

Μαγνητικά Μονόπολα σε Spin Ice

Μια εισαγωγή

Παναγόπουλος Γεώργιος, ge19007

Επιβλέπων: Λ. Τσέτσερης

Σεμινάριο - Θέμα

Τρίτη, 09/05/2023

Σχολή Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών

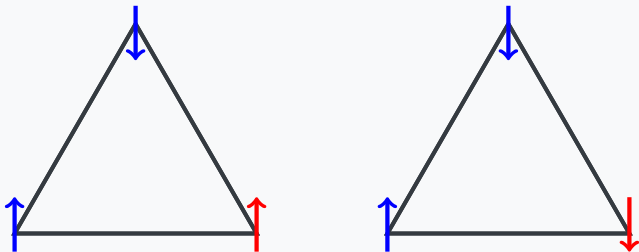
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο

Magnetic Monopoles

- Μαγνητισμός στην φύση ιστορικά: Πάντα σε μορφή διπόλων
- Στοιχειώδη σωματίδια με στοιχειώδες μαγνητικό φορτίο:
Μαγνητικά Μονόπολα - Προβλέπονται από αρκετές θεωρίες
- Δεν έχουν παρατηρηθεί
- Μαγνητικά μονόπολα ως quasi-particles, δηλαδή ως αναδυόμενη ιδιότητα συλλογικής συμπεριφοράς πολύπλοκων συστημάτων
- Καθίσταται δυνατή η μέτρηση και η μελέτη τους
- Ανοίγει ο δρόμος για νέες τεχνολογικές εφαρμογές

Geometric Frustration

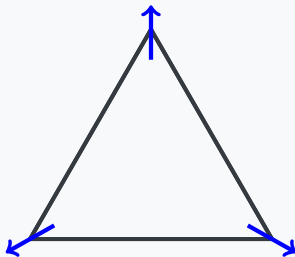
- Αντισιδηρομαγνητισμός: Γειτονικά spin προτιμούν να είναι αντιπαράλληλα



- Για δεδομένη επιλογή των 2 spin, το τρίτο δεν μπορεί να είναι αντιπαράλληλο και στα δύο \rightarrow frustrated spin
- Δύο ισοενεργειακές καταστάσεις για κάθε γωνία \rightarrow έξι συνολικά ισοενεργειακές καταστάσεις

Geometric Frustration

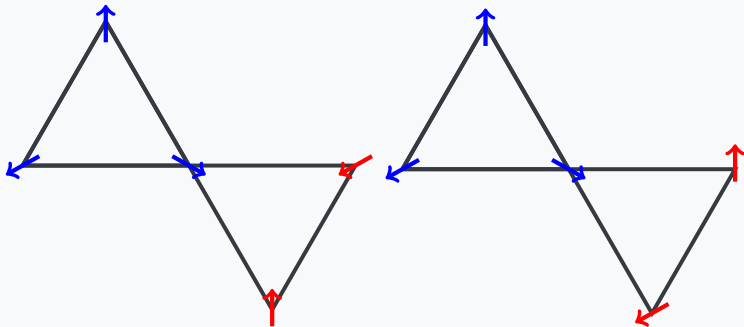
- Η θεμελιώδης ενεργειακή στάθμη είναι εκφυλισμένη → μη μηδενική εντροπία στους 0 βαθμούς
- Το σύστημα "συμβιβάζεται" σε μια κατάσταση ελάχιστης ενέργειας:



- Τα 3 spin βρίσκονται σε γωνίες 120° και έτσι το ολικό spin είναι 0

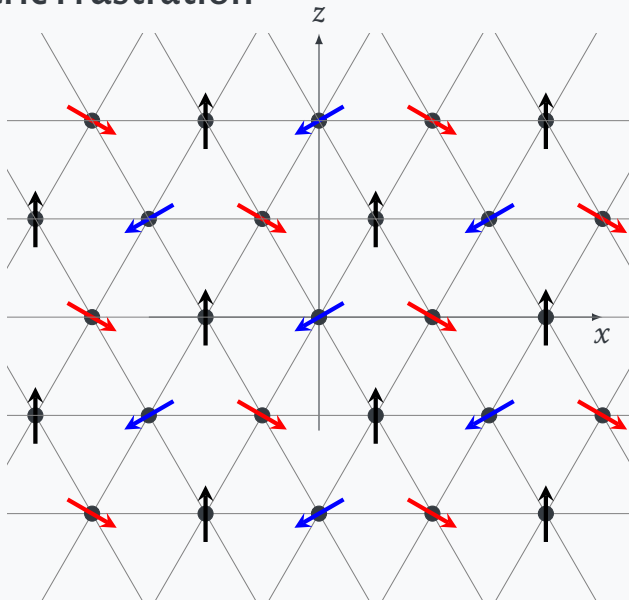
Geometric Frustration

- Ας θεωρήσουμε ένα διπλανό τρίγωνο:



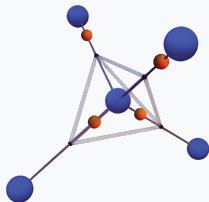
- Δύο τρόποι για να ικανοποιείται ο παραπάνω κανόνας
- Κρύσταλλος: Μεγάλος εκφυλισμός της θεμελιώδους κατάστασης

Geometric Frustration



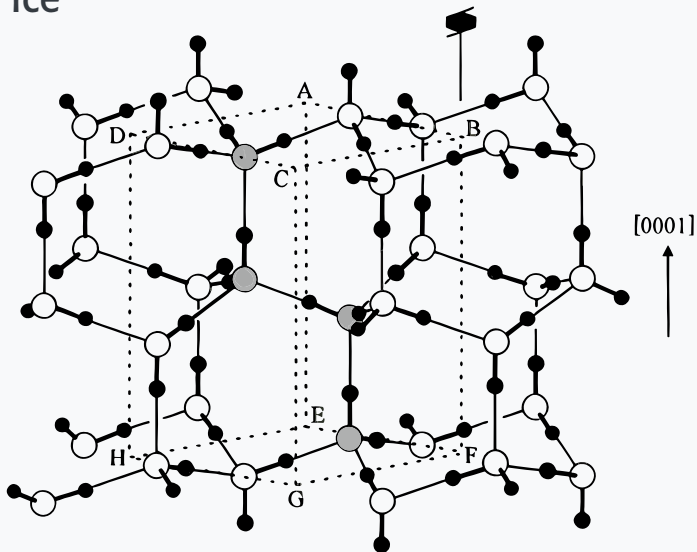
Water Ice

- Στον πάγο, τα άτομα του O βρίσκονται στο κέντρο ενός τετραέδρου
- Κάθε άτομο O αναπτύσσει ομοιοπολικούς δεσμούς με δύο άτομα H τα οποία βρίσκονται κοντά του
- Επιπλέον, αναπτύσσει δεσμούς H με άλλα δύο άτομα νερού. Τα H αυτά βρίσκονται πιο μακριά, καθώς ο δεσμός είναι ασθενέστερος \rightarrow Ice Rules



Σχήμα 1: Τετραεδρική διάταξη του πάγου¹

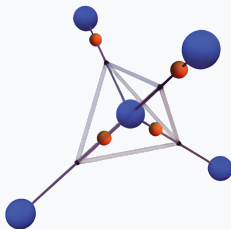
Water Ice



Σχήμα 2: Κρυσταλλική δομή του πάγου ¹

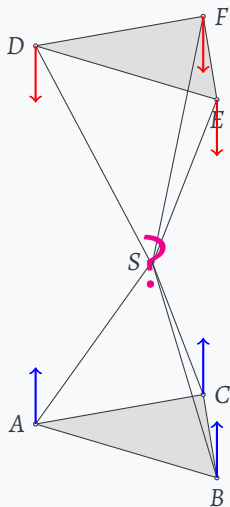
Water Ice

- Ας σκεφτούμε τις πιθανές διατάξεις των ατόμων H γύρω από ένα άτομο O



- Για κάθε τετράεδρο \rightarrow 6 ισοδύναμες καταστάσεις \rightarrow δύο H είναι κοντά (εντός τετραέδρου) και τα άλλα δύο είναι μακριά (εκτός τετραέδρου)
- Επομένως, έχουμε εκφυλισμό της θεμελιώδους κατάστασης \rightarrow μη-μηδενική εντροπία στους 0 K (Pauling, 1935²)

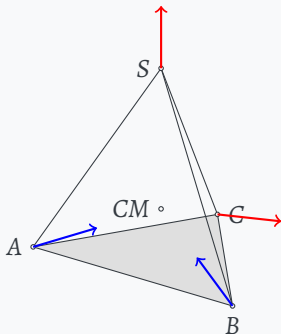
Spin Ice



- Ας φανταστούμε μια τετραεδρική διάταξη όπου γειτονικά spin αλληλεπιδρούν σιδηρομαγνητικά
- Το spin στην θέση S δεν μπορεί να ικανοποιήσει την σιδηρομαγνητική συνθήκη και με τις δύο βάσεις \rightarrow έχουμε frustration και δύο ισοδύναμες καταστάσεις

Spin Ice

- Το σύστημα συμβιβάζεται σε μια κατάσταση όπου τα δύο spin είναι προς το κέντρο του τετραέδρου και τα άλλα δύο προς τα έξω:

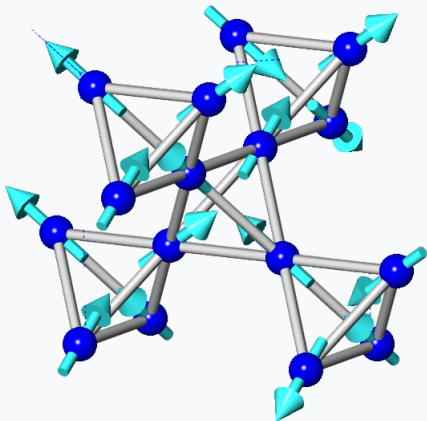


- Αντίστοιχο με την θεμελιώδη κατάσταση του πάγου → spin ice!

Spin Ice

- Εκφυλισμός θεμελιώδους κατάστασης → μη-μηδενική εντροπία
- Η κρυσταλλική δομή στην οποία έχουμε το παραπάνω είναι αυτή του πυρόχλωρου (pyrochlore)
- Μπορεί να περιγραφεί ως δομή FCC με βάση 4 ατόμων που σχηματίζουν τετράεδρα από υλικά του τύπου $A_2B_2O_7$
- Τα A , B είναι συνήθως σπάνιες γαίες ή στοιχεία μετάπτωσης. Τόσο το A , όσο και το B σχηματίζουν την δομή του πυρόχλωρου
- Χαρακτηριστικά παραδείγματα: $Dy_2Ti_2O_7$ (dysprosium titanate) & $Ho_2Ti_2O_7$ (holmium titanate)

Spin Ice



Σχήμα 3: Κρυσταλλική δομή του πυρόχλωρου σε κρύσταλλο spin ice³

Spin Ice

Nearest-Neighbor Spin Ice Model

- Το παραπάνω μοντέλο εκφράζεται μαθηματικά από την παρακάτω Χαμιλτονιανή

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1)$$

όπου $J > 0$ γιατί θεωρούμε μια σιδηρομαγνητική αλληλεπίδραση

- Για πλέγμα πυρόχλωρου έχουμε ότι $\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = -\frac{1}{3} \sigma_i \sigma_j$ και επομένως⁴:

$$H = \frac{J}{3} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j = J_{nn} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j \quad (2)$$

όπου $\sigma_i = \pm 1 \rightarrow$ και $J_{nn} > 0$, επομένως έχουμε ένα μοντέλο Ising για αντισιδηρομαγνητισμό!

Spin Ice

Nearest-Neighbor Spin Ice Model

- Το μοντέλο αυτό αναπαράγει την εκφυλισμένη θεμελιώδη κατάσταση του spin ice
- Ωστόσο, δεν λαμβάνονται υπόψιν όλα τα δεδομένα, ειδικά για τα $Dy_2Ti_2O_7$ και $Ho_2Ti_2O_7$
- Στην πραγματικότητα, οι αλληλεπιδράσεις μεταξύ πλησιέστερων γειτόνων στα υλικά αυτά είναι αντισιδηρομαγνητικές! ($J_{nn} < 0$). Πώς;
- Αυτό που έχει αγνοηθεί είναι η μεγάλη μαγνητική ροπή που έχουν τα Dy^{+3} και Ho^{+3} , που είναι περίπου $\sim 10\mu_B$
- Αυτό σημαίνει ότι στην Χαμιλτονιανή εμπεριέχεται και ένας όρος αλληλεπίδρασης διπόλων \rightarrow Dipolar Spin Ice Model

Spin Ice

Dipolar Spin Ice Model

- Μπορούμε να γράψουμε την νέα Χαμιλτονιανή ως⁴

$$H = J_{nn} \sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j + D r_{nn}^3 \sum_{i>j} \left[\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{|\vec{r}_{ij}|^3} - \frac{3(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{|\vec{r}_{ij}|^5} \right] \quad (3)$$

όπου $J_{nn} < 0$ και $D = \frac{\mu_0 \mu^2}{4\pi r_{nn}^3}$, r_{nn} η απόσταση μεταξύ πλησιέστερων γειτόνων και r_{ij} η απόσταση μεταξύ οποιωνδήποτε δύο spin

- Ο δεύτερος όρος είναι ο όρος της αλληλεπίδρασης διπόλων. Για γειτονικά spin, ο όρος αυτός παίρνει την τιμή $D_{nn} = \frac{5D}{3}$
- Επομένως ορίζουμε μια ενεργό κλίμακα ενέργειας μεταξύ γειτονικών spin⁵:

$$J_{eff} = J_{nn} + D_{nn} \quad (4)$$

Spin Ice

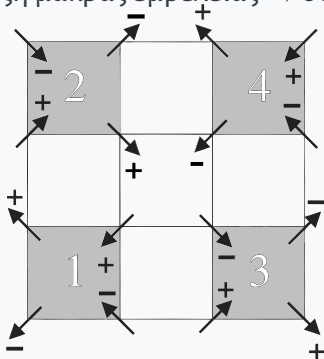
Dipolar Spin Ice Model

- Αν $J_{eff} > 0$ έχουμε συνολικά σιδηρομαγνητική αλληλεπίδραση, παρόλο που η αλληλεπίδραση πλησιέστερων γειτόνων είναι αντισιδηρομαγνητική ($J_{nn} < 0$)
- Ωστόσο υπάρχει ένα "πρόβλημα": Οι όροι πιο μακρινών γειτόνων είναι σημαντικοί \rightarrow άρση του εκφυλισμού της θεμελιώδους κατάστασης
- Στην πραγματικότητα, το φαινόμενο αυτό όντως υπάρχει, αλλά είναι τόσο ασθενές που πρακτικά οι καταστάσεις είναι εκφυλισμένες \rightarrow quasi-degenerate Pauling states
- Στην πραγματικότητα, υπάρχει μια μοναδική θεμελιώδης κατάσταση

Spin Ice

Dipolar Spin Ice Model

- Στους $\sim 0.18mK$ αλλαγή φάσης πρώτης τάξης από τις quasi-degenerate καταστάσεις στην θεμελιώδη κατάσταση, όπου υπάρχει τάξη μακράς εμβέλειας \rightarrow συνολική μαγνήτιση 0



Σχήμα 4: Κάθετη προβολή της θεμελιώδους κατάστασης του Dipolar Spin Ice Model. Η συνολική μαγνήτιση του υλικού είναι 0

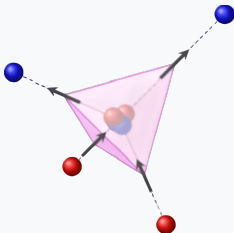
Summary

- Σε κάποια υλικά με την κρυσταλλική δομή του πυρόχλωρου έχουμε spin frustration
- Συμβιβαστικά, η κατάσταση ελάχιστης ενέργειας (θεμελιώδης κατάσταση) του κρυστάλλου υπακούει στα Ice Rules
- Το Nearest Neighbor Spin Ice model είναι ένα απλοϊκό μοντέλο που δίνει σχετικά σωστά αποτελέσματα. Το Dipolar Spin Ice model, που εμπεριέχει τις αλληλεπιδράσεις διπόλων, είναι πιο ακριβές
- Που είναι τα μονόπολα;

Magnetic Monopoles in Spin Ice

Dumbbell Model

- Θεωρούμε κάθε διπολική ροπή να είναι ένα ζεύγος μονοπόλου-αντιμονοπόλου (dumbbell)
- Όλα τα μονόπολα/αντιμονόπολα είναι στο κέντρο κάποιου τετραέδρου
- Τα ουδέτερα αυτά σημεία σχηματίζουν δομή αδάμαντα

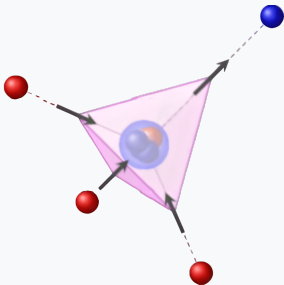


Σχήμα 5: Dumbbell model: Ένα μαγνητικό δίπολο (spin) μπορεί να ειπωθεί ως δύο αντίθετα μαγνητικά φορτία ⁴

Magnetic Monopoles in Spin Ice

Dumbbell Model

- DSIM: Η διέγερση του συστήματος από μια κατάσταση Pauling αντιστοιχεί σε ένα spin flip το οποίο "σπάει" τα Ice Rules
- DM: Η διέγερση αντιστοιχεί στην εναλλαγή ενός μονοπόλου με ένα αντιμονόπολο:



Σχήμα 6: Dumbbell model: Το μαγνητικό φορτίο εμφανίζεται ως αποτέλεσμα της διέγερσης του κρυστάλλου με αλλαγή ενός spin ⁴

Magnetic Monopoles in Spin Ice

Dumbbell Model

- Εμφανίζονται συγκεντρώσεις θετικού και αρνητικού μαγνητικού φορτίου σε δύο γειτονικά τετράεδρα, λόγω διεγέρσεων του κρυστάλλου
- Αλλάζοντας την φορά πολλών διαδοχικών spin είναι δυνατόν τα φορτία αυτά να απομακρυνθούν σε μεγάλες αποστάσεις.
- Η διαδρομή των flipped spins που συνδέουν τα δύο αυτά μονόπολα είναι ανάλογη με ένα "Dirac string"
- Τα μονόπολα αλληλεπιδρούν μέσω μιας δύναμης Coulomb ⁶:

$$V(r_{ij}) = \begin{cases} \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{q_i q_j}{r_{ij}} & r_{ij} \neq 0 \\ \nu_0 q_i q_j & r_{ij} = 0 \end{cases} \quad (5)$$

όπου το μαγνητικό φορτίο παίρνει τις τιμές $q_m = \pm \frac{\mu}{a_d}$, a_d η απόσταση μεταξύ ουδέτερων θέσεων στο πλέγμα του αδάμαντα

Magnetic Monopoles in Spin Ice

Dumbbell Model

- Η Χαμιλτονιανή μπορεί να γραφεί στην μορφή ⁶

$$H = \frac{\mu_0}{4\pi} \sum_{\alpha < \beta} \frac{Q_\alpha Q_\beta}{r_{\alpha\beta}} + \frac{v_0}{2} \sum_{\alpha} Q_\alpha^2 \quad (6)$$

όπου Q_α είναι το συνολικό μαγνητικό φορτίο σε μια πλεγματική θέση και v_0 είναι μια κατάλληλη σταθερά που αναπαράγει την αντισιδηρομαγνητική σύζευξη πλησιέστερων γειτόνων

- Είναι τα μονόπολα αυτά ανεξάρτητα (unconfined); Θα πρέπει να μπορούν να κινούνται ελεύθερα στον κρύσταλλο → το κόστος ενέργειας καθώς μεγαλώνει το μήκος του Dirac string θα πρέπει να έχει κάποιο άνω φράγμα
- Αυτό εξασφαλίζεται από τις quasi-degenerate καταστάσεις Pauling

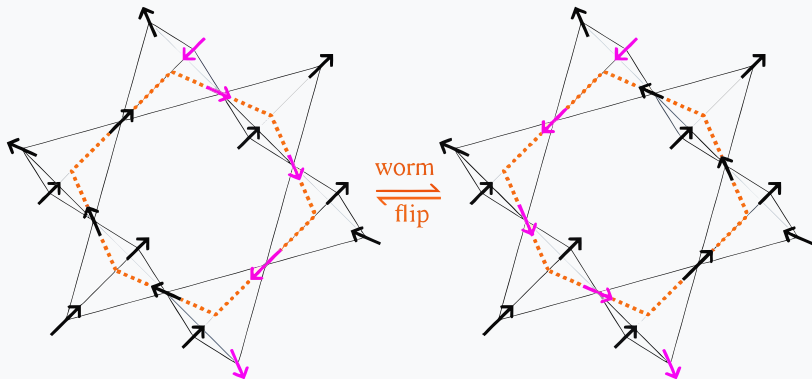
Magnetic Monopoles in Spin Ice

Dumbbell Model

- Μια κλειστή διαδρομή από flipped spins (worm) οδηγεί σε μια διαφορετική quasi-degenerate κατάσταση του κρυστάλλου
- Η διαδρομή αυτή μπορεί να έχει οποιοδήποτε μήκος και σχήμα, λόγω της γεωμετρίας του κρυστάλλου → υπάρχει ένα άπειρο πλήθος από dirac strings που μπορούν να ενώσουν δύο μονόπολα
- Αυτό καθιστά τα dirac strings ενεργειακά ασήμαντα, και γι'αυτό η αλληλεπίδραση είναι της μορφής Coulomb^{7,8}
- Παρ' όλα αυτά, τα dirac strings είναι παρατηρήσιμα → δεν υπάρχει κβάντωση του μαγνητικού φορτίου

Magnetic Monopoles in Spin Ice

Dumbbell Model



Σχήμα 7: Κλειστή διαδρομή από flipped spins (worm) ⁹

Magnetic Monopoles in Spin Ice

Dumbbell Model

- Εφόσον η αλληλεπίδραση μεταξύ μαγνητικών μονοπόλων είναι της μορφής Coulomb μόνο, η ενέργεια μεταξύ δύο μονοπόλων σε απόσταση r είναι της μορφής⁶

$$E(r) = 2 \frac{2\nu_0 \mu^2}{a_d^2} + \frac{\mu_0}{4\pi} \frac{\left(\frac{2\mu}{a_d}\right) \cdot \left(-\frac{2\mu}{a_d}\right)}{r} \quad (7)$$

όπου ο πρώτος όρος είναι το ενεργειακό κόστος δημιουργίας ενός ζεύγους μονόπολου-αντιμονόπολου και ο δεύτερος όρος είναι η μαγνητική αλληλεπίδραση Coulomb

- Για $r \rightarrow \infty$ η ενέργεια είναι πεπερασμένη και άρα τα μονόπολα είναι ανεξάρτητα (unconfined)

Application: Parallel Computing

Spintronics

- Τα συμβατικά ηλεκτρονικά συστήματα ημιαγωγών χρησιμοποιούν την ιδιότητα του φορτίου των ηλεκτρονίων
- Τα spintronics (spin transport electronics) κάνουν χρήση της ιδιότητας του spin και μπορούν να χρησιμοποιηθούν για αποθήκευση πληροφορίας σε μη-πτητική (non-volatile) μνήμη σε συνδυασμό με συμβατικά συστήματα
- Spintronics: καλή επιλογή για σχεδιασμό συστημάτων που μπορούν να εκτελούν υπολογισμούς παράλληλα, αντίστοιχα με τους Κβαντικούς Υπολογιστές ή τον ανθρώπινο εγκέφαλο (neuromorphic computation)¹⁰
- Τα συστήματα spin ice βασίζονται επίσης στο spin → ίδια κατηγορία με spintronics → spin-based parallel computation systems

Application: Parallel Computing

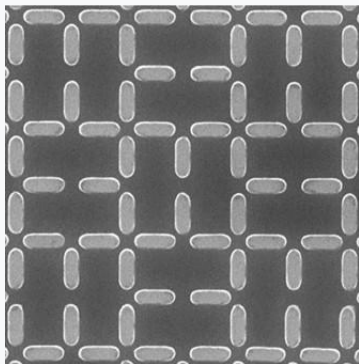
Artificial Spin Ice

- Ορμώμενοι από την έννοια του spin ice, μπορούμε να κατασκευάσουμε παρόμοια συστήματα μεγαλύτερης κλίμακας, τα οποία λέγονται artificial spin ice
- Αποτελούνται από μικρούς σιδηρομαγνήτες της κλίμακας των nm , η μαγνήτιση των οποίων είναι σε μια συγκεκριμένη διεύθυνση
- Μπορούμε να διατάξουμε αυτούς τους σιδηρομαγνήτες σε διάφορες γεωμετρίες, ώστε να έχουμε geometric frustration και να εμφανιστούν μαγνητικά μονόπολα
- Σε τέτοιου είδους συστήματα, μπορούμε να κατασκευάσουμε λογικές πύλες που βασίζονται στην μεταφορά μαγνητικού και όχι ηλεκτρικού φορτίου

Application: Parallel Computing

Artificial Spin Ice

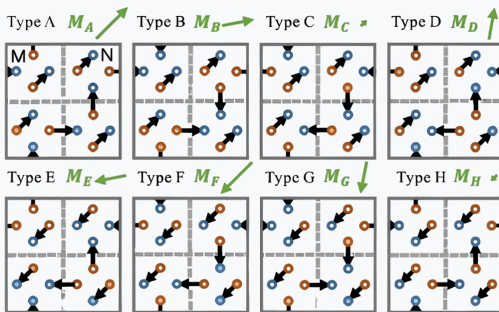
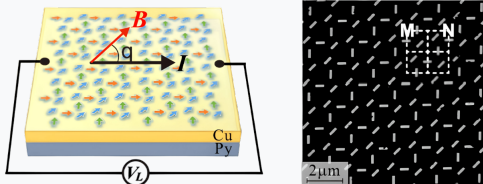
- Τα συστήματα αυτά λειτουργούν κοντά στο όριο Landauer, δηλαδή έχουν την μέγιστη θεωρητική απόδοση (ελάχιστη κατανάλωση ενέργειας στους υπολογισμούς) ¹¹



Σχήμα 8: Artificial Spin Ice: Shakti Lattice ¹²

Application: Parallel Computing

Artificial Spin Ice



Σχήμα 9: Artificial Spin Ice: tri-layer ASI device¹³



Bibliography

- ¹ C. Nisoli, “Frustration(s) and the ice rule: from natural materials to the deliberate design of exotic behaviors”, in (Springer Cham, Nov. 2018), pp. 57–59.
- ² L. Pauling, “The structure and entropy of ice and of other crystals with some randomness of atomic arrangement”, *Journal of the American Chemical Society* **57**, 2680–2684 (1935).
- ³ Mjppgngras, *Portion of the pyrochlore lattice showing magnetic moments (arrows) obeying the two-in, two out spin ice rule*, Wikipedia, Sept. 2013.
- ⁴ L. Jaubert and P. Holdsworth, “Magnetic monopole dynamics in spin ice”, *Journal of physics. Condensed matter : an Institute of Physics journal* **23**, 164222 (2011).



Bibliography

- ⁵ R. G. Melko and M. J. P. Gingras, “Monte carlo studies of the dipolar spin ice model”, *Journal of Physics: Condensed Matter* **16**, R1277–R1319 (2004).
- ⁶ C. Castelnovo, R. Moessner, and S. Sondhi, “Spin ice, fractionalization, and topological order”, *Annual Review of Condensed Matter Physics* **3**, 35–55 (2012).
- ⁷ C. Castelnovo, R. Moessner, and S. L. Sondhi, “Magnetic monopoles in spin ice”, *Nature* **451**, 42–45 (2008).
- ⁸ C. H. Marrows, “Experimental studies of artificial spin ice”, in *Spin ice*, edited by M. Udagawa and L. Jaubert (Springer International Publishing, Cham, 2021), pp. 455–478.
- ⁹ L. Jaubert, “Topology of the vacuum”, in (Oct. 2021), pp. 117–141.
- ¹⁰ M. Di Ventura and Y. V. Pershin, “The parallel approach”, *Nature Physics* **9**, 200–202 (2013).



Bibliography

- ¹¹ F. Flicker, *The magick of matter the magick of matter*, (Profile Books, London, England, Nov. 2022).
- ¹² Y. Lao, F. Caravelli, M. Sheikh, J. Sklenar, D. Gardeazabal, J. D. Watts, A. M. Albrecht, A. Scholl, K. Dahmen, C. Nisoli, and P. Schiffer, “Classical topological order in the kinetics of artificial spin ice”, *Nature Physics* **14**, 723–727 (2018).
- ¹³ W. Hu, Z. Zhang, Y. Liao, Q. Li, Y. Shi, H. Zhang, X. Zhang, C. Niu, Y. Wu, W. Yu, X. Zhou, H. Guo, W. Wang, J. Xiao, L. Yin, Q. Liu, and J. Shen, “Distinguishing artificial spin ice states using magnetoresistance effect for neuromorphic computing”, *Nature Communications* **14**, 2562 (2023).

Ευχαριστώ πολύ για την προσοχή σας!