

# Strongly correlated electrons in ladder systems

**Doctoral Thesis**

**Author(s):**

Müller, Thierry François Alexandre

**Publication date:**

1998

**Permanent link:**

<https://doi.org/10.3929/ethz-a-001987487>

**Rights / license:**

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

Diss. ETH No. 12749

# Strongly Correlated Electrons in Ladder Systems

A dissertation submitted to the  
SWISS FEDERAL INSTITUTE OF TECHNOLOGY ZÜRICH

for the degree of  
Doctor of Natural Sciences

presented by  
THIERRY FRANÇOIS ALEXANDRE MÜLLER  
Dipl. Phys. ETH  
born October 16, 1970  
citizen of Liesberg (BL)

accepted on the recommendation of  
Prof. Dr. T. M. Rice, examiner  
Prof. Dr. F. C. Zhang, co-examiner

1998

## Résumé

Les systèmes d'échelles de spins, trouvés par exemple dans certains composés d'oxydes de cuivre, sont étudiés dans le cadre du modèle  $t$ - $J$  à l'aide d'un algorithme de Lanczos. Des conditions aux bords générant une géométrie analogue à la bande de Moebius ("conditions aux bord de Moebius") sont introduites. Ajoutées aux conditions aux bords traditionnellement utilisées, elles permettent une étude numérique plus adéquate de ces systèmes en fonction du remplissage.

Il est déjà connu que l'état fondamental des échelles à deux montants et à semi remplissage est un liquide de spins. En dopant le système, cet état évolue en un liquide de Luther-Emery. Dans la première partie du texte, le cas isotropique (couplages le long des montants et des échellons égaux) est considéré. Le but est d'obtenir un diagramme de phase en fonction du remplissage  $n$  et du rapport  $J/t$  aussi complet que possible. L'étude se basera sur la connaissance de deux cas limites définis par  $n < 1/2$  (liquide de Luttinger) et par  $(1 - n) \ll 1$ ,  $J/t \rightarrow 0$  (phase de Nagaoka).

Premièrement, la dépendance de la phase de Nagaoka en fonction du rapport  $J/t$  est étudiée et une estimation du paramètre critique  $(J/t)_f$  est donné. Pour des valeurs de  $J/t$  légèrement supérieures à  $(J/t)_f$ , des états partiellement ferro-magnétiques sont détectés dans les simulations numériques. Pour des valeurs de  $J/t$  encore légèrement supérieures, il est montré que le système ne subit pas tout de suite une transition de phase en un liquide de Luther-Emery mais qu'une nouvelle phase sans bande d'énergie interdite dans les excitations de spin et de charge apparaît. Cette assertion se fonde sur les caractéristiques des fonctions de corrélations de trous et de spins. Par exemple, la fonction de corrélation trou-trou pour ces valeurs montre que les trous se repoussent. D'autres fonctions de corrélations sont calculées; elles corroborent l'assertion de l'existence d'une telle phase. Dans une étude ultérieure, la corrélation entre la bande liante et anti-liante est étudiée. Pour ce faire, un déphasage entre les états correspondants est introduit dans l'Hamiltonien et son influence sur les propriétés du système est calculé. Pour  $J/t < 0.3$  cette influence est extrêmement faible indiquant l'indépendance des deux canaux (liants et anti-liants) et par conséquent le caractère uni-dimensionnel du système.

Dans le chapitre suivant, l'attention est portée sur le couplage entre les échelles. Cette étude est basée sur les résultats obtenus par des méthodes d'approximation linéaire de densités pour le composé  $\text{SrCu}_2\text{O}_3$ . Il est observé que la bande  $3d_{x^2-y^2}$  du cuivre détermine le spectre d'énergie près de la surface de Fermi. Utilisant un modèle effectif, les paramètres de sauts sont obtenus par comparaison.  $t_\perp$  et  $t_\parallel$  présentent une anisotropie importante et inattendue issue de la structure même des échelles. Cela permet d'expliquer la différence mesurée entre les couplages magnétiques  $J_\perp$

et  $J_{\parallel}$ . En outre, il est trouvé que les paramètres inter-échelles sont très petits et que ceux entre second voisins doivent être pris en compte. Utilisant les résultats obtenus, la conductivité perpendiculaire aux échelles est estimée donnant une valeur très proche de celle de l'expérience.

Dans le dernier Chapitre, un système de chaînes couplées par une série de liaisons en zig-zag est étudié. Une telle structure est trouvée dans le composé  $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$  ou elle forme un liquide de Fermi. Premièrement l'approche des couplages faibles est revisitée. Elle prédit l'existence de bandes d'énergie interdites pour les excitations de spins de la même manière que dans les échelles. L'interaction forte est étudiée en utilisant les techniques de diagonalisation exacte. Le cas des conditions aux bords avec couches semi-remplies (open shell boundary conditions) est considéré et il est montré que ce système de chaînes couplées forme un liquide de Luttinger.

## Zusammenfassung

In der vorliegenden Dissertation studieren wir Systeme von Spinleitern (“spinladders”); diese trifft man zum Beispiel in Unterstrukturen von einigen Kupferoxiden an. Sie werden im Rahmen des  $t$ - $J$  Modells mit Hilfe eines Lanczos-Programmes untersucht. Wir betrachten ausser den üblichen periodischen Randbedingungen auch noch solche, mit denen die Leiter eine Möbiusband-Geometrie haben. Dies erlaubt eine bessere Studie der Leiter als Funktion der Füllung.

Für Leiter mit zwei Leiterbeinen ist schon bekannt, dass der Grundzustand bei halber Füllung eine Spin-Flüssigkeit ist. Unter Einführung von Löchern entwickelt sich der Grundzustand zu einem Luther-Emery-Zustand. Im ersten Teil der Dissertation werden isotropische Leitern (d.h. mit gleicher Wechselwirkung längs der Leiterbeine und -sprossen) untersucht. Das Ziel ist es, ein möglichst vollständiges Phasendiagramm als Funktion des Dopings und des Verhältnisses  $J/t$  zu erhalten. Bekannte Grenzwerte sind  $n < 1/2$  (Luttinger-Flüssigkeit) und  $(1 - n) \ll 1$ ,  $J/t \rightarrow 0$  (Nagaoka-Phase).

Als Erstes wird die Abhängigkeit der Nagaoka-Phase als Funktion von  $J/t$  studiert. Eine Abschätzung des kritischen Parameters  $(J/t)_f$  wird gegeben. Wenn  $J/t$  etwas grösser ist als  $(J/t)_f$ , existieren partiell ferromagnetische Zustände. Für noch grössere Werten von  $J/t$  (aber  $J/t < 0.3$ ) finden wir mit Hilfe der Loch-Loch- und Spin-Spin-Korrelationen, dass eine Phase ohne Spin- und Ladung-Energielücke existiert, bevor sich das System in eine Luther-Emery-Phase entwickelt. Zum Beispiel zeigt die Loch-Loch-Korrelation in diesem Parameterbereich, dass die Löcher sich abstossen. Andere Korrelationen werden berechnet und führen zum selben Ergebnis. Zusätzlich untersuchen wir die Korrelation zwischen dem gebundenen (bonding) und ungebundenen (antibonding) Band des Leitersystems. Dafür wird eine relative Phasenverschiebung im Hamiltonoperator eingeführt und ihr Einfluss auf die Eigenschaften des Systems abgeschätzt. Für  $J/t < 0.3$  ist dieser Einfluss extrem klein, was die Unabhängigkeit der beiden Kanäle (bonding und antibonding) zeigt und deshalb den eindimensionalen Charakter des Systems beweist.

Im folgenden Kapitel wird die Kopplung zwischen den Leitern untersucht. Diese Studie basiert auf LDA-Rechnungen für  $\text{SrCu}_2\text{O}_3$  und  $\text{Sr}_{14-x}\text{Ca}_x\text{Cu}_{24}\text{O}_{41}$ . Die  $3d$ -Bänder des Kupfers bestimmen das Energiespektrum in der Umgebung der Fermienergie. Wir benützen ein effektives Model, um die Hüpfparameter  $t_\perp$  und  $t_\parallel$  abzuschätzen. Es wird gezeigt, dass  $t_\perp$  und  $t_\parallel$  eine wichtige und unerwartete Anisotropie besitzen. Damit lässt sich der Unterschied zwischen  $J_\perp$  und  $J_\parallel$  erklären. Der Ursprung dieser Anisotropie liegt in der Leiterstruktur. Zusätzlich zeigen wir, dass die zweitnächsten Nachbarn auch berücksichtigt werden müssen. Die Ab-

schätzung der Leitfähigkeit senkrecht zu den Leitern ergibt einen Wert, der sehr gut mit dem Experiment übereinstimmt.

Im letzten Kapitel werden gekoppelte Ketten mit Zick-Zack-Kopplungen studiert. Solche Anordnungen findet man im  $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ , wo sie eine Fermi-Flüssigkeit bilden. Im Grenzfall der schwachen Wechselwirkung (“weak-coupling limit”) ist die niederenergetische Physik die gleiche wie für die Leitersysteme. Wir untersuchen den Fall der starken Wechselwirkungen mit Lanczos-Algorithmen. Hierbei benützen wir die Randbedingungen halbgefüllter schalen (“Open shell boundary conditions”). Damit zeigen wir, dass gedopte Systeme eine Luttinger-Flüssigkeit bilden.

## Abstract

The coupled chains systems found for instance in the copper-oxide compounds are investigated in the framework of the  $t$ - $J$  model using exact diagonalization techniques. In order to increase the numerical possibilities of investigations using Lanczos algorithms, Moebius boundary conditions are introduced. These are implemented for the study of the ladder geometry.

It is known that the 2-leg  $t$ - $J$  ladder forms a spin liquid at half-filling which evolves into a Luther-Emery liquid upon doping. In the first part, the aim is to obtain a complete phase diagram for isotropic couplings (i.e. rungs and legs equal) as a function of electron density  $n$  and the ratio  $J/t$ . Two known regimes in the phase diagram are:  $n < 1/2$  which is a single band Luttinger liquid and small hole doping  $\delta \ll 1$  for  $J/t \rightarrow 0$  which is a Nagaoka phase. First, the  $J/t$  dependence of the Nagaoka phase is investigated and a numerical estimate of a critical value  $(J/t)_c$  is given. For slightly larger  $J/t$  indications of partially ferromagnetic phases occur. For  $1 > n > 1/2$  evidence for gapless behavior in both spin and charge channels for  $0.1 < J/t < 0.3$  is found. This is consistent with Luttinger liquids in both bonding and anti-bonding bands. This proposal is based on the behavior of spin and charge correlation functions. For example, the hole-hole correlation function which displays hole pairing at larger  $J/t$  shows hole-hole repulsion in this region. As a further test, we examined the dependence of the energy on a relative phase shift between bonding and antibonding bands. For  $J/t < 0.3$  this is very weak, indicating a lack of pairing between these channels.

Then, in order to investigate the coupling between ladders, the electronic structure of ladder compounds is studied on the basis of LDA calculations for  $\text{SrCu}_2\text{O}_3$ . The Cu  $3d$  bands are the leading bands near the Fermi energy. The hopping parameters are obtained by fitting these bands. An anisotropy between the intraladder hoppings  $t_\perp$  and  $t_\parallel$  is reported which explains the anisotropy measured between the magnetic couplings  $J_\perp$  and  $J_\parallel$ . A downfolding method shows that this anisotropy arises from the ladder structure. Moreover, the interladder hopping is shown to be much smaller than the intraladder hopping and thus the next-nearest neighbors must be taken into account. Using these parameters, the conductivity perpendicular to the ladders is computed assuming incoherent tunneling. This gives a value close to experiment.

In the last chapter, coupled chains with zig-zag bonds are investigated in order to understand the metallic behavior found in  $\text{YBa}_2\text{Cu}_4\text{O}_8$ . First, the weak coupling limit is revisited using RG method, showing to the existence of a spin-gap for these structures. The strong interacting model is studied by using exact diagonalization

techniques. Open shell boundary conditions are preferred here and clearly show the degeneracy between the  $k = 0$  and  $k = 2k_F$  state, in agreement with the picture of a Luttinger-Liquid and in contradiction with the weak-interacting limit picture.