

ORDRE DE CHARGE ET DE SPIN DANS LES CONDUCTEURS DE BASSE DIMENSION A FORTES CORRELATIONS

P. FOURY-LEYLEKIAN (LPS, Orsay)

S. BERNU, S. FAGOT, D. LE BOLLOC'H, J.P. POUGET, A. MORADPOUR (LPS, Orsay)

E. LORENZO, Y. JOLY (Labo de Cristallographie, Grenoble)

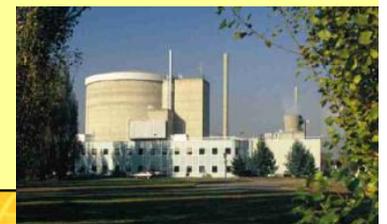
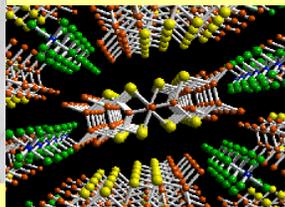
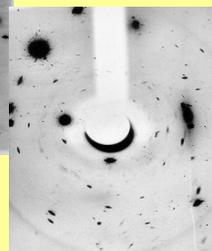
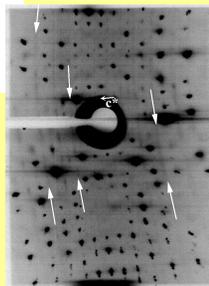
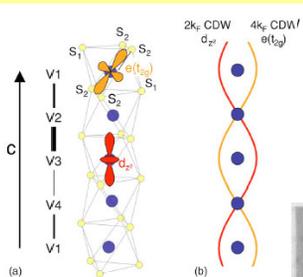
S. RAVY, P. FERTEY (SOLEIL)

B. HENNION (LLB), S. PETIT (LLB)

M.H. LEMEE-CAILLOT (ILL), A. STUNAU (ILL)

E. RESSOUCHE (CEA)

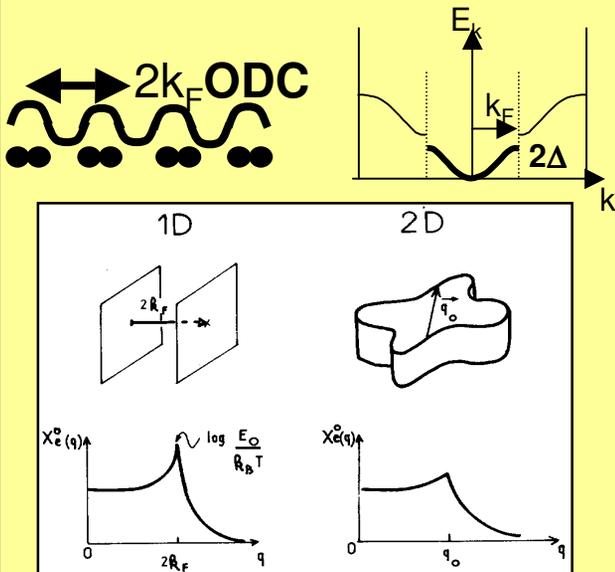
C. COULON (CRPP, Bordeaux)



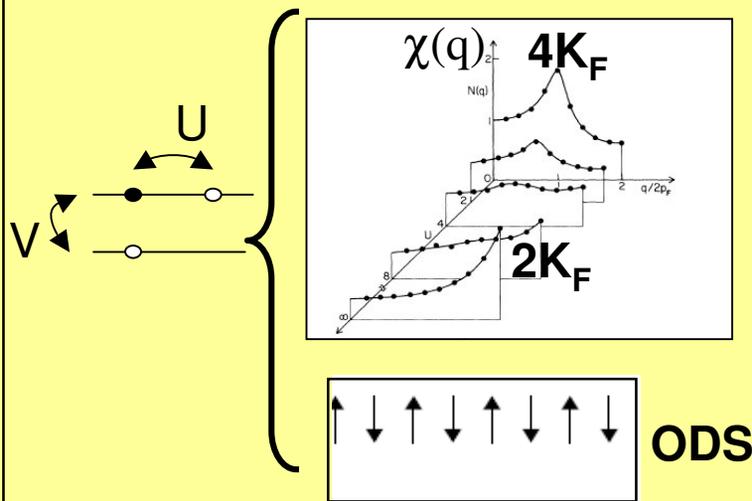
15-16 Mars 07
Journées
LLB/SOLEIL

INSTABILITE DES SYSTEMES DE BASSE DIMENSION A FORTES CORRELATIONS

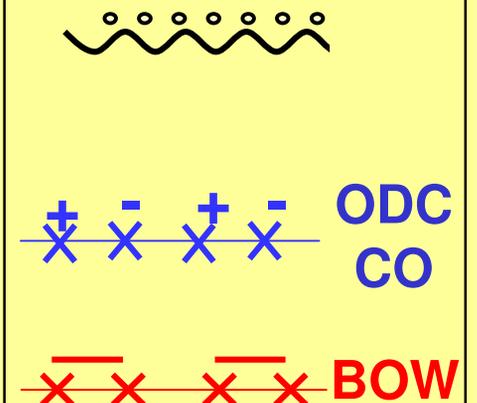
Système de basse dim.



+ Corrélations électroniques



+ couplage réseau

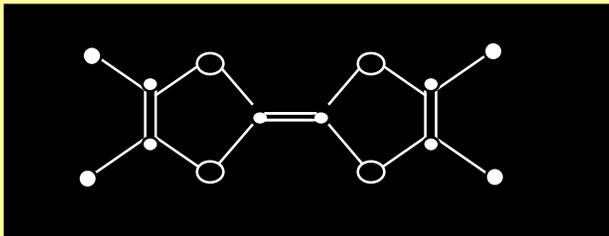


I) $(\text{TMTYF})_2\text{X}$: Etude des ordres de charge et de spin à la lumière de nouvelles techniques expérimentales

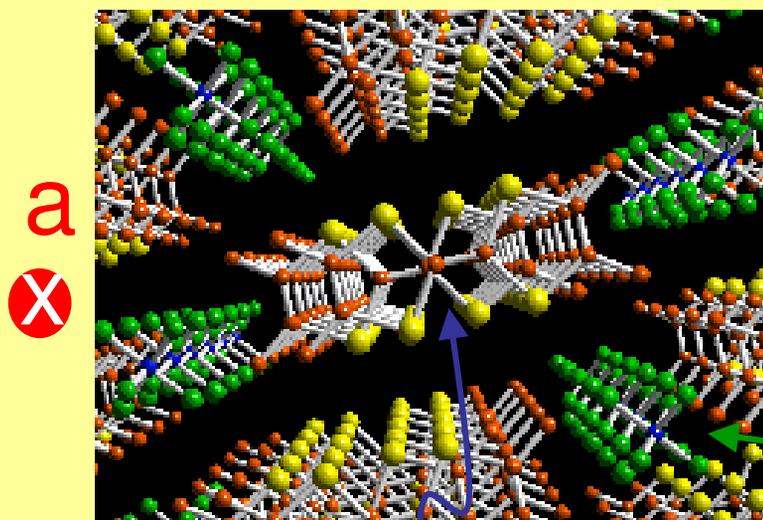
Collaborations :

- B. Hennion, S. Petit (LLB)
- M.H. Lemée-Caillet, A. Stunault (ILL)
- S. Ravy, P. Fertey (SOLEIL), E. Ressouche (CEA), C. Coulon (CRPP)

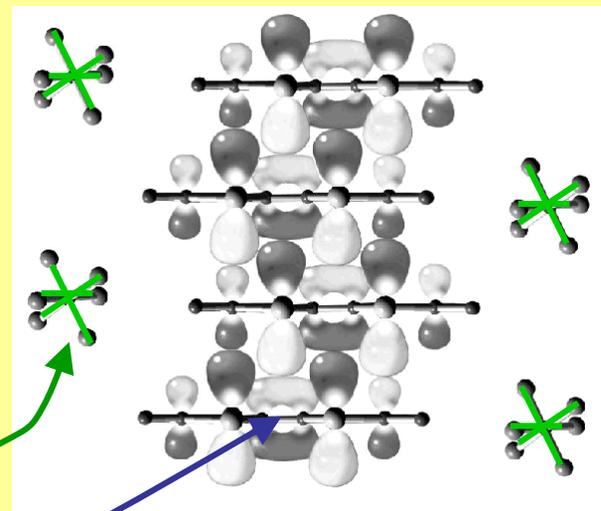
(TMTyF)₂X: UN CONDUCTEUR QUASI-1D



Molécule Organique avec S (o=TMTTF)
ou Se (o=TMTSF)

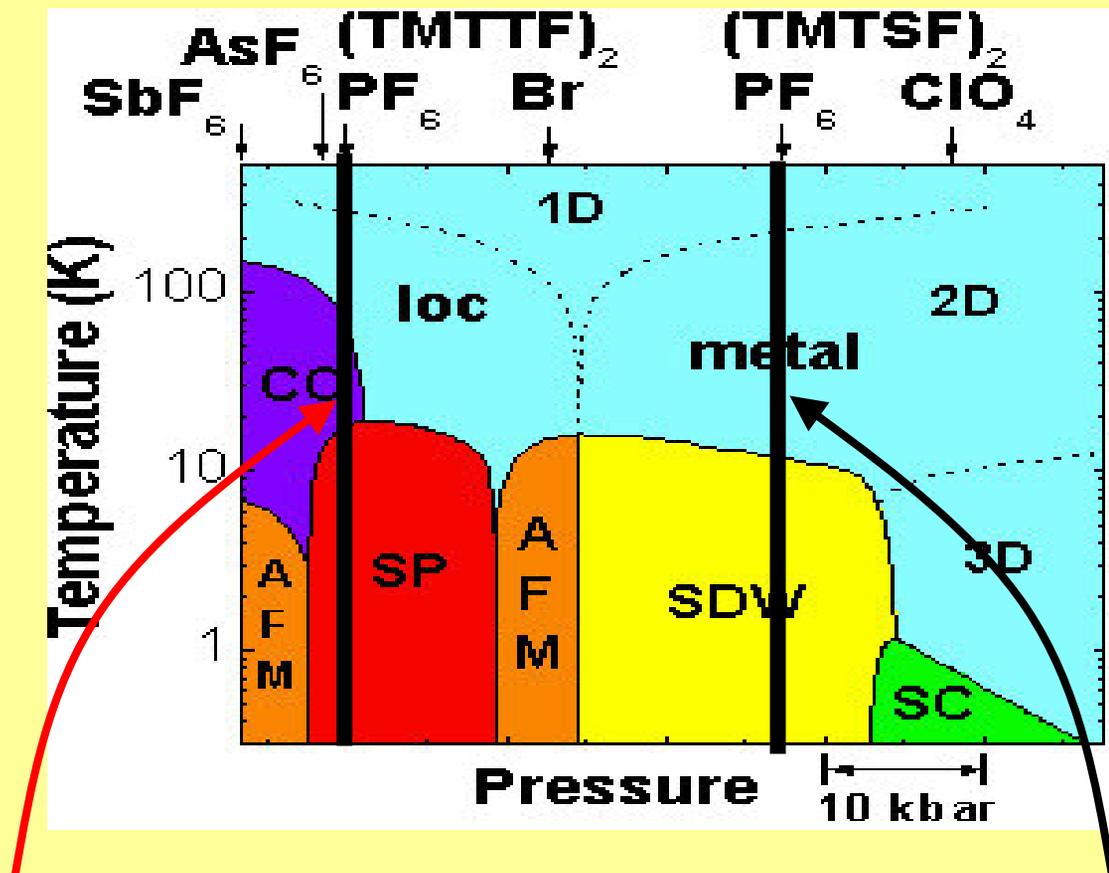


chaîne zig-zag de TMTyF



X=anion Centro : AsF₆, PF₆, SbF₆...
ou non centro. : BF₄, ClO₄...

UN RICHE DIAGRAMME DE PHASES...



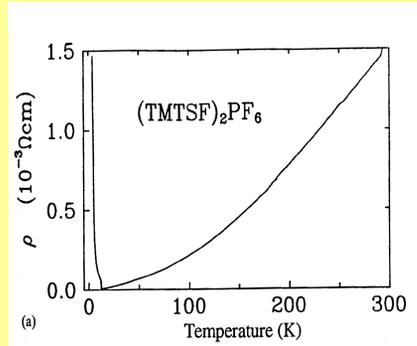
Ordre de charge et phase SP dans $(TMTTF)_2X$

Coexistence de $2k_F$ ODC/ODS dans $(TMTSF)_2PF_6$

**I) COEXISTENCE MICROSCOPIQUE DE
PHASE ODS/ODC DANS $(\text{TMTSF})_2\text{PF}_6$**

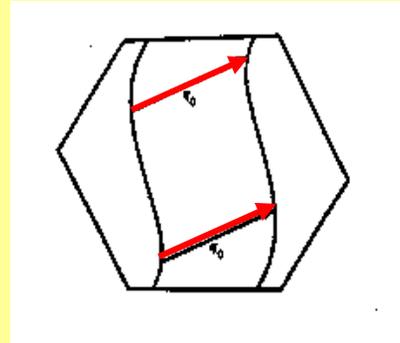
PHASE $2k_F$ ODS

Résistivité

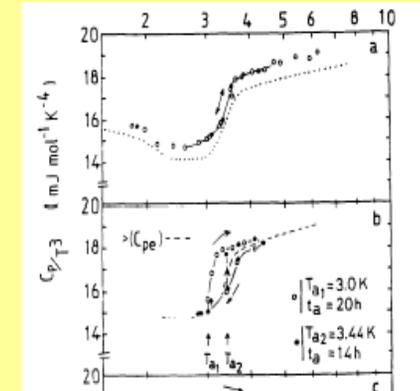


J.M. Delrieu et al

SF



C_p/T^3



J. Lasjaunas PRL 94

- $T_{CDW}=12K$; $q=(2k_F=0.5;0.2\pm0.05;?)$; $0.1\mu_B$
- q emboîte la SF quasi-1D
- Transition 1er ordre?
- Anomalie cinétique à 4-5K

ETUDES NEUTRONS



Recherche de la composante ODS : 4F2 (LLB), Vivaldi, D23 (ILL)

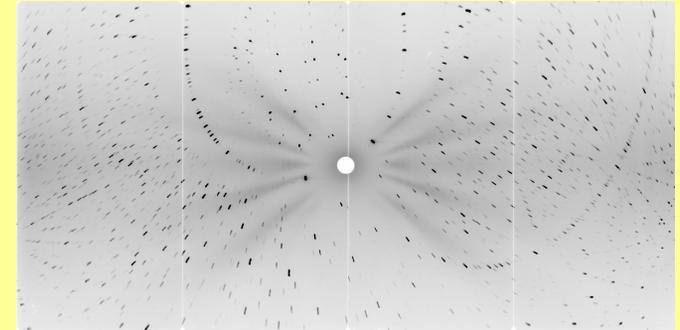
Réflexion de Bragg ~ 1000 ct/mn

ODS de $0.1 \mu_B \rightarrow I \sim 10^{-2} I_{\text{bragg}} \sim 20$ ct/mn?

Bruit aux petits angles : $I \sim 50 \pm 7$ ct/mn

ODS non détectée :

Amplitude de l'ODS plus faible que prévu ??

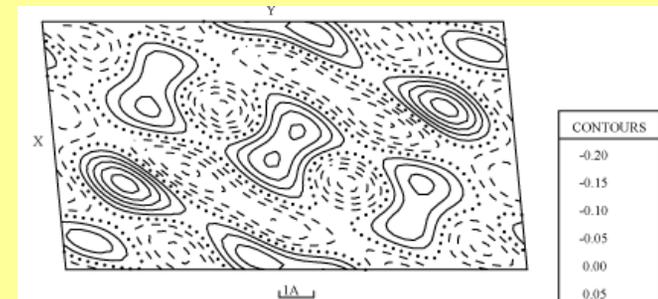


Carte d'aimantation : Neutrons polarisés D3 (ILL)

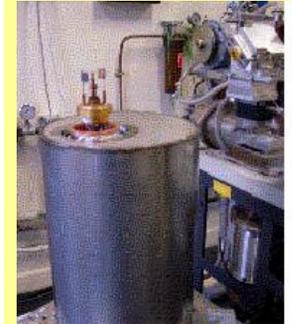
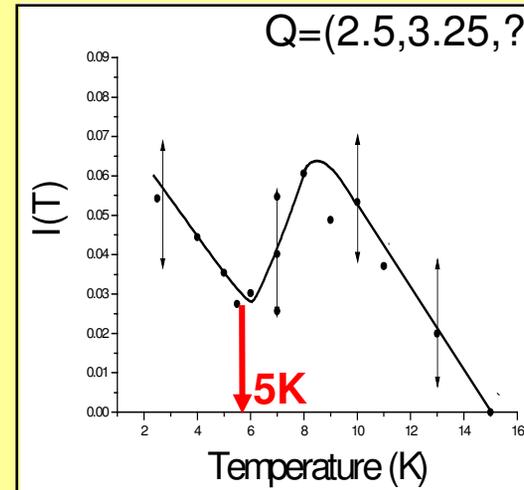
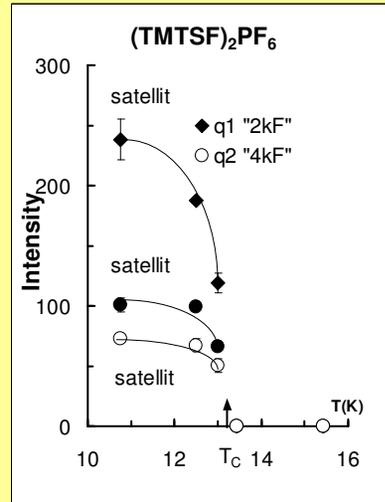
Mesuré : $4R_{\text{flipping}} \sim 0.005 \pm 0.005 \rightarrow F_M < 0.02 \pm 0.02$

$M < 10^{-2} \mu_B$ /molecule, **\sim limite expérimentale**

Attendu : $\chi = 2.10^{-4}$ emu/mol $\rightarrow M \sim 5.10^{-3} \mu_B$ /mol



+ COMPOSANTE $2k_F$ ODC



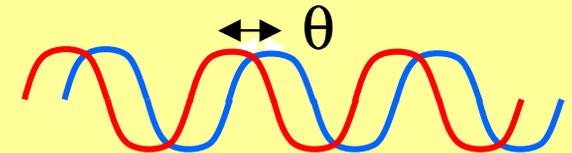
J.P. Pouget et al, *Synth. Met.* 97

P. Foury, et al, non publié

G. Guillier

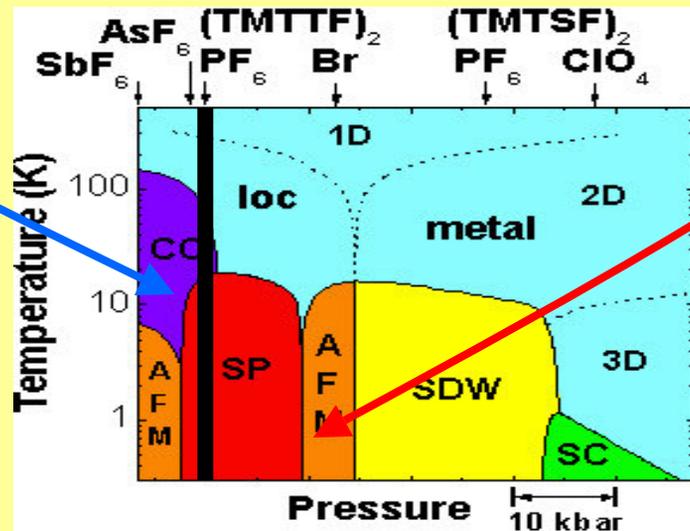
- Résultats : réflexions satellites à $(0.5, 0.25, ?) = q_{ODS} \rightarrow$ Ordre de charge pur

UN ETAT MIXTE $2k_F$ ODC/ODS ...



- Effets inattendus à 4K (*Kagoshima et al SSC 1999 et P. Foury et al*)

II) ORDRE DE CHARGE ET SPIN PEIERLS DANS $(\text{TMTTF})_2\text{A}$ ($\text{A}=\text{PF}_6, \text{AsF}_6, \text{SbF}_6$)

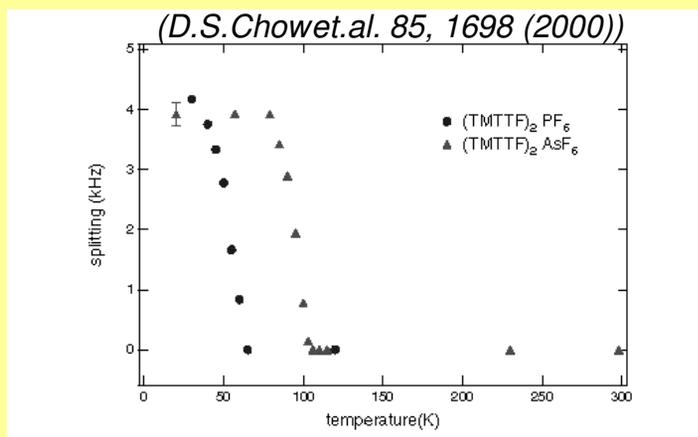
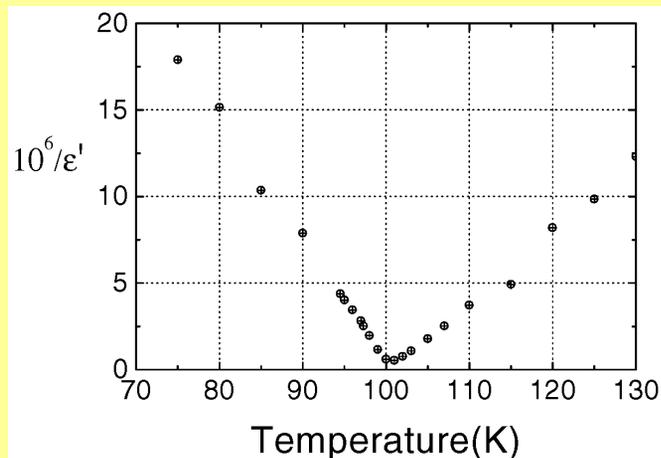


(TMTTF)₂X (PF₆...) : ORDRE DE CHARGE?

Constante diélectrique inverse (100 khz)



(Nad et. al. J. Phys. : Cond. Mat. 12 (2000) L435)



Ordre de Charge

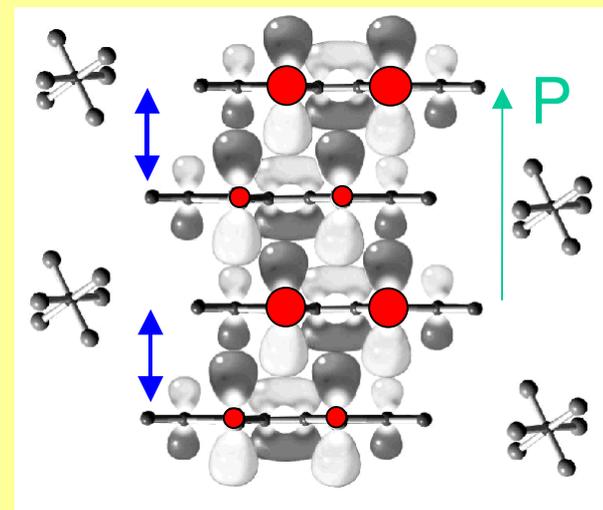
+

dimérisation

=

Ferroélectricité

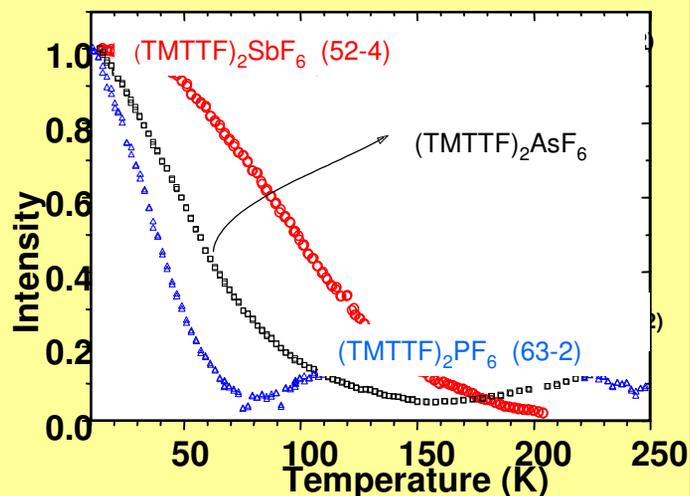
Perte du centre d'inversion



Prédictions théoriques : rôle des anions (D. Poilblanc (2001) , P. Monceau (2001))

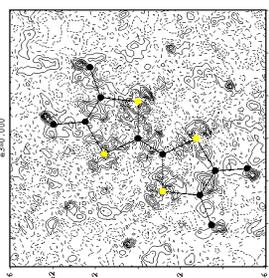
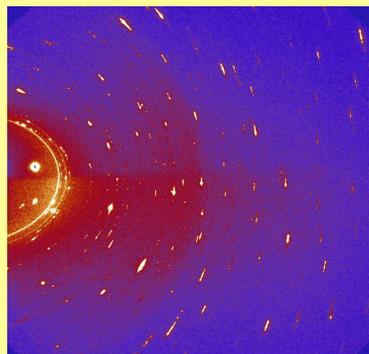
ORDRE DE CHARGE : EFFET « STRUCTURELESS »

Mesure de DFX



* Pas d'anomalie de $I(T)$
liée à l'OC

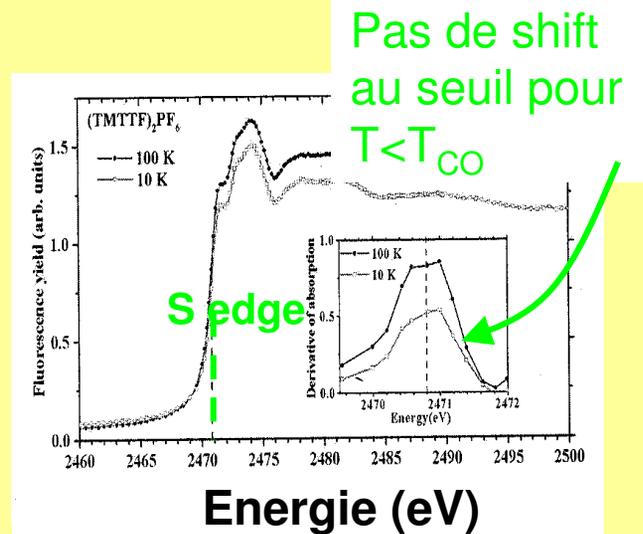
Affinement de structure



BM1, ESRF

* Brisure de
symétrie $\bar{1}$ invisible

EXAFS



S. Ravy, P. Foury et al, J. Phys. 04 (LURE)

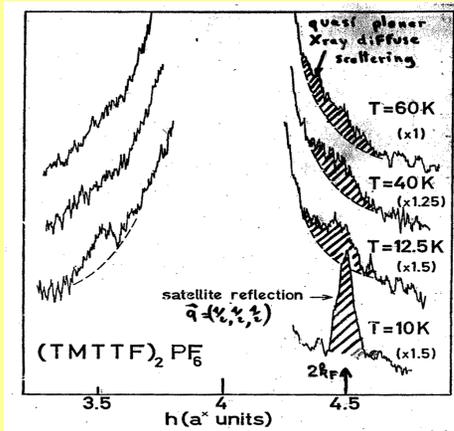
* OC s'il existe : $< 0.04e^-/S$
 \rightarrow c'est-à-dire $< 0.24e^-/mol.$
* EXAFS : faible précision
pour un OC moléculaire



! SENSIBILITÉ DE L'ODRE DE CHARGE AUX RX !

TRANSITION SPIN PEIERLS

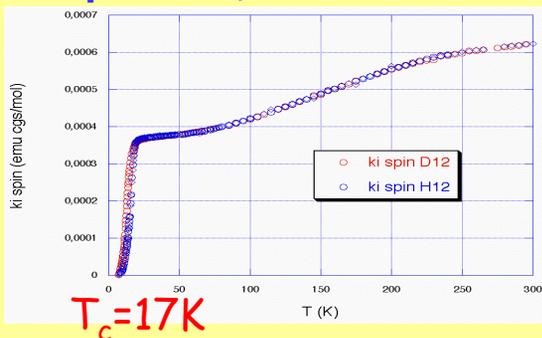
Diffusion RX



J.P. Pouget et al (82)

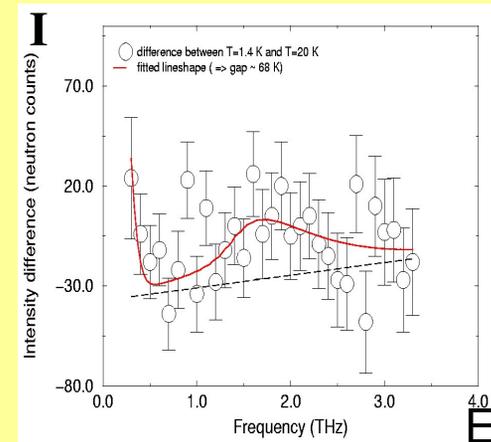
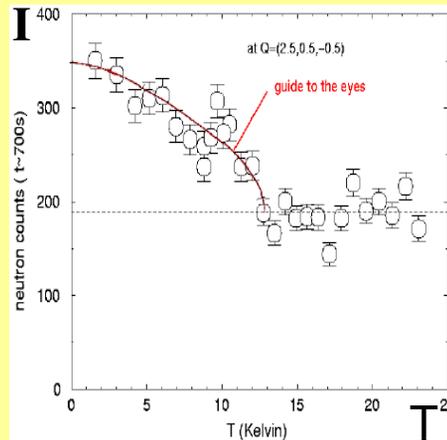
$q=(1/2,1/2,1/2) : 2k_F$ BOW
Sensible aux RX

Susceptibilité, C.Coulon al 05



$T_c=17K$

Diffusion neutrons



P. Foury et al PRB 2004 et JP Pouget et al JLTP. 06

→ Mesure de $I(T)$, T_c , amplitude

$T_{SPH}=17K$ et $T_{SPD}=14K$; $\Delta_H \approx 80 K$ et $\Delta_D \approx 72 K$; $\eta_D \sim 10^{-3} \text{\AA}$

→ Mesure du gap de Spin en cours ($\sim 1.6 \text{ THZ}$)

II) BaVS_3 : Ordre de charge et ordre orbital?

Collaborations :

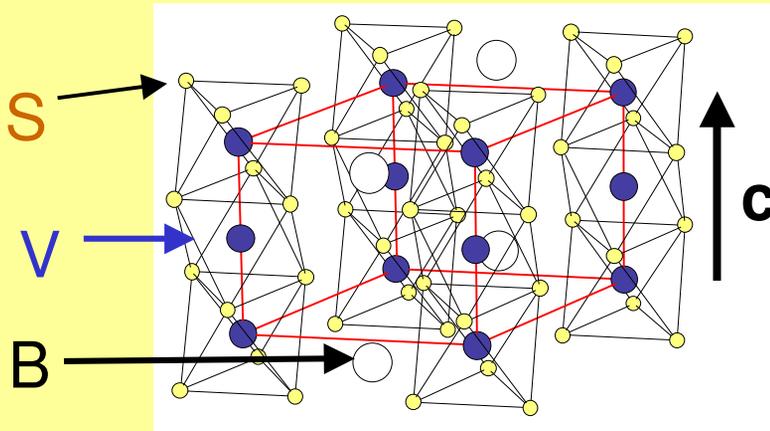
- L. Forro, N. Barisic (EPFL, Suisse)
- H. Berger (ICM, Suisse)
- M. Greenblatt, M. Lobanov, G. Popov (Rutgers, USA)
- A. Georges, S. Biermann, F. Lechermann (CPHT, X)
- M. Anne, E. Lorenzo, Y. Joly (Labo de cristallographie, Grenoble)
- P. Fertey (SOLEIL), V. Ilakovac (CCR, Paris)
- M.H. Lemée-Caillet (ILL, Grenoble)
- P. Cenzier, C. Pasquier (LPS, Orsay)

Thèses :

- S. Fagot (05)
- S. Bernu (en cours)

UN CONDUCTEUR QUASI-1D A FORTES CORRELATIONS

Structure



Réseau hexagonal de chaînes d'octaèdres VS₆ séparés par des atomes de Ba (P6₃/mmc)

$$d_{V-V//} = 2.8 \text{ \AA}$$

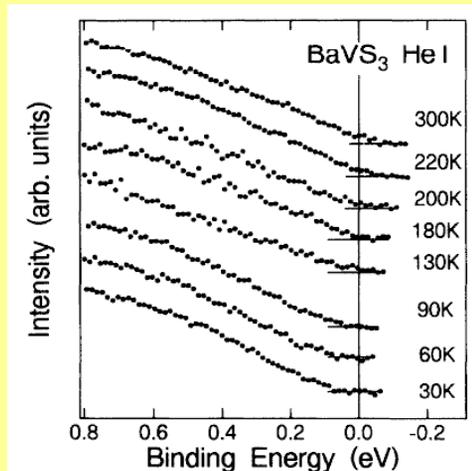
$$d_{V-V\perp} = 6.72 \text{ \AA}$$

$$\sigma_c / \sigma_a = 4$$

Structure fortement 1D

Conductivité faiblement 1D

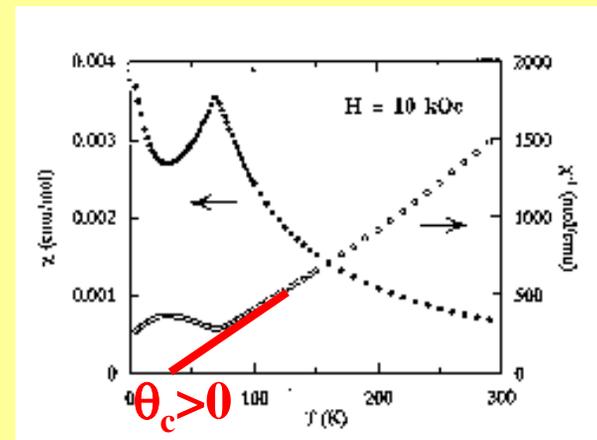
ARPES



M. Nakamura et al, PRB 49 (1994)

Liquide de Luttinger?

Susceptibilité

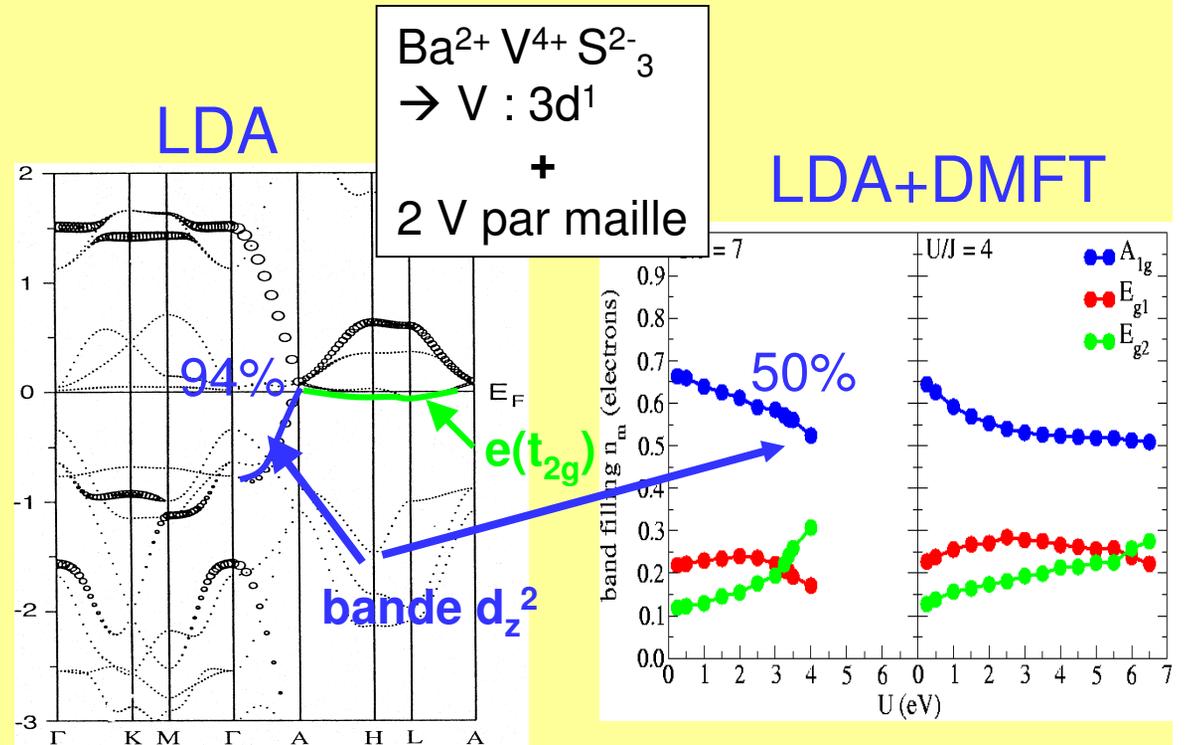
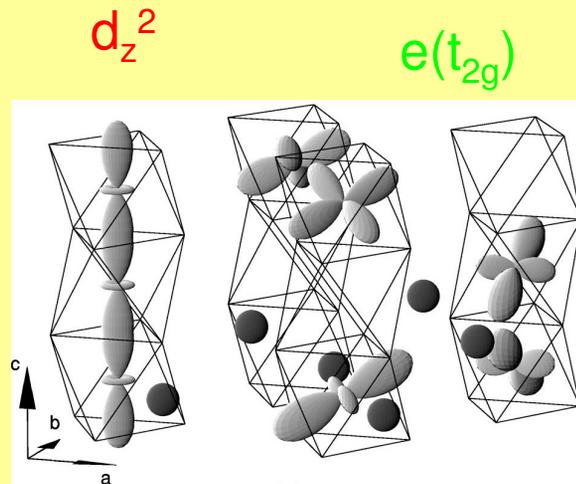
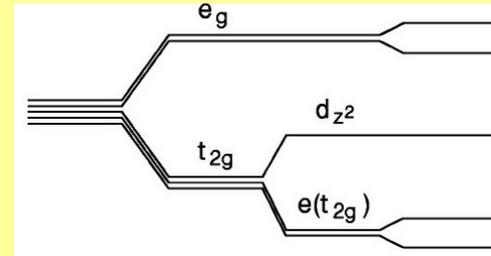


H. Imai et al JPSJ (1996)

Tendance au ferromagnétisme

DEGRES DE LIBERTES DE SPIN, DE CHARGE ET D'ORBITALE ...

Le champ cristallin sépare les niveaux électroniques t_{2g} du V



M. Whangbo et al, J. Solid State Chem. 02

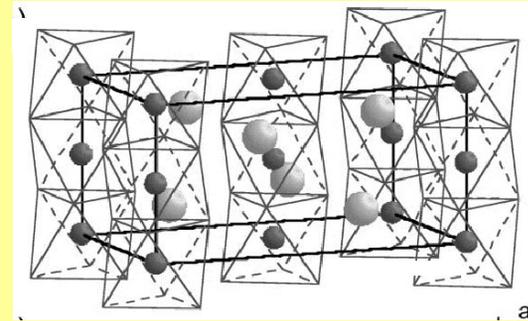
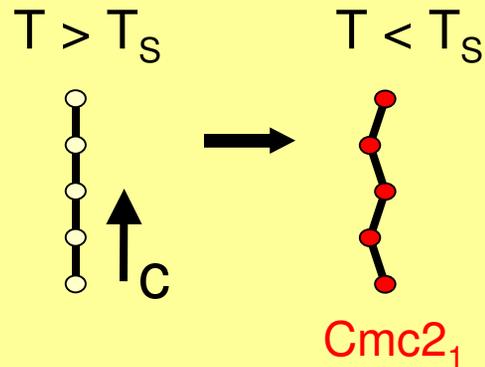
F. Lechermann et al, PRL 05

SERIE DE TRANSITIONS DE PHASE

Transition structurale à $T_s=240\text{K}$

Hexagonal \rightarrow Orthorhombique

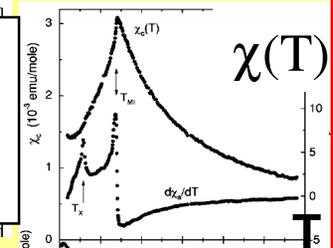
M. Guedira et al, J. Phys. C 19 (1986)



Transition Métal-Isolant à $T_{MI}=70\text{K}$

Comportement anormal

Curie $1.2 \pm 0.1 \mu_B$
 $\rightarrow 1/2 e^-$ localisé/V
 $\rightarrow 1/2 e^-$ déloc/V
= calcul LDA+DMFT



G. Mihaly et al. PRB 00

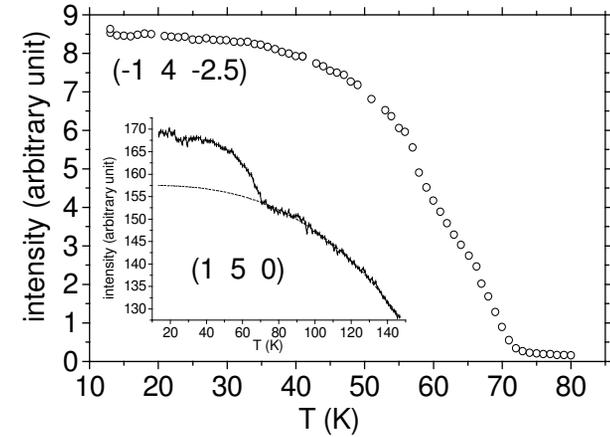
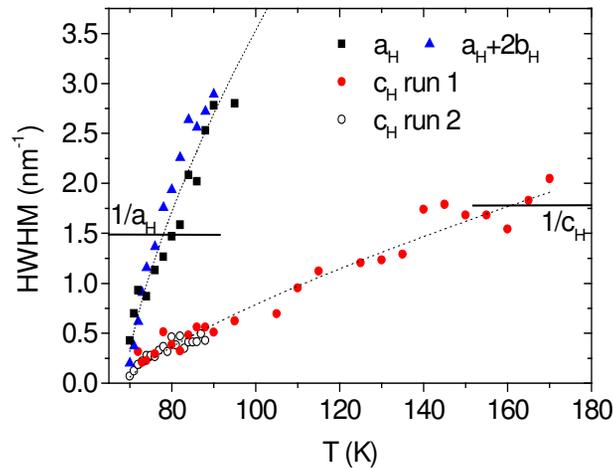
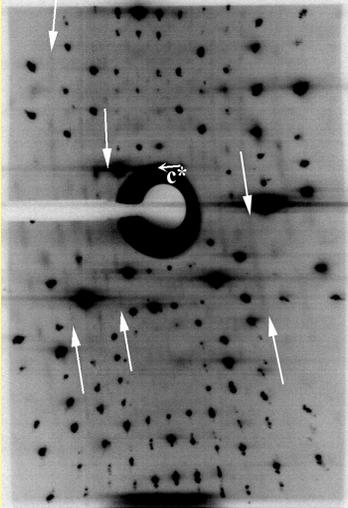
Transition incomprise à $T_x=30\text{K}$

Origine magnétique?

TRANSITION MI DE TYPE PEIERLS

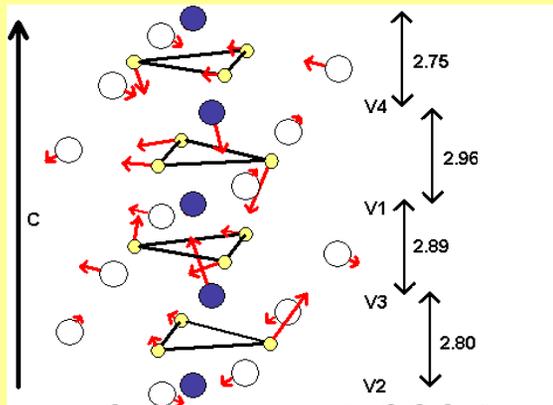
Régime de fluctuations quasi-1D \rightarrow instabilité structurale de la chaîne de V^{4+}

Modulation structurale à $q=(1,0, \frac{1}{2})$ et $2q$



S. Fagot et al, PRL 04

Surstructure à 40K (ID31, ESRF) :
tétramérisation de la chaîne=BOW



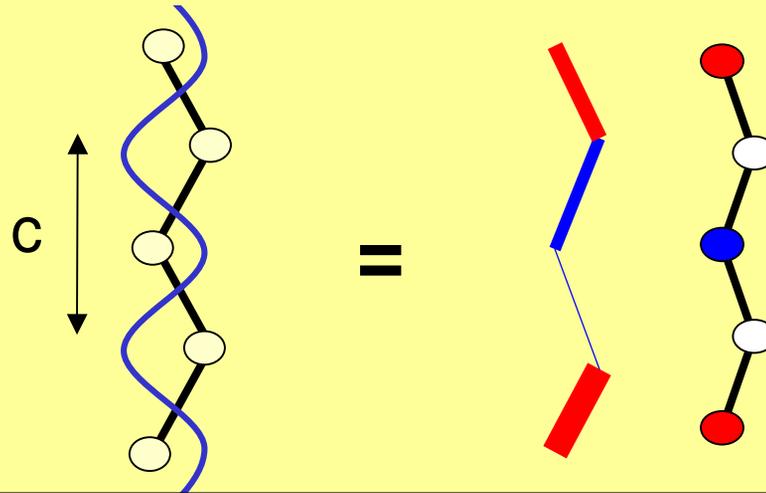
(S. Fagot et al, SSS 05)

Transition MI de type Peierls avec $2k_F=1/2$:
 \rightarrow En accord avec la susceptibilité
 \rightarrow En accord avec le calcul LDA+DMFT

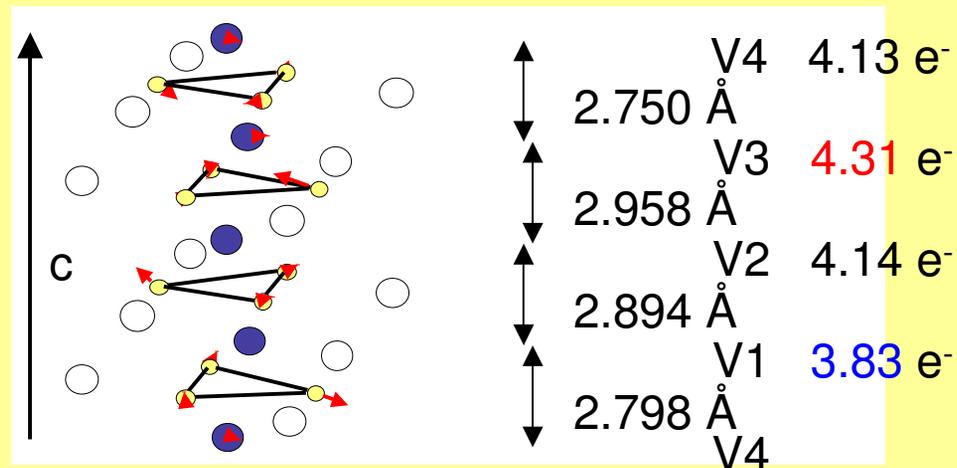
ORDRE DE CHARGE ?

ODC+ maille à 2 sites

BOW + OC



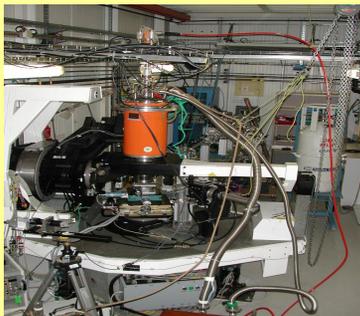
T=5K



Analyse BVS → **Ordre de Charge?**

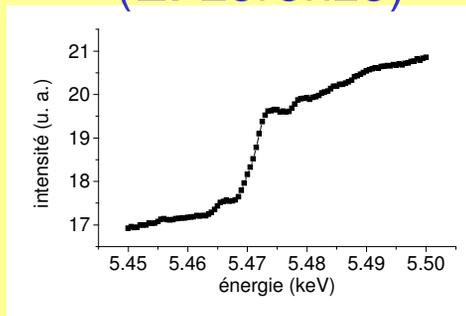
ETUDE DE L'ORDRE DE CHARGE

DAFS (ID20+D2AM)



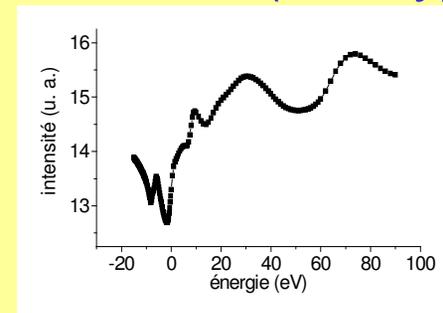
+

Correction d'absorption
(E. Lorenzo)



+

Simulations
FDMNES (Y. Joly)



$+\delta$

0

$-\delta$

0

$+\delta$

0

$-\delta$

0

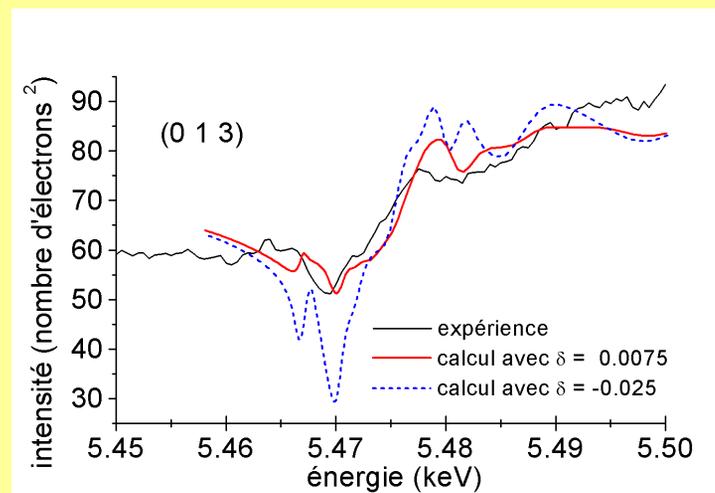
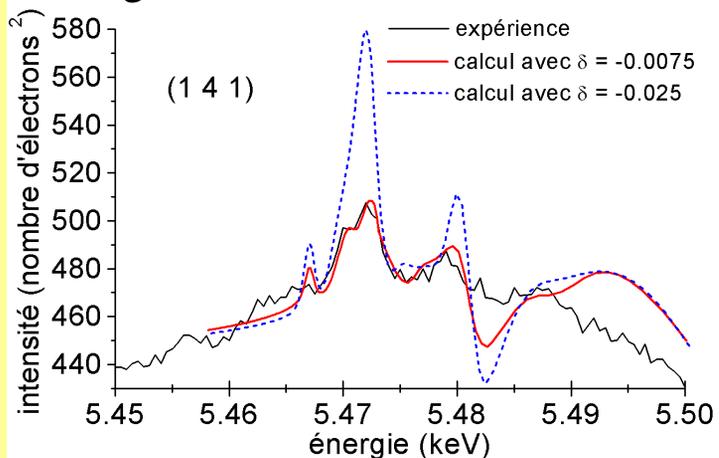
$+\delta$

0

$-\delta$

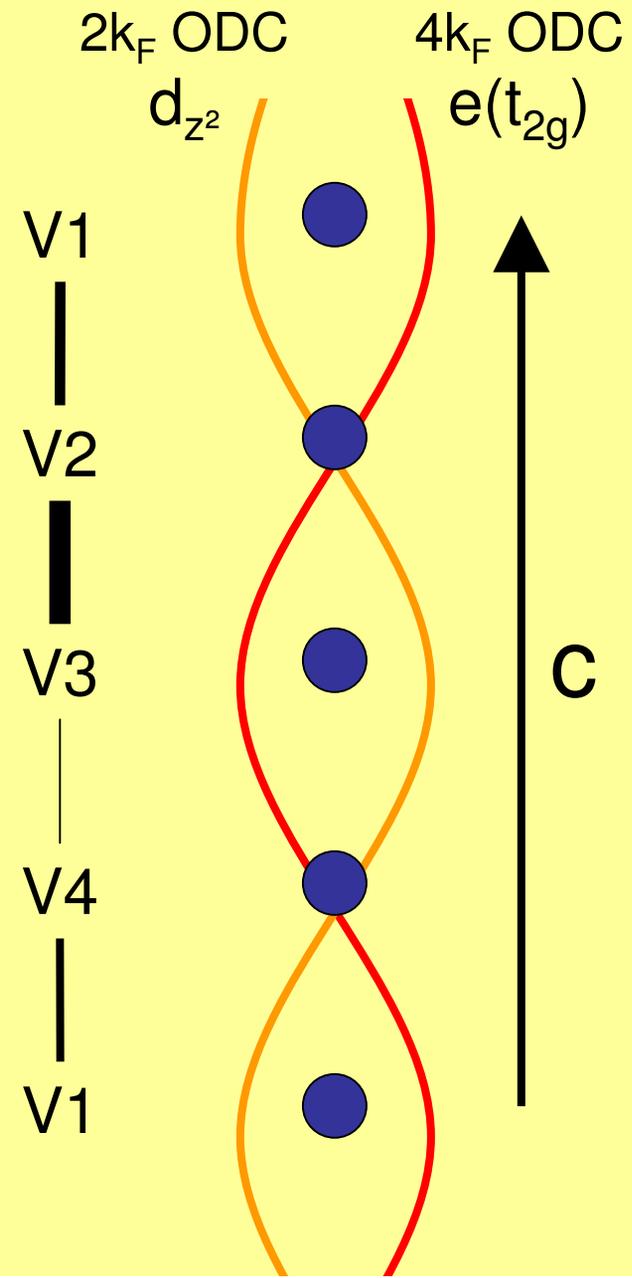
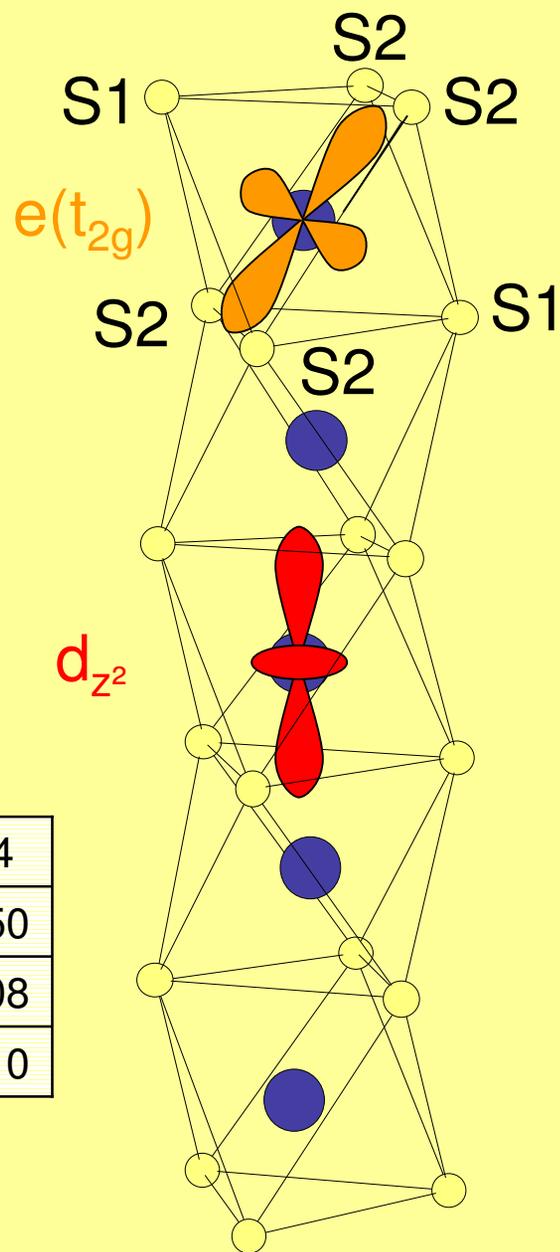
0

S. Fagot et al PRB 06



$\rightarrow \delta_{\text{optimum}} = -0.0047 \pm 0.01 e^- \rightarrow$ Absence d'ordre de charge à $T < T_{MI}, T_x$

INTERPRETATION : ORDRE ORBITAL

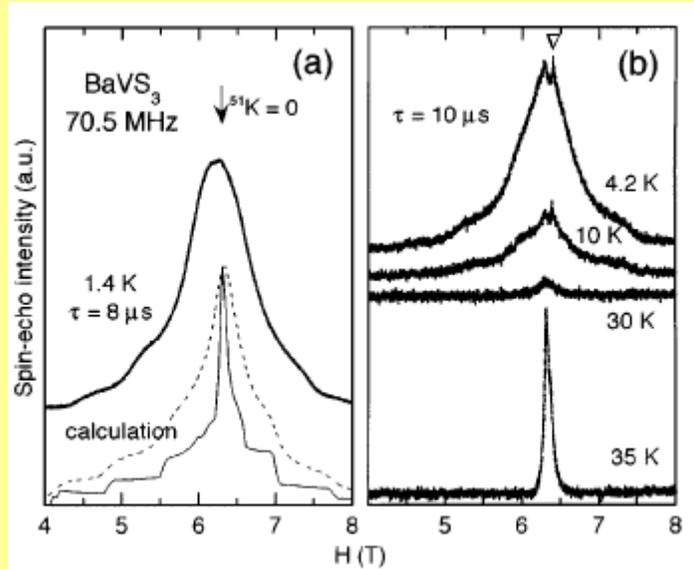


Variations des distances V-S

	V1	V2	V3	V4
$\Delta V-S_1$	0.47	0.53	0.37	0.50
$\Delta V-S_2$	0.02	0.08	0.13	0.08
$\Delta V-S_G$	0.14	0.12	0.04	0.10

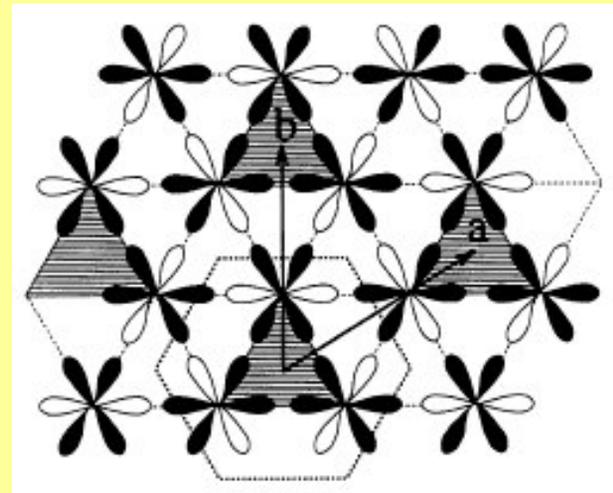
ORDRE ORBITAL A BASSE T

Spin-Echo, RMN



*H. Nakamura et al,
PRL 97*

OO, réseau triangulaire



H. Pen et al, PRL 97

→ Diffusion anormale au seuil L du Vanadium (~500eV)

CONCLUSIONS

- De Nombreux phénomènes type ordre de charge, spin, ordre orbital dans les conducteurs de basse dimension à corrélations fortes
- Diverses techniques de choix pour leurs études : diffusion anormale, neutrons, neutrons polarisés...
- Vers de nouveaux systèmes tels les supraconducteurs lamélares hydratés Na_xCoO_2 où toutes ces thématiques sont critiques