times \widetilde{\mathrm{G}}|_{\mathrm{L}}\big)_{\mathrm{diag}}$, qui est en général différent de $(\mathrm{G}|_{\mathrm{R}} \times \mathrm{G}|_{\mathrm{L}})_{\mathrm{diag}}$.

Concrètement, le flot du groupe de renormalisation amène le modèle vers une théorie effective G-invariante, moyennant une redéfinition des champs dans l´un des secteurs de chiralité. Nous allons montrer que les différentes manières d´élargir la symétrie peuvent être classées exhaustivement, ce qui fournira une classification des phases à symétrie élargie.

A cette fin, prenons le problème à l´envers, en supposant que le flot des constantes de couplages amène le modèle dans l´infrarouge vers une théorie isotrope définie par l´action :

$$S = S_0 + \int \frac{d^2x}{\pi\, k} \; g^* \; \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^A \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^A. \tag{V.5}$$

Essayons à présent de déformer cette action S par des transformations (locales dans les courants) laissant invariantes S_0, et ne changeant par la forme (V.2,V.3) de l´interaction. Ces transformations doivent laisser invariante l'action conforme S_0, ce qui signifie que les algèbres $\mathfrak{g}_R, \mathfrak{g}_L$ sont invariantes, à un automorphisme près. Appelons $\mathcal{A}_{\mathrm{P}}$ l´automorphisme de $\mathfrak{g}$ agissant sur $\mathfrak{g}_{\mathrm{P}}$. Il est représenté sur les courants par une matrice orthogonale [2] Ω_{P} :

$$\mathcal{J}_{\mathrm{P}}^{\prime A} = \mathcal{A}_{\mathrm{P}}(\mathcal{J}_{\mathrm{P}}^A) = \Omega_{\mathrm{P}}^{AB} \mathcal{J}_{\mathrm{P}}^B, \tag{V.6}$$

si bien que l´action pour les nouveaux courants est :

$$S = S_0 + \int \frac{d^2x}{\pi\, k} \; g^* \; \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^{\prime A} \, ({}^t\Omega_{\mathrm{R}}\Omega_{\mathrm{L}})^{AB} \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{\prime B}. \tag{V.7}$$

Cette action est encore G-invariante, les générateurs locaux étant donnés par : $\Omega_{\mathrm{R}}^{BA}\mathcal{J}_{\mathrm{R}}^{\prime B} + \Omega_{\mathrm{L}}^{BA}\mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{\prime B}$. Remarquons que $\Omega_{\mathrm{R}} = \Omega_{\mathrm{L}}$ correspond simplement à une redéfinition des courants locaux, qui est une déformation triviale de l´action initiale (V.5). Nous pouvons donc pour la suite nous restreindre au cas $\Omega_{\mathrm{L}} = \mathrm{Id}$, et nous omettrons l´indice R de l´automorphisme agissant sur $\mathfrak{g}_{\mathrm{R}}$. La contrainte sur l´automorphisme $\mathcal{A}$ pour que l´action (V.7) soit de la forme (V.1,V.2) est que Ω puisse se décomposer sur les matrices d^α :

$$\Omega = \lambda^\alpha \, d^\alpha. \tag{V.8}$$

Avant d´examiner les conséquences de cette contrainte, remarquons que la transformation (V.6) sur les courants, qui relie les deux actions (V.7) et (V.5) à l´échelle d´élargissement de symétrie, et que nous appelerons désormais dualité, peut se représenter directement sur les constantes de couplage à toute échelle. En effet, pour peu

[2] Les automorphismes constituent un sous groupe de $\mathrm{O}(N_G)$, puisqu´ils préservent la forme de Killing.

que l´action soit renormalisable à deux boucles, les matrices d^α forment une algèbre [3] [80] : $d^\alpha d^\beta = D^{\alpha\beta}_\gamma\, d^\gamma$, si bien que $g_\alpha\, \mathcal{J}^A_{\mathrm{R}}\, d^\alpha_{AB} \mathcal{J}^B_{\mathrm{L}} = g'_\alpha\, \mathcal{J}'^A_{\mathrm{R}}\, d^\alpha_{AB} \mathcal{J}'^B_{\mathrm{L}}$ avec $g'_\alpha = D^{\gamma\beta}_\alpha\, \lambda^\beta g_\gamma$. La dualité, paramétrée par Ω, relie donc exactement, à toute échelle, des modèles possédant des couplages différents ; en particulier, les modèles nus peuvent être reliés par la dualité : il s´agit d´une symétrie du diagramme des phases.

Ceci nous permet d´identifier le point d´arrivée du schéma (V.4) : lorsqu´il y a élargissement de symétrie, la théorie à l´échelle d´élargissement est étiquetée par un automorphisme Ω vérifiant la contrainte (V.8), et le groupe de symétrie à basse énergie est $\mathrm{G}^* = \left(\widetilde{\mathrm{G}}\big|_{\mathrm{R}} \times \mathrm{G}\big|_{\mathrm{L}}\right)_{\mathrm{diag}}$, les générateurs locaux étant $\Omega^{AB} \mathcal{J}^B_{\mathrm{R}} + \mathcal{J}^A_{\mathrm{L}}$, $A = 1, ..., N_G$.

Propriétés de $\mathcal{A}$ La contrainte (V.8) est suffisamment forte pour n´autoriser qu´un nombre fini d´automorphismes. En effet, (V.8) implique que Ω doit être une matrice symétrique ; comme Ω est par ailleurs orthogonale, on en déduit que $\Omega^2 =$ Id. Les transformations de dualité sont donc involutives. Dans une bonne base, dont on pourra toujours choisir les N_H premiers éléments comme $\left(\mathcal{J}^A_{\mathrm{R}}\right)_{A=1...N_H}$, l´automorphisme $\mathcal{A}$ se représente donc sur les courants par :

$$\mathcal{A}(\mathcal{J}^A_{\mathrm{R}}) = \varepsilon^A \mathcal{J}^A_{\mathrm{R}}, \qquad \varepsilon^A = \pm 1 \tag{V.9}$$

(sans sommation dans cette égalité) avec $\varepsilon^A = +1$ pour $A = 1...N_H$.

Action de $\mathcal{A}$ sur les champs Nous avons défini $\mathcal{A}$ par son action sur la représentation adjointe. Il est également possible de donner son action sur une représentation quelconque de plus haut poids λ. A cet effet il est bon de rappeler la structure de Aut($\mathfrak{g}$), le groupe des automorphismes de $\mathfrak{g}$ [111]. En plus des automorphismes intérieurs, qui consistent en les changements de base dans la représentation fondamentale de G, il existe des automorphismes extérieurs, qui ne sont pas des changements de base. Pour $\mathfrak{g} = \mathfrak{su}(n)$ (qui est le cas qui nous intéressera principalement), l´opération de conjugaison $\mathcal{C}$, définie sur les générateurs par $\mathcal{C} : T^a \to -{}^tT^a$, ^{t} étant la transposition, est un exemple d´automorphisme extérieur. Le groupe Aut($\mathfrak{su}(n)$) est le produit des automorphismes intérieurs par un groupe discret $\mathbb{Z}_2$ d´éléments $\{\mathrm{Id}, \mathcal{C}\}$. Ceci permet de définir deux classes de dualités :

• la classe “paire”, pour laquelle $\mathcal{A}$ est intérieur. Etant donné une représentation λ, la dualité sera représentée par une application

$$f^{\mathcal{A}}_\lambda = M^{\mathcal{A}}_\lambda, \tag{V.10}$$

[3] Les coefficients $D^{\alpha\beta}_\gamma$ sont précisément ceux qui interviennent dans le calcul de la fonction β resommée, cf. annexe B.

où $M^{\mathcal{A}}_{\lambda}$ est une matrice agissant à l´intérieur de λ.

• la classe "impaire", pour laquelle $\mathcal{A}$ n´est pas intérieur. La dualité agira alors sur la représentation λ comme une application

$$f^{\mathcal{A}}_{\lambda} = \mathcal{C} \circ M^{\mathcal{A}}_{\lambda}, \tag{V.11}$$

où $M^{\mathcal{A}}_{\lambda}$ agit à l´intérieur de λ : la dualité *conjugue*, c´est-à-dire qu´elle envoie la représentation λ sur sa conjuguée λ^*, et réciproquement.

V.1.3 Conséquences physiques

Nous allons étudier quelques-unes des propriétés physiques d´un modèle à symétrie élargie dans la classe définie par un automorphisme $\mathcal{A}$. Nous allons voir qu´un des effets de la dualité est un changement de statut de certains opérateurs entre le régime ultraviolet et le régime infrarouge : dans une bonne base de $\mathfrak{g}$, certaines des densités de courant et de charge de Noether sont échangées :

$$\begin{aligned} J^A_0 &\xrightarrow{\text{R.G.}} J^A_1 \\ J^A_1 &\xrightarrow{\text{R.G.}} J^A_0 \end{aligned} \tag{V.12}$$

au sens que la densité de courant de Noether J^A_0 pour le groupe ultraviolet G est la densité de courant de Noether J^A_1 pour le groupe infrarouge G*, et inversement. Cette "transmutation chirale" aura des conséquences profondes sur la physique de basse énergie du système.

Pour simplifier la discussion, nous considérons ici le cas du niveau $k = 1$ pour le groupe G=SU(n), qui est la situation apparaissant naturellement comme limite continue d´un modèle de fermions (possédant un indice de couleur $a = 1...n$) sur réseau, en l´absence de couplage spin-charge. Dans la limite infrarouge, et dans la phase à symétrie élargie de type $\mathcal{A}$, ce modèle possède donc l´action effective :

$$S = S_0 + \int \frac{d^2x}{\pi} \; g^* \, \mathcal{J}^A_{\text{R}} \, \Omega^{AB} \mathcal{J}^B_{\text{L}}. \tag{V.13}$$

Les courants sont reliés aux fermions chiraux $\psi_{\text{P}a}$, (limite continue des fermions sur le réseau c_{ia}, voir eq. (I.33)) par une formule analogue à (I.63) : $\mathcal{J}^A_{\text{P}} = \psi^{\dagger}_{\text{P}a} T^A_{ab} \psi_{\text{P}b}$ où les T^A forment une base orthonormée des matrices hermitiques $n \times n$ de trace nulle.

Notons que dans le cas $\Omega = \mathbb{I}$, l´action (V.13) est celle du modèle de Gross Neveu SU(n). Ce modèle est intégrable [112, 113, 114], son spectre comprenant $n-1$ branches d´excitations massives, de masse $m_r = m_1 \sin(r\pi/n)$, $r = 1, ..., n-1$. La particule r se transforme dans la représentation à une colonne et r lignes de SU(n).

Nombres quantiques

En plus de la charge électrique totale $Q = \int dx \left(:\psi^\dagger_{\mathrm{R}a}\psi_{\mathrm{R}a}: + :\psi^\dagger_{\mathrm{L}a}\psi_{\mathrm{L}a}: \right)$, ce modèle possède dans l´infrarouge $n^2 - 1$ autres quantités conservées,

$$\widetilde{Q}^A = \int dx \, \left(\Omega^{AB}\mathcal{J}^A_{\mathrm{R}} + \mathcal{J}^B_{\mathrm{L}}\right). \tag{V.14}$$

Si nous choisissons une base dans $\mathfrak{g}$ qui diagonalise Ω selon (V.9) [4], les quantités conservées $\widetilde{Q}^A$ ont une interprétation physique simple. En effet, étant donné un élément A de cette base, les courants de Noether J^A_μ associés aux transformations *diagonales* autour de la direction A (i.e. les transformations $e^{i\lambda Q^A}$ générées par $Q^A = \sum_i c^\dagger_{ia}T^A_{ab}c_{ib}$) sont :

$$J^A_0 = \mathcal{J}^A_{\mathrm{L}} + \mathcal{J}^A_{\mathrm{R}}, \qquad J^A_1 = \mathcal{J}^A_{\mathrm{L}} - \mathcal{J}^A_{\mathrm{R}}, \tag{V.15}$$

de sorte que si $\varepsilon^A = +1$, $\widetilde{Q}^A = Q^A = \int dx \, J^A_0$ est la charge totale associée à cette transformation, tandis que si $\varepsilon^A = -1$, $\widetilde{Q}^A = \int dx \, J^A_1$ est le courant total de cette transformation.

Les états propres de plus basse énergie du modèle seront donc étiquetés par des nombres quantiques qui seront, par rapport au groupe ultraviolet, ou bien des nombres quantiques de charge, ou bien des nombres quantiques de courant.

Paramètres d´ordre

Un paramètre d´ordre, pour prendre une valeur moyenne non nulle dans le vide, doit être un singulet du groupe de symétrie. Celui-ci étant dans l´infrarouge $\mathrm{G}^* = \left(\widetilde{\mathrm{G}}\big|_{\mathrm{R}} \times \mathrm{G}\big|_{\mathrm{L}}\right)_{\mathrm{diag}}$, les opérateurs susceptibles de prendre une valeur moyenne ne seront pas simplement des singulets de $\left(\mathrm{G}\big|_{\mathrm{R}} \times \mathrm{G}\big|_{\mathrm{L}}\right)_{\mathrm{diag}}$ dès lors que $\mathcal{A} \neq \mathrm{Id}$. Pour identifier les singulets de G^*, il faut suivre la procédure suivante : étant donné un opérateur se transformant dans $(\lambda_{\mathrm{R}}, \lambda_{\mathrm{L}})$ sous $\mathrm{G}\big|_{\mathrm{R}} \times \mathrm{G}\big|_{\mathrm{L}}$, on détermine la représentation $\widetilde{\lambda}_{\mathrm{R}}$ dans laquelle il se transforme sous $\widetilde{\mathrm{G}}_{\mathrm{R}}$, puis on effectue le produit $\widetilde{\lambda}_{\mathrm{R}} \otimes \lambda_{\mathrm{L}}$. Notons que la correspondance $\lambda_{\mathrm{R}} \to \widetilde{\lambda}_{\mathrm{R}}$ est l´application $f^{\mathcal{A}}_{\lambda_{\mathrm{R}}}$ précédemment introduite.

Un exemple permettra de clarifier cette discussion : si l´on cherche à construire un paramètre d´ordre bilinéaire en les fermions, faisant intervenir les deux secteurs de chiralité, on introduit $f^{\mathcal{A}}_{\square}$ qui représente la dualité sur les fermions droits. L´opérateur singulet sous G^* est alors :

$$\mathcal{O} = \psi^\dagger_{\mathrm{L}a} \, \left[f^{\mathcal{A}}_{\square}(\psi_{\mathrm{R}})\right]_a. \tag{V.16}$$

Cet opérateur $\mathcal{O}$ est qualitativement différent selon la parité de $\mathcal{A}$.

[4] Dans la suite, nous utiliserons systématiquement une telle base.

• Si la dualité $\mathcal{A}$ est paire, $\mathcal{O}$ est de la forme :

$$\mathcal{O} = \psi^{\dagger}_{\mathrm{L}a} \, \left(M^{\mathcal{A}}_{\square}\right)_{ab} \psi_{\mathrm{R}b}. \tag{V.17}$$

L´ordre est alors *diagonal*, $\mathcal{O}$ étant l´expression continue de la partie oscillant à $2k_{\mathrm{F}}$ d´un paramètre d´ordre sur le réseau de la forme $c^{\dagger}_{ia} \left(M^{\mathcal{A}}_{\square}\right)_{ab} c_{jb}$. Cet ordre est similaire à une onde de densité de charge, cette dernière étant obtenue dans le cas particulier $\mathcal{A} = \mathrm{Id}$, $j = i$.

• Si la dualité $\mathcal{A}$ est impaire, $\mathcal{O}$ est de la forme :

$$\mathcal{O} = \psi^{\dagger}_{\mathrm{L}a} \, \left(M^{\mathcal{A}}_{\square}\right)_{ab} \psi^{\dagger}_{\mathrm{R}b}. \tag{V.18}$$

En effet, l´expression de $f^{\mathcal{A}}_{\square}$ fait maintenant intervenir l´opération de conjugaison $\mathcal{C} : \psi_{\mathrm{R}a} \to \psi'_{\mathrm{R}a} = \psi^{\dagger}_{\mathrm{R}a}$. L´ordre est à présent *hors diagonal*, et correspond à un appariement de type supraconducteur dont la forme précise dépend de la matrice $M^{\mathcal{A}}_{\square}$. L´opérateur $\mathcal{O}$, partie uniforme de la limite continue d´un paramètre d´ordre sur le réseau de la forme $c^{\dagger}_{ia} \, \left(M^{\mathcal{A}}_{\square}\right)_{ab} c^{\dagger}_{jb}$, n´est cependant plus invariant sous le groupe U(1) de charge, si bien qu´il ne pourra pas développer de valeur moyenne non nulle : seule la partie de pur spin prendra une valeur moyenne non nulle. Cependant, il pourra dans une phase métallique avoir des corrélations à quasi longue portée.

Densités de spin

Les dualités affectent également les densités de spin de manière non triviale. Les densités de spin sont des champs se transformant dans la représentation adjointe sous le groupe $\mathrm{SU}(n)|_{\mathrm{R}} \times \mathrm{SU}(n)|_{\mathrm{L}}$. Elles se décomposent, en général, sur les primaires du modèle de WZNW, qui, pour $\mathrm{SU}(n)_1$ sont les champs $\Phi_{\lambda_{\mathrm{R}},\lambda_{\mathrm{L}}}$ où $\lambda_{\mathrm{R}}, \lambda_{\mathrm{L}}$ sont les représentations de tableau d´Young comportant une seule colonne et m lignes, $m = 0, ..., n-1$. Dans la suite, nous noterons λ_m le plus haut poids de la représentation de tableau d´Young comportant m lignes. Le singulet ($m = 0$) correspond à la tour conforme de l´identité, et les densités de spin qui lui sont associés sont les densités uniformes $\mathcal{J}^{A}_{\mathrm{R}} + \mathcal{J}^{A}_{\mathrm{L}}$, dont les propriétés de transformation sous les dualités ont déjà été mentionnée. Lorsque $m \neq 0$, la seule manière de construire un objet se transformant dans l´adjointe est la suivante [5] :

$$\mathcal{N}^{A}_{(m)} = \mathrm{Tr}\left(T^{A}_{\lambda_m} \, \Phi_{\lambda_{n-m},\lambda_m}\right), \tag{V.19}$$

où les $T^{A}_{\lambda_m}$, $A = 1, ..., n^2-1$ sont les générateurs de $\mathrm{SU}(n)$ dans la représentation de plus haut poids λ_m. On construit ainsi $n-1$ densités de spin, $\mathcal{N}^{A}_{(m)}$ étant la

[5] La seule manière d´obtenir l´adjointe dans le produit tensoriel $\lambda_m \otimes \lambda_{m'}$ est de choisir $m + m' = n$.

composante oscillant à $2mk_{\mathrm{F}}$ de la limite continue des opérateurs de spin sur le réseau. Ceci constitue une simple généralisation de l´équation (II.15) dans le cas de $\mathrm{SU}(4)_1$.

Nous pouvons à présent nous poser la question des propriétés de transformation de ces densités de spin sous le groupe infrarouge $\mathrm{G}^* = \left(\widetilde{\mathrm{SU}(n)}\big|_{\mathrm{R}} \times \mathrm{SU}(n)\big|_{\mathrm{L}}\right)_{\mathrm{diag}}$. Au vu de (V.10,V.11) et (V.19), les densités $\mathcal{N}^A_{(m)}$ ne se transforment plus en général dans une représentation irréductible de G^*, mais appartiennent à différentes représentations irréductibles de G^*. Une fois encore, ces densités de spin sont affectées différemment selon la parité de la dualité. La raison en est que la représentation λ_{R} devient la représentation $\widetilde{\lambda}_{\mathrm{R}}$ sous le groupe G^*, avec $\widetilde{\lambda}_{\mathrm{R}} = \lambda_{\mathrm{R}}$ si la dualité est paire tandis que $\widetilde{\lambda}_{\mathrm{R}} = \lambda^*_{\mathrm{R}}$ si la dualité est impaire.

• Si la dualité est *paire*, en utilisant (V.10) et (V.19), il apparaît que les $\mathcal{N}^A_{(m)}$ sont des états du produit tensoriel $\lambda_{n-m} \otimes \lambda_m$, qui contient l´adjointe mais aussi d´autres représentations. Toutes les représentations apparaissant dans ce produit tensoriel ont un point commun : elles appartiennent à la même classe de congruence (voir A.2.1), celle de l´adjointe. Les densités de spin restent donc des opérateurs de “spin entier” (voir A.2.2).

• Si la dualité est *impaire*, les densités $\mathcal{N}^A_{(m)}$ sont maintenant des états du produit tensoriel $\lambda_m \otimes \lambda_m$ sous l´action du groupe G^*, puisque la conjuguée de λ_{n-m} est λ_m. Les représentations de ce produit tensoriel ont toutes la même classe de congruence, qui n´est pas, en général [6], la classe de congruence de l´adjointe : les densités de spin $\mathcal{N}^A_{(m)}$ ne sont plus de “spin entier”.

Cette distinction aura des conséquences sur la cohérence des excitations de spin. En effet, rappelons que le spectre du modèle de Gross Neveu $\mathrm{SU}(n)$ est constitué de r branches de particules ($r = 1, ..., n-1$), la particule $|\xi_r\rangle$ se transformant dans la repésentation de tableau d´Young à une colonne et r lignes. La classe de congruence de $|\xi_r\rangle$ (voir A.2.1) est $p_r = r \neq 0$: le spectre du modèle de Gross Neveu $\mathrm{SU}(n)$ ne comprend pas de particule de spin entier (i.e. appartenant à la classe de congruence de l´adjointe). En conséquence, lorsque la dualité est paire, les facteurs de forme des opérateurs de spin sont nuls pour les états à une particule (pour une demonstration, voir annexe A.2.2), de sorte que les excitations de spin sont incohérentes. En revanche, dès que la dualité est impaire, les densités de spin $\mathcal{N}^A_{(m)}$ ne sont plus de spin entier, mais appartiennent à la classe de congruence $p_m = 2m \bmod(n)$. Dans ces conditions, le facteur de forme à une particule peut être non nul :

$$\left\langle 0 \middle| \mathcal{N}^A_{(m)} \middle| \xi_{n-p_m} \right\rangle \neq 0. \qquad \text{(V.20)}$$

[6] Une exception se présente lorsque λ_m est autoconjuguée, i.e. $2m = n$.

Les excitations de spin sont donc cohérentes dans les phases à dualité impaire.

Susceptibilités et raideurs

Susceptibilités Plusieurs susceptibilités peuvent être définies pour le modèle que nous considérons. On peut en effet envisager de coupler le système à un "champ magnétique" h^A généralisé, dans une direction quelconque de $\mathfrak{g}$. Au premier ordre en h^A, il convient d´ajouter à l´action (V.13) un terme linéaire en les courants, de sorte que l´action totale est :

$$S_{\text{champ}}[h] = S + \int d^2x \; h^A \left(\mathcal{J}_{\mathrm{R}}^A + \mathcal{J}_{\mathrm{L}}^A\right). \tag{V.21}$$

Les susceptibilités à température nulle sont alors définies comme :

$$\chi_{AB} = \left.\frac{\partial^2 E[h]}{\partial h^A \partial h^B}\right|_{h=0}, \tag{V.22}$$

$E[h]$ étant la valeur moyenne de l´énergie par unité de longueur sous champ. Dans un système avec gap, comme c´est le cas ici, on attend habituellement une valeur nulle de la susceptibilité à température nulle : le champ n´affecte que les états magnétiques, qui ne seront accessibles qu´à partir d´une température de l´ordre de Δ/k_{B}, Δ étant le gap. Cependant, le fait que certains des nombres quantiques soient des courants, et non des charges, modifie cette conclusion. Nous allons voir que les susceptibilités diagonales χ_{AA} sont non nulles si $\varepsilon^A = -1$.

Considérons donc une de ces susceptibilités $\chi_{A_0A_0}$, obtenue comme réponse à un champ $h^A = h\,\delta^{AA_0}$. La direction A_0 dans $\mathfrak{g}$ peut toujours être choisie comme l´un des générateurs de Cartan. On peut donc bosoniser l´action (V.21) en introduisant $n-1$ champs bosoniques $(\Phi_\mu)_{\mu=1\ldots n-1}$, les densités de courant dans la direction A_0 étant représentées par les gradients de Φ_1 :

$$\mathcal{J}_{\mathrm{L}}^{A_0} = \frac{i}{\sqrt{\pi}}\,\partial\phi_{\mathrm{L}1}\,, \qquad \mathcal{J}_{\mathrm{R}}^{A_0} = -\frac{i}{\sqrt{\pi}}\,\overline{\partial}\phi_{\mathrm{R}1}. \tag{V.23}$$

Le terme de "champ magnétique" dans l´action (V.21) est alors $h/\sqrt{\pi}\int d^2x\,\partial_x\Phi_1$, et peut être absorbé par une redéfinition des champs Φ_1, Θ_1 :

$$\Phi_1(x) \to \hat{\Phi}_1(x) = \Phi_1(x) + \frac{h}{u\sqrt{\pi}}\,x\,, \qquad \Theta_1(x) \to \hat{\Theta}_1(x) = \Theta_1(x), \tag{V.24}$$

$u/2$ étant le coefficient du terme $(\partial_x\Phi_1)^2$ dans l´action (V.13). D´autre part, l´invariance de l´action (V.13) par les transformations $e^{i\lambda\widetilde{Q}^A}$ contraint sa dépendance en les champs $\phi_{\text{P}1}$. En effet, ces transformations se représentent sur les champs bosoniques de la manière suivante :

$$\begin{aligned} &\Phi_1 \to \Phi_1\,, \quad \Theta_1 \to \Theta_1 - \lambda/\sqrt{\pi}\,, && \text{si} \quad \varepsilon^{A_0} = +1, \\ &\Phi_1 \to \Phi_1 + \lambda/\sqrt{\pi}\,, \quad \Theta_1 \to \Theta_1\,, && \text{si} \quad \varepsilon^{A_0} = -1. \end{aligned} \tag{V.25}$$

Lorsque $\varepsilon^{A_0} = +1$, la compétition entre les opérateurs de vertex $\cos(\beta\Phi_1)$ de l´action (V.13), qui tendent à geler Φ_1, et le terme de champ magnétique qui s´y oppose, résulte en une transition commensurable-incommensurable pour une valeur $h \sim \Delta$ [63, 64, 65, 66], si bien que $\chi_{A_0A_0} = 0$. En revanche, losrque $\varepsilon^{A_0} = -1$, l´action (V.13) ne peut plus contenir d´opérateurs $\cos(\beta\Phi_1)$ comme le montre (V.25). C´est en fait le champ dual Θ_1 qui est gelé lorsqu´un gap est ouvert. La transformation (V.24) n´affecte que le terme cinétique, et l´on a

$$S_{\text{champ}}[h][\Phi_1, \Phi_{\mu\neq 1}] = S_{\text{champ}}[h=0][\hat{\Phi}_1, \Phi_{\mu\neq 1}] - \beta L \frac{h^2}{2u\pi}, \tag{V.26}$$

β étant l´inverse de la température et L la taille du système, si bien que (V.22) fournit

$$\chi_{A_0A_0} = \frac{1}{u\pi} \neq 0 \quad \text{si} \quad \varepsilon^{A_0} = -1 \tag{V.27}$$

Raideurs La raideur, quantité duale à la susceptibilité, mesure la réponse du système à une modification des conditions aux limites. Nous imposons une torsion dans l´espace des couleurs du modèle sur réseau à N sites, de la forme

$$c_{i+N,a} = \mathcal{U}_{ab}\; c_{i,b}\,, \qquad \mathcal{U} = \exp\left(i\lambda^A T^A_{\square}\right), \tag{V.28}$$

$\mathcal{U}$ étant une matrice de SU(n), et en mesurons l´effet sur l´energie du fondamental $E[\lambda]$ par les raideurs :

$$\rho_{AB} = \left.\frac{\partial^2 E[\lambda]}{\partial\lambda^A \partial\lambda^B}\right|_{\lambda=0}. \tag{V.29}$$

Dans le continu, la torsion (V.28) se représente par les conditions aux limites : $\psi_{\text{P}a}(x+L) = \mathcal{U}_{ab}\,\psi_{\text{P}b}(x)$, et a donc pour conséquence d´affecter les courants de la manière suivante :

$$\mathcal{J}^A_{\text{P}}(x+L) = U_{AB}\mathcal{J}^B_{\text{P}}(x), \tag{V.30}$$

la matrice U étant définie par

$$\mathcal{U}^{-1} T^A_{\square} \mathcal{U} = U_{AB} T^B_{\square}. \tag{V.31}$$

L´avantage de la représentation (V.30) sur les courants est qu´elle ne fait plus référence à une base de Cartan particulière ; pour calculer la raideur diagonale $\rho_{A_0A_0}$

nous pourrons donc, comme pour les susceptibilités, choisir $T_{\square}^{A_0}$ comme un générateur de Cartan, et introduire $n-1$ champs bosoniques Φ_μ, Φ_1 étant associé aux courants $\mathcal{J}_{\mathrm{P}}^{A_0}$ selon (V.23). Il est plus simple de choisir une base de Cartan-Weyl pour $\mathfrak{g}$, les générateurs de Cartan étant H^a, $a = 1, ..., r$ et $H^1 = T_{\square}^{A_0}$, les opérateurs d´échelle étant notés E_α (voir A.1.1). Comme nous sommes intéressés à la torsion définie par $\mathcal{U} = e^{i\lambda H^1}$, l´application répétée de (A.5) permet de fixer la forme de U, qui est diagonale dans la base $\{H^a, E_\alpha\}$, avec :

$$U_{aa} = 1\,, \qquad U_{\alpha\alpha} = e^{i\lambda\alpha^1}, \tag{V.32}$$

(dans cette dernière égalité, α^1 désigne la première composante de la racine α). Par ailleurs, les courants associés aux opérateurs d´échelle dans cette base ont l´expression suivante [16] :

$$\mathcal{J}_{\mathrm{P}}^{E_\alpha} = \exp\left(i\mathrm{P}\sqrt{4\pi}\,\alpha^\mu\phi_{\mathrm{P}\mu}\right). \tag{V.33}$$

En comparant avec (V.30,V.32), on en déduit la représentation de la torsion sur le boson $\phi_{\mathrm{P}1}$:

$$\Phi_1(x+L) = \Phi_1(x)\,, \qquad \Theta_1(x+L) = \Theta_1(x) + \lambda/\sqrt{\pi}, \tag{V.34}$$

les autres bosons $\phi_{\mu\neq 1}$ ayant des conditions aux limites périodiques. La transformation canonique :

$$\Phi_1(x) \to \hat{\Phi}_1(x) = \Phi_1(x)\,, \qquad \Theta_1(x) \to \hat{\Theta}_1(x) = \Theta_1(x) - \frac{\lambda}{L\sqrt{\pi}}\,x \tag{V.35}$$

permet de revenir à des conditions aux limites périodiques pour Θ_1, ce qui montre une grande similarité de la raideur avec la susceptibilité : les rôles de Θ_1 et Φ_1 sont échangés. Ceci permet directement de conclure quant à $\rho_{A_0A_0}$:

$$\begin{aligned}\rho_{A_0A_0} &= 0 \quad \text{si} \quad \varepsilon^{A_0} = -1,\\ \rho_{A_0A_0} &\neq 0 \quad \text{si} \quad \varepsilon^{A_0} = +1.\end{aligned} \tag{V.36}$$

Ces résultats sur les susceptibilités et les raideurs méritent quelques commentaires. Tout d´abord, il est bon de rappeler qu´il est d´usage de considérer qu´un liquide de spin gapé possède une susceptibilité nulle. Or nous avons établi que dès lors que la dualité n´est pas triviale ($\mathcal{A} \neq \mathrm{Id}$), la susceptibilité est *non nulle* dans certaines directions. Une implication physique est l´absence de plateaux d´aimantation, dans un système gapé en spin, lorsque l´on applique un champ magnétique dans certaines directions. Le liquide de spin gapé alors obtenu est “compressible” magnétiquement, dans certaines directions. La propriété duale, à une dimension, est l´absence de raideur dans ces mêmes directions. Ceci permet de proposer que de manière générique, pour un liquide de spin gapé à une dimension, le produit de la susceptibilité et de la raideur doit s´annuller :

$$\chi_{AA} \cdot \rho_{AA} = 0\,, \qquad \forall\, A. \tag{V.37}$$

Notons que ces deux quantités ne peuvent pas s´annuller simultanément ; l´annulation de ρ_{AA} est en effet associée au gel du champ Φ_1, tandis que l´annulation de χ_{AA} se produit lorsque le champ dual Θ_1 est gelé.

V.1.4 Robustesse des résultats

Avant de résumer les principaux résultats que nous avons obtenus, il convient de faire une remarque quand à la robustesse de ceux-ci vis à vis d´une petite perturbation brisant la symétrie. En effet, les résultats précédemment établis concernent les phases d´élargissement "total" de la symétrie : le vide est supposé être exactement invariant sous le groupe infrarouge élargi G*. Si cet élargissement devient asymptotiquement exact [79] dans la limite d´échelle $a_0 \ll m^{-1}$ où m est l´échelle de masse dynamiquement générée, nous avons donné des arguments dans le chapitre III qui permettent d´interpréter ce phénomène comme un élargissement de symétrie approximatif lorsque ma_0 est fini non nul. Il y a donc une certaine robustesse à l´introduction d´anisotropie, le spectre de la théorie étant alors une déformation adiabatique du spectre de la théorie symétrique. On peut se demander ce qu´il advient de propriétés plus fines comme la cohérence des excitations lorsqu´une faible anisotropie est présente. Il se trouve que les résultats sont encore robustes, ce qu´on peut pressentir étant donnée la nature massive de la théorie.

La preuve de cette robustesse pour la cohérence des excitations fait intervenir les facteurs de forme des opérateurs de spin, que l´on peut calculer en perturbation autour du point symétrique, ce développement perturbatif étant par hypothèse légitime dans une phase à symétrie approximative. Explicitement, le hamitonien effectif de la théorie est donné par :

$$H = H^* + \int dx\, \delta g_\alpha \mathcal{O}_\alpha, \tag{V.38}$$

où H^* est le hamiltonien G*-symétrique, et où de faibles perturbations δg_α brisent la symétrie G*. Les opérateurs $\mathcal{O}_\alpha$ sont de la forme courant-courant (voir eq. (V.3)), ou bien des puissances d´opérateurs courant-courant. Les quantités physiques seront évaluées dans un développement en δg_α. Un facteur de forme pour un opérateur de spin entre le vide et un état propre $|\xi\rangle$ aura alors comme correction au premier ordre en δg_α (nous reprenons les notations de l´annexe A) :

$$\begin{aligned} \delta\mathcal{F}_\xi^{\mathcal{S}^A} &= \delta g_\alpha \left\langle 0|\mathcal{O}_\alpha \mathcal{S}^A|\xi\right\rangle \\ &= 0, \end{aligned} \tag{V.39}$$

où la dernière égalité s´obtient en appliquant le raisonnement de l´annexe A page 203 à l´opérateur $\mathcal{O}_\alpha\mathcal{S}^A$, lui-même de spin entier puisque $\mathcal{O}_\alpha$ et $\mathcal{S}^A$ le sont. Cet argument est valable à tout ordre de la série de perturbation.

En conclusion, l´ensemble des propriétés ennoncées au point de symétrie exacte sont robustes à l´introduction d´une anisotropie.

V.1.5 Conclusion

Nous avons donc mis en évidence, lorsqu´il y a séparation spin-charge, l´existence de phases de liquides de spin gapés au voisinage du point critique $\mathrm{SU}(n)_1$. Ce point est en fait multicritique, et connecte des liquides de spin de natures différentes, ayant en commun une symétrie $\mathrm{SU}(n)^*$ approximative dans la limite infrarouge. Ces liquides de spin peuvent être classés par la nature du groupe de symétrie infrarouge $\mathrm{SU}(n)^*$, qui est relié au groupe $\mathrm{SU}(n)$ diagonal par des transformations de dualités. Ces dualités correspondent à une transmutation chirale des courants de Noether entre les limites ultraviolette et infrarouge. Cette transmutation se reflète à son tour dans les fonctions de réponse statiques du liquide de spin : elle implique une susceptibilité non nulle dans certaines directions. La propriété duale à une dimension est qu´on observe une raideur nulle dans ces directions.

Il est donc tentant de baptiser “liquide chiral” ces phases de liquides de spin où il y a transmutation chirale : la symétrie de parité semble brisée. Ce terme de liquide chiral mérite quelques commentaires, puisqu´il a été employé dans différents contextes par divers auteurs. Il ne s´agit pas ici de la notion la plus immédiate de liquide chiral défini comme un système dont le fondamental brise la symétrie de parité. Ces liquides chiraux ont été proposés initialement par Wen *et al.* [115] pour les systèmes de spin bidimensionnels, et est stabilisé par des interactions frustrantes. Dans notre cas, le fondamental est chiral invariant : seules les excitations ne sont pas invariantes par parité, (elles peuvent porter un courant j) et celles-ci apparaissent par paires (j et $-j$). Le liquide de spin chiral que nous obtenons est également à distinguer du liquide chiral introduit par Azaria *et al.* [116], qui intervient dans l´échelle zig-zag à trois montants. Dans cette situation, la théorie se factorise en deux parties commutantes, échangées par l´opération de parité, et le liquide de spin obtenu est sans gap en raison du méchanisme de stabilisation chirale [117]. Nous entendrons ici par liquide de spin chiral, em première approximation, un système dans lequel la transmutation chirale (V.12) a lieu lors du processus de renormalisation, c´est-à-dire un système dont les états excités portent des courants de Noether. Cependant, avec cette définition, la distinction entre liquide chiral et non chiral n´a pas beaucoup de sens : tous les liquides que nous avons obtenus seraient chiraux à l´exception d´un seul, correspondant à la dualité triviale ($\mathcal{A} = \mathrm{Id}$ avec les notations précédentes).

Une distinction plus utile sera obtenue en considérant les nombres quantiques étiquetant les états propres du système. Lorsque la dualité est paire, il est possible de choisir tous ces nombres quantiques comme des *charges* de Noether, si bien que les états propres peuvent être choisis invariants par parité [7]. Nous baptiserons un tel liquide de spin, où la dualité est paire, "liquide conventionnel". En revanche, lorsque la dualité est impaire, au moins l´un des nombres quantiques *doit* être un *courant* de Noether. Les liquides de spin correspondant aux dualités impaires seront donc naturellement appellés "liquides chiraux".

Les résultats de la section précédente établissent ainsi une disctinction claire entre liquide chiral et liquide conventionnel.

Dans un liquide de spin gapé conventionnel, l´ordre est diagonal. Ceci peut s´exprimer simplement dans le langage du modèle de WZNW $\mathrm{SU}(n)_1$. On introduit le champ de WZNW, qui est une matrice de $\mathrm{SU}(n)$ reliée aux champs fermioniques par :

$$g_{ab} = \psi^{\dagger}_{\mathrm{L}a}\psi_{\mathrm{R}b}\, e^{-i\sqrt{\pi}\Phi_c}, \tag{V.40}$$

et qui a l´avantage de ne retenir que les degrés de liberté de charge. Le paramètre d´ordre (V.17) s´interprète alors comme :

$$\mathrm{Tr}\left(g\, M^{\mathcal{A}}_{\square}\right) \neq 0. \tag{V.41}$$

Les autres caractéristiques d´un liquide de spin conventionnel sont l´existence d´une susceptibilité nulle et d´une raideur non nulle dans la direction des générateurs de Cartan. D´autres part, les liquides de spin conventionnels ont tendance a posséder des excitations de spin incohérentes.

[7] Il peut sembler étrange au premier abord de pouvoir "choisir" un étiquetage des états invariant par parité. En effet, dès lors que $\mathcal{A} \neq \mathrm{Id}$, certaines directions dans $\mathfrak{su}(n)$ sont transmutées, et l´on pourrait choisir un des générateurs de Cartan (qui étiquettent les états) le long de cette direction transmutée. Ainsi, par changement de base dans $\mathfrak{su}(n)$, les états sont invariants ou pas sous la parité. Ce paradoxe est résolu si l´on remarque que l´opération de parité ne commute pas avec ce changement de base.

Dans un liquide de spin chiral, toutes les propriétés sont duales. Tout d´abord, l´ordre est hors-diagonal et se laisse caractériser par la matrice duale de WZNW :

$$\widetilde{g}_{ab} = \psi^{\dagger}_{\mathrm{L}a}\psi^{\dagger}_{\mathrm{R}b}\, e^{-i\sqrt{\pi}\Theta_c}. \tag{V.42}$$

On a ainsi

$$\mathrm{Tr}\left(\widetilde{g}\, M^{\mathcal{A}}_{\square}\right) \neq 0. \tag{V.43}$$

De plus, certaines susceptibilités ne s´annullent pas (le liquide est compressible dans certaines directions) tandis que la raideur s´annulle dans ces mêmes directions. En outre, l´expression (V.42) du paramètre d´ordre dans cette phase montre que les électrons ont tendance à s´apparier. Si l´on dope le système, pour entrer dans une phase métallique, une instabilité supraconductrice apparaît. Les excitations de spin se distinguent dans un liquide chiral par leur cohérence.

Enfin, remarquons l´importance cruciale de l´anisotropie initiale pour générer un liquide de spin chiral : dans notre modèle, la brisure de la symétrie SU(n) par les interactions permet au système d´atteindre dans l´infrarouge un point d´élargissement vers un groupe *différent* du groupe ultraviolet, ce qui autorise l´apparition d´une transmutation chirale pour certaines directions. Cette anisotropie est naturellement présente dans un système à dégénérescence orbitale, même si le sous groupe SU(2) de spin n´est pas brisé. En ce sens, la dégénérescence orbitale favorise intrinséquement les phases de liquide de spin chiraux gapés, avec ordre hors-diagonal, sans brisure de l´invariance par rotation dans l´espace de spin.

V.2 Brisure de SU(4) en SU(2)×U(1)×$\mathbb{Z}_2$

L´inclusion d´opérateurs brisant la symétrie SU(4) vers un groupe plus petit que $\mathrm{SU}(2)_{\mathrm{spin}} \times \mathrm{SU}(2)_{\mathrm{orb}}$ (voir chapitre IV) présente un grand intérêt physique, la symétrie $\mathrm{SU}(2)_{\mathrm{orb}}$ dans le secteur orbital n´ayant pas d´autre justification que la simplicité du schéma d´interaction qui en découle. La brisure de $\mathrm{SU}(2)_{\mathrm{orb}}$ en le groupe $\mathrm{U}(1)_{\mathrm{orb}} \times \mathbb{Z}_2$ des rotations autour de l´axe z d´isospin et de l´échange $\mathbb{Z}_2$ des deux chaînes, est un premier pas vers un schéma de brisure plus réaliste. Abaisser la symétrie du secteur orbital de SU(2) à U(1)×$\mathbb{Z}_2$ permet notamment d´inclure une interaction importante, l´interaction de Hund $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$.

Dans la suite, nous étudions ce schéma de brisure, en nous focalisant sur le voisinage du quart de remplissage. Ceci permet de restreindre l´étude au seul secteur de spin, les degrés de liberté de charge demeurant découplés pour ces remplissages.

En effet, les interactions spin-charge dans la limite continue sont représentée par un opérateur oscillant à $4k_{\mathrm{F}}$, exactement comme dans le modèle de Hubbard SU(4) [8], dont les effets sur la physique de basse énergie sont négligeables loin du demi remplissage.

V.2.1 Hamiltonien microscopique

Faible couplage

Dans la limite de faible interaction coulombienne, l´hamiltonien de type Hubbard (voir eq. (I.7)) le plus général, respectant la symétrie SU(2)×U(1) est celui introduit par Arovas et Auerbach [118] pour décrire le composé C_{60}TDAE. Une manière commode d´écrire le terme d´interaction coulombienne

$$H_{\text{coulomb}} = \sum_i \sum_{abcd} U^{abcd} c^\dagger_{i,a} c_{i,b} c^\dagger_{i,c} c_{i,d} \tag{V.44}$$

est d´introduire des états à deux particules $(|s,\alpha\rangle, |t,\alpha\rangle)_{\alpha=0,\pm}$ se transformant simplement sous les transformations de SU(2)×U(1) :

$$\begin{aligned}
|s,+\rangle &= c^\dagger_{1\uparrow} c^\dagger_{2\uparrow} |0\rangle \\
|s,-\rangle &= c^\dagger_{1\downarrow} c^\dagger_{2\downarrow} |0\rangle \\
|s,\,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c^\dagger_{1\uparrow} c^\dagger_{2\downarrow} + c^\dagger_{1\downarrow} c^\dagger_{2\uparrow} \right) |0\rangle \\
|t,+\rangle &= c^\dagger_{1\uparrow} c^\dagger_{1\downarrow} |0\rangle \\
|t,-\rangle &= c^\dagger_{2\uparrow} c^\dagger_{2\downarrow} |0\rangle \\
|t,\,0\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} \left(c^\dagger_{1\uparrow} c^\dagger_{2\downarrow} - c^\dagger_{1\downarrow} c^\dagger_{2\uparrow} \right) |0\rangle
\end{aligned} \tag{V.45}$$

Les états $|s,\alpha\rangle_{\alpha=0,\pm}$ forment un triplet de spin 1 sous le groupe $\mathrm{SU}(2)_{\text{spin}}$, α étant la projection du spin sur l´axe z, et portent un isospin 0. Les états $|t,\alpha\rangle_{\alpha=0,\pm}$, singulets de spin, et portent un isospin 1, α étant la projection de cet isospin sur l´axe 3. L´interaction coulombienne générique du type (V.44) respectant la symétrie SU(2)×U(1)×$\mathbb{Z}_2$ prend alors la forme :

$$H_{\text{coulomb}} = \sum_i \Big[u_1 \, |s,\alpha\rangle_i \langle s,\alpha|_i + u_0 \, |t,0\rangle_i \langle t,0|_i + u_2 \left(|t,+\rangle_i \langle t,+|_i + |t,-\rangle_i \langle t,-|_i \right) \Big]. \tag{V.46}$$

[8] La seule différence est que la partie “spin” de cet opérateur n´est plus contrainte à respecter la symétrie SU(4).

La symétrie est $\mathrm{SU}(2)_{\mathrm{orb}}\times\mathrm{SU}(2)_{\mathrm{spin}}$ lorsque $u_0 = u_2$, qui est le cas étudié précédemment (chapitre IV), tandis que sur la ligne $u_0 = u_1 = u_2$, H_{coulomb} acquiert la symétrie SU(4).

Au voisinage de la ligne SU(4)-symétrique, il est commode d´écrire le hamiltonien total sous la forme :

$$\begin{aligned} H &= -t \sum_i \left[c^\dagger_{i,a} c_{i+1,a} + \mathrm{h.c.}\right] + H_{\mathrm{coulomb}} \\ &= H_{\mathrm{SU}(4)} + \sum_i \left[\, U_H\, \vec{S}_{1i} \cdot \vec{S}_{2i} + U_t\, (T^z_i)^2\right], \end{aligned} \tag{V.47}$$

où $H_{\mathrm{SU}(4)}$ est le hamiltonien de Hubbard SU(4) (I.9), et où les couplages sont donnés par :

$$U = \frac{4u_2 + 3u_1 + u_0}{8}, \qquad U_H = u_1 - u_0\,, \qquad U_t = \frac{4u_2 - 3u_1 - u_0}{4}\,. \tag{V.48}$$

Fort couplage

Lorsque l´on se place exactement au quart de remplissage (un électron par site), on s´attend, par analogie avec le cas étudié au chapitre II, à une transtion de Mott qui vient geler les degrés de liberté de charge, laissant comme théorie effective à basse énergie un hamiltonien de spin. Nous verrons dans la suite que l´analyse de la limite continue de l´hamiltonien de faible couplage (V.47) permet de prédire une telle transition, à une valeur finie des couplages U, U_t, U_H.

Dans la limite de fort couplage $U/t, U_t/t, U_H/t \gg 1$ pour le hamiltonien sur réseau (V.47), il est possible d´obtenir l´hamiltonien de spin résultant par la théorie de perturbation en $1/t$, par une formule analogue à (II.1). Cet hamiltonien de spin a été établi par Arovas et Auerbach [118] et a la forme :

$$\begin{aligned} H_{\mathrm{eff}} &= \sum_i \Big[A\, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} + B\, \vec{T}_i \cdot \vec{T}_{i+1} + C\, T^z_i T^z_{i+1} \\ &\qquad + D\, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} \vec{T}_i \cdot \vec{T}_{i+1} + E\, \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} T^z_i T^z_{i+1}\Big] + \mathrm{const.}, \end{aligned} \tag{V.49}$$

où les opérateurs de spin et d´isospin $\vec{S}_i$ et $\vec{T}_i$ ont été définis en (I.17,I.18). Notons qu´au quart de remplissage, lorsque la charge est gelée, il est possible de réécrire les 9 autres générateurs locaux (sur réseau) de SU(4) comme des produits des opérateurs de spin et d´isospin selon :

$$c^\dagger_i \mathcal{T}^{ab}_{st} c_i = 2 S^a_i T^b_i, \tag{V.50}$$

Les valeurs des échanges sont, au premier ordre non nul en u_a/t :

$$A = J_0 - J_1 + 2J_2\,, \qquad B = 3J_1 - J_0\,, \qquad C = 2(J_0 - J_2),$$
$$D = 4(J_0 + J_1)\,, \qquad E = 8(J_2 - J_0), \tag{V.51}$$

avec

$$J_a = \frac{t^2}{u_a}\,, \qquad a = 0, 1, 2. \tag{V.52}$$

Sur la ligne SU(4) symétrique $J_0 = J_1 = J_2$, on retrouve le hamiltonien de Heisenberg SU(4) antiferromagnétique (II.2). Cette limite de fort couplage est valable tant que $u_a > 0$, c´est-à-dire tant que le fondamental (infiniment dégénéré) à $t = 0$ reste constitué des états comportant exactement un électron par site. Cette condition, pour les couplages U, U_t, U_H, devient :

$$4U - 2U_t - U_H > 2\,|U_H|. \tag{V.53}$$

Lorsque cette condition n´est pas remplie, il favorable à $t = 0$ de remplir certains états à deux particules. Nous restreindrons notre étude aux hamiltoniens sur réseau vérifiant (V.53), ce qui est certainement le cas dans le voisinage de la ligne SU(4)-symétrique.

V.2.2 Limite continue

Nous nous plaçons dans la suite suffisamment loin du demi remplissage, de sorte que la limite continue de l´hamiltonien de Hubbard SU(4) $H_{\mathrm{SU}(4)}$ ne fait pas apparaître de couplage spin-charge (voir chapitre I). Ceci garantit l´existence d´un point fixe pour les degrés de liberté de spin -décrits par le modèle de WZNW SU(4)$_1$- autorisant un développement autour de ce point fixe.

Après passage à la limite continue des termes d´anisotropie de (V.47), la séparation spin charge subsiste et on obtient la densité hamiltonienne totale :

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_s. \tag{V.54}$$

Le hamiltonien $\mathcal{H}_c$ décrivant les degrés de liberté de charge est :

$$\mathcal{H}_c = \frac{v_c}{2}\left[(\partial_x \Phi_c)^2 + (\partial_x \Theta_c)^2\right] + 2g_c\, \partial_x \phi_{\mathrm{R}c} \partial_x \phi_{\mathrm{L}c}, \tag{V.55}$$

avec

$$v_c = v_{\mathrm{F}} + \frac{3U}{2\pi}\,, \qquad g_c = \frac{1}{2\pi}\,(3U - U_t). \tag{V.56}$$

De manière remarquable, le hamiltonien pour le secteur de spin peut encore s´écrire en terme des courants $\mathcal{J}_{\mathrm{P}}^{A}$ de SU(4)$_1$. Nous choisissons ici une formulation en terme des 6 fermions de Majorana $(\xi_P^a)_{a=1..6}$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_s &= -\frac{iv_s}{2}\sum_{a=1}^{6}\left(\xi_{\mathrm{R}}^a\partial_x\xi_{\mathrm{R}}^a - \xi_{\mathrm{L}}^a\partial_x\xi_{\mathrm{L}}^a\right) - \frac{i\delta v_t}{2}\sum_{a=4}^{5}\left(\xi_{\mathrm{R}}^a\partial_x\xi_{\mathrm{R}}^a - \xi_{\mathrm{L}}^a\partial_x\xi_{\mathrm{L}}^a\right) - \frac{i\delta v_6}{2}\left(\xi_{\mathrm{R}}^6\partial_x\xi_{\mathrm{R}}^6 - \xi_{\mathrm{L}}^6\partial_x\xi_{\mathrm{L}}^6\right) \\
&+ 2\pi g_1 \sum_{1\le a<b\le 3}\kappa^a\kappa^b + 2\pi g_2 \sum_{1\le a\le 3}\kappa^a\left(\kappa^4+\kappa^5\right) + 2\pi g_3 \sum_{1\le a\le 3}\kappa^a\,\kappa^6 \\
&+ 2\pi g_4\left(\kappa^4+\kappa^5\right)\kappa^6 + 2\pi g_5\,\kappa^4\kappa^5, \qquad \text{(V.57)}
\end{aligned}$$

les constantes de couplage étant données au premier ordre en $U/t, U_H/t, U_t/t$ par :

$$\begin{gathered}
v_s = v_{\mathrm{F}} - \tfrac{U}{2\pi}\,, \qquad \delta v_t = -\tfrac{U_t}{2\pi}\,, \qquad \delta v_6 = -\tfrac{3U_H}{8\pi}, \\
g_1 = -\tfrac{1}{4\pi}\left(2U + U_t - U_H\right)\,, \qquad g_2 = -\tfrac{1}{8\pi}\left(4U - 2U_t - U_H\right), \\
g_3 = -\tfrac{1}{4\pi}\left(2U + U_t + U_H\right)\,, \qquad g_4 = -\tfrac{1}{8\pi}\left(4U - 2U_t + 3U_H\right), \\
g_5 = -\tfrac{1}{4\pi}\left(2U - 3U_t\right). \qquad \text{(V.58)}
\end{gathered}$$

Les propriétés de symétrie de l´hamiltonien de spin sont manifestes si l´on remarque que les fermions de Majorana ξ_{P}^a se transforment simplement sous les sous groupes SU(2)$_{\mathrm{spin}}$ et SU(2)$_{\mathrm{orb}}$ de SU(4). En effet, le vecteur $\vec{\xi}_{\mathrm{P}s} = (\xi_{\mathrm{P}}^1, \xi_{\mathrm{P}}^2, \xi_{\mathrm{P}}^3)$ est un singulet d´isospin et se transforme dans la représentation de spin 1 de SU(2)$_{\mathrm{spin}}$ tandis que le vecteur $\vec{\xi}_{\mathrm{P}t} = (\xi_{\mathrm{P}}^4, \xi_{\mathrm{P}}^5, \xi_{\mathrm{P}}^6)$, singulet de spin, porte un isospin 1.

La séparation des degrés de liberté de spin et de charge permet d´étudier séparément les théories effectives dans les deux secteurs.

Secteur de charge

Le hamiltonien de charge (V.55) peut être ramené à une forme libre par la transformation standard de Bogoliubov (I.84), et il décrit un liquide de Luttinger de paramètres :

$$K_c = \sqrt{\frac{v_c - g_c}{v_c + g_c}}, \qquad u_c = \sqrt{v_c^2 - g_c^2}. \qquad \text{(V.59)}$$

Lorsque l´on s´écarte du point $U = U_H = U_t = 0$, on attend une renormalisation des couplages, c´est-à-dire que (V.56) n´est valable qu´au premier ordre en $U/t, U_H/t, U_t/t$. Cependant, en dehors du quart de remplissage, les arguments de stabilité de la section I.2.2 sont encore valables et montrent que théorie effective en charge demeure un liquide de Luttinger.

Au quart de remplissage, la situation est très similaire à celle du modèle de Hubbard SU(4) étudié au chapitre II : un opérateur d´Umklapp $\cos(\sqrt{16\pi\Phi_c})$ devient relevant lorsque le paramètre de Luttinger K_c est inférieur à $\frac{1}{2}$, ce qui résulte en une transition de Mott pour une valeur finie des couplages microscopiques U, U_H, U_t. Lorsque $U_t = U_H = 0$, la transition de Mott a lieu a une valeur finie $U \sim 2.8\,t$ de la répulsion coulombienne [25]. En comparant (II.6) à (V.56) et (V.59), on peut définir une valeur effective de la répulsion coulombienne contrôlant la transition de Mott :

$$U_{\text{eff}} = \frac{U - U_t/3}{1 + U_t/\pi v_{\text{F}}} \tag{V.60}$$

et donner ainsi une estimation de la valeur critique des couplages pour cette transition de Mott : $U_{\text{eff}} \sim 2.8\,t$. Comme l´interaction de Hund U_H ne participe pas à l´expression (V.56) des couplages dans le secteur de charge, on attend seulement une faible dépendance de la transition en U_H.

Secteur de spin

Le secteur de spin n´est pas affecté pas la transition dans le secteur de charge, et de même que pour le modèle de Hubbard SU(4) au quart de remplissage, on a continuité de la théorie en spin entre les régimes de faible couplage ($u_a \ll t$) et de fort couplage ($u_a \gg t$), pourvu que l´on reste au voisinage de la ligne SU(4). Le hamiltonien de fort couplage pour le secteur de spin a donc lui aussi la forme (V.57), les constantes de couplages $(g_\alpha)_{\alpha=1,\ldots,5}$ dépendant maintenant des échanges A, B, C, D, E (V.51).

L´hamiltonien de spin (V.57) étant celui d´un modèle de WZNW perturbé par des interactions marginales, il est possible de calculer la fonction β pour les couplages g_α selon la méthode de Gerganov *et al.*, avec pour résultat :

$$
\begin{aligned}
\dot{g}_1 &= 4\,(g_1-2)^2\,\left[\left(\frac{g_1}{g_1^2-4}\right)^2+2\left(\frac{g_2}{g_2^2-4}\right)^2+\left(\frac{g_3}{g_3^2-4}\right)^2\right]\\
\dot{g}_2 &= \frac{2\,g_2}{g_2^2-4}\,\left[3g_2^2-(g_2^2+4)\left(2\frac{g_1}{g_1+2}+\frac{g_5}{g_5+2}\right)\right]+4\,\frac{(g_2g_4-2g_3)(g_2g_3-2g_4)}{(g_4^2-4)(g_3^2-4)}\\
\dot{g}_3 &= -8\,\frac{g_3(2g_1-g_3^2)}{(g_1+2)(g_3^2-4)}+8\,\frac{(g_2g_3-2g_4)(g_3g_4-2g_2)}{(g_2^2-4)(g_4^2-4)}\\
\dot{g}_4 &= -4\,\frac{g_4(2g_5-g_4^2)}{(g_5+2)(g_4^2-4)}+12\,\frac{(g_3g_4-2g_2)(g_2g_4-2g_3)}{(g_2^2-4)(g_3^2-4)}\\
\dot{g}_5 &= 4\,(g_5-2)^2\,\left[3\left(\frac{g_2}{g_2^2-4}\right)^2+\left(\frac{g_4}{g_4^2-4}\right)^2\right]
\end{aligned}
\tag{V.61}
$$

où la vitesse v_s a été abosorbée dans la redéfinition $g_\alpha \to g_\alpha/v_s$. Notons que pour obtenir cette fonction β, il a fallu négliger les anisotropies de vitesse δv_t et δv_6. Ces anisotropies de vitesse, si elles peuvent jouer un rôle dans des situations très anisotropiques, ne devraient pas modifier nos conclusions dans le voisinage de la ligne SU(4)-symétrique.

Plutôt que d´étudier l´ensemble du diagramme des phases, à 5 dimensions, par intégration numérique de la fonction β, nous allons exploiter le phénomène d´élargissement de symétrie qui contraint sa structure. En effet, il existe un nombre fini de rayons isotropes attractifs, sur lesquels la théorie acquiert une symétrie élargie SO(6). Ces rayons sont reliés par des dualités. Chacun de ces rayons admet un large bassin d´attraction dans l´espace des paramètres g_α. Ces bassins d´attraction sont connectés par des régions d´élargissement partiel de la symétrie. Nous allons dans la suite déterminer et caractériser les différentes phases à symétrie élargie.

V.2.3 Classification des phases SO(6)

Nous nous focalisons dans cette partie sur le secteur de spin de la théorie, qui, du fait de la séparation spin-charge à basse énergie, devrait pouvoir être étudié indépendamment du secteur de charge. Ceci est vrai dans une large mesure. Cependant, certaines des quantités que nous utiliserons pour caracteriser la physique à basse énergie seront des opérateurs composites, comportant une partie de charge et une partie de spin, si bien que certains paramètres d´ordre ne prendront de valeur moyenne que dans la phase de Mott. Une manière de contourner cette difficulté est de définir des quantités qui ne dépendent plus de la charge, avec la contrepartie que les opérateurs ainsi définis ne sont plus locaux en terme des fermions du réseau.

Nous considérerons la plupart du temps des opérateurs locaux, qui ont l´avantage de s´exprimer simplement dans les fermions, et nous nous placerons implicitement dans la phase de Mott. Dans la phase métallique, ces opérateurs continuent à caractériser l´ordre en spin, dans le sens qu´ils développent alors des corrélations à quasi longue portée.

Dualités

Pour commencer, introduisons les matrices $(d^\alpha)_{\alpha=1\ldots5}$ intervenant dans la définition des opérateurs marginaux courant-courant (V.3) respectant la symétrie SU(2)×U(1). Comme base de $\mathfrak{su}(4)$, nous choisissons $(\mathcal{T}_s^a, \mathcal{T}_t^a, \mathcal{T}_{st}^{ax}, \mathcal{T}_{st}^{ay}, \mathcal{T}_{st}^{az})$, les $\mathcal{T}$ étant donnés dans la représentation fondamentale par (I.19). Les matrices d^α sont alors diagonales, et valent :

$$d^1 = \begin{pmatrix} \mathbb{I}_3 & \\ & 0_{12} \end{pmatrix}, \quad d^3 = \begin{pmatrix} 0_{12} & \\ & \mathbb{I}_3 \end{pmatrix} \tag{V.62}$$

$$d^2 = \begin{pmatrix} 0_6 & & \\ & \mathbb{I}_6 & \\ & & 0_3 \end{pmatrix}, \quad d^4 = \begin{pmatrix} 0_3 & & \\ & \mathbb{I}_2 & \\ & & 0_{10} \end{pmatrix}, \quad d^5 = \begin{pmatrix} 0_5 & & \\ & \mathbb{I}_1 & \\ & & 0_9 \end{pmatrix}.$$

Les automorphismes de $\mathfrak{su}(4)$ qui satisfont à la contrainte (V.8) sont, par inspection, au nombre de 4. Il s´agit de :

$$\begin{aligned} &\mathcal{A}_0: \ \Omega_0 = d^1+d^2+d^3+d^4+d^5 = \mathbb{I}_{15}\,, && \mathcal{A}_1: \ \Omega_1 = d^1+d^2-d^3-d^4+d^5, \\ &\mathcal{A}_2: \ \Omega_2 = d^1-d^2+d^3-d^4+d^5\,, && \mathcal{A}_3: \ \Omega_3 = d^1-d^2-d^3+d^4+d^5. \end{aligned} \tag{V.63}$$

On remarque que $\mathcal{A}_3 = \mathcal{A}_1\mathcal{A}_2$. Les 3 dualités non triviales affectent les générateurs de la manière suivante (les générateurs omis sont invariants) :

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_1 \ &: \ \mathcal{T}_t^x \to -\mathcal{T}_t^x, \quad \mathcal{T}_t^y \to -\mathcal{T}_t^y, \quad \mathcal{T}_{st}^{az} \to -\mathcal{T}_{st}^{az} \\ \mathcal{A}_2 \ &: \ \mathcal{T}_t^x \to -\mathcal{T}_t^x, \quad \mathcal{T}_t^y \to -\mathcal{T}_t^y, \quad \mathcal{T}_{st}^{ax} \to -\mathcal{T}_{st}^{ax}, \quad \mathcal{T}_{st}^{ay} \to -\mathcal{T}_{st}^{ay} \quad (a=x,y,z) \\ \mathcal{A}_3 \ &: \ \mathcal{T}_{st}^{ab} \to -\mathcal{T}_{st}^{ab} \quad (a,b=x,y,z) \end{aligned} \tag{V.64}$$

Ces dualités se représentent de manière remarquablement simple sur les fermions de Majorana : tandis que les fermions droits sont invariants, certains des fermions gauches changent de signe :

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_1 &: \xi^6_{\mathrm{L}} \to -\xi^6_{\mathrm{L}}, \\
\mathcal{A}_2 &: \xi^4_{\mathrm{L}} \to -\xi^4_{\mathrm{L}}, \qquad \xi^5_{\mathrm{L}} \to -\xi^5_{\mathrm{L}}, \\
\mathcal{A}_3 &: \xi^a_{\mathrm{L}} \to -\xi^a_{\mathrm{L}}, \qquad a = 4, 5, 6.
\end{aligned} \tag{V.65}$$

Pour compléter cette description des dualités, nous donnons leur représentation sur les constantes de couplage g_α, qui est simplement déduite de (V.65) :

$$\begin{aligned}
\mathcal{A}_1 &: g_{3,4} \to -g_{3,4}, \\
\mathcal{A}_2 &: g_{2,4} \to -g_{2,4}, \\
\mathcal{A}_3 &: g_{2,3} \to -g_{2,3}.
\end{aligned} \tag{V.66}$$

La fonction β (V.61) est invariante sous cette transformation. Notons que (V.66) est une symétrie exacte du diagramme des phases, et laissera donc invariant la fonction β non perturbative à tous les ordres du développement en $1/k$.

Il est facile de se convaincre que les dualités $\mathcal{A}_0$ et $\mathcal{A}_2$ sont paires, tandis que $\mathcal{A}_1$ et $\mathcal{A}_3$, qui conjuguent, sont impaires (l´un des générateurs de Cartan, $\mathcal{T}^{zz}_{st}$, change de signe). Nous en déduisons que les phases à symétrie élargie SO(6) sont au nombre de 4, deux d´entre elles ayant un ordre diagonal de type CDW, les deux autres ayant un ordre hors diagonal de type supraconducteur.

Phases paires ou conventionnelles

Phase $\mathcal{A}_0$ Commençons par décrire la phase correspondant à la dualité triviale $\mathcal{A}_0 = \mathrm{Id}$. Le hamiltonien de spin, dans la limite infrarouge, est celui du modèle de Gross Neveu SO(6) :

$$\mathcal{H}^*_s = -\frac{iv^*}{2}\sum_{a=1}^{6}\left(\xi^a_{\mathrm{R}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{R}} - \xi^a_{\mathrm{L}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{L}}\right) + 2\pi\, g^* \sum_{1\leq a<b\leq 6} \kappa^a\kappa^b. \tag{V.67}$$

Ce modèle est intégrable, et son spectre [84, 83, 57] comporte trois branches d´excitations élémentaires : un kink et un antikink, se transformant dans les représentations spinorielles de SO(6) (qui sont les représentations fondamentale $\square$ et antifondamentale $\begin{smallmatrix}\square\\\square\\\square\end{smallmatrix}$, de dimension 4, de SU(4)), ainsi qu´un fermion, se transformant dans la représentation naturelle de SO(6) (représentation antisymétrique $\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}$ de SU(4)). Ces états sont étiquetés par les nombres quantiques $[n_s, n_t, n_{st}]$, valeurs propres des opérateurs $Q^z_s = \int(\mathcal{J}^z_{\mathrm{R}s} + \mathcal{J}^z_{\mathrm{L}s})$, $Q^z_t = \int(\mathcal{J}^z_{\mathrm{R}t} + \mathcal{J}^z_{\mathrm{L}t})$, $Q^{zz}_{st} = \int(\mathcal{J}^{zz}_{\mathrm{R}st} + \mathcal{J}^{zz}_{\mathrm{L}st})$.

Les kinks et antikinks ont une masse $m \propto (\xi^*)^{-1}\, e^{-1/g^*} \sim t\, e^{-1/U}$, tandis que les fermions ont une masse $\sqrt{2}m$. Nous avons introduit ξ^*, l´échelle typique d´élargissement de symétrie.

Fondamental Le fondamental de (V.67) brise la symétrie $\mathbb{Z}_2$ $\kappa^a \to -\kappa^a$. Cependant, il faut être prudent sur l´interprétation physique de cette brisure de symétrie, en raison de l´existence des symétries de jauge. Une discussion analogue à celle menée dans la section III.1.2 du chapitre III, permet de paramétriser les fondamentaux de la manière suivante : dans l´image semi classique, les champs bosoniques $(\Phi_\alpha)_{\alpha=c,s,t,st}$ prennent les valeurs moyennes

$$\begin{aligned} \langle \Phi_c \rangle &= p_c \frac{\sqrt{\pi}}{2}\,, \qquad p_c = 0,1,2,3 \\ \langle \Phi_\alpha \rangle &= 0\,, \qquad\qquad \alpha = s,t,st \end{aligned} \tag{V.68}$$

Le fondamental est dégénéré quatre fois, la translation d´un site sur le réseau [9] connectant ces fondamentaux $|\Omega_{p_c}\rangle$. En outre, les kinks et antikinks connectent $|\Omega_{p_c}\rangle$ à $\left|\Omega_{p_c+1[4]}\right\rangle$ et les fermions connectent $|\Omega_{p_c}\rangle$ à $\left|\Omega_{p_c+2[4]}\right\rangle$.

Le paramètre d´ordre bilinéaire en les fermions est

$$\mathcal{O}_0 = e^{2ik_{\mathrm{F}}j} \sum_{a=1}^{4} c^\dagger_{j,a} c_{j,a} \tag{V.69}$$

(ou son hermitique conjugué), qui représente une onde de densité de charge (CDW). L´expression continue de ce paramètre d´ordre,

$$\mathcal{O}_0 = \psi^\dagger_{\mathrm{R}a}\psi_{\mathrm{L}a} \propto e^{-i\sqrt{\pi}\Phi_c} \left(\prod_{\alpha=s,t,st} \cos(\sqrt{\pi}\Phi_\alpha) + i \prod_{\alpha=s,t,st} \sin(\sqrt{\pi}\Phi_\alpha) \right), \tag{V.70}$$

est un singulet sous le groupe SO(6) diagonal. Notons que ceci correspond naturellement à l´équation (V.17) avec $M^{(0)}_{\square} = \mathbb{I}$. Au quart de remplissage, comme $e^{2ik_{\mathrm{F}}} = i$, cette onde de densité de charge a une période de quatre pas de réseau, qui correpond bien à la dégénérescence 4 du fondamental. En utilisant les expressions (II.15) pour les opérateurs de spin de SU(4), la partie oscillant à $2k_{\mathrm{F}}$ de $\mathcal{S}^A(x)\mathcal{S}^A(x+a_0)$ a la même expression continue que $\mathcal{O}_0$ et prend donc une valeur moyenne. L´interprétation semi classique est que le système “quadrimérise”, des singulets de SU(4) (nécessitant quatre électrons) se formant avec une période de 4 mailles de réseau.

[9] Au quart de remplissage, celle-ci est représentée par $\Phi_c \to \Phi_c + \sqrt{\pi}/2$, les autres champs n´étant pas affectés.

L´opérateur de dimérisation prend également une valeur moyenne non nulle :

$$\left\langle (-1)^j \sum_{A=1}^{15} \mathcal{S}_j^A \mathcal{S}_{j+1}^A \right\rangle \propto \left\langle \sum_{a=1}^{6} \kappa^a \right\rangle \neq 0. \tag{V.71}$$

On peut se faire une image simple du fondamental en remarquant que les opérateurs de dimérisation pour le spin SU(2) et l´isospin

$$\begin{aligned} \Delta_s &= (-1)^j \, \vec{S}_j \cdot \vec{S}_{j+1} \propto \sum_{a=1}^{3} \kappa^a \\ \Delta_t &= (-1)^j \, \vec{T}_j \cdot \vec{T}_{j+1} \propto \sum_{a=4}^{6} \kappa^a \end{aligned} \tag{V.72}$$

prennent séparément des valeurs moyennes non nulles, et égales. Le fondamental du modèle (voir figure V.1) est donc constitué de singulets de spin SU(2) et d´isospin. Ces singulets sont en résonance et forment un singulet de SU(4) (ce qui nécessite quatre sites au quart de remplissage).

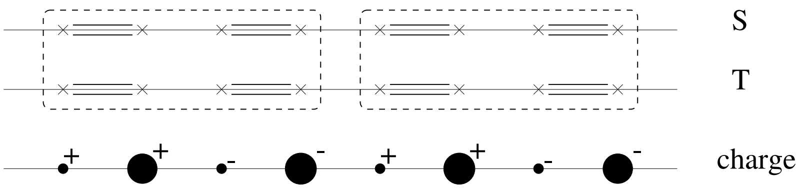


FIG. V.1: L´un des quatre fondamentaux dans la phase $\mathcal{A}_0$, au quart de remplissage. Les singulets de spin SU(2) et d´isospin sont représentés par des doubles traits. Les singulets SU(4), figurés par les rectangles pointillés, comprennent quatre électrons, donc quatre sites. Enfin, l´amplitude de l´onde de densité de charge, dont le signe est précisé, est figurée par un cercle.

Cohérence des excitations Les classes de congruence des excitations, kinks, antikinks et fermions, sont respectivement $p_{\square} = 1$, $p_{\begin{smallmatrix}\square\\\square\\\square\end{smallmatrix}} = 3$ et $p_{\begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix}} = 2$. Nous en déduisons (cf. A.2) que les facteurs de forme $\mathcal{F}_\xi^{\mathcal{S}^A}$, où ξ est une excitation élémentaire du modèle de Gross Neveu SO(6), sont nuls. Il en découle que le facteur de structure de spin ne présente pas de pic bien défini correpondant à la présence s´une particule de “spin entier” dans le spectre : les excitations de spin sont incohérentes.

Susceptibilités et raideurs Le liquide de spin dans cette phase est un liquide “conventionnel”, dans le sens qu'il présente les caratéristiques usuelles d´un système gapé. D´après la section V.1.3, toutes les susceptibilités sont nulles, et toutes les raideurs sont non nulles : le système est rigide dans toutes les directions de $\mathfrak{su}(4)$.

Phase $\mathcal{A}_2$ L´hamiltonien dans l´infrarouge est encore le hamiltonien de Gross Neveu SO(6) (V.67), une fois effectuée la transformation de dualité (V.66) sur les fermions de Majorana. Le fondamental et le spectre sont donc les mêmes, l´interprétation physique en étant toutefois différente. Comme le montre (V.64), $\mathcal{A}_2$ a pour effet de tourner de π autour de l´axe z dans l´espace d´isospin, pour le secteur gauche. Le trois cartans que l´on a choisi, S^z, T^z et S^zT^z ne sont pas affectés par la dualité, si bien que les nombres quantiques des excitations du modèle de Gross Neveu s´interprètant encore comme des charges (de Noether) totales.

Fondamental Il est encore quatre fois dégénéré, les fondamentaux étant connectés par la translation d´un site sur le réseau. Les quasiparticules du modèle de Gross Neveu connectent ces fondamentaux de la même manière que dans la phase $\mathcal{A}_0$.

La matrice $M^{(2)}_{\square}$ de l´équation (V.10), qui donne la représentation de la dualité sur la représentation fondamentale, est :

$$M^{(2)}_{\square} = i\mathbb{I}_2 \otimes \sigma^1, \tag{V.73}$$

où la première matrice du produit tensoriel agit dans l´espace des spin SU(2) $\sigma = (\uparrow, \downarrow)$ et la deuxième dans l´espace d´isospin $\ell = (1, 2)$. Nous en déduisons que le paramètre d´ordre pour cette phase est

$$\mathcal{O}_2 = e^{2ik_{\mathrm{F}}j} \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \left(c^{\dagger}_{j,1\sigma} c_{j,1\sigma} - c^{\dagger}_{j,2\sigma} c_{j,2\sigma} \right). \tag{V.74}$$

Il s´agit d´une onde de densité de charge portant un isospin 1 : les ondes de densité de charge sur les chaînes 1 et 2 sont en opposition de phase.

L´image qualitative du fondamental, présentée dans la figure V.2, est très semblable à celle de la phase $\mathcal{A}_0$. Une modification est toutefois à noter pour l´ordre en spin : tandis que les spin SU(2) dimérisent encore ($\langle \Delta_s \rangle \neq 0$), la dimérisation dans l´espace d´isospin est tordue de π, l´opérateur de pseudo-dimérisation étant :

$$\widetilde{\Delta}_t = (-1)^j \left(T^z_j T^z_{j+1} - T^+_j T^-_{j+1} - T^-_j T^+_{j+1} \right) \propto \kappa^6 - \kappa^4 - \kappa^5 \tag{V.75}$$

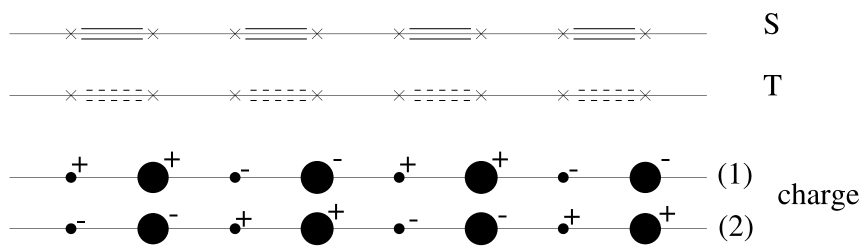


FIG. V.2: L´un des quatre fondamentaux dans la phase $\mathcal{A}_2$, au quart de remplissage. Les singulets de spin SU(2) et les pseudo-singulets d´isospin sont représentés par des doubles traits respectivement pleins et pointillés. Les ondes de densité de charge sur les chaînes 1 et 2 sont en opposition de phase.

Cohérence des excitations La discussion de la section V.1.3 (page 155) nous indique que les propriétés de cohérence sont les mêmes que dans la phase $\mathcal{A}_0$: les excitations de spin sont incohérentes, le facteur de structure de spin ne présentant qu´un fond incohérent.

Susceptibilités et raideurs Certaines directions de $\mathfrak{su}(4)$ sont touchées par la dualité, si bien que, même si le système est complètement gapé, on pourra observer certaines susceptibilités diagonales non nulles, tandis que certaines raideurs s´annulleront. C´est par exemple le cas dans la direction T^x (voir V.64). Notons cependant qu´il est toujours possible de choisir une base de Cartan de $\mathfrak{su}(4)$ qui ne sera pas touchée par la dualité : dans toutes les directions de la sous-algèbre de Cartan (qui définit l´ensemble des grandeurs que l´on peut mesurer), le système se comporte comme un liquide de spin conventionnel.

Phases impaires ou chirales

Dans les deux phases impaires, $\mathcal{A}_1$ et $\mathcal{A}_3$, le hamiltonien infrarouge est encore, après transformation de dualité, le hamiltonien de Gross Neveu SO(6). Une différence fondamentale avec les phases paires $\mathcal{A}_0$ et $\mathcal{A}_2$ est que l´un des générateurs de Cartan, à savoir $\mathcal{T}^{zz}_{st}$, est touché par la dualité. Les nombres quantiques qui étiquettent les états propres du modèle dans la limite infrarouge ont donc une interprétation physique différente : les états sont repérés par les nombres quantiques $[n_s, n_t, j_{st}]$, le dernier de ces nombres quantiques étant un *courant*, valeur propre de l´opérateur de courant total $\int(\mathcal{J}^{zz}_{\mathrm{L}st} - \mathcal{J}^{zz}_{\mathrm{R}st}) \propto \int \partial_x \Theta_{st}$.

Fondamental Les fondamentaux peuvent toujours être paramétrés par un entier $0 \leq p_c < 4$, avec :

$$\begin{aligned} \langle \Phi_c \rangle &= p_c \frac{\sqrt{\pi}}{2}, \qquad p_c = 0, 1, 2, 3 \\ \langle \Phi_\alpha \rangle &= 0, \qquad\qquad \alpha = s, t \\ \langle \Theta_{st} \rangle &= 0 \end{aligned} \tag{V.76}$$

Cependant, ces quatre fondamentaux sont encore connectés par une symétrie de jauge : $\Phi_\alpha \to \Phi_\alpha$, $\Theta_\alpha \to \Theta_\alpha + \sqrt{\pi} \quad \forall \alpha$, qui permet d´identifier les fondamentaux p_c et $p_c + 2$. Il en résulte que le fondamental est *doublement* dégénéré dans les phases impaires.

Le paramètre d´ordre bilinéaire en fermions est obtenu à partir des matrices qui représentent la dualité sur la représentation fondamentale :

$$\begin{aligned} M_{\square}^{(1)} &= \sigma^1 \otimes \sigma^1, \\ M_{\square}^{(3)} &= \sigma^1 \otimes \sigma^2. \end{aligned} \tag{V.77}$$

• Dans la phase $\mathcal{A}_1$, le paramètre d´ordre est :

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_1 &= c_{j,1\uparrow} c_{j+1,2\downarrow} + c_{j,1\downarrow} c_{j+1,2\uparrow} + c_{j,2\uparrow} c_{j+1,1\downarrow} + c_{j,2\downarrow} c_{j+1,1\uparrow} \\ &\propto \psi_{\mathrm{L}1\uparrow} \psi_{\mathrm{R}2\downarrow} + \psi_{\mathrm{L}1\downarrow} \psi_{\mathrm{R}2\uparrow} + \psi_{\mathrm{L}2\uparrow} \psi_{\mathrm{R}1\downarrow} + \psi_{\mathrm{L}2\downarrow} \psi_{\mathrm{R}1\uparrow} \end{aligned} \tag{V.78}$$

La phase $\mathcal{A}_1$ présente donc une instabilité supraconductrice singulette, puisque $\mathcal{O}_1$ est un singulet d´isospin. L´opérateur $\mathcal{O}_1$ ne peut bien entendu pas prendre de valeur moyenne non nulle, même dans la phase de Mott, puisqu´il brise la symétrie U(1) de charge. Néanmoins, ses fonctions de corrélation sont à quasi longue portée dans la phase métallique.

• Dans la phase $\mathcal{A}_3$, le paramètre d´ordre bilinéaire en fermions est

$$\begin{aligned} \mathcal{O}_3 &= c_{j,1\uparrow} c_{j,2\downarrow} + c_{j,1\downarrow} c_{j,2\uparrow} \\ &\propto \psi_{\mathrm{L}1\uparrow} \psi_{\mathrm{R}2\downarrow} + \psi_{\mathrm{L}1\downarrow} \psi_{\mathrm{R}2\uparrow} - \psi_{\mathrm{L}2\uparrow} \psi_{\mathrm{R}1\downarrow} - \psi_{\mathrm{L}2\downarrow} \psi_{\mathrm{R}1\uparrow}, \end{aligned} \tag{V.79}$$

et l´instabilité supraconductrice est cette fois triplette, puisqu´elle porte un isospin 1. Les conclusions sont les mêmes que dans la phase $\mathcal{A}_1$: cet opérateur ne peut pas prendre de valeur moyenne, mais ses fonctions de corrélation sont à quasi longue portée dans la phase métallique.

Les formes (V.78) et (V.79) pour les paramètres d´ordre des fermions sont tirées de l´étude des dualités ; on peut vérifier directement sur la limite continue des opérateurs

$\mathcal{O}_1$ et $\mathcal{O}_\ni$ qu´il s´agit bien des bons paramètres d´ordre :

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}_1 &\propto \exp\left[i\sqrt{\pi}\,(\Phi_s - \Theta_c)\right]\ \cos\left[\sqrt{\pi}\,(\Phi_t - \Theta_{st})\right], \\
\mathcal{O}_3 &\propto \exp\left[i\sqrt{\pi}\,(\Phi_s - \Theta_c)\right]\ \sin\left[\sqrt{\pi}\,(\Phi_t - \Theta_{st})\right].
\end{aligned} \tag{V.80}$$

On peut compléter la description du fondamental en s´intéressant à l´arrangement local des spins SU(2) et des isospins. Les expressions (V.72) et (V.75) des opérateurs de dimérisation et de pseudo-dimérisation permettent de montrer qu´il y a dimérisation en spin SU(2) ($\langle\Delta_s\rangle \neq 0$) dans les deux phases impaires, et que, de manière alternée, il y a dimérisation d´isospin dans la phase $\mathcal{A}_1$ ($\langle\Delta_t\rangle = -\langle\Delta_s\rangle \neq 0$) et pseudo-dimérisation d´isospin dans la phase $\mathcal{A}_3$ ($\langle\widetilde{\Delta}_t\rangle = -\langle\Delta_s\rangle \neq 0$). Une image qualitative des fondamentaux est présentée dans la figure V.3.

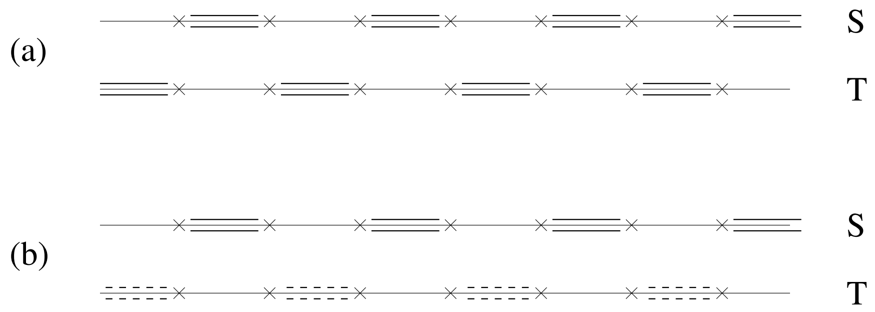


FIG. V.3: L´un des deux fondamentaux dans les phases $\mathcal{A}_1$ (a) et $\mathcal{A}_3$ (b) au quart de remplissage. Les singulets sont représentés par des doubles traits pleins et les les pseudo-singulets par des pointillés.

Facteur de structure de spin D´après la discussion de la transformation des densités de spin sous les dualités (voir page 155), les densités uniformes et oscillants à $4k_{\mathrm{F}}$ demeurent des opérateurs de “spin entier” sous le groupe de symétrie infrarouge, si bien qu´elles n´appaorteront aucune contribution cohérente au facteur de structure de spin, similairement à la situation rencontrée dans les phases paires. Cependant, les densités oscillant à $2k_{\mathrm{F}}$ se transforment dans les représentations du produit $\square \times \square = \begin{smallmatrix}\square\\\square\end{smallmatrix} + \square\square$: elles ont maintenant une classe de congruence égale à 2, si bien que le facteur de forme de ces densités avec un état de fermions du modèle de Gross Neveu est non nul. Le facteur de spin présentera donc un pic de quasiparticule pour le vecteur d´onde $k = 2k_{\mathrm{F}}$, à l´énergie $\omega = m\sqrt{2}$.

Réponse à une perturbation L´un des générateurs de Cartan ($\mathcal{T}_{st}^{zz}$) change de signe sous la dualité [10]. En conséquence, le système réagira à l´ajout d´un potentiel chimique de la forme

$$H_\mu = \mu \sum_i \left(n_{i,1\uparrow} + n_{i,2\downarrow} - n_{i,2\uparrow} - n_{i,1\downarrow} \right), \tag{V.81}$$

puisque la susceptibilité dans la direction $\mathcal{T}_{st}^{zz}$ est non nulle :

$$\left. \frac{\partial^2 \langle H + H_\mu \rangle}{\partial \mu^2} \right|_{\mu=0} \neq 0. \tag{V.82}$$

La version duale de cette propriété est l´absence de rigidité par rapport à une torsion des conditions aux limites dans la direction $\mathcal{T}_{st}^{zz}$: si l´on impose les conditions aux limites

$$\begin{aligned} c_{i+L,1\uparrow} &= e^{i\alpha}\, c_{i,1\uparrow}\,, \qquad & c_{i+L,2\downarrow} &= e^{i\alpha}\, c_{i,2\downarrow}, \\ c_{i+L,1\downarrow} &= e^{-i\alpha}\, c_{i,1\downarrow}\,, \qquad & c_{i+L,2\uparrow} &= e^{-i\alpha}\, c_{i,2\uparrow}, \end{aligned} \tag{V.83}$$

l´énergie du fondamental ne dépend pas de α.

Ces deux propriétés, inhabituelles pour un système avec gap, sont la conséquence de la circulation de courants dans la direction $\mathcal{T}_{st}^{zz}$.

V.2.4 Diagramme des phases

Une fois établie l´existence de régions d´élargissement de symétrie dans le diagramme des phases, se pose la question de la manière dont ces régions sont connectées, et de la nature des transitions entre différentes phases à symétrie élargie.

Elargissement partiel

De part et d´autre d´une frontière séparant deux régions à symétrie élargie, le comportement du flot des constantes de couplage est drastiquement différent après un grand nombre d´itérations du groupe de renormalisation : certaines constantes de couplage entrent dans le régime de fort couplage avec des signes différents. L´hypothèse la plus simple est que certains couplages s´annullent sur cette frontière. Afin de rendre la discussion plus limpide, nous choisissons d´étudier l´une de ces transitions, entre la phase d´onde de densité de charge $\mathcal{A}_0$ et la phase supraconductrice $\mathcal{A}_3$, la généralisation aux 5 autres transitions possibles étant immédiate.

[10]Notons qu´il n´est pas possible de trouver de base de Cartan qui ne soit pas affectée par la dualité, puisque cette dernière conjugue.

D´après (V.66), le signe des couplages g_2 et g_3 doit changer à la transition. Lorsque $g_2 = g_3 = 0$, les trois fermions de Majorana de spin $(\xi^a)_{a=1,2,3}$ se découplent des trois fermions de Majorana d´isospin $(\xi^a)_{a=4,5,6}$. A ce point très particulier dans l´espace des couplages, répulsif, l´élargissement de symétrie maximal, vers le groupe SO(6), ne doit donc pas se produire. C´est une manifestation de la compétition entre les deux ordres (supraconducteur et d´onde de densité de charge). Cependant, l´élargissement de symétrie étant une tendance naturelle du système, celui-ci va se produire d´une manière plus faible : le groupe de symétrie infrarouge sera le plus gros sous-groupe de SO(6) compatible avec la condition $g_2 = g_3 = 0$, c´est-à-dire $\mathrm{SO}(3)_{\mathrm{spin}}\times\mathrm{SO}(3)_{\mathrm{orb}}$, qui sera le groupe de symétrie du modèle à la transition.

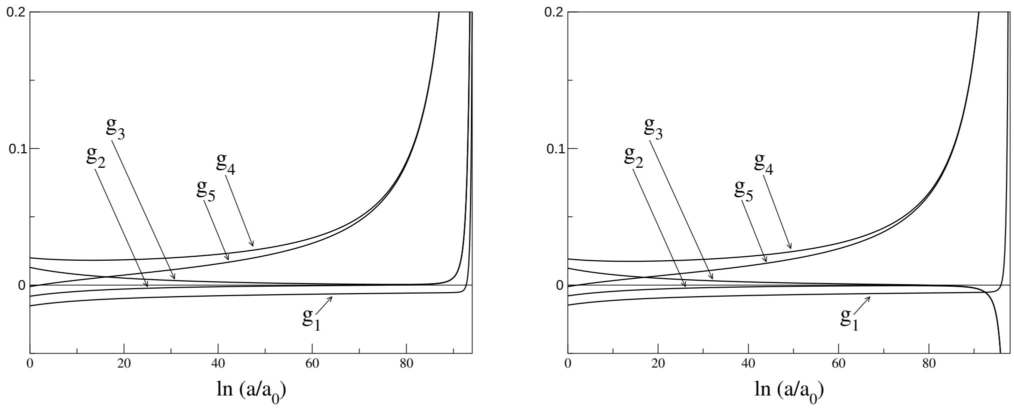


FIG. V.4: Flot des constantes de couplage au voisinage de la transition $\mathcal{A}_0 \leftrightarrow \mathcal{A}_3$. Le premier flot (phase $\mathcal{A}_0$) est obtenu pour les conditions initiales $(U, U_H, U_t) = (0.01, -0.25, 0)$. Le deuxième flot (phase $\mathcal{A}_3$), pour $(U, U_H, U_t) = (0.01, -0.24, 0)$.

La figure (V.4) montre le comportement du flot de part et d´autre de la transition $\mathcal{A}_0 \leftrightarrow \mathcal{A}_3$. Dans la limite infrarouge, $g_2 = g_3$ et $g_4 = g_5$, et le hamiltonien effectif au voisinage de la transition, invariant sous $\mathrm{SO}(3)_{\mathrm{spin}}\times\mathrm{SO}(3)_{\mathrm{orb}}$, a la forme :

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= -\frac{iv_s}{2}\sum_{a=1}^{3}(\xi^a_{\mathrm{R}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{R}} - \xi^a_{\mathrm{L}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{L}}) - \frac{iv_t}{2}\sum_{a=4}^{6}(\xi^a_{\mathrm{R}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{R}} - \xi^a_{\mathrm{L}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{L}}) \\ &+ 2\pi\, g_1 \sum_{1\leq a<b\leq 3}\kappa^a\kappa^b + 2\pi\, g_4 \sum_{4\leq a<b\leq 6}\kappa^a\kappa^b + 2\pi\, g_2 \sum_{1\leq a\leq 3<b\leq 6}\kappa^a\kappa^b. \end{aligned} \quad \text{(V.84)}$$

La première conclusion est donc qu´un élargissement de symétrie partiel a lieu. Bien entendu, lorsque l´on se déplace sur une ligne de transition, à l´approche d´un point tricritique où la compétition avec un troisième type d´ordre se manifeste, l´élargissement partiel de symétrie devra respecter une contrainte supplémentaire, si bien que le groupe de symétrie infrarouge sera plus petit. Nous nous restreindrons à l´étude de la transition suffisamment loin des points multicritiques.

Le fait que l´élargissement ne soit plus total complique le modèle, qui dépend maintenant de trois couplages, l´un d´entre eux étant arbitrairement petit proche de la transition ($g_2 = g_3 \ll g_{\alpha\neq 2,3}$). Cependant, les valeurs relatives de g_1 et $g_4 = g_5$ n´étant plus contraintes par la symétrie infrarouge, la situation générique est que l´un de ces deux couplages domine. Dans le cas de la transition $\mathcal{A}_0 \leftrightarrow \mathcal{A}_3$, on observe ainsi que $g_1 \ll g_4 = g_5$. Cette hiérarchie des couplages, conséquence de l´absence d´élargissement total de symétrie, va nous permettre de simplifier le modèle. En effet, $g_1 \ll g_4 = g_5$ signifie que l´échelle de masse générée dynamiquement dans le modèle de Gross Neveu $\mathrm{SO}(3)_{\mathrm{orb}}$ par l´interaction marginale $g_4 \sum_{4\leq a<b\leq 6} \kappa^a \kappa^b$ est très grande devant toutes les autres échelles d´énergie du problème. En conséquence, il est légitime d´intégrer sur les degrés de liberté orbitaux (les fermions de Majorana $(\xi^a)_{a=4,5,6}$) pour obtenir une théorie effective pour les fermions de Majorana de spin $(\xi^a)_{a=1,2,3}$. Cette procédure est similaire à celle que nous avons employéee dans l´étude du modèle de Hubbard au demi remplissage : aux frontières des régions à symétrie élargie, un opérateur devient dominant, qui interdit l´élargissement total de symétrie, et qui génére une échelle d´énergie dominante permettant d´intégrer sur une partie des degrés de liberté.

Cette procédure fournit le hamiltonien effectif suivant pour le secteur de spin :

$$\mathcal{H}_s = -\frac{iv_s}{2} \sum_{a=1}^{3} (\xi^a_{\mathrm{R}} \partial_x \xi^a_{\mathrm{R}} - \xi^a_{\mathrm{L}} \partial_x \xi^a_{\mathrm{L}}) \; + \; 2\pi\, g_1 \sum_{1\leq a<b\leq 3} \kappa^a \kappa^b \; + i\, m_s \sum_{1\leq a\leq 3} \kappa^a, \tag{V.85}$$

où le paramètre de masse des fermions est :

$$m_s = -i\, g_2 \left\langle \sum_{4\leq a\leq 6} \kappa^a \right\rangle, \tag{V.86}$$

la valeur moyenne étant prise dans le modèle de Gross Neveu SO(3) décrivant les fermions d´isospin.

Notre approche nous permet de donner l´ordre la transition : à la transition, g_2 s´annulle, si bien que l´opérateur relevant dans (V.85), le terme de masse, voit sa constante de couplage s´annuller et changer de signe. En conséquence, si $g_1 < 0$, le terme de couplage marginal est irrelevant et la transition est du deuxième ordre. En revanche, si $g_1 > 0$, on attend une transition du premier ordre, avec une singularité dans le gap de spin.

Avec les conditions initiales (V.58), la transition est du deuxième ordre. Ce fait est très intéressant : notre approche prédit l´existence d´un point critique, avec charge centrale $c = \frac{3}{2}$, à la transition supraconducteur-onde de densité de charge. A ce point de transition, le secteur de spin est décrit par le modèle $SO(3)_1$, tandis que le secteur orbital est décrit par le modèle de Gross Neveu SO(3).

La description du crossover entre le centre des phases à symétrie élargie et le bord de ces phases, décrits par le hamiltonien (V.85), est un problème non perturbatif compliqué, comme nous l´avons vu pour le modèle de Hubbard SU(4) au demi remplissage. Lors de ce crossover, le spectre du modèle passe de celui du modèle de Gross Neveu SO(6) (un sextuplet de fermions et deux quartuplets de kinks) à celui de trois fermions de Majorana massifs en interaction. Le spectre de ce modèle n´est pas connu. On peut néanmoins émettre une hypothèse raisonnable : d´une part, si $g_1 < 0$, l´interaction est répulsive et n´entraîne qu´une renormalisation de m_s. D´autre part, si $g_1 > 0$, on obtient lorsque $m_s = 0$ le modèle de Gross Neveu SO(3), dont le spectre ne contient que deux doublets de kinks. Dès que $m_s \neq 0$, la symétrie $\mathbb{Z}_2$ $\kappa^a \to -\kappa^a$ est brisée explicitement si bien que l´on s´attend à ce que les kinks disparaissent du spectre. Les excitations de basse énergie les plus vraisemblables sont alors un triplet de fermions, de masse $m \sim m_s$ au plus bas ordre en g_1. Quel que soit le signe de g_1, le bas du spectre est donc constitué d´un triplet de fermions de Majorana massifs. Il est tentant de postuler une continuité entre ces trois états de basse énergie et la moitié du sextuplet du modèle de Gross Neveu SO(6). Puisque $g_4 = g_5 \gg g_1$, l´autre moitié de ces états, qui représente les excitations dans le secteur d´orbitale, possède une masse bien plus grande que les excitations de spin et disparaît du spectre de basse énergie. Le sort des kinks du modèle de Gross Neveu SO(6) est une question ouverte.

Diagramme des phases

L´étude de la sous section précédente peut être répétée pour les autres transitions. A chaque transition, on peut attacher le groupe de symétrie du modèle (le plus gros sous groupe de SO(6) permis) dans l´infrarouge.

La transition $\mathcal{A}_0 \leftrightarrow \mathcal{A}_2$ a ainsi le groupe de symétrie SO(4)×SO(2). A la transition, $g_2 = g_4 = 0$ et le modèle consiste en le produit d´un modèle de Luttinger, de charge centrale $c = 1$, par un modèle à symétrie SO(4), qui peut être massif ou non. Dans tous les cas, la transition est du deuxième ordre.

La transition $\mathcal{A}_0 \leftrightarrow \mathcal{A}_1$ a pour groupe de symétrie SO(5)×$\mathbb{Z}_2$. A la transition, $g_3 = g_4 = 0$ et le modèle consiste en le produit d´un modèle d´Ising critique par un modèle à symétrie SO(5). La transition est du deuxième ordre.

D´après (V.66), les transitions $\mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{A}_2$, $\mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{A}_3$ et $\mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{A}_3$ sont respectivement identiques aux transitions $\mathcal{A}_0 \leftrightarrow \mathcal{A}_3$, $\mathcal{A}_0 \leftrightarrow \mathcal{A}_2$, et $\mathcal{A}_0 \leftrightarrow \mathcal{A}_1$.

Nous résumons ces résultats dans le tableau suivant.

	Symétrie	Ordre	Degrés de liberté critiques
$\mathcal{A}_0 \leftrightarrow \mathcal{A}_1$ et $\mathcal{A}_2 \leftrightarrow \mathcal{A}_3$	SO(5)×$\mathbb{Z}_2$	2 2	Ising $(c = \frac{1}{2})$ si $g_1 = g_2 = g_5 > 0$ $\mathrm{SO}(6)_1$ $(c = 3)$ si $g_1 = g_2 = g_5 < 0$
$\mathcal{A}_0 \leftrightarrow \mathcal{A}_2$ et $\mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{A}_3$	SO(4)×SO(2)	2 2	L.L. $(c = 1)$ si $g_1 = g_3 > 0$ $\mathrm{SO}(6)_1$ $(c = 3)$ si $g_1 = g_3 < 0$
$\mathcal{A}_0 \leftrightarrow \mathcal{A}_3$ et $\mathcal{A}_1 \leftrightarrow \mathcal{A}_2$	SO(3)×SO(3)	1 2 2	$\emptyset$ si $g_1, g_4 = g_5 > 0$ $\mathrm{SO}(3)_1$ $(c = \frac{3}{2})$ si $g_1 g_4 = g_1 g_5 < 0$ $\mathrm{SO}(6)_1$ $(c = 3)$ si $g_1, g_4 = g_5 < 0$

Avant de présenter le diagramme des phases dans le plan (U_H, U_t), à U fixé (figure V.5), obtenu par intégration numérique de la fonction β (V.61), faisons remarquer que le modèle défini par le hamiltonien (V.57) et les couplages (V.58) possède, sur certaines lignes, une symétrie ultraviolette étendue.

Ainsi, sur la ligne $U_t = -\frac{3}{4}U_H$, la symétrie du modèle nu est SU(2)×SU(2). Cette ligne est la ligne étudiée par Arovas et Auerbach [118], et correspond au modèle spin orbital étudié dans le chapitre IV. Sur cette ligne, le point $U_H = -8U$, $U_t = 6U$, est un point de découplage des secteurs de spin et d´orbitale. Il marque la transition entre une phase $\mathcal{A}_0$ et une phase $\mathcal{A}_3$.

Sur la ligne $U_t = \frac{1}{4}U_H$, la symétrie du modèle nu est SO(5)×$\mathbb{Z}_2$. Le point A, de coordonnées $U_H = -8U$, $U_t = -2U$ est un point à symétrie SU(4) ; il s´agit du groupe SU(4) de la classe $\mathcal{A}_1$ (à ce point les couplages nus vérifient $g_1 = g_2 = -g_3 = -g_4 = g_5 < 0$). Sur cette ligne, ce point marque la transition entre une phase $\mathcal{A}_0$ et une région critique $\mathrm{SU}(4)_1$. Il existe également un point de découplage des secteurs SO(5) et $\mathbb{Z}_2$ sur cette ligne, le point B de coordonnées $U_H = -\frac{8}{5}U$, $U_t = -\frac{2}{5}U$.

Sur la ligne $U_H = 0$, la symétrie du modèle nu est SO(4)×SO(2). Le point D, de coordonnée $U_t = 2U$ est un point de découplage entre le secteur SO(4) et le secteur SO(2), qui marque une transition entre une phase $\mathcal{A}_2$ et une phase $\mathcal{A}_0$.

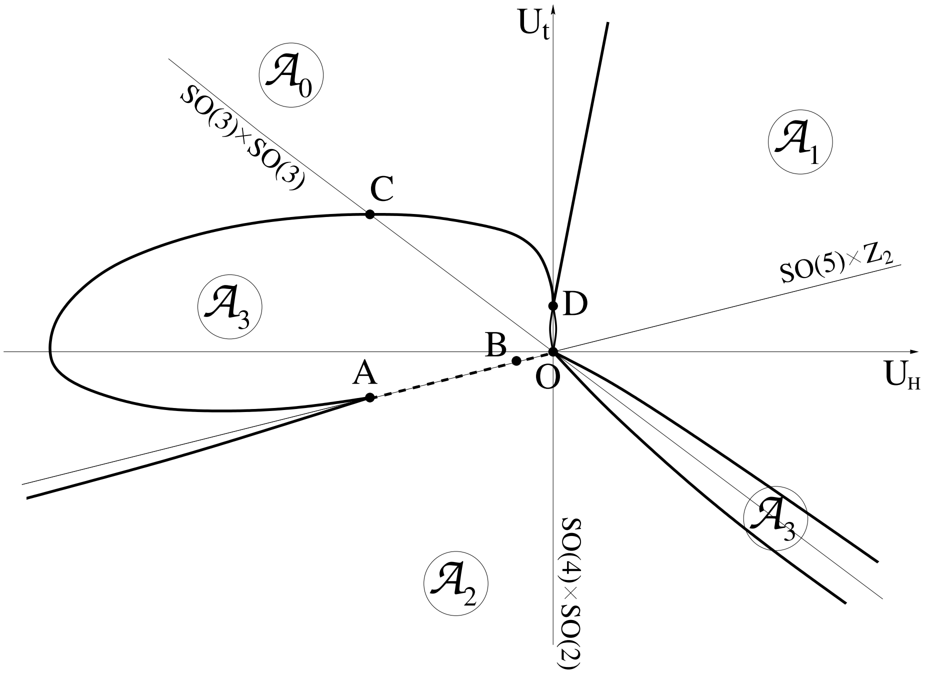


FIG. V.5: Diagramme des phases du hamiltonien (V.57) à petit U fixé. Les lignes de transition sont en gras. La symétrie nue étendues des trois lignes particulières est mentionnée. La ligne pointillée AO est une ligne totalement critique $SU(4)_1$. La petite région autour du segment OD est une phase $\mathcal{A}_2$.

L´interaction de Hund, qui tend à aligner les spin sur les deux chaînes, correspond à $U_H < 0$. Son effet, lorsque $U_H \lesssim U$, est de favoriser l´apparition d´une instabilité supraconductrice de type triplette. Ceci s´interprète simplement : localement, l´interaction de Hund favorise un appariement triplet des spin sur les barreaux de l´échelle. Il s´agit d´un liquide de spin gapé chiral, dans lequel les états portent un courant de spin-orbital j_{st}. Notons que cette phase est identique à la phase C de liquide de spin gapé du modèle spin-orbital (chapitre IV). Le paramètre d´ordre est hors diagonal, et en conséquence, cette phase devient supraconductrice lorsque l´on dope le système pour l´écarter du quart de remplissage. Cette phase est similaire à celle obtenue par Shelton *et al.* [48], en le sens que l´ordre est le même. Cependant, le modèle considéré par ces auteurs ne possède pas de magnon cohérent à basse énergie, contrairement à notre phase.

Lorsque U_H/U croît, la répulsion coulombienne locale n´est plus suffisante pour assurer une répartition uniforme de la charge, et une onde de densité de charge se forme en raison de la trop forte interaction de Hund. L´instabilité supraconductrice disparaît pour une valeur $U_H \sim 10\,U$ de l´interaction de Hund. Cette transition est du second ordre. Dans la phase d´onde de densité de charge, le magnon disparaît comme particule élémentaire : les excitations de spin sont incohérentes.

V.3 Conclusion

L´étude de perturbations au modèle de Hubbard SU(4) en dehors du demi remplissage a fait apparaître que génériquement, lorsque la symétrie est suffisamment brisée, ces perturbations sont essentielles et le modèle est dans une phase de liquide de spin gapé. (Une exception remarquable est constituée du modèle spin-orbite, pour lequel les perturbations, dans une large zone du diagramme des phases, ne détruisent pas la criticalité en spin du modèle de Hubbard SU(4)). Un autre fait générique est la tendance à l´élargissement de symétrie : les écarts au point à symétrie SU(4) sont inessentiels, dans le sens que la théorie effective retrouve asymptotiquement (dans la limite d´échelle) une invariance SU(4). A la lumière de l´étude du modèle de Hubbard au demi remplissage (chapitre III), on peut donner un sens à cet élargissement de symétrie même loin de la limite d´échelle. La symétrie SU(4) est alors approximative, dans le sens que le contenu en particules à basse énergie est celui du modèle isotrope à symétrie SU(4), qui s´identifie au modèle de Gross Neveu SO(6). La symétrie SU(4), non physique, de notre modèle de Hubbard initial, est donc dynamiquement restaurée lors du processus de renormalisation, un effet majeur de la brisure de symétrie étant la génération d´un gap de spin.

Le type de liquide de spin gapé obtenu dépend de manière fine du schéma d´interaction, et le groupe de renormalisation permet de déterminer lequel des nombreux ordres en compétition sera choisi par le système à basse énergie. Ces différents ordres sont fortement contraints par l´élargissement de symétrie. Nous avons ainsi établi qu´il est possible de classer les types de liquide de spin gapés accessibles au modèle sur réseau, étant donné un schéma de brisure de la symétrie SU(4). Ces liquides de spin se laissent paramétrer par des automorphismes de SU(4), ce qui nous a permis de distinguer deux classes de liquide de spin à symétrie élargie SO(6) : le liquide conventionnel et le liquide chiral, ce dernier étant caractérisé par des excitations portant un courant et non une charge. Ces deux liquides diffèrent par le type d´ordre, la cohérence des excitations de spin ainsi que par leurs fonctions de réponses statiques à des perturbations. Ainsi, dans les liquides conventionnels, l´ordre est diagonal, et le paramètre d´ordre est local en les fermions sur le réseau. Les excitations de spin sont incohérentes (le magnon n´existe pas comme quasiparticule). Le liquide conventionnel est incompressible (sa susceptibilité magnétique s´annulle), et rigide (une torsion du système dans l´espace des spin coûte une énergie finie). Dans le liquide chiral, toutes ces propriétés sont changées : l´ordre est hors diagonal et non local en les fermions, les excitations de spin sont cohérentes, la susceptibilité dans certaines directions est non nulle, tandis que la raideur s´annulle dans ces mêmes directions. Il est remarquable que l´instabilité supraconductrice apparaisse dans le liquide de spin chiral lorsque le système devient métallique (sous dopage). Dans la phase isolante, le liquide de spin chiral est donc un précurseur de l´instabilité supraconductrice.

L´effet du champ magnétique dans ces modèles de spin gapés peut présenter quelques surprises. Ainsi, dans le modèle spin orbite, en plus de la transition commensurable - incommensurable qui rend critique le secteur de spin du modèle, une transition vers une phase critique pour les degrés de liberté orbitaux est induite lors le champ magnétique dépasse une valeur critique. De manière plus générale, il est possible de considérer un “champ magnétique” généralisé, à savoir une quantité se couplant de manière linéaire à un courant de la théorie, dans ces liquides de spin gapés. Un exemple physiquement intéressant est l´interaction spin-orbite, qui, en dehors du demi remplissage, est un courant du modèle de WZNW $SU(4)_1$. Dans cette situation, le “champ magnétique” n´est plus une quantité conservée, et l´on doit s´attendre, sous le groupe de renormalisation, à un flot de la *direction* de ce “champ magnétique”. Ce flot est marginal, et une compétition est attendue entre la direction de ce champ et les interactions marginales courant-courant.

Conclusions

Ce travail dégage quelques-uns des aspects de la dégénérescence orbitale dans les systèmes d´électrons fortement corrélés à une dimension en s´appuyant sur un modèle simplifié qui en exalte les effets. La dégénérescence orbitale est entendue au sens large d´une participation de plusieurs bandes dégénérées, et possédant des dispersions similaires, à la physique de basse énergie. La plus grande part de cette thèse se concentre sur le cas à deux bandes, le modèle central étant le modèle de Hubbard à symétrie SU(4).

Bien plus qu´une commodité mathématique, comme il est d´usage dans les études asymptotiques à grand nombre de composantes, le modèle à symétrie maximale SU(4) a révélé sa pertinence pour au moins deux raisons dans la description des systèmes unidimensionnels de fermions corrélés avec dégénérescence orbitale. Ainsi, par la richesse de son diagramme des phases, il illustre certaines propriétés génériques à l´introduction des degrés de liberté microscopiques orbitaux. D´autre part, il offre un point de vue privilégié sur la famille des liquides de spin gapés susceptibles de se développer génériquement dans ces systèmes.

Le modèle de Hubbard SU(4) se concentre sur les effets de la dégénérescence orbitale en la retenant de manière maximale. Malgré la grande simplicité de ce modèle - et en regard du modèle de Hubbard à une bande - la richesse de son diagramme des phases peut surprendre. Tout d´abord, il présente au quart de remplissage une transition de Mott à une valeur finie de la répulsion coulombienne. Ceci est typiquement un effet entropique lié à l´augmentation du nombre d´états microscopiques disponibles. Ensuite, une deuxième phase isolante de Mott apparaît au demi remplissage, qui s´accompagne cette fois du développement d´une longueur de corrélation finie pour les degrés de liberté de spin. L´apparition d´une phase de liquide de spin gapé sans qu´aucune symétrie continue ne soit brisée, et sans frustration géométrique, découle de la dégénérescence orbitale. Cette phase de liquide de spin possède en outre une symétrie élargie SO(8) lorsque la répulsion coulombienne n´est pas trop importante.

Le modèle de Hubbard SU(4) est le plus simple des modèles exhibant cette propriété, qui a été proposée comme générique dans l´échelle de Hubbard à deux montants [77] à faible couplage. Une combinaison d´arguments théoriques et numériques nous a permis de montrer que les conséquences spectrales importantes de cette symétrie élargie s´étendent au delà du régime perturbatif, jusqu´à des valeurs $U \simeq 4\,t$ de la répulsion coulombienne où l´on sort nettement de la limite d´échelle $\Delta a_0 \ll 1$. L´extension appréciable de cette phase où degrés de liberté de spin, d´orbitale et de charge sont unifiés, rend plus probable l´éventualité de son observation expérimentale. En outre, cette phase de liquide de spin gapé à symétrie SO(8) subsiste lorsque le système est légèrement dopé, et la phase paramagnétique métallique qui en résulte est également une nouveauté attribuable à la dégénérescence orbitale. Il est tentant d´établir une parenté entre cette phase et la phase métallique paramagnétique proche de la transition de Mott dans certains oxydes de métaux de transition comme VO_2 : la dégénérescence orbitale seule serait suffisante pour rendre compte de cette spécificité, sans qu´il soit besoin d´invoquer le rôle de la frustration. La robustesse de cette phase lors du passage de notre modèle unidimensionnel à un modèle tridimensionnel est une question ouverte.

Le modèle de Hubbard SU(4) s´est également révélé être un point de départ fécond pour atteindre perturbativement certaines des phases de liquides de spin gapés supportées par l´échelle de Hubbard en dehors du demi remplissage. Si la dégénérescence orbitale, étant une source de frustration, favorise naturellement l´apparition de liquides de spin désordonnés, la spécificité du modèle de Hubbard SU(4) est d´être un point de frustration maximale. En conséquence, il se trouve être pour ses propriétés magnétiques un point multicritique connectant de nombreuses phases gapées différentes. L´approche qui consiste à considérer ces liquides de spin, aux propriétés très variées, comme un liquide beaucoup plus simple pour des “spin” généralisés, faisant notamment intervenir les degrés de liberté orbitaux, en a permis une classification au voisinage du point multicritique $SU(4)_1$. Loin du point multicritique, ces phases s´étendent de manière adiabatique, au moins pour leurs propriétés thermodynamiques. La question de la nature des excitations de basse énergie est plus délicate. Nous avons pu l´aborder en exploitant le phénomène d´élargissement de symétrie, qui assure que dans une large portion du diagramme des phases, la théorie effective à basse énergie possède une symétrie approximative SO(6), et se réduit au modèle - intégrable - de Gross Neveu SO(6), ce qui donne accès au spectre de basse énergie. L´élargissement de symétrie contraint en outre fortement le type de liquide de spin gapé accessible -la forme du paramètre d´ordre. Ces contraintes nous ont permis une énumération des liquides de spin gapés, à symétrie élargie, portés par l´échelle à plusieurs montants. Les différents liquides de spin gapés obtenus sont ainsi étiquetés par des automorphismes qui encodent la correspondance entre les champs de la théorie effective à basse énergie et les électrons du modèle initial. Il ressort de cette étude que les liquides de spin obtenus peuvent appartenir à deux grandes classes : les liquides conventionnels, qui correspondent à la notion intuitive d´un liquide de spin incompressible, présentant de la rigidité de phase, et les liquides chiraux. Dans le cas d´un liquide chiral, certains nombres quantiques changent de statut lors du processus de renormalisation : de charges de Noether dans la limite ultraviolette ils deviennent des courants de Noether dans la limite infrarouge. Il est probable que ce phénomène de changement de statut possède une interprétation topologique ; nous ne l´avons toutefois pas trouvée. Les liquides chiraux sont caractérisés par des excitations portant des courants, une compressiblité non nulle et une rigidité nulle dans certaines directions. Une propriété remarquable des liquides de spin chiraux est leur lien à la supraconductivité : lorsque l´on dope ces systèmes pour atteindre une phase métallique, une instabilité supraconductrice se développe. Il serait intéressant de savoir s´il s´agit seulement d´une coïncidence.

Nous avons rencontré au cours de ce travail un certain nombre de questions ouvertes, qui suggèrent naturellement quelques extensions à ce travail. Tout d´abord, le phénomène d´élargissement de symétrie a joué un rôle central. Il est d´un grand intérêt pratique puisqu´il prédit, dans des théories non intégrables, un large régime où la théorie effective à basse énergie, grande distance est approximativement un modèle intégrable, ce qui donne accès au contenu spectral de basse énergie : le contenu en quasiparticules d´une théorie non intégrable en forte interaction est disponible ! Le schéma de renormalisation proposé par Gerganov, Moriconi et LeClair [80], que nous avons utilisé, constitue la seule approche non perturbative en constante de couplage dont nous disposons. Il s´agit cependant d´un développement perturbatif dans l´inverse du niveau k du modèle de WZNW sous-jacent, et il est fort probable que l´élargissement en un nombre fini d´itérations du groupe de renormalisation prédit dans le cadre de ce schéma soit un artefact de la méthode. Il est également clair qu´aller au delà de toute approche perturbative pour des modèles anisotropes est une tâche considérable, probablement impossible. Dans ce contexte, une voie à considérer est d´exploiter l´intégrabilité de la théorie effective pour contrôler, en perturbation *autour de la théorie massive intégrable*, par l´emploi des facteurs de forme, l´effet des anisotropies courant-courant résiduelles. On peut ainsi espérer suivre de manière quantitative l´évolution de la brisure des multiplets en s´éloignant du point isotrope, et éventuellement localiser une instabilité spectrale lorsque l´anisotropie atteint une valeur critique.

L´étude des liquides de spin au voisinage du point multicritique $SU(4)_1$ a fait apparaître qu´en ce qui concerne leurs théories continues effectives à basse énergie, tous ces liquides sont essentiellement les mêmes à un changement de base non local près, qui fixe la correspondance entre les champs ultraviolets et infrarouges. La description d´un liquide particulier se ramène donc à la description de l´une de ces bases possibles. L´éventuelle extension de cette structure à d´autres types de liquide de spin à une dimension, est une question naturelle. Ceci supposerait l´identification de degrés de liberté additionnels au spin qui s´ordonneraient concomitamment à ce dernier, analogues aux degrés de liberté orbitaux dans le cas de l´échelle de Hubbard.

Une question cruciale qui n´a pas été soulevée est la stabilité, en présence de désordre, des phases obtenues. Il serait ainsi intéressant d´étudier la robustesse au désordre du phénomène d´élargissement de symétrie. La possible interprétation topologique du changement de statut des nombres quantiques pour les liquides chiraux aurait tendance à les protéger vis-à-vis du désordre.

Enfin, la formidable richesse du diagramme des phases de l´échelle à deux montants est un encouragement à l´étude de situations plus complexes, en exploitant le phénomène d´élargissement de symétrie. Il ne fait aucun doute que pour l´échelle à m montants, le groupe de symétrie maximale $SU(2m)$ en dehors du demi remplissage, ou $SO(4m)$ au demi remplissage, est d´autant moins probable de jouer un rôle comme symétrie effective à basse énergie que m est grand. Un argument de théorie des champs permet ainsi de montrer que pour de grandes valeurs de m l´élargissement à $SO(4m)$ au demi remplissage ne peut pas avoir lieu. Une direction plus raisonnable et prometteuse est de chercher à coupler ces échelles de Hubbard à symétrie effective $SO(8)$ à basse énergie. Dans cette approche, il est probable que subsistent certains modes de basse énergie du modèle de Gross Neveu $SO(8)$ lorsque le nombre d´échelles croît.

Annexe A

Quelques notions sur les groupes de Lie

A.1 Construction des représentations

A.1.1 Structure des représentations

Nous présentons ici le strict nécessaire à la description des représentations des algèbres de Lie simples. Une très bonne introduction aux algèbres de Lie simples se trouve dans la référence [16].

Une algèbre de Lie $\mathfrak{g}$ est un espace vectoriel muni d´une application bilinéaire antisymétrique notée $[,]$ qui applique $\mathfrak{g} \times \mathfrak{g}$ dans $\mathfrak{g}$, et qui vérifie l´identité de Jacobi :

$$[X,[Y,Z]] + [Y,[Z,X]] + [Z,[X,Y]] = 0 \qquad \forall X, Y, Z \in \mathfrak{g} \tag{A.1}$$

Une seule contrainte supplémentaire [1] suffit à définir les algèbres de Lie simples. Les groupes de Lie simples, groupes de symétrie continus (notés génériquement G) omniprésents en physique, sont obtenus par exponentiation de $\mathfrak{g}$: les éléments de G [2] sont de la forme :

$$U = \exp(iX)\,, \qquad X \in \mathfrak{g}, \tag{A.2}$$

ou, de manière équivalente, les éléments de $\mathfrak{g}$ sont les générateurs du groupe de symétrie. Les règles de commutation dans $\mathfrak{g}$ définissent la structure de G.

Il est extraordinaire qu´une définition aussi générale permette une classification exhaustive des algèbres de Lie simples : Cartan a montré au début du siècle der-

[1] Cette contrainte est qu´il n´existe pas de sous idéal propre dans g.

[2] Plus précisément, de la composante connexe de l´unité dans G

nier qu´elles pouvaient se classer en quatre familles infinies (qui par exponentiation donnent les groupes SU(n), sp(n), SO($2n$), SO($2n$+1)) auxquelles s´ajoutent 5 algèbres simples exceptionnelles.

Le rang de $\mathfrak{g}$, noté r, est défini comme le nombre maximal d´éléments de $\mathfrak{g}$ linéairement indépendants et commutant deux à deux. C´est une caractéristique importante de $\mathfrak{g}$, puisqu´il fixe le nombre de générateurs que l´on pourra diagonaliser dans une même base : dans un système physique G-invariant, les états seront indexés par r nombres quantiques, généralisations de la projection du spin sur un axe choisi (disons l´axe z) dans le cas de SU(2). L´ensemble de ces générateurs commutant entre eux, qui forme une sous-algèbre, est appellée l´algèbre de Cartan et sera notée $\mathfrak{h}$. Une base des générateurs de Cartan sera notée $(H^a)_{a=1\ldots r}$.

Représentation adjointe

Parmi toutes les représentations linéaires irréductibles de $\mathfrak{g}$, la représentation *adjointe* joue un rôle très particulier : il s´agit de la représentation de $\mathfrak{g}$ sur elle-même, si bien que la connaître, c´est connaître $\mathfrak{g}$. L´opération de $\mathfrak{g}$ sur elle-même qui définit la représentation adjointe est l´opération Ad_X, définie pour tout de X dans $\mathfrak{g}$, par :

$$\mathrm{Ad}_X : \quad Y \to \mathrm{Ad}_X(Y) = [X, Y]\,. \tag{A.3}$$

Cette opération permet de définir un produit scalaire sur $\mathfrak{g}$, la forme de Killing, donnée par :

$$K(X, Y) = \frac{1}{2g}\,\mathrm{Tr}\,(\mathrm{Ad}_X \mathrm{Ad}_Y) \tag{A.4}$$

où g est une normalisation (le nombre de Coxeter dual) qui sera définie plus tard.

Comme les générateurs de Cartan H^a commutent entre eux, on peut choisir une base $\mathcal{B}$ de $\mathfrak{g}$ dans laquelle les opérations Ad_{H^a} sont diagonales. Puisque $\mathrm{Ad}_{H^a}(H^b) = 0$, on peut choisir l´ensemble des H^b comme les r premiers éléments de $\mathcal{B}$. Les autres éléments sont les *opérateurs d´échelle*, notés E_α, où α est un vecteur de composantes α^a (a=1...r) données par :

$$\mathrm{Ad}_{H^a}(E_\alpha) = [H^a, E_\alpha] = \alpha^a E_\alpha. \tag{A.5}$$

Ces vecteurs r-dimensionnels, qui sont non dégénérés, sont appelés les racines. Comme $E_\alpha^\dagger = E_{-\alpha}$, si α est une racine, $-\alpha$ en est aussi une. En utilisant l´identité de Jacobi, on peut montrer que si $\alpha \neq -\beta$ sont deux racines, ou bien $\alpha + \beta$ est une racine, et $[E_\alpha, E_\beta] \propto E_{\alpha+\beta}$, ou bien $[E_\alpha, E_\beta] = 0$. L´identité de Jacobi permet aussi de montrer que si α est une racine, alors $\left[E_\alpha, E_\alpha^\dagger\right]$ commute à tout générateur de Cartan H^a, ce qui implique que $\left[E_\alpha, E_\alpha^\dagger\right] \in \mathfrak{h}$. La normalisation des opérateurs d´échelle est fixée par :

$$[E_\alpha, E_{-\alpha}] = \frac{2}{|\alpha|^2}\,\alpha^a H^a. \tag{A.6}$$

où $|\alpha|^2 = \alpha \cdot \alpha = \sum_j (\alpha^j)^2$.

L´ensemble Δ des racines comporte $|\Delta| = \dim(\mathfrak{g}) - r$ éléments, et en général, $|\Delta|$ est bien plus grand que r. Mais parmi ces racines, on peut montrer que r d´entre elles, les racines *simples* $(\alpha_i)_{i=1\ldots r}$ forment une base de Δ, les composantes de toute racine dans cet base étant des entiers, de même signe : les racines appartiennent à un réseau qu´on notera Q. Ce réseau est $Q = \alpha_1\mathbb{Z} + \ldots \alpha_r\mathbb{Z}$. La manière dont se distribuent les racines dans Q est fixée par les symétries discrètes de Δ. Notons que comme Δ est invariant dans l´opération $\alpha \to -\alpha$, on peut définir un ensemble de racines *positives* Δ^+, en définissant par exemple : $\alpha > 0$ si la première composante α^j non nulle de α est strictement positive.

Quelques éléments sur les représentations irréductibles de $\mathfrak{g}$ sont nécessaires pour aller plus loin. Etant données une telle représentation, les générateurs de Cartan permettent d´étiqueter chaque état, dans une base $(|\lambda\rangle)$ convenablement choisie, selon :

$$H^a\,|\lambda\rangle = \lambda^a\,|\lambda\rangle\,, \tag{A.7}$$

Les valeurs propres $(\lambda^a)_{a=1\ldots r}$ définissent les composantes du vecteur λ, qui est appelé un *poids* [3]. La relation (A.5) implique :

$$H^a\left(E_\alpha\,|\lambda\rangle\right) = \left(\lambda^a + \alpha^a\right)\left(E_\alpha\,|\lambda\rangle\right), \tag{A.8}$$

si bien que $E_\alpha\,|\lambda\rangle$, s´il n´est pas nul, est proportionnel à un état $|\lambda + \alpha\rangle$: les opérateurs d´échelle E_α permettent de se promener à l´intérieur de la représentation, à l´instar des opérateurs S^+ et S^- dans SU(2), qui augmentent ou diminuent d´une unité la valeur de la projection du spin s^z. L´application répétée de (A.8) permet en outre de montrer que pour tout poids λ et toute racine α, la quantité $2\,\frac{\alpha\cdot\lambda}{|\alpha|^2}$ est un entier. Mieux : le vecteur

$$s_\alpha(\lambda) = \lambda - 2\,\frac{\alpha \cdot \lambda}{|\alpha|^2}\,\alpha, \tag{A.9}$$

est encore un poids de la représentation. L´équation (A.9) définit la réflexion de Weyl par rapport à l´hyper plan perpendiculaire à la racine α. Le groupe de Weyl, généré par les réflexions s_α, est le groupe de symétrie discrète de toute représentation. On

[3] Les racines sont donc les poids de la représentation adjointe.

peut en fait montrer que le groupe de Weyl est engendré par les r reflexions simples s_{α_i}.

De la même manière que pour SU(2), chaque représentation s possède un état de plus haute projection $s^z = s$ (ce qui définit l´“étiquette” de la représentation), toute représentation de G possède un plus haut poids, non dégénéré, que l´on notera λ (les autres poids de la représentation seront à partir de maintenant appelés λ', ou $\mu \dots$), qui a la propriété suivante :

$$E_\alpha^\dagger \left|\lambda\right\rangle = 0 \quad \forall \alpha \in \Delta^+. \tag{A.10}$$

En appliquant ces résultats à la représentation adjointe, on peut définir, parmi toutes les racines, la *plus haute* racine, notée θ, qui vérifie (A.10). En conséquence, on peut montrer que la décomposition $\sum_{i=1}^r m_i \alpha_i$ de θ sur les racines simples maximise la somme $\sum_i m_i$. L´ensemble des racines se déduit donc de θ en lui soustrayant un nombre fini de racines simples. La plus haute racine permet également de fixer la normalisation du produit scalaire (A.4) : la normalisation traditionnelle [4] est $|\theta|^2 = 2$. Une fois définie θ, on obtient toutes les racines (c´est-à-dire tous les poids de la représentation adjointe) par applications répétées des réflexions de Weyl simples s_{α_i}. Pour caractériser complètement la représentation adjointe, il suffit donc de connaître les angles que font les racines simples entre elles, ce qui est codé dans la *matrice de Cartan* C, à r^2 coefficients entiers :

$$C_{ij} = 2\,\frac{\alpha_i \cdot \alpha_j}{|\alpha_j|^2}. \tag{A.11}$$

Représentation quelconque

Nous pouvons à présent aborder la construction d´une représentation quelconque, définie par son plus haut poids λ.

Jusqu´à présent, la base de Cartan $(H^a)_{a=1\dots r}$ était complètement quelconque. Il existe une base très pratique, la *base de Chevalley* $(h^i)_{i=1\dots r}$, définie par :

$$h^i = \frac{2}{|\alpha_i|^2} \sum_{a=1}^r \alpha_i^a H^a. \tag{A.12}$$

Dans cette base, le poids de tout état a des coefficients *entiers*. Les coefficients des poids dans cette base particulière sont appelés les *coefficients de Dynkin*. Le fait qu´ils

[4] Une exception : dans le cas de SU(2), où la seule racine est un vecteur à une composante, on choisit en général $\theta = 1$.

soient entiers montre que les poids vivent sur un réseau, noté $P = \omega_1\mathbb{Z} + \ldots + \omega_r\mathbb{Z}$, où les ω_i sont les *poids fondamentaux* [5]. On a bien entendu $Q \subset P$, puisque les racines sont des poids particuliers. On peut interpréter simplement les composantes de la matrice de Cartan : ce sont les coefficients de Dynkin des racines simples :

$$\alpha_i = \sum_j C_{ij}\omega_j. \tag{A.13}$$

Une autre propriété importante de la base de Chevalley est que les plus hauts poids λ ont des coefficients dans cette base qui sont tous positifs ou nuls.

Une fois donné le plus haut poids $\lambda = (\lambda_1, \ldots, \lambda_r)$, il suffit pour en déduire les autres poids de la représentation, d´utiliser la propriété (A.8), c´est-à-dire, de manière équivalente, de lui retirer des racines simples. La manière dont on retire ces racines simples est contrainte fortement par le groupe de Weyl. Nous présentons ici un algorithme simple qui permet de construire tous les poids de la représentation, à partir du plus haut poids et de la matrice de Cartan :

Pour chaque composante λ_i strictement positive, on construit les poids $\mu = \lambda - \alpha_i, \lambda - 2\alpha_i, \ldots, \lambda - \lambda_i\alpha_i$. Tous ces poids μ appartiennent à la représentation. Puis on répète cette opération en remplaçant λ par les poids μ que l´on vient d´obtenir, et ainsi de suite, jusqu´à ce que les poids construits n´aient plus de composantes positives.

Etant donnée une représentation de G, de plus haut poids λ et dont les poids sont notés μ, on peut montrer que l´ensemble des poids $-\mu$ est encore une représentation, la représentation *conjuguée* à λ. Lorsque cette dernière représentation coïncide avec λ, la représentation est dite auto-conjuguée. Un exmple de représentation auto-conjuguée est la représentation adjointe.

A.1.2 Application à SU(4) et SO(8)

Exemple de SU(2)

L´algèbre $\mathfrak{su}(2)$ est de dimension 3, une base en étant donnée par les matrices de Pauli $(\sigma^a)_{a=1,2,3}$. Le rang est $r = 1$, et une base de Cartan est σ^3. Afin d´utiliser les mêmes normalisations que dans le cas général, les opérateurs de spin sont choisis comme $S^a = \sigma^a/\sqrt{2}$. Les opérateurs d´échelle sont $S^+ = (\sigma^1 + i\sigma^2)/2$, $S^- = S^{+\dagger}$, et la relation $[S^3, S^+] = \sqrt{2}\, S^+$ montre que la seule racine positive (qui est forcément simple !) est $\alpha_1 = \sqrt{2}$. Les racines $\{\alpha_1, -\alpha_1\}$ vivent donc sur le réseau $Q = \sqrt{2}\,\mathbb{Z}$.

[5] La base $(\omega_i)_{i=1\ldots r}$ est la base duale des $\left(\frac{2\alpha_i}{|\alpha_i|^2}\right)_{i=1\ldots r}$.

Le poids fondamental est $\omega_1 = 1/\sqrt{2}$, de sorte que les poids vivent sur le réseau $P = \mathbb{Z}/\sqrt{2}$. En revenant à la normalisation usuelle pour SU(2), on voit que le réseau des racines Q correspond aux spins entiers, tandis que le réseau des poids P contient des états de projection de spin demi entier. La matrice de Cartan est $C = (2)$, et la racine α_1 a pour coefficient de Dynkin 2.

Le plus haut poids de la représentation de spin s a pour projection de spin $\sigma^3 = 2s$, et son coefficient de Dynkin est $\lambda_1 = 2s$. L´algorithme qui permet d´obtenir les autres états de cette représentation fait apparaître (en une seule étape) les poids μ de coefficient de Dynkin $\mu_1 = 2s-2, 2s-4, \ldots, 2s-2\mu_1 = -2s$.

Quelques représentations de SU(4)

Présentation de $\mathfrak{su}(4)$ La dimension de $\mathfrak{su}(N)$ est N^2-1, et son rang est $r = N-1$; la matrice de Cartan est donnée par :

$$C = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 \\ . & . & . & \ddots & . & . \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & 2 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 \end{pmatrix}, \tag{A.14}$$

et la plus haute racine a pour coefficients de Dynkin $\theta = (1, 0, \ldots, 0, 1)$.

La donnée de la matrice de Cartan suffit en principe à construire toutes les représentations de SU(N). Cependant, afin d´avoir une interprétation physique des nombres quantiques, il est nécessaire de faire le choix explicite d´une base de Cartan. Une base simple des N^2-1 générateurs de $\mathfrak{su}(N)$ est obtenue comme des matrices de taille N agissant sur la représentation naturelle, de dimension N, de SU(N). Elle est constituée des $N-1$ matrices diagonales (qu´on choisira comme les générateurs de Cartan) $\left(\widetilde{H}^a\right)_{a=1..N-1}$:

$$\widetilde{H}^a = \frac{1}{\sqrt{a(a+1)}}\ \mathrm{Diag}\Big(\underbrace{1, 1, \ldots, 1}_{a}, -a, 0, \ldots, 0\Big) \tag{A.15}$$

et des $N(N-1)$ opérateurs d´échelle $\left(E^{\alpha\beta}\right)_{1\leq\alpha\neq\beta\leq N}$:

$$\left(E^{\alpha\beta}\right)_{ij} = \delta_{\alpha i}\delta_{\beta j} \tag{A.16}$$

qui vérifient $(\widetilde{H}^a)^\dagger = \widetilde{H}^a$, $(E^{\alpha\beta})^\dagger = E^{\beta\alpha}$. La forme de Killing est très simple :

$$\begin{aligned} K(\widetilde{H}^a, \widetilde{H}^b) &= \delta^{ab} \\ K(\widetilde{H}^a, E^{\alpha\beta}) &= 0 \\ K(E^{\alpha\beta}, E^{\gamma\delta}) &= \delta^{\alpha\delta}\delta^{\beta\gamma} \end{aligned} \tag{A.17}$$

Ce choix de base permet d´établir simplement une formule utile, valable dans toute base $\left(T^A\right)_{A=1\ldots N^2-1}$:

$$\sum_{A,B} K^{-1}(A,B)\, T^A_{ab}\, T^B_{cd} = \delta_{ad}\delta_{bc} - \frac{1}{N}\delta_{ab}\delta_{cd}. \tag{A.18}$$

Dans le cas de SU(4), nous avons utilisé une autre base de Cartan qui met bien en évidence le sous groupe SU(2) du spin physique. Nous rappelons ici les définitions des générateurs (dans la représentation fondamentale de dimension 4, dont une base est formée des états $|\ell\sigma\rangle$, $\ell = 1, 2$, $\sigma =\uparrow, \downarrow$) :

$$\begin{aligned} \mathcal{T}^a_s &= \frac{1}{2}\,\sigma^a \otimes \mathbb{I}, \\ \mathcal{T}^a_t &= \frac{1}{2}\,\mathbb{I} \otimes \sigma^a, \\ \mathcal{T}^{ab}_{st} &= \frac{1}{2}\,\sigma^a \otimes \sigma^b, \end{aligned} \tag{A.19}$$

où dans $A \otimes B$, la matrice A agit dans l'espace de spin $\sigma =\uparrow, \downarrow$ et B dans l'espace d'isospin $\ell = 1, 2$ [6]. Pour la base de Cartan, on a choisi les générateurs :

$$H^1 = \mathcal{T}^z_s\,, \qquad H^2 = \mathcal{T}^z_t\,, \qquad H^3 = \mathcal{T}^{zz}_{st}. \tag{A.20}$$

Les opérateurs d´échelle associés aux racines positives sont alors :

$$\begin{aligned} E_{\alpha_1} &= \mathcal{T}^+_t + \mathcal{T}^{z+}_{st}, \\ E_{\alpha_2} &= \mathcal{T}^{+-}_{st}, \\ E_{\alpha_3} &= \mathcal{T}^+_t - \mathcal{T}^{z+}_{st}, \\ E_{\alpha_4} &= \mathcal{T}^+_s + \mathcal{T}^{+z}_{st}, \\ E_{\alpha_5} &= \mathcal{T}^+_s - \mathcal{T}^{+z}_{st}, \\ E_{\alpha_6} &= \mathcal{T}^{++}_{st}, \end{aligned} \tag{A.21}$$

[6] Cette construction se généralise en fait à toute la série des “Adamar” SU(2^p), la représentation fondamentale de dimension 2^p étant construite comme le produit tensoriel $\underbrace{\{\uparrow,\downarrow\} \otimes \ldots \otimes \{\uparrow,\downarrow\}}_{p}$ de représentations de spin $s = \frac{1}{2}$ de SU(2).

où l´indice $\pm$ désigne comme à l´accoutumée la combinaison $x+iy$ (par exemple, $\mathcal{T}_s^+ = (\mathcal{T}_s^x + i\mathcal{T}_s^y)/\sqrt{2}$).

Les trois racines simples sont $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$, de composantes dans la base de Cartan (A.20) [7] :

$$\alpha_1 = [0,1,1]\,, \qquad \alpha_2 = [1,-1,0]\,, \qquad \alpha_3 = [0,1,-1], \tag{A.22}$$

les autres racines positives étant $\alpha_4 = \alpha_1 + \alpha_2$, $\alpha_5 = \alpha_2 + \alpha_3$, $\alpha_6 = \theta = \alpha_1 + \alpha_2 + \alpha_3$. De (A.22), on déduit que la base de Chevalley pour les générateurs de Cartan est :

$$h^1 = H^2 + H^3\,, \qquad h^2 = H^1 - H^2\,, \qquad h^3 = H^2 - H^3, \tag{A.23}$$

si bien que les coefficients de Dynkin des poids sont reliés aux nombres quantiques $(\mathtt{n}_\alpha)_{\alpha=s,t,st}$ par :

$$\lambda_1 = \mathtt{n}_t + \mathtt{n}_{st}\,, \qquad \lambda_2 = \mathtt{n}_s - \mathtt{n}_t\,, \qquad \lambda_3 = \mathtt{n}_t - \mathtt{n}_{st}. \tag{A.24}$$

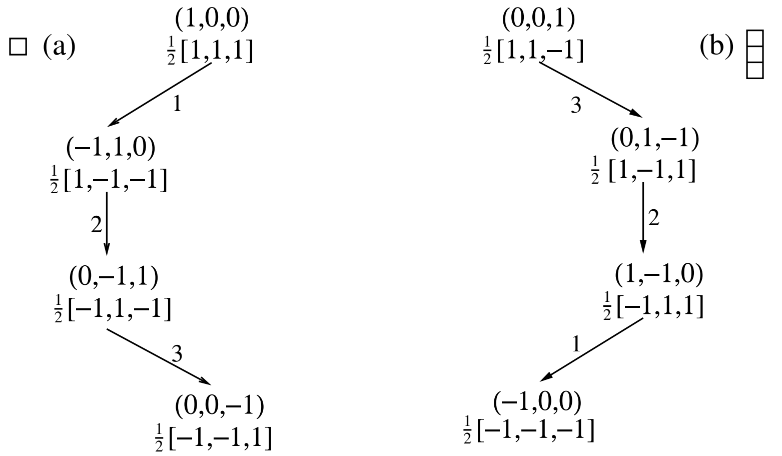


FIG. A.1: La représentation fondamentale de SU(4) (a) et sa conjuguée l´anti-fondamentale (b). Ce sont respectivement les représentations des fermions sur le réseau $c_a^\dagger$ et c_a.

Tableaux d´Young Il est possible de représenter graphiquement les représentations de SU(N), par des tableaux d´Young [8]. La correspondance est établie de la manière

[7] Pour distinguer les poids dans la base de Chevalley et dans la base de Cartan, les coefficients de Dynkin seront notés entre parenthèses, $\mu = (\mu_1, \ldots, \mu_r)$, et les composantes dans la base de Cartan (A.20) entre crochets, $\mu = [\mu_1, \ldots, \mu_r]$.

[8] Les tableaux d´Young à n cases sont en fait reliés aux représentations du groupe de permutation $\mathcal{S}_n$. A chacune de ces représentations, on peut associer au plus une représentation irréductible de SU(N). Les tableaux d´Young admissibles pour SU(N) comportent au plus $N-1$ lignes.

suivante : étant donnée le plus haut poids λ de coefficients de Dynkin $(\lambda_1, \ldots, \lambda_{N-1})$, on lui associe le tableau d´Young possédant λ_1 colonnes à 1 ligne, λ_2 colonnes à 2 lignes, $\ldots$,λ_r colonnes à $N-1$ lignes. Par exemple, dans SU(4), où les tableaux d´Young ont des colonnes comportant au plus 3 lignes, la représentation adjointe, de plus haut poids $\theta = (1,0,1)$, est symbolisée par le tableau .

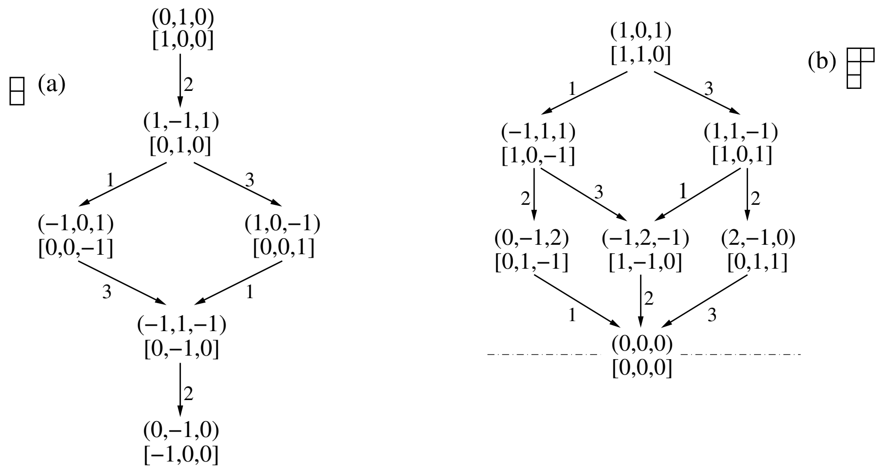


FIG. A.2: Représentations "antisymétrique" (a) et adjointe (b) de SU(4). La représentation antisymétrique est celle dans laquelle se transforment les états à deux particules $c_a c_b$ ou $c_a^\dagger c_b^\dagger$ (elle est auto-conjuguée). La représentation adjointe est celle des opérateurs de spin $\mathcal{S}^A$. Elle est auto-conjuguée, et seulement la moitié des poids à été représenté (l´autre moitié s´obtient par l´opération $\mu \to -\mu$ sur les poids). Dans l´adjointe, le poids nul a une dégénérescence égale au rang $r = 3$.

Représentations les plus basses Nous donnons les poids des représentations intervenant dans le texte principal : la représentation fondamentale $\square$ et la représentation anti-fondamentale dans la figure A.1, la représentation "antisymétrique" et la représentation adjointe dans la figure A.2. Pour chacune d´entre elle, le plus haut poids se trouve au sommet, et l´application des opérateurs d´échelle $E^\dagger_{\alpha_i}$ qui permet d´atteindre les autres poids est rappelée par l´indice de la racine simple α_i correspondante. Les poids notés entre parenthèses sont donnés dans la base de Chevalley (ce sont les coefficients de Dynkin) ; ceux notés entre crochets sont ceux de la base de Cartan $(H^a)_{a=1,2,3}$, c´est-à-dire $[\mathtt{n}_s, \mathtt{n}_t, \mathtt{n}_{st}]$.

Quelques représentations de SO(8)

Présentation de $\mathfrak{so}(8)$ La dimension de $\mathfrak{so}(2N)$ est $N(2N-1)$; son rang est $r = N$ et sa matrice de Cartan est :

$$C = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 2 & \cdots & 0 & 0 & 0 \\ . & . & . & \ddots & . & . & \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 2 & -1 & -1 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & -1 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \tag{A.25}$$

La plus haute racine a pour coefficients de Dynkin $\theta = (0, 1, 0, \dots, 0)$.

Comme pour SU(N), nous allons donner une représentation des générateurs de SO($2N$) dans la représentation fondamentale de dimension $2N$. On peut choisir comme base de $\mathfrak{so}(2N)$ les matrices antisymétriques $\left(M^{a,b}\right)_{1\leq a<b\leq 2N}$:

$$(M^{a,b})_{ij} = i(\delta_{i,a}\delta_{j,b} - \delta_{i,b}\delta_{j,a}). \tag{A.26}$$

On choisira pour les générateurs de Cartan les N matrices :

$$H^p = M^{2p-1,2p}\,, \qquad p = 1 \dots N, \tag{A.27}$$

si bien que les opérateurs d´échelle sont les matrices :

$$E_\alpha = \frac{1}{2}\left(M^{2p-1,2q-1} + \varepsilon_1 M^{2p,2q-1} + \varepsilon_2 M^{2p-1,2q} + \varepsilon_1\varepsilon_2 M^{2p,2q}\right)\,, \qquad p < q, \tag{A.28}$$

avec $\varepsilon_1, \varepsilon_2 = \pm 1$, la racine associée étant

$$\alpha = (\alpha^1, \dots, \alpha^N)\,, \qquad \alpha^k = \varepsilon_1\delta_{p,k} + \varepsilon_2\delta_{q,k} \tag{A.29}$$

Les N racines simples sont données par :

$$\begin{gathered} \alpha_1 = [1, -1, 0, \dots, 0] \qquad \alpha_2 = [0, 1, -1, \dots, 0] \quad \dots \quad \alpha_{N-2} = [0, \dots, 1, -1] \\ \alpha_{N-1} = [0, \dots, 1, 1] \qquad \alpha_N = [0, \dots, 1, -1]. \end{gathered} \tag{A.30}$$

Ces racines simples permettent de retrouver la matrice de Cartan.

Dans la suite, nous nous restreignons à $\mathfrak{so}(8)$. L´indice $a = 1 \dots 8$ du vecteur de la représentation naturelle introduite ci-dessus s´identifie à celui des fermions de Majorana (ξ^a_{p}) introduits dans la section III.1.1. Les générateurs de Cartan dans la base (A.27) s´identifient aux quantités conservées $\left(\hat{N}_\alpha\right)_{\alpha=c,s,t,st}$, si bien que les poids dans cette base ont pour coefficients les nombres quantiques de U(1)×SU(4) $[\mathtt{n}_c, \mathtt{n}_s, \mathtt{n}_t, \mathtt{n}_{st}]$.

Les générateurs de Cartan dans la base de Chevalley sont donnés par la formule (A.12) :

$$h^1 = H^1 - H^2\,, \qquad h^2 = H^2 - H^3\,, \qquad h^3 = H^3 + H^4\,, \qquad h^4 = H^3 - H^4. \tag{A.31}$$

Les coefficients de Dynkin sont donc reliés aux nombres quantiques $\mathtt{n}_\alpha$ par :

$$\lambda_1 = \mathtt{n}_c - \mathtt{n}_s\,, \qquad \lambda_2 = \mathtt{n}_s - \mathtt{n}_t\,, \qquad \lambda_3 = \mathtt{n}_t + \mathtt{n}_{st}\,, \qquad \lambda_4 = \mathtt{n}_t - \mathtt{n}_{st}. \tag{A.32}$$

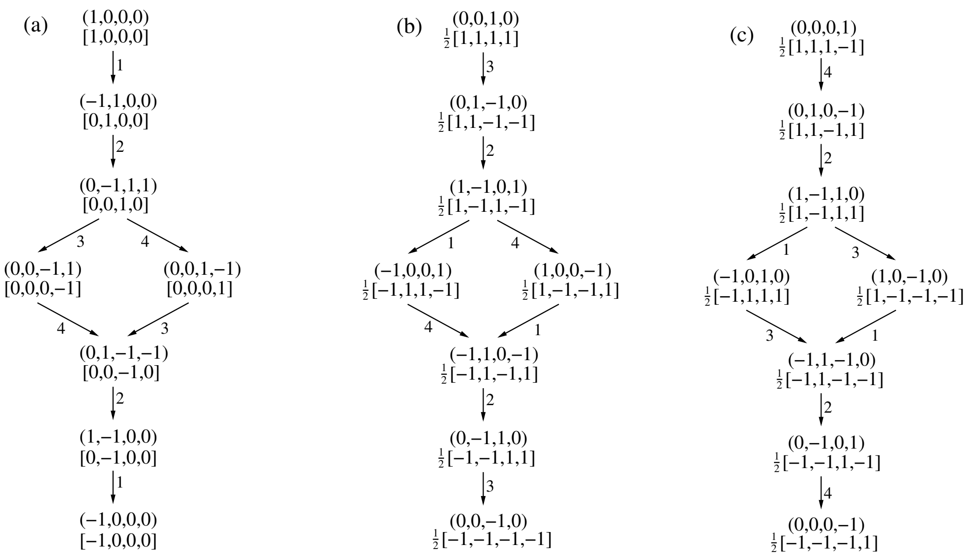


FIG. A.3: La représentation vectorielle (a) et les deux représentations spinorielles de SO(8) (b) et (c). La représentation vectorielle est celle de l´octet 8_{F} du modèle de Gross Neveu SO(8), la première spinorielle (b) est celle de l´octet 8_{K}^{+}, la seconde (c), celle de l´octet 8_{K}^{-}.

Nous donnons dans les figures A.3 et A.4 les poids des représentations les plus basses de SO(8).

Il nous faut faire une remarque importante sur une particularité de SO(8). La matrice de Cartan de $\mathfrak{so}(8)$:

$$C = \begin{pmatrix} 2 & -1 & 0 & 0 \\ -1 & 2 & -1 & -1 \\ 0 & -1 & 2 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 2 \end{pmatrix}, \tag{A.33}$$

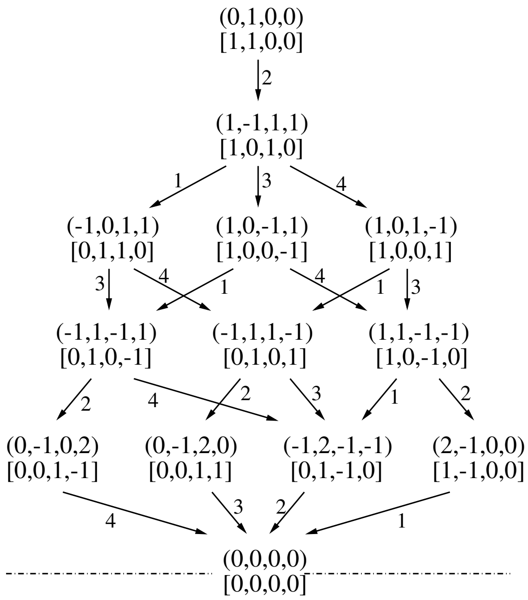


FIG. A.4: La représentation ajointe de SO(8), dans laquelle se transforment les états liés du modèle de Gross Neveu SO(8). Nous n´avons représentés que les poids positifs. Le poids nul a une dégénérescence 4.

est invariante sous l´opération qui échange les trois racines simples $\alpha_1, \alpha_3, \alpha_4$. Cette symétrie de trialité, notée σ, a des conséquences importantes pour le modèle de Gross Neveu SO(8). Elle transforme une représentation de plus haut poids λ en la représentation de plus haut poids $\lambda' = \sigma(\lambda) = (\lambda_4, \lambda_2, \lambda_1, \lambda_3)$. La représentation naturelle (notée 8_{F} dans le texte principal) a pour plus haut poids $\lambda_{\mathrm{F}} = (1,0,0,0)$. Les deux représentations spinorielles (notées 8_{K}^+ et 8_{K}^-) ont pour plus hauts poids $\lambda_{\mathrm{K}}^+ = (0,0,1,0)$ et $\lambda_{\mathrm{K}}^- = (0,0,0,1)$, et l´on remarque que $\lambda_{\mathrm{K}}^- = \sigma(\lambda_{\mathrm{K}}^+) = \sigma^2(\lambda_{\mathrm{F}})$: ces trois octets doivent intervenir de manière équivalente dans une théorie SO(8)-invariante. La représentation adjointe de SO(8), de plus haut poids $(0,1,0,0)$, est invariante sous l´opération de trialité.

A.2 Règles de sélection

A.2.1 Classes de congruence

Nous avons vu dans la section A.1.1 que les poids vivent sur le réseau $P = \omega_1\mathbb{Z} + \ldots + \omega_r\mathbb{Z}$, tandis que les racines vivent sur le réseau $Q = \alpha_1\mathbb{Z} + \ldots + \alpha_r\mathbb{Z}$. En général, $P \neq Q$ et le quotient P/Q est un groupe fini. Il existe donc différents types de représentations, qui sont les classes de congruence [9] de la relation d´équivalence entre poids : ($\lambda \mathcal{R} \lambda' \Longleftrightarrow \lambda - \lambda' \in Q$). Ces types sont indexés par les éléments de P/Q. Par exemple, dans SU(2), il existe deux classes de congruence, qui correspondent aux représentations de spin entier et de spin demi-entier.

Pour le groupe SU(n), $P/Q = \mathbb{Z}_n$ et n types de représentations peuvent apparaître. La classe de congruence de la représentation de plus haut poids λ est donnée par $p_\lambda = \lambda_1 + 2\lambda_2 + ... + (n-1)\lambda_{n-1} \quad [\mathrm{mod}\ n]$, ou, de manière équivalente, p est le nombre de cases (modulo n) du tableau d´Young associé à λ.

A.2.2 Contraintes sur les facteurs de forme

Nous sommes souvent amenés à considérer des facteurs de forme, qui apparaissent naturellement dans le calcul des fonctions de corrélation. Le facteur de forme pour l´opérateur $\mathcal{O}$ a la définition suivante :

$$\mathcal{F}_\xi^{\mathcal{O}} = \langle 0|\mathcal{O}|\xi\rangle \,, \tag{A.34}$$

où $|\xi\rangle$ est un état propre de l´hamiltonien, de poids λ_ξ. L´opérateur $\mathcal{O}$ appartient à une certaine représentation irréductible de U(1)×SU(4), disons $(\mathtt{n}_c, \lambda)$, et a un poids $\lambda_{\mathcal{O}}$; appelons $(\mathtt{n}'_c, \mu)$ la représentation dans laquelle $|\xi\rangle$ se transforme. De la même manière que ce facteur de forme, en raison de l´invariance U(1), est nul dès que $q+q' \neq 0$, il existe des contraintes sur les représentations λ et μ pour que $\mathcal{F}_\xi^{\mathcal{O}}$ ne soit pas nul : on doit avoir $p_\lambda + p_\mu = 0$. Pour montrer ceci, on effectue une rotation $\mathcal{U}$ d´angle infinitésimal ϵ autour du générateur de Cartan H^a : $\mathcal{U} = \exp\left(i\epsilon \int dx\, (\mathcal{J}^a_{\mathrm{R}} + \mathcal{J}^a_{\mathrm{L}})\right)$, où les $\mathcal{J}^a_{\mathrm{P}}$ sont les courants associés au générateur H^a. Cette rotation (globale) affecte $\mathcal{O}$ et $|\xi\rangle$ selon :

$$\begin{aligned} |\xi\rangle \;&\to\; |\xi\rangle + \delta\,|\xi\rangle \,, \qquad \delta\,|\xi\rangle = i\epsilon\,\lambda^a_\xi\,|\xi\rangle \\ \mathcal{O} \;&\to\; \mathcal{O} + \delta\mathcal{O} \,, \qquad \delta\mathcal{O} = i\epsilon\,\lambda^a_{\mathcal{O}}\mathcal{O}. \end{aligned} \tag{A.35}$$

On a alors, pour tout $a = 1 \ldots r$:

$$\mathcal{F}_\xi^{\mathcal{O}} = \left\langle 0|\mathcal{U}^{-1}\mathcal{U}\mathcal{O}\mathcal{U}^{-1}\mathcal{U}|\xi\right\rangle = \mathcal{F}_\xi^{\mathcal{O}}\left(1 + i\epsilon\,(\lambda^a_\xi + \lambda^a_{\mathcal{O}}) + \ldots\right) \tag{A.36}$$

si bien que $\mathcal{F}_\xi^{\mathcal{O}}$ est nul pour $\lambda_\xi + \lambda_{\mathcal{O}} \neq 0$, ce qui donne bien la condition nécessaire $p_\lambda + p_\mu = 0$ pour que le facteur de forme ne soit pas nul.

[9] Tous les poids d´une même représentation sont dans la même classe de congruence, puisque leur différence est une somme de racines simples.

Le facteur de structure de spin fait intervenir les facteurs de forme des opérateurs de spin $\mathcal{S}^A$. Ces opérateurs se transforment par construction dans la représentation adjointe de SU(4). Comme la représentation adjointe est dans la classe de congruence du poids nul, le facteur de forme $\mathcal{F}_{\xi}^{\mathcal{S}A}$ n´est pas nul à la condition nécessaire que $p_{\lambda_\xi} = 0$.

Dans le cas de SU(2), ce résultat est notoirement connu : un facteur de forme d´un opérateur de spin sur un état $|\xi\rangle$ de spin demi entier est nul. Seuls les états $|\xi\rangle$ de spin SU(2) entier contribuent.

L´appartenance à la classe de congruence de l´adjointe est donc la généralisation naturelle de la notion de spin entier pour des groupes plus gros que SU(2).

Annexe B

Calcul de la fonction β resommée

Nous présentons dans cet appendice quelques détails du calcul de la fontion β resommée à tous les ordres du développement en boucles, selon la méthode exposée dans la référence [80].

B.1 Cas général

Rapellons la forme générique de l´action conforme perturbée par des opérateurs marginaux courant-courant :

$$S = S_0^k + S_{\text{int}}, \tag{B.1}$$

où S_0^k est l´action du modèle de WZNW pour le groupe G, au niveau k, G étant dans notre cas un groupe de Lie simple. Les courants droits et gauches sont notés $\mathcal{J}_{\text{P}}^A$, et vérifient les OPE :

$$\mathcal{J}_{\text{L}}^A(z)\mathcal{J}_{\text{L}}^B(w) \sim \frac{i\,f_C^{AB}\ \mathcal{J}_{\text{L}}^C}{z-w} + \frac{k\ K^{AB}}{(z-w)^2}, \tag{B.2}$$

les OPE pour les courants droits étant obtenues en susbtituant $\overline{z}$ et $\overline{w}$ à z et w. Les f_C^{AB} sont les constantes de structure du groupe , et K^{AB} la forme de Killing.

La perturbation est de la forme :

$$S_{\text{int}} = \int \frac{d^2x}{\pi k}\ g_\alpha \mathcal{O}^\alpha, \tag{B.3}$$

où l´opérateur $\mathcal{O}^\alpha$, marginal, est une forme quadratique des courants :

$$\mathcal{O}_\alpha(z,\overline{z}) = \sum_{A,B} \mathcal{J}_{\text{R}}^A(\overline{z})\, d_{AB}^\alpha\, \mathcal{J}_{\text{L}}^B(z). \tag{B.4}$$

L´invariance par parité impose que les matrices d^α soient symétriques.

La renormalisabilité à une boucle est assurée par la fermeture des OPE entre les opérateurs $\mathcal{O}^\alpha$:

$$\mathcal{O}^\alpha(z,\overline{z})\mathcal{O}^\beta(0) \sim \frac{1}{|z|^2}\sum_\gamma C_\gamma^{\alpha\beta}\mathcal{O}^\gamma(0). \tag{B.5}$$

Pourvu que l´on ait inclus dès le départ tous les opérateurs marginaux courant-courant respectant la symétrie du problème, cette condition est vérifiée.

En revanche, le renormalisabilité aux ordres supérieurs n´est pas toujours assurée. Les conditions de renormalisabilité s´expriment simplement en terme d´OPE entre les opérateurs $\mathcal{O}^\alpha$ et des opérateurs $\mathcal{T}^\alpha$, sortes de tenseurs énergie-impulsion construits à partir des matrices d^α :

$$\mathcal{T}^\alpha(z) = \sum_{A,B} d_{AB}^\alpha \left(\mathcal{J}_{\mathrm{L}}^A(z)\mathcal{J}_{\mathrm{L}}^B(z)\right), \tag{B.6}$$

où les parenthèses indiquent l´ordre normal. Les OPE des $\mathcal{O}^\alpha$ et des $\mathcal{T}^\alpha$ doivent être fermées :

$$\mathcal{T}^\alpha(z)\mathcal{O}^\beta(0,0) \sim \frac{1}{z^2}\sum_\gamma \left(2kD_\gamma^{\alpha\beta} + R_\gamma^{\alpha\beta}\right)\mathcal{O}^\gamma(0,0). \tag{B.7}$$

La fonction β resommée s´exprime alors comme une fraction rationnelle en les constantes de couplage, construite à partir des tenseurs de structure $C_\gamma^{\alpha\beta}, D_\gamma^{\alpha\beta}$ et $R_\gamma^{\alpha\beta}$ des OPE (B.5,B.7). Afin d´écrire de manière compacte cette fonction β, nous suivons les notations des auteurs de la référence [80], qui introduisent la matrice des couplages :

$$D(g)_\beta^\alpha = \sum_\gamma D_\beta^{\alpha\gamma}\, g_\gamma, \tag{B.8}$$

ainsi que le vecteur $C(u,v)$, étant donnés deux vecteurs u et v :

$$C(u,v)_\alpha = \sum_{\beta\gamma} u_\beta\, v_\gamma\, C_\alpha^{\beta\gamma}. \tag{B.9}$$

Si g' désigne le vecteur :

$$g' = g\,\frac{1}{1-D(g)^2}, \tag{B.10}$$

et $R(g)$ la matrice :

$$R(g)_\beta^\alpha = \sum_\gamma R_\beta^{\alpha\gamma}\, g_\gamma, \tag{B.11}$$

alors la fonction $\beta_\alpha = \frac{dg_\alpha}{d\ln(a/a_0)}$ pour le couplage g_α est :

$$\beta_\alpha = \frac{2}{k}\left\{-\frac{1}{2}C(g',g')\left[1+D(g)^2\right] + C(g'D(g),g'D(g))D(g) - g'D(g)R(g)\right\}_\alpha \tag{B.12}$$

B.2 Exemple : modèle à symétrie SO(m)×SO(n)

Nous allons calculer cette fonction β pour le modèle de WZNW SO$(m{+}n)_k$ perturbé par une interaction marginale brisant la symétrie en SO$(m)\times$SO(n). Il suffit en fait de considérer le cas où le niveau est $k=1$: il suffira de se souvenir, lorsqu´on effectuera les OPE (B.2), que le terme en $1/(z-w)^2$ dans la fusion de deux courants, est proportionnel à k.

L´intérêt du cas du niveau $k=1$ est qu´il existe une représentation très simple en terme de fermions de Majorana $(\xi^a_{\mathrm{P}})_{a=1\ldots m+n}$. La densité hamiltonienne associée à l´action de WZNW est simplement celui des fermions Majorana libres :

$$\mathcal{H}_0 = -\frac{i}{2}\sum_{a=1}^{m+n}\left(\xi^a_{\mathrm{R}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{R}} - \xi^a_{\mathrm{L}}\partial_x\xi^a_{\mathrm{L}}\right). \tag{B.13}$$

Les courants de SO$(m{+}n)_1$ sont alors indexés par les $(m+n)(m+n-1)/2$ paires d´indices $(a<b)$:

$$\mathcal{J}^{a,b}_{\mathrm{P}} = 2i\pi\,\xi^a_{\mathrm{P}}\xi^b_{\mathrm{P}}. \tag{B.14}$$

Notons que l´on utilise ici une normalisation pour les courants *différente* de celle utilisée dans le cours du texte principal. Un facteur 2π a été ajouté, qui garantit que la forme de Killing est l´identité et allège les formules.

Les OPE (B.2) entre courants sont obtenues en utilisant le théorème de Wick pour les fermions, dont nous rappelons les OPE pour le secteur gauche (elles dont identiques dans le secteur droit, $\overline{z},\overline{w}$ remplaçant z,w) :

$$\xi^a_{\mathrm{L}}(z)\xi^b_{\mathrm{L}}(w) \sim \frac{\delta^{ab}}{2\pi(z-w)} + \left(\xi^a_{\mathrm{L}}\xi^b_{\mathrm{L}}\right)(w). \tag{B.15}$$

Passons à présent à l´expression de la densité hamiltonienne d´interaction. Dans le cas d'une interaction respectant la symétrie SO$(m)\times$SO(n), les trois opérateurs indépendants sont les casimirs des trois groupes SO(m), SO(n) et SO$(m{+}n)$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{O}^1 &= \sum_{a<b\le m} \mathcal{J}^{ab}_{\mathrm{R}}(\overline{z})\mathcal{J}^{ab}_{\mathrm{L}}(z)\\
\mathcal{O}^2 &= \sum_{m<a<b\le m+n} \mathcal{J}^{ab}_{\mathrm{R}}(\overline{z})\mathcal{J}^{ab}_{\mathrm{L}}(z)\\
\mathcal{O}^K &= \sum_{a<b\le m+n} \mathcal{J}^{ab}_{\mathrm{R}}(\overline{z})\mathcal{J}^{ab}_{\mathrm{L}}(z)
\end{aligned} \tag{B.16}$$

et similairement pour les pseudo-tenseurs énergie impulsion. Pour la théorie de niveau $k=1$, ces opérateurs s´expriment en fonction des densités d´energie $i\kappa^a = i\xi^a_{\mathrm{R}}\xi^a_{\mathrm{L}}$ des

m+n modèles d´Ising attachés aux fermions ξ^a ; par exemple :

$$\mathcal{O}^1 = 2\pi^2 \sum_{1\leq a\neq b\leq m} \kappa^a\kappa^b \tag{B.17}$$

Les OPE entre les opérateurs $\mathcal{O}^\alpha$, qui permettent de déterminer les tenseurs de structure $C_\gamma^{\alpha\beta}$, s´obtiennent à partir des OPE entre fermions (B.15) et ne posent pas de difficulté particulière. Une précaution est nécessaire pour le calcul des tenseurs de structure $D_\gamma^{\alpha\beta}$ et $R_\gamma^{\alpha\beta}$: comme $\mathcal{T}^\alpha$ est un opérateur composite, il faut utiliser la formule suivante, qui généralise le théorème de Wick :

$$\overbrace{A(z)(BC)(}0) \sim \frac{1}{2i\pi}\oint \frac{dx}{x}\left\{\overbrace{A(z)B(}x)C(0) + B(x)\overbrace{A(z)C(}0)\right\} \tag{B.18}$$

où l´intégrale de contour entoure le point $z=0$.

Ces OPE sont plus simples une fois exprimées dans la base $\mathcal{O}^1, \mathcal{O}^2, \mathcal{O}^3 = \mathcal{O}^K - \mathcal{O}^1 - \mathcal{O}^2$, et l'on obtient :

$$\begin{array}{lclcl}
C_1^{11} & = & -2(m-2) & C_2^{22} = & -2(n-2) \\
C_1^{33} & = & -2n & C_2^{33} = & -2m \\
C_3^{13} & = & -(m-1) & C_3^{23} = & -(n-1) \\
D_\gamma^{\alpha\beta} & = & \delta^{\alpha\beta}\delta^{\alpha\gamma} & & \\
R_1^{11} & = & 2(m-2) & R_2^{22} = & 2(n-2) \\
R_3^{33} & = & (m+n-2) & & \\
R_3^{13} & = & m-1 & R_3^{23} = & n-1 \\
R_1^{31} & = & 2n & R_2^{32} = & 2m
\end{array} \tag{B.19}$$

Ces coefficients suffisent à déterminer la fonction β :

$$\beta_1 = \frac{2}{k}\left[(m-2)\left(\frac{g_1}{g_1+1}\right)^2 + n\left(\frac{g_3(g_1-1)}{g_3^2-1}\right)^2\right] \tag{B.20}$$

$$\beta_2 = \frac{2}{k}\left[(n-2)\left(\frac{g_2}{g_2+1}\right)^2 + m\left(\frac{g_3(g_2-1)}{g_3^2-1}\right)^2\right] \tag{B.21}$$

$$\beta_3 = \frac{2}{k}\frac{g_3}{1-g_3^2}\left[(m+n-2) - (g_3^2+1)\left(\frac{m-1}{g_1+1} + \frac{n-1}{g_2+1}\right)\right]$$

Notamment, dans le cas isotrope $g_1 = g_2 = g_3 = g$, cette fonction β se réduit à :

$$\frac{dg}{d\ln(a/a_0)} = \frac{2(m+n-2)}{k}\left(\frac{g}{g+1}\right)^2 \tag{B.22}$$

On retrouve la fonction β de la section III.1.1 avec $m=2$, $n=6$, $k=1$.

Annexe C

Construction des modes zéros du secteur solitonique

Il est bien connu [87, 88] qu´une théorie de fermions avec un terme masse local $m(x)$ tel que $\int dx\, m(x) = 0$ possède en taille infinie un mode zéro, d´énergie nulle, qui a en outre la propriété de porter une charge fractionnaire (plus précisément, l´opérateur nombre de particule, le générateur de la symétrie U(1) du modèle, a des valeurs propres demi-entières). Nous allons nous intéresser à cette situation lorsque N espèces de fermions sont présentes, où la symétrie s´élargit à SO($2N$), et montrer que la situation se généralise simplement à ce cas non abélien. Les cartans admettent alors des valeurs propres fractionnaires, dans le sens où les fondamentaux dégénérés constituent maintenant des états se transformant dans les représentations spinorielles de SO($2N$).

C.1 Cas abélien

Rappelons tout d´abord le raisonnement pour une seule espèce de fermions. Le lagrangien des fermions est :

$$\mathcal{L}_1 \left[\psi, \overline{\psi}\right] = \overline{\psi}\, (i\partial\!\!\!/ - m(x))\, \psi, \tag{C.1}$$

On choisit de décomposer ψ sur ses composantes chirales : $\psi = (\psi_{\mathrm{R}}, \psi_{\mathrm{L}})$, si bien que $\gamma^0 = -\sigma^2, \gamma^1 = i\sigma^1$. La théorie est invariante sous les transformations U(1), générées par la charge totale (opérateur nombre de fermions) :

$$Q = \int dx\ : \psi^\dagger(x)\psi(x) : \tag{C.2}$$

où le produit normal est pris par rapport au fondamental. Comme le lagrangien (C.1) est quadratique en fermions, les états propres du hamiltonien associé seront simplement les états de Fock construits sur les états à une particule.

Intéressons-nous d´abord aux solutions classiques de l´équation de Dirac :

$$\big(i\sigma^3\partial_x + \sigma^2 m(x)\big)\,\psi(x) = E\psi(x). \tag{C.3}$$

Comme le hamiltonien anticommute à σ^1, à chaque solution de (C.3) $u_k(x)$ d´énergie positive E_k sera associée une solution $\hat{u}_k(x) = \sigma^1\, u_k(x)$ d´énergie opposée [1]. Cependant, en raison de la condition $\int dx\, m(x) = 0$, il existe une solution normalisable d´énergie nulle (un mode zéro) $u_0(x) = A\,\eta_0(x)\begin{pmatrix}1\\1\end{pmatrix}$, qui vérifie $\sigma^1\, u_0 = u_0$, où la fonction η_0 est donnée par :

$$\eta_0(x) = e^{\int_0^x dy\, m(y)}. \tag{C.4}$$

La quantification canonique du champ ψ s´effectue donc en introduisant des modes fermioniques (b_k, d_k) et a :

$$\psi(x,t) = \sum_{k\neq 0}\Big(b_k u_k(x) e^{iE_k t} + d_k^\dagger \hat{u}_k(x) e^{-iE_k t}\Big) + a u_0(x) \tag{C.5}$$

où les modes satisfont aux relations de commutation canoniques :

$$\begin{aligned}
\{b_k, d_{k'}\} &= \{b_k, a\} = \{d_k, a\} = 0\,, \qquad \Big\{b_k, d_{k'}^\dagger\Big\} = \big\{b_k, a^\dagger\big\} = \big\{d_k, a^\dagger\big\} = 0\\
\Big\{b_k, b_{k'}^\dagger\Big\} &= \Big\{d_k, d_{k'}^\dagger\Big\} = \delta_{k,k'}\,, \qquad \{b_k, b_{k'}\} = \{d_k, d_{k'}\} = 0\\
\big\{a, a^\dagger\big\} &= 1\,, \qquad a^2 = 0
\end{aligned} \tag{C.6}$$

L´existence du mode zéro confère au fondamental une dégénérescence deux. On notera ces deux fondamentaux $|\Omega\rangle$ et $|\hat{\Omega}\rangle$, et ils vérifient :

$$|\hat{\Omega}\rangle = a^\dagger\,|\Omega\rangle\;, \qquad |\Omega\rangle = a|\hat{\Omega}\rangle\,, \qquad b_k\,|\Omega\rangle = d_k\,|\Omega\rangle = 0 = a\,|\Omega\rangle \tag{C.7}$$

Deux tours d´états de Fock $|\xi\rangle$ et $|\hat{\xi}\rangle$ peuvent être construites sur $|\Omega\rangle$ et $|\hat{\Omega}\rangle$ respectivement, par application successive des modes $b_k^\dagger$ et $d_k^\dagger$. Ces deux tours sont échangées par l´opération de conjugaison de charge :

$$\psi_\alpha \to \psi'_\alpha = -C^{-1}_{\alpha\beta}\overline{\psi}_\beta\,, \qquad C = \sigma^1, \tag{C.8}$$

[1] L´indice $k \neq 0$ indexe le spectre, mais il ne s´agit pas d´une impulsion, (C.1) n´étant pas invariant par translation.

qui se représente sur les modes par :

$$b'_k = d_k\,, \qquad d'_k = b_k\,, \qquad a' = a^\dagger \tag{C.9}$$

La charge étant impaire sous cette transformation, les deux vides $|\Omega\rangle$ et $|\hat{\Omega}\rangle$ portent une charge opposée, dont on va voir qu´elle est demi entière.

La dégénérescence double du fondamental rend ambigüe l´expression (C.2) de la charge, puisque le produit normal n´est pas bien défini. Le développement de (C.2) dans les modes fermioniques produit :

$$Q = \sum_{k\neq 0}\left(b_k^\dagger b_k - d_k^\dagger d_k\right) + a^\dagger a + c\,, \qquad c \in \mathbb{R}. \tag{C.10}$$

Les modes fermioniques créent où détruisent des charges entières, comme le montrent les relations

$$\left[Q, b_k^\dagger\right] = b_k^\dagger\,, \qquad \left[Q, d_k^\dagger\right] = d_k^\dagger\,, \qquad \left[Q, a^\dagger\right] = a^\dagger. \tag{C.11}$$

Ceci implique que les charges opposées des deux fondamentaux $|\Omega\rangle$ et $|\hat{\Omega}\rangle$ sont respectivement $-1/2$ et $+1/2$, et fixe donc la constante dans (C.10) à $c = -1/2$. Ce résultat peut aussi être obtenu simplement en imposant que la charge change de signe sous la conjugaison de charge. Ceci montre que les valeurs propres de Q sont demi entières.

Remarque : le paradoxe que constituent ces états de charge demi-entière, construits à partir de fermions portant une charge entière peut être dépassé [88] en considérant le même modèle à taille finie, où un deuxième mode zéro, localisé sur les bords du système, existe. Les modes zéros apparaissant par paires, les quatre fondamentaux dégénérés portent des charges entières $0, \pm 1$. Lorsque la taille est augmentée, la charge totale reste entière à toute taille finie, mais il existe bien un état, au centre du système, qui porte une charge demi entière.

C.2 Cas non abélien

Considérons à présent N espèces de fermions $(\psi_\alpha)_{\alpha=1\ldots N}$ découplés, avec pour lagrangien :

$$\mathcal{L}_N = \sum_{\alpha=1}^{N} \mathcal{L}_1\left[\psi_\alpha, \overline{\psi}_\alpha\right]. \tag{C.12}$$

La théorie définie par (C.12) possède une invariance SO($2N$), les $N(2N-1)$ générateurs locaux étant :

$$\begin{aligned} J_{\alpha\beta} &= \psi_{\mathrm{R}\alpha}^\dagger \psi_{\mathrm{R}\beta} + \psi_{\mathrm{L}\alpha}^\dagger \psi_{\mathrm{L}\beta}\,, \qquad \alpha, \beta = 1\ldots N \\ E_{\alpha\beta} &= \psi_{\mathrm{R}\alpha}^\dagger \psi_{\mathrm{R}\beta}^\dagger + \psi_{\mathrm{R}\alpha}^\dagger \psi_{\mathrm{R}\beta}^\dagger\,, \qquad E_{\alpha\beta}^\dagger\,, \qquad 1 \leq \alpha < \beta \leq N \end{aligned} \tag{C.13}$$

On choisit pour les N Cartans conservés $Q_\alpha = \int dx\, J_{\alpha\alpha}(x)$. Similairement au cas abélien, N modes zéro a_α apparaissent alors, chacun associé au fermion ψ_α, si bien que le fondamental a maintenant une dégénérescence 2^N. Ces 2^N fondamentaux peuvent être paramétrés ainsi :

$$|\Omega_{\epsilon_1,\ldots,\epsilon_N}\rangle\ , \qquad \epsilon_\alpha = \pm, \tag{C.14}$$

avec

$$|\Omega_{\epsilon_1,\ldots,\epsilon_N}\rangle = \prod_{\alpha=1}^{N} (a_\alpha)^{(1-\epsilon_\alpha)/2}\, |\Omega_{+,+,\ldots,+}\rangle\,. \tag{C.15}$$

Les charges de ces fondamentaux sont demi entières et valent :

$$Q_\alpha\, |\Omega_{\epsilon_1,\ldots,\epsilon_N}\rangle = \frac{\epsilon_\alpha}{2}\ |\Omega_{\epsilon_1,\ldots,\epsilon_N}\rangle\,. \tag{C.16}$$

Les fondamentaux peuvent être groupés en deux familles, l´une paire, pour laquelle $\sum_\alpha \epsilon_\alpha \equiv N\,[2]$, et l´autre impaire, pour laquelle $\sum_\alpha \epsilon_\alpha \equiv N-1\,[2]$. Ces deux familles constituent chacune une représentation de $\mathrm{SO}(2N)$; ce sont les deux spinorielles, de dimension 2^{N-1}, de $\mathrm{SO}(2N)$, qui sont les plus élémentaires : elles permettent de construire toutes les autres représentations de $\mathrm{SO}(2N)$ par produits successifs. Ce fait est la généralisation non abélienne naturelle de la notion de charge fractionnaire.

Dans le cas $N = 3$, qui nous intéresse dans le texte principal, les deux spinorielles de SO(6) sont la représentation fondamentale de SU(4) et sa conjuguée. Les nombres quantiques $(\mathtt{n}_\alpha)_{\alpha=s,t,st}$ des fondamentaux sont $\mathtt{n}_\alpha = \epsilon_\alpha/2$, et les opérateurs d´échelle sont les $a_\alpha^\dagger a_\beta, a_\alpha a_\beta, a_\alpha^\dagger a_\beta^\dagger$. Voici par exemple la représentation fondamentale, où l´on a représenté seulement les opérateurs d´échelle associés aux racines simples :

$$\begin{array}{ccc} |\Omega_{+++}\rangle & \xrightarrow{a_t a_{st}} & |\Omega_{+--}\rangle \\ & & \downarrow\ a_s a_t^\dagger \\ |\Omega_{--+}\rangle & \xleftarrow[a_t a_{st}^\dagger]{} & |\Omega_{-+-}\rangle \end{array} \tag{C.17}$$

En se rapellant que ces modes zéros sont construits sur un kink du secteur de charge $|\kappa_c^\pm\rangle$ de charge $q = \pm 1$ (avec $m(x) = \left\langle \cos\left(\sqrt{4\pi}\,\Phi_c(x)\right)\right\rangle_{\mathtt{n}_c=\pm\frac{1}{2}} = \pm m_0(x)$), on voit que des états peuvent être construits, qui ont les nombres quantiques des fermions sur le réseau :

$$\begin{array}{lcll} c_{1\uparrow} & \rightarrow & |\kappa_c^-\rangle \otimes |\Omega_{---}\rangle\ , & c_{1\uparrow}^\dagger \ \rightarrow\ |\kappa_c^+\rangle \otimes |\Omega_{+++}\rangle \\ c_{1\downarrow} & \rightarrow & |\kappa_c^-\rangle \otimes |\Omega_{+-+}\rangle\ , & c_{1\downarrow}^\dagger \ \rightarrow\ |\kappa_c^+\rangle \otimes |\Omega_{-+-}\rangle \\ c_{2\uparrow} & \rightarrow & |\kappa_c^-\rangle \otimes |\Omega_{-++}\rangle\ , & c_{2\uparrow}^\dagger \ \rightarrow\ |\kappa_c^+\rangle \otimes |\Omega_{+--}\rangle \\ c_{2\downarrow} & \rightarrow & |\kappa_c^-\rangle \otimes |\Omega_{++-}\rangle\ , & c_{2\downarrow}^\dagger \ \rightarrow\ |\kappa_c^+\rangle \otimes |\Omega_{--+}\rangle \end{array} \tag{C.18}$$

Bibliographie

[1] P. Nozières. *Theory of interacting Fermi systems.* W.A. Benjamin, New York, 1963.

[2] D. Pines et P. Nozières. *The theory of quantum liquids. Vol 1 : Normal Fermi liquids.* W.A. Benjamin, New York, 1966.

[3] R. Shankar. Renormalization-group approach to interacting fermions. *Rev. Mod. Phys.*, 66 :129, 1994.

[4] J.M. Luttinger. An exactly soluble model of a many-fermion system. *J. Math. Phys.*, 4 :1154, 1963.

[5] F.D.M. Haldane. 'Luttinger liquid theory' of one-dimensional quantum fluids. 1. Properties of the Luttinger model and their extension to the general 1D interacting spinless Fermi gas. *J. Phys. C*, 14 :2585, 1981.

[6] J. Voit. One-dimensional Fermi liquids. *Rep. Prog. Phys.*, 58 :977, 1995.

[7] H.J. Schulz, G. Cuniberti, et P. Pieri. Fermi liquids and Luttinger liquids. In G. *et al.* Morandi, éditeurs, *Field theories for low-dimensional condensed matter systems : spin systems and strongly correlated electrons.* Springer, 2000.

[8] P.W. Anderson. The resonating valence bond state in La_2CuO_4 and superconductivity. *Science*, 235 :1196, 1987.

[9] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 276 :238, 1963.

[10] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. ii. the degenerate case. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 277 :237, 1964.

[11] J. Hubbard. Electron correlations in narrow energy bands. iii. an improved solution. *Proc. R. Soc. London, Ser. A*, 281 :401, 1964.

[12] C. Kim, A.Y. Matsuura, Z.-X. Shen, N. Motoyama, H. Eisaki, S. Uchida, T. Tohyama, et S. Maekawa. Observation of spin-charge separation in one-dimensional $SrCuO_2$. *Phys. Rev. Lett.*, 77 :4054, 1996.

[13] D.A. Tennant, T.G. Perring, R.A. Cowley, et S.E. Nagler. Unbound spinons in the s=1/2 antiferromagnetic chain $KCuF_3$. *Phys. Rev. Lett.*, 70 :4003, 1993.

[14] D.A. Tennant, R.A. Cowley, S.E. Nagler, et A.M. Tsvelik. Measurement of the spin-excitation continuum in one-dimensional $KCuF_3$3 using neutron scattering. *Phys. Rev. B*, 52 :13368, 1995.

[15] N.D. Mermin et H. Wagner. Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models. *Phys. Rev. Lett.*, 17 :1133, 1966.

[16] P. Di Francesco, P. Mathieu, et D. Sénéchal. *Conformal field theory.* Springer - Verlag, 1997.

[17] F.D.M. Haldane. Continuum dynamics of the 1-D Heisenberg antiferromagnet : identification with the o(3) nonlinear sigma model. *Phys. Lett. A*, 93 :464, 1983.

[18] D.G. Shelton, A.A. Nersesyan, et A.M. Tsvelik. Antiferromagnetic spin ladders : crossover between spin $s = 1/2$ and $s = 1$ chains. *Phys. Rev. B*, 53 :8521, 1996.

[19] C.K. Majumdar et D.K. Ghosh. On next-nearest-neighbor interaction in linear chain. i. *J. Math. Phys.*, 10 :1388, 1969.

[20] S.R. White et I. Affleck. Dimerization and incommensurate spiral spin correlations in the zigzag spin chain : analogies to the Kondo lattice. *Phys. Rev. B*, 54 :9862, 1996.

[21] M. Imada, A. Fujimori, et Y. Tokura. Metal-insulator transitions. *Rev. Mod. Phys.*, 70 :1039, 1998.

[22] I. S. Jacobs, J. W. Bray, H. R. Hart, L. V. Interrante, J. S. Kasper, et G. D. Watkins. Spin-Peierls transitions in magnetic donor-acceptor compounds of tetrathiafulvalene (ttf) with bisdithiolene metal complexes. *Phys. Rev. B*, 14 :3036, 1976.

[23] E. Dagotto, J. Riera, et D.J. Scalapino. Superconductivity in ladders and coupled planes. *Phys. Rev. B*, 45 :5744, 1992.

[24] P. Azaria, A.O. Gogolin, P. Lecheminant, et A.A. Nersesyan. Theory of the one dimensional SU(4) spin-orbital model. *Phys. Rev. Lett.*, 83 :624, 1999.

[25] R. Assaraf, P. Azaria, M. Caffarel, et P. Lecheminant. Metal-insulator transition in the one-dimensional SU(n) Hubbard model. *Phys. Rev. B*, 60 :2299, 1999.

[26] D. Gross et A. Neveu. Dynamical symmetry breaking in asymptotically free field theories. *Phys. Rev. D*, 10 :3235, 1974.

[27] K.I. Kugel et D.I. Khomskii. The Jahn-Teller effect and magnetism : transition metal compounds. *Sov. Phys. Usp.*, 25 :231, 1982.

[28] A.A. Nersesyan et A.M. Tsvelik. One-dimensional spin liquid without magnon excitations. *Phys. Rev. Lett.*, 78 :3939, 1997.

[29] F. Gebhard. *The Mott metal-insulator transition.* Springer - Verlag, 1997.

[30] E. H. Lieb et F. Y. Wu. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension. *Phys. Rev. Lett.*, 20 :1445, 1968.

[31] I. Affleck. Field theory methods and quantum critical phenomena. In E. Brézin et J. Zinn-Justin, éditeurs, *Fields, strings and critical phenomena.* Les Houches, session XLIX, Elsevier, 1990.

[32] H.J. Schulz. Fermi liquids and non Fermi liquids. In E. Akkermans et al., éditeurs, *Physique Quantique Mésoscopique.* Elsevier, 1995. Les Houches, session LXI.

[33] A.O. Gogolin, A.A. Nersesyan, et A.M. Tsvelik. *Bosonization and strongly correlated systems.* Cambridge University Press, 1998.

[34] G. Kotliar. The large-n expansion in the strong-correlation problem. In B. Douçot et J. Zinn-Justin, éditeurs, *Strongly interacting fermions and hight T_c superconductivity.* Elsevier, 1995. Les Houches, session LVI.

[35] V.J. Emery et S.A. Kivelson. Mapping of the two-channel Kondo problem to a resonant-level model. *Phys. Rev. B*, 46 :10812, 1992.

[36] M. Stone. *Bosonization.* World scientific publishing compagny, 1994.

[37] D.C. Mattis. New wave-operator identity applied to the study of persistent currents in 1D. *J. Math. Phys.*, 15 :609, 1974.

[38] A. Luther et I. Peschel. Single-particle states, Kohn anomaly, and pairing fluctuations in one dimension. *Phys. Rev. B*, 9 :2911, 1974.

[39] S. Coleman. Quantum sine-Gordon equation as the massive Thirring model. *Phys. Rev. D*, 11 :2088, 1975.

[40] S. Mandelstam. Soliton operators for the quantized sine-Gordon equation. *Phys. Rev. D*, 11 :3026, 1975.

[41] F.D.M. Haldane. Coupling between charge and spin degrees of freedom in the one-dimensional Fermi gas with backscattering. *J. Phys. C*, 12 :4791, 1979.

[42] J. von Delft et H. Schoeller. Bosonization for beginners, refermionization for experts. *Annalen der Physik*, 4 :225, 1998.

[43] E. Witten. Non-abelian bosonization in two dimensions. *Comm. Math. Phys.*, 92 :455, 1984.

[44] V. Knizhnik et A. Zamolodchikov. Current algebra and Wess-Zumino model in two dimensions. *Nucl. Phys. B*, 247 :83, 1984.

[45] H. Sugawara. A field theory of currents. *Phys. Rev.*, 170 :1659, 1968.

[46] C. Sommerfield. Currents as dynamical variables. *Phys. Rev.*, 176 :2019, 1968.

[47] C. Itzykson et J.-M. Drouffe. *Statistical field theory.* Cambridge University Press, 1989.

[48] D.G. Shelton et A.M. Tsvelik. Superconductivity in a spin liquid : a one-dimensional example. *Phys. Rev. B*, 53 :14036, 1996.

[49] T.D. Schultz, D.C. Mattis, et E.H. Lieb. Two-dimensional Ising model as a soluble model of many fermions. *Rev. Mod. Phys.*, 36 :856, 1964.

[50] C. Itzykson et J.-B. Zuber. Quantum field theory and the two dimensional Ising model. *Phys. Rev. D*, 15 :2875, 1977.

[51] J. Cardy. *Scaling and renormalization in statistical physics.* Cambridge University Press, 1996.

[52] I. Affleck. Critical behaviour of SU(n) quantum chains and topological non-linear σ-models. *Nucl. Phys. B*, 305 :582, 1988.

[53] B. Sutherland. Model for a multicomponent quantum system. *Phys. Rev. B*, 12 :3795, 1975.

[54] I. Affleck. Exact critical exponents for quantum spin chains, non-linear σ-models and the quantum hall effect. *Nucl. Phys. B*, 265 :409, 1986.

[55] E.K. Sklyanin, L.A. Takhtajan, et L.D. Fadeev. Quantum inverse problem method. *Teor. Mat. Fiz.*, 40 :193, 1979.

[56] R.F. Dashen, B. Hasslacher, et A. Neveu. Particle spectrum in model field theories from semiclassical functional integral techniques. *Phys. Rev. D*, 11 :3424, 1975.

[57] A. Zamolodchikov et Al. Zamolodchikov. Factorized S-matrices in two dimensions as the exact solutions of certain relativistic quantum field theory models. *Ann. Phys.*, 120 :253, 1979.

[58] J.M. Kosterlitz et D.J. Thouless. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *J. Phys. C*, 6 :1181, 1973.

[59] F.D.M. Haldane. "Solidification" in a soluble model of bosons on a one-dimensional lattice : the "boson-Hubbard chain". *Phys. Lett. A*, 80 :281, 1980. +ibid volume 81A, p 545, 1981, erratum.

[60] H. Frahm et A. Schadschneider. Critical exponents of the degenerate Hubbard model. *J. Phys. A*, 26 :1463, 1993.

[61] B. Frischmuth, F. Mila, et M. Troyer. Thermodynamics of the one-dimensional SU(4) symmetric spin-orbital model. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :835, 1999.

[62] R. Chitra et T. Giamarchi. Critical properties of gapped spin-$\frac{1}{2}$ chains and ladders in a magnetic field. *Phys. Rev. B*, 55 :5816, 1997.

[63] G.I. Dzhaparidze et A.A. Nersesyan. Phase transition across magnetic field in one-dimensional system of electrons with attraction. *JETP Lett.*, 27 :356, 1978.

[64] Y. Okwamoto. Incommensurate-commensurate transition in two-dimensional sine-Gordon system. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 49 :8, 1980.

[65] V.L. Pokrovsky et A.L. Talapov. Ground state, spectrum, and phase diagram of two-dimensional incommensurate crystals. *Phys. Rev. Lett.*, 42 :65, 1979.

[66] H.J. Schulz. Critical behavior of commensurate-incommensurate phase transitions in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 22 :5274, 1980.

[67] Roland Assaraf. *Méthodes de Monte Carlo, développements et applications à quelques problèmes quantiques fortement corrélés.* PhD thesis, Université Pierre et Marie Curie, 1999.

[68] A.M. Finkel'stein et A.I. Larkin. Two coupled chains with Tomonaga-Luttinger interactions. *Phys. Rev. B*, 47 :10461, 1993.

[69] M. Fabrizio. Role of transverse hopping in a two-coupled-chains model. *Phys. Rev. B*, 48 :15838, 1993.

[70] H.J. Schulz. Phases of two coupled Luttinger liquids. *Phys. Rev. B*, 53 :R2959, 1996.

[71] B. Marston et I. Affleck. Large-n limit of the Hubbard-Heisenberg model. *Phys. Rev. B*, 39 :11538, 1989.

[72] I. Affleck, D.P. Arovas, J.B. Marston, et D.A. Rabson. Su(2n) quantum antiferromagnet with exact c-breaking ground states. *Nucl. Phys. B*, 366 :467, 1991.

[73] E. Lieb, T. Schultz, et D. Mattis. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Ann. Phys. (N.Y.)*, 16 :407, 1961.

[74] A. Onufriev et B. Marston. Enlarged symmetry and coherence in arrays of quantum dots. *Phys. Rev. B*, 59 :12573, 1999.

[75] R. Konik, F. Lesage, A.W.W. Ludwig, et H. Saleur. Two-leg ladders and carbon nanotubes : exact properties at finite doping. *Phys. Rev. B*, 61 :4983, 2000.

[76] R. Konik et A.W.W. Ludwig. Exact zero-temperature correlation functions for two-leg Hubbard ladders and carbon nanotubes. *Phys. Rev. B*, 64 :155112, 2001.

[77] H.-H. Lin, L. Balents, et M.P.A. Fisher. Exact SO(8) symmetry in the weakly-interacting two-leg ladder. *Phys. Rev. B*, 58 :1794, 1998.

[78] P. Azaria, P. Lecheminant, et A.M. Tsvelik. Restoration of symmetry by interactions and nonreliability of the perturbative renormalization group approach. cond-mat/9806099, unpublished.

[79] R. Konik, H. Saleur, et A.W.W. Ludwig. Interplay of the scaling limit and the renormalization group : implications for symmetry restoration. *Phys. Rev. B*, 66 :075105, 2002.

[80] B. Gerganov, A. LeClair, et M. Moriconi. On the beta function for anisotropic current interactions in 2D. *Phys. Rev. Lett.*, 86 :4753, 2001.

[81] A. LeClair. Strong coupling fixed points of current interactions and disordered fermions in two dimensions. *Phys. Rev. B*, 64 :045329, 2001.

[82] C. Destri. Two-loop β-function for generalized non-abelian Thirring models. *Phys. Lett. B*, 210 :173, 1988.

[83] R. Shankar et E. Witten. The S-matrix of the kinks of the $(\overline{\psi}\psi)^2$ model. *Nucl. Phys. B*, 141 :349, 1978.

[84] R.F. Dashen, B. Hasslacher, et A. Neveu. Semiclassical bound states in an asymptotically free theory. *Phys. Rev. D*, 12 :2443, 1975.

[85] R. Shankar. Solvable models with self-triality in statistical mechanics and field theory. *Phys. Rev. Lett.*, 46 :379, 1981.

[86] Al. Zamolodchikov. Mass scale in the sine Gordon model and its reductions. *Int. J. Mod. Phys. A*, 10 :1125, 1995.

[87] R. Jackiw et C. Rebbi. Solitons with fermion number 1/2. *Phys. Rev. D*, 13 :3398, 1976.

[88] R. Rajaraman. *Solitons and instantons.* North-Holland, 1982.

[89] J.R. Su, W.P. Schrieffer et A.J. Heeger. Solitons in polyacetylene. *Phys. Rev. Lett*, 42 :1698, 1976.

[90] J.S. Bell et R. Rajaraman. On states, on a lattice, with half-integral charge. *Nucl. Phys. B*, 220 :1, 1983.

[91] A. Luther et V.J. Emery. Backward scattering in the one-dimensional electron gas. *Phys. Rev. Lett.*, 33 :589, 1974.

[92] C. Destri et H. de Vega. New exact result in affine Toda field theories : free energy and wave function renormalization. *Nucl. Phys. B*, 358 :251, 1991.

[93] T. Giamarchi et H.J. Schulz. Theory of spin-anisotropic electron-electron interactions in quasi-one-dimensional metals. *J. Phys. (France)*, page 819, 1988.

[94] J. Cardy. Conformal invariance and universality in finite-size scaling. *J. Phys. A*, 17 :L385, 1984.

[95] I. Affleck. Critical behavior of two-dimensional systems with continuous symmetries. *Phys. Rev. Lett.*, 55 :1355, 1985.

[96] L.D. Faddeev et L.A. Takhtajan. What is the spin of a spin wave ? *Phys. Lett. A*, 85 :375, 1981.

[97] F.D.M. Haldane. Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets : semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state. *Phys. Rev. Lett.*, 50 :1153, 1983.

[98] S.K. Pati, R.R.P. Singh, et D.I. Khomskii. Alternating spin and orbital dimerization in strong-coupling two-band models. *Phys. Rev. Lett.*, 81 :5406, 1998.

[99] E. Axtell. Phase transition and spin-gap behavior in a layered tetragonal pnictide oxide. *J. Solid State Chem.*, 134 :423, 1997.

[100] A.K. Kolezhuk et H.-J. Mikeska. Non-Haldane spin-liquid models with exact ground states. *Phys. Rev. Lett.*, 80 :2709, 1998.

[101] E. Orignac, R. Citro, et N. Andrei. Low-energy behavior of the spin-tube and spin-orbital models. *Phys. Rev. B*, 61 :11533, 2000.

[102] Y.Q. Li, M. Ma, D.N. Shi, et F.C. Zhang. SU(4) theory for spin systems with orbital degeneracy. *Phys. Rev. Lett.*, 81 :3527, 1998.

[103] Y. Yamashita, N. Shibata, et K. Ueda. SU(4) spin-orbit critical state in one dimension. *Phys. Rev. B*, 58 :9114, 1998.

[104] A.B. Zamolodchikov. "Irreversibility" of the flux of the renormalization group in 2D field theory. *JETP Lett.*, 43 :730, 1986.

[105] G.I. Japaridze, A.A. Nersesyan, et P.B. Wiegmann. Exact results in the two-dimensional U(1)-symmetric Thirring model. *Nucl. Phys. B*, 230 :511, 1984.

[106] C. Itoi, S. Qin, et I. Affleck. Phase diagram of a one-dimensional spin-orbital model. *Phys. Rev. B*, 61 :6747, 2000.

[107] Y. Yamashita, N. Shibata, et K. Ueda. Numerical study of the one-dimensional spin-orbit coupled system with SU(2)$\otimes$SU(2) symmetry. *J. Phys. Soc. Jpn.*, 69 :242, 2000.

[108] Y.-L. Lee et Y.-W. Lee. Effects of a magnetic field on the one-dimensional spin-orbital model. *Phys. Rev. B*, 61 :6765, 2000.

[109] H.J. Schulz. SO(n) symmetries in the two-chain model of correlated fermions. cond-mat/9808167, unpublished.

[110] E. Arragoni et W. Hanke. Renormalized SO(5) symmetry in ladders with next-nearest-neighbor hopping. *Phys. Rev. Lett.*, 82 :2115, 1999.

[111] N. Bourbaki. *Groupes et algèbres de Lie*, chapitres 7-8. Hermann, Paris, 1975.

[112] N. Andrei et J.H. Lowenstein. Diagonalization of the chiral-invariant Gross-Neveu hamiltonian. *Phys. Rev. Lett.*, 43 :1698, 1979.

[113] N. Andrei et J.H. Lowenstein. Derivation of the chiral Gross-Neveu spectrum for arbitrary SU(n) symmetry. *Phys. Lett. B*, 90 :106, 1980.

[114] N. Andrei et J.H. Lowenstein. A direct calculation of the S-matrix of the chiral invariant Gross-Neveu model. *Phys. Lett. B*, 91 :401, 1980.

[115] X.G. Wen, F. Wilczek, et A. Zee. Chiral spin states and superconductivity. *Phys. Rev. B*, 39 :11413, 1989.

[116] P. Azaria, P. Lecheminant, et A.A. Nersesyan. Chiral universality class in a frustrated three-leg spin ladder. *Phys. Rev. B*, 58 :R8881, 1998.

[117] N. Andrei, M.R. Douglas, et A. Jerez. Chiral liquids in one dimension : a non-Fermi-liquid class of fixed points. *Phys. Rev. B*, 58 :7619, 1998.

[118] D.P. Arovas et A. Auerbach. Tetrahis(dimethylamino)ethylene-C_{60} : multicomponent superexchange and Mott ferromagnetism. *Phys. Rev. B*, 52 :10114, 1995.

Résumé

Cette thèse est consacrée à l´étude de la dégénérescence orbitale dans les systèmes d´électrons fortement corrélés à une dimension. Nous définissons un modèle simplifié, le modèle de Hubbard à symétrie SU(4), qui prend en compte de manière maximale la dégénérescence orbitale. Le diagramme des phases à température nulle est obtenu par des méthodes analytiques (bosonisation, théorie conforme, groupe de renormalisation). Les prédictions théoriques sont confrontées à des simulations numériques par Monte Carlo quantique. Dans les phases critiques, la théorie conforme décrivant la classe d´universalité du modèle est identifiée. Dans les phases massives, nous dérivons la théorie effective, qui s´avère être quasi-intégrable, permettant une description des modes collectifs de basse énergie. Le diagramme des phases obtenu est d´une grande richesse en regard de la simplicité du modèle, une particularité intéressante étant la présence d´une phase de liquide de spin gapé isolante de Mott au voisinage du demi remplissage. Dans la deuxième partie de cette thèse, nous incluons des processus réalistes qui brisent la symétrie SU(4), et étudions la stabilité des phases du modèle de Hubbard SU(4) sous ces perturbations. La tendance générique est à l´apparition d´un liquide de spin gapé. Nous mettons en évidence des symétries discrètes exactes (non perturbatives) du diagramme des phases, qui relient entre elles différentes phases de liquide de spin. Ces symétries autorisent une classification des liquides de spin portés par l´échelle de spin à deux montants au voisinage de la ligne à symétrie SU(4). Deux grandes classes de liquide de spin apparaissent, l´une associée à un ordre diagonal, de type onde de densité de charge, l´autre exhibant une instabilité supraconductrice.

Summary

This thesis is dedicated to the study of orbital degeneracy in one-dimensional strongly correlated electron systems. A simple model is defined which maximally accounts for orbital degeneracy : the SU(4)-symmetric Hubbard model. The zero temperature phase diagram is obtained using analytical methods (bosonization, conformal field theory, renormalization group). Our theoretical predictions are compared to quantum Monte Carlo simulations. In the critical phases, the conformal field theory describing the universality class of the model is identified. In the massive phases, we derive the low energy effective theory, which turns out to be quasi-integrable. This allows for a description of the low lying collective modes. The phase diagram of the model is surprisingly rich, in spite of its simplicity. An interesting feature is the existence of a Mott insulator with no magnetic order at half filling. In the second part of the thesis, realistic physical processes which break the SU(4) symmetry are taken into account. The stability of the phases of the SU(4) Hubbard model under these perturbations is studied. The generic tendency is the appearance of a gaped spin liquid. Exact (non perturbative) discrete symmetries of the phase diagram are revealed. These symmetries connect different spin liquids and allow for a classification of the gaped spin liquid phases for a two-leg spin ladder in the vicinity of the SU(4) symmetric line. Two broad classes of gaped spin liquids are found, one associated with diagonal (charge density wave-like) order, the other supporting a superconducting instability.