

Propiedades magnéticas de sistemas frustrados

Dr. Diego Rosales

Instituto de Física de La Plata

6 de Noviembre de 2017

Curso de Posgrado 2017: Modelos en Nanomagnetismo

¿Qué es frustración magnética, y cómo cuantificarla?

- Tipos de frustración
- Frustración geométrica
- Interacciones ferromagnéticas y antiferromagnéticas
- Interacciones a más vecinos
- Interacción de Dzyaloshinskii-Moriya

Cuantificar el grado de frustración

- Relación entre temperatura de Curie-Weiss temperatura de orden
- Relación entre el máximo y mínimo del factor de estructura

Frustración geométrica y consecuencias

- Redes triangular y kagome
- Método de Luttinger-Tisza
- Fluctuaciones térmicas: correcciones Gaussianas
- Fluctuaciones térmicas: simulaciones de Monte Carlo
- Fluctuaciones cuánticas: aproximación de Holstein-Primakoff

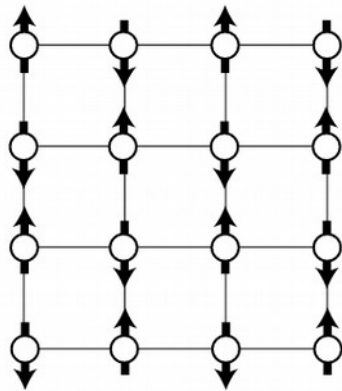
Algunos ejemplos: Fases exóticas en sistemas frustrados con distintos tipos de interacciones

- Red triangular con Dzyaloshinskii-Moriya: redes de skyrmions

¿Qué es frustración magnética?

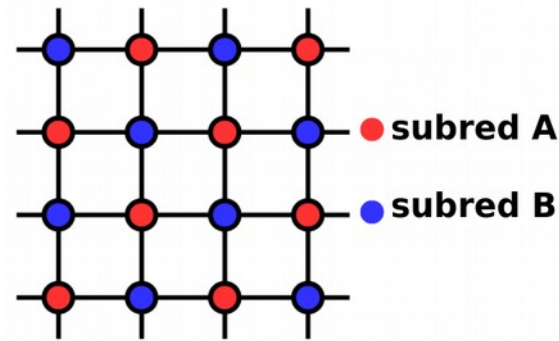
(i) Frustración geométrica

red cuadrada: espines vecinos pueden arreglarse de manera anti-paralela para minimizar la energía.

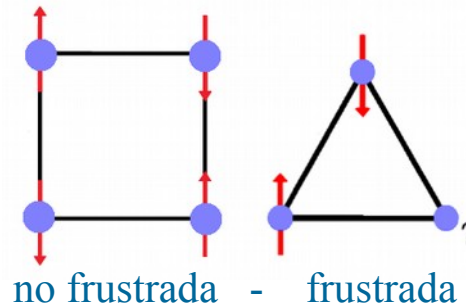
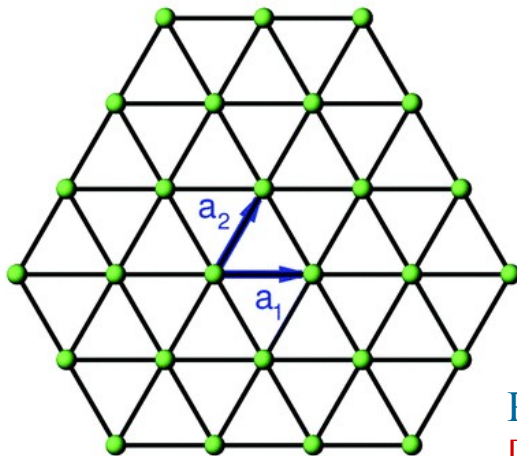


Neel

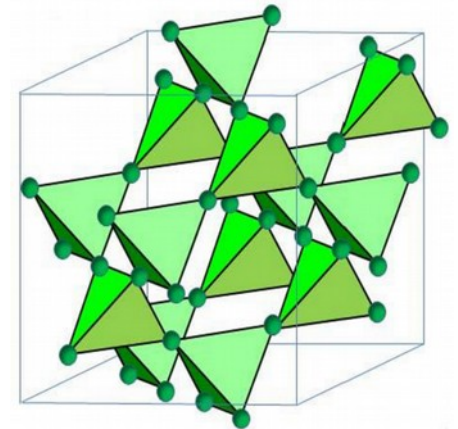
red bipartita



¿Qué ocurre en la red triangular?



Otro ejemplo: la red de pirocloro



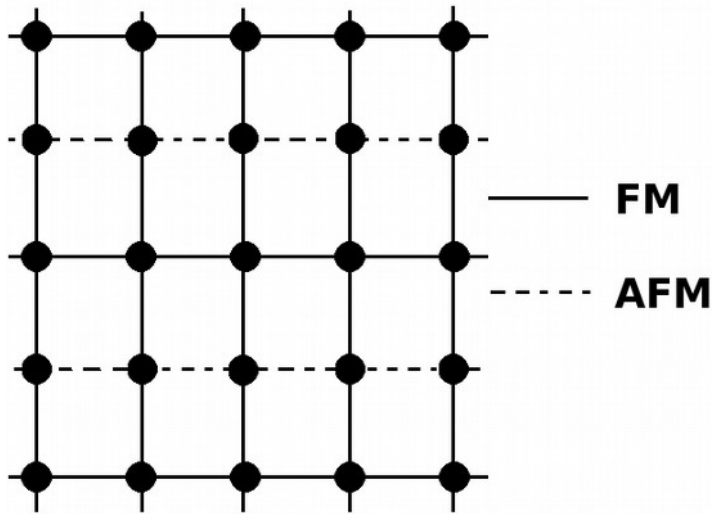
Red triangular: red tripartita

[Ejercicio: identificar las tres subredes A,B,C]

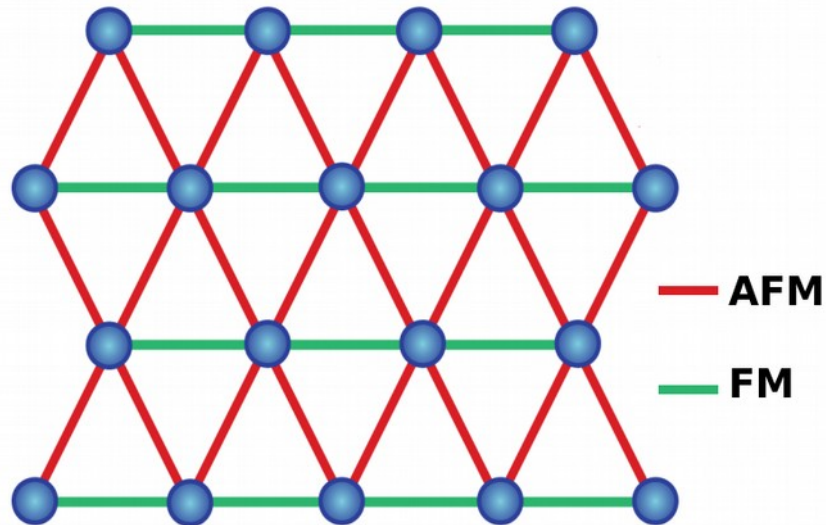
¿Qué es frustración magnética?

3

(ii) Mezcla de interacciones ferro- y antiferromagnéticas

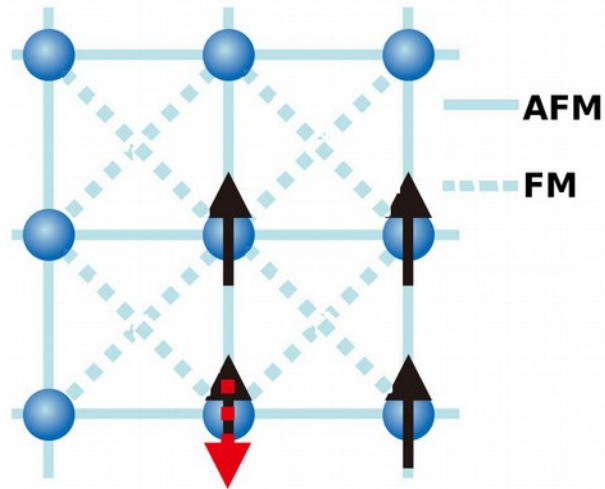


[Ejercicio: mostrar que no es posible un arreglo de espines que optimice todos los links]



[Ejercicio: encontrar una configuración que optimice la energía de cada bond]

(iii) Interacciones competitivas



[Ejercicio: mostrar que esta red es frustrada]

(iv) Otras interacciones: interacción de Dzyaloshinskii-Moriya

Interacción invariante SU(2) \longrightarrow Heisenberg $\hat{H} = J \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$ $J>0$: ferromagnética
 $J<0$: antiferromagnética

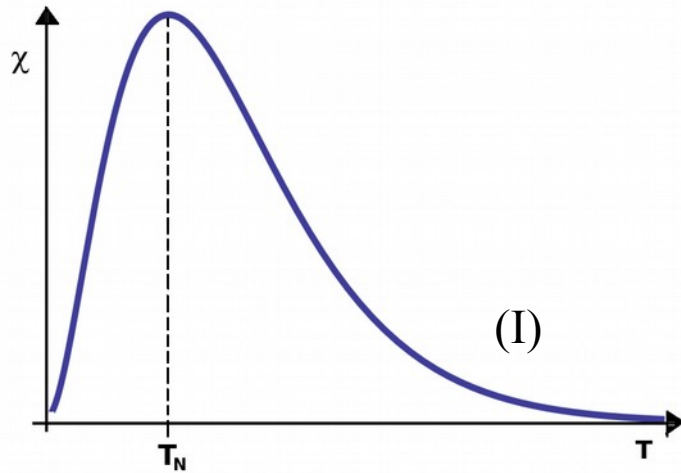
Cristales reales rompen isotropía en espacio real \longrightarrow

$$\hat{H} \rightarrow \hat{H} + \underbrace{\vec{D}_{i,j} \cdot (\vec{S}_i \times \vec{S}_j)}_{\text{Dzyaloshinskii-Moriya}}$$

Dzyaloshinskii-Moriya

¿Cómo cuantificar la frustración magnética?

(i) susceptibilidad magnética



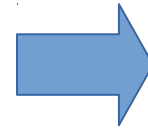
En la región (I) tenemos:

$$\chi = \frac{C}{T - \theta_{CW}}$$

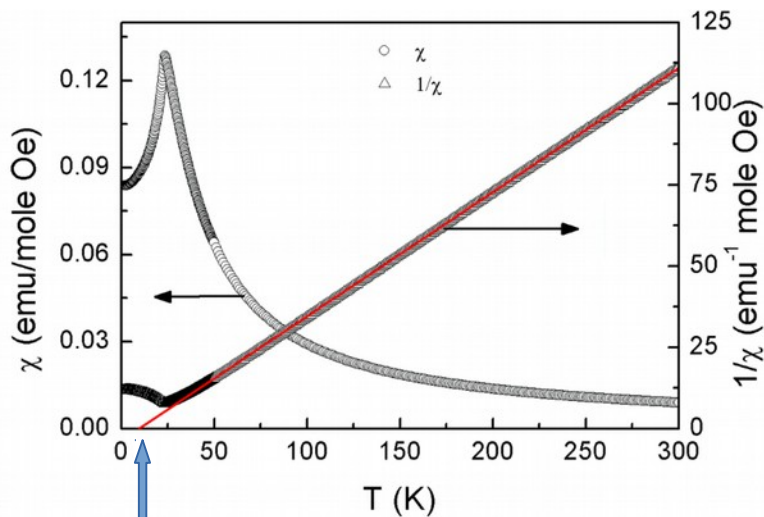
Campo medio da (con signo libre de J)

$$T_N = \theta_{CW}$$

θ_{CW}
Temperatura de
Curie-Weiss



Da una predicción de alta temperatura de cuál (FM o AFM) orden se establece



$\theta_{CW} > 0$ Interacciones ferromagnéticas

$\theta_{CW} < 0$ Interacciones antiferro-magnéticas

Si $T_N \ll |\theta_{CW}|$, es un efecto de frustración

Definición empírica: $f_1 = -\frac{\theta_{CW}}{T_N}$



$$f_1 > 1$$

implica frustración

θ_{CW}

¿Cómo cuantificar la frustración magnética?

6

(ii) factor de estructura (lo vemos más adelante)

$$\gamma(\vec{k}) = \sum_{\vec{a}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{a}} J(\vec{a})$$

\vec{a} : conjunto de vectores conectando vecinos

$J(\vec{a})$: acoplamiento conectando sitios vecinos

Medida de frustración: $f_2 = \frac{\gamma_{max}}{\gamma_{min}}$

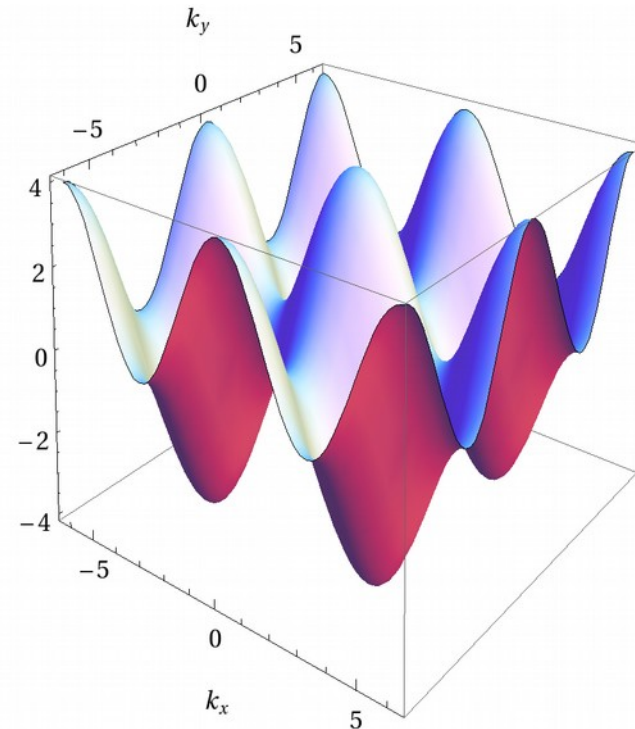
Ejemplo: red cuadrada $\{\vec{a}\} = (\pm a, 0), (0, \pm a)$

➔
$$\gamma(\vec{k}) = 2J(\cos(k_x a) + \cos(k_y a))$$

Máximo en $\vec{k} = (0, 0)$ $\gamma_{max} = 4J$

Mínimo en $\vec{k} = (\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})$ $\gamma_{min} = -4J$

➔ $f_2 = 1$ caso no frustrado




Dado el Hamiltoniano de Heisenberg $H = \sum_{\vec{r}, \vec{a}} J(\vec{a}) \vec{S}_{\vec{r}} \cdot \vec{S}_{\vec{r}+\vec{a}}$ con $|\vec{S}_{\vec{r}}|^2 = 1$

Encontrar la configuración de mínima energía: difícil por el vínculo “fuerte”

En el método de L-T se relaja el vínculo $\sum_{\vec{r}} |\vec{S}_{\vec{r}}|^2 = N$ vínculo “débil”

Procedimiento:

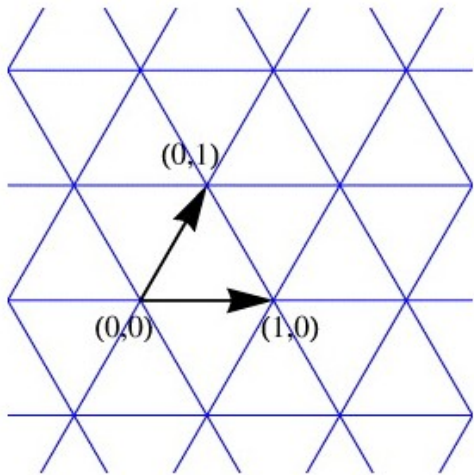
Transformar Fourier los espines $S_{\vec{r}}^{\alpha} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{r}} S_{\vec{k}}^{\alpha}$


$$H = \sum_{\vec{k}} \gamma(\vec{k}) \vec{S}_{\vec{k}} \cdot \vec{S}_{-\vec{k}} \quad \text{con} \quad \gamma(\vec{k}) = \sum_{\vec{a}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{a}} J(\vec{a})$$

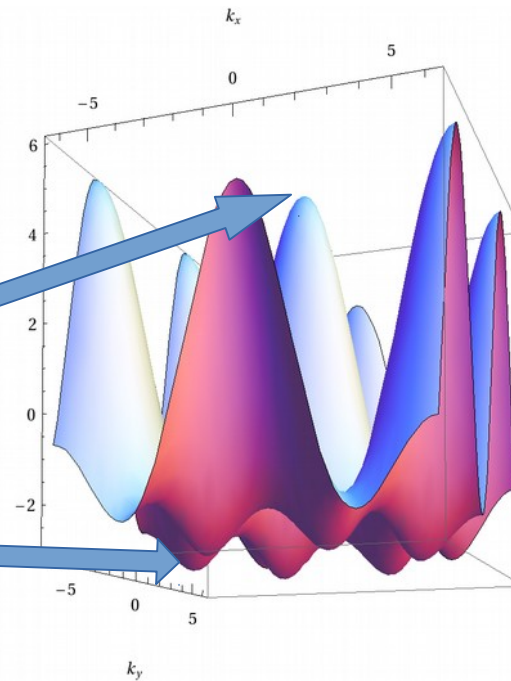
Si la red en cuestión no es de Bravais (ej: kagome, pirocloro) con n_0 sitios en celda unidad

$$H = \sum_{\vec{k}} \psi_{\vec{k}}^{\dagger} \cdot M(\vec{k}) \cdot \psi_{\vec{k}} \quad n_0 \text{ autovalores dan bandas } n_0 \text{ bandas}$$

Ejemplo 1: red triangular

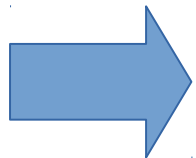


$$\gamma(\vec{k}) = 2[\cos(k_x) + \cos(k_x/2 + \sqrt{3}k_y/2) + \cos(k_x/2 - \sqrt{3}k_y/2)]$$



Máximo en $\vec{k} = (0,0)$

Mínimos (no equivalentes) en $\vec{k} = (\pm \frac{4\pi}{3}, 0)$

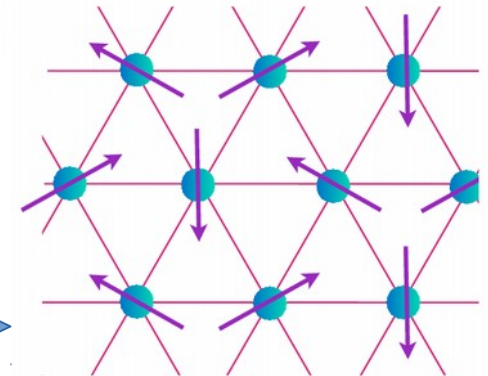


$$f_2 = \frac{\gamma_{max}}{|\gamma_{min}|} = \frac{4}{2} = 2 > 1$$

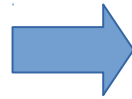
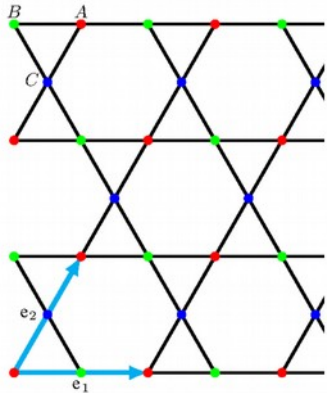
evidencia de frustración

En el Q mín

$$\vec{S}(\vec{r}) = (\cos(\vec{Q} \cdot \vec{r}), \sin(\vec{Q} \cdot \vec{r}), 0)$$



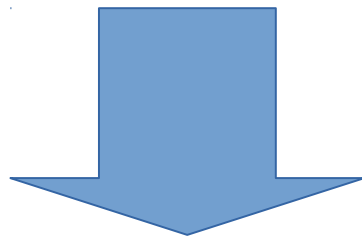
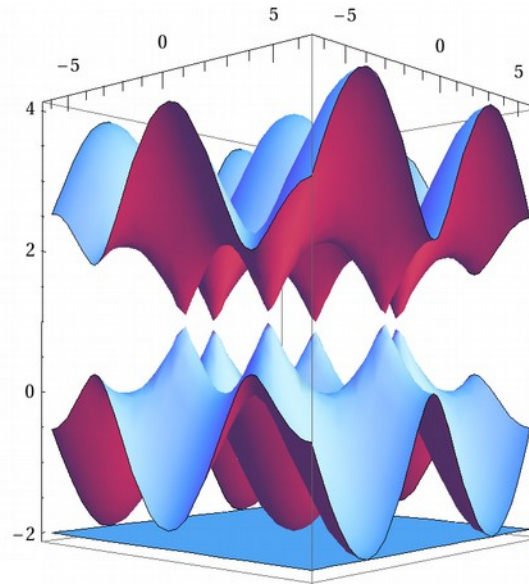
Ejemplo 2: red kagome (no Bravais)



$$M(\vec{k}) = \begin{bmatrix} 0 & 1 + \gamma_1(\vec{k}) & 1 + \gamma_2(\vec{k}) \\ 1 + \gamma_1(-\vec{k}) & 0 & 1 + \gamma_1(\vec{k})\gamma_2(-\vec{k}) \\ 1 + \gamma_2(-\vec{k}) & 1 + \gamma_1(-\vec{k})\gamma_2\vec{k} & 0 \end{bmatrix}$$

Bandas

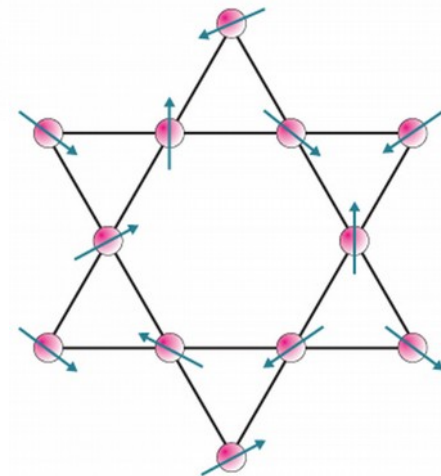
$$\lambda(\vec{k}) = \{-2J, 1 \pm \sqrt{3 + 2 \cos(k_x) + 2 \cos(k_x/2 + \sqrt{3}k_y/2) + 2 \cos(k_x/2 - \sqrt{3}k_y/2)}\}$$



$$f_2 = \frac{\gamma_{max}}{|\gamma_{min}|} = \frac{4}{2} = 2 > 1$$

evidencia de frustración

¿Orden?



En realidad kagome presenta degeneración macroscópica en el GS

¿Cómo estudiamos las fluctuaciones en un sistema interactuante?

Métodos (algunos):

Clásicos

Teorías efectivas-teorías de campos de baja energía

Fluctuaciones Gaussianas (a bajas temperaturas)

Langevin dynamics

Monte Carlo Metropolis

Monte Carlo Wang-Landau



Cuánticos

Diagonalización exacta (matrices de $O(2^N \times 2^N)$)

Ondas lineal (linear spin waves): Holstein-Primakoff


Bosones de Schwinger (campo medio)

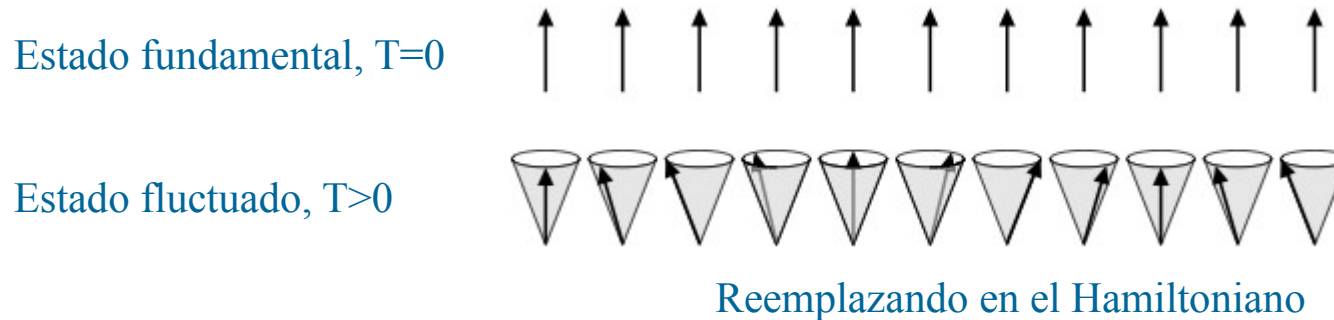
Monte Carlo Cuántico (sistemas no frustrados)




(i) Fluctuaciones Gaussianas

Teniendo el orden a $T=0$ (Luttinger-Tisza)

 Idea: incluir fluctuaciones (cuadráticas) respecto de la configuración de mínima energía



Idea muy resumida: $\vec{S}(\vec{r}) = \vec{S}^0(\vec{r}) + \delta\vec{S}(\vec{r})$  $H = H^0(\vec{r}) + \delta H$

Pasos: (a) proponer fluctuaciones en los ejes locales de las variables de espín, (b) transformar Fourier, (c) diagonalización de la forma cuadrática.

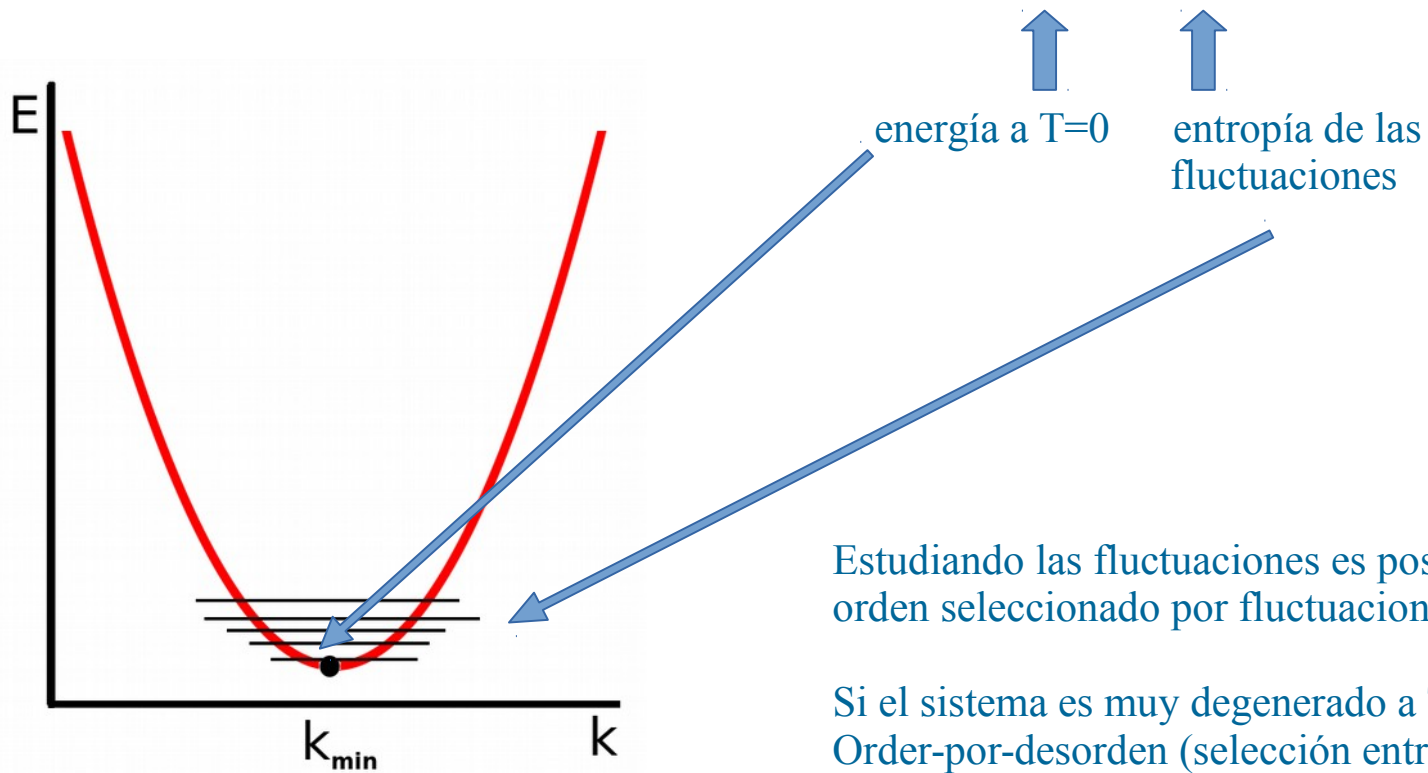
Resultado: $H = E_0 + \sum_{\vec{k}, \alpha} \lambda^\alpha(\vec{k}) |\xi^\alpha(\vec{k})|^2$ Hamiltoniano cuadrático:
fácil de integrar para
calcular función de
partición

$$\int_{-\infty}^{\infty} e^{-ax^2} dx = \sqrt{\frac{\pi}{a}}$$

Finalmente: $F = E_0 - T S$

(i) Fluctuaciones Gaussianas

Finalmente integrando las fluctuaciones se obtiene: $F = E_0 - T S$




Estudiando las fluctuaciones es posible determinar el orden seleccionado por fluctuaciones térmicas

Si el sistema es muy degenerado a T=0 puede haber Order-por-desorden (selección entrópica de estados)

(ii) Simulaciones de MC (Metropolis)

Sistema de muchos cuerpos (interactuantes)  espacio de fases muy grande

Ej1: espines clásico 3D (vectores)  dos ángulos por sitio (θ_i, ϕ_i) (variables continuas)

Ej2: espines de Ising  $\sigma_i = \pm 1$, para N sitios, espacio de fases $2^N \times 2^N$

Calcular valores medios implica “recorrer” todos los microestados (configuraciones) del sistema

$$\langle O(x) \rangle_T = \frac{1}{Z} \int e^{-\beta H(x)} O(x) dx$$

x : vector asociado a una configuración del espacio

Pregunta: ¿Cómo hacer la integral sin conocer todas las configuraciones?

Respuesta: Incluir en el promedio aquellas configuraciones con peso (probabilidad) no nulo

Algoritmo de Metropolis: recorrer el espacio de fases incluyendo sólo estados con probabilidad no nula dada por $P(x) = e^{-\beta H(x)}$

Pasos:

Iniciar el sistema en una dada configuración (random) x_i

Mover una de las partículas y generamos una nueva configuración x_{i+1}

Calcular la diferencia de energía $\Delta E = E(x_{i+1}) - E(x_i)$

Evaluamos la probabilidad de transición $v(x_i, x_{i+1}) = \min(1, e^{-\beta \Delta E})$

Si $\Delta E < 0$ siempre se acepta la nueva configuración

Si $\Delta E > 0$ se acepta con probabilidad $P = e^{-\beta \Delta E}$

Ventajas (algunas):

Sistemas ordenados, desordenados

Cálculo de cantidades en amplio rango de temperaturas

Amplia variedad de modelos e interacciones

.
. .
.

Hasta ahora espines clásicos (vectores)

Pero no lo son realmente, las componentes no conmutan $[S_i^a, S_j^b] = i\hbar\delta_{ij}\epsilon^{abc}S_i^c$

¿qué consecuencias tiene esto? ¿cómo tratarlas?

IDEA: agregar fluctuaciones cuánticas de manera controlada a partir de la solución clásica.

Ejemplo: Red triangular 2D (sólo un poco) (para detalles ver por ej PRB 79, 1444416 (2009))

Pasos del cálculo:

(i) Estado inicial: orden 120° (T=0, aproximación de Luttinger-Tisza)

(ii) Escribir el estado de 120° como una versión rotada del estado ferromagnético

[Pregunta: ¿Por qué se pueden rotar los espines libremente?]

$$\text{orden de } 120^\circ \longrightarrow \vec{S}_i = R_i \cdot \vec{S}_{ref} \longleftarrow \text{Estado ferro } \vec{S}_{ref} = \{1, 0, 0\}$$

(iii) aplicar la rotación al Hamiltoniano de Heisenberg

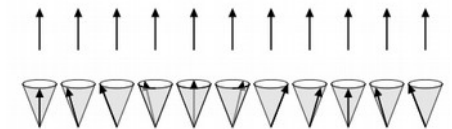
(iv) Expandir los operadores de espín alrededor del estado de referencia utilizando la transformación de Holstein-Promakoff

$$S_i^x = S - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$$

$$S_i^- = (S_i^y - iS_i^z) = \hat{a}_i \sqrt{2S - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i} \simeq \sqrt{2S} \hat{a}_i$$

$$S_i^+ = (S_i^y + iS_i^z) = \sqrt{2S - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i} \hat{a}_i^\dagger \simeq \sqrt{2S} \hat{a}_i^\dagger$$

misma idea que para las fluctuaciones Gaussianas



donde $\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i$ son operadores bosónicos $[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}$

$H = E_0 + H'$ ← Hamiltoniano cuadrático en bosones

(v) Transformar Fourier $\hat{a}_i = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k}\cdot\vec{r}_i} \hat{a}_{\vec{k}}$

(vi) Transformación de Bogoliubov

RESULTADO: $H = -\frac{3JS(S+1)N}{2} + \sum_{\vec{k}} \epsilon(\vec{k}) (\hat{b}_{\vec{k}}^\dagger \hat{b}_{\vec{k}} + 1/2)$

Donde el espectro de los magnones es $\epsilon(\vec{k}) = 3JS \sqrt{(1 - \gamma_{\vec{k}})(1 + 2\gamma_{\vec{k}})}$

¿Cuál es el efecto de las fluctuaciones en la configuración?

Calculamos el valor medio del espín $\langle S_i^x \rangle = S - \langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rangle$

Resultado: $\langle S_i^x \rangle = S - 0,26130032$

Para espín $S=1/2$, este resultado representa una reducción en un 20%

What is a Skyrmion?

16



Tony Skyrme

Nucl. Phys. 31 556 (1962)

History:

- * 1962, **T.H.R. Skyrme** (particle-like objects: baryons in a spinless pion medium)
- * 1975, **Belavin-Polyakov** (Baby) Skyrmions in the Non-linear sigma model

Metastable states of two-dimensional isotropic ferromagnets

A. A. Belavin and A. M. Polyakov

Gor'kii State University

(Submitted October 4, 1975)

Pis'ma Zh. Eksp. Teor. Fiz. 22, No. 10, 503-506 (20 November 1975)

Metastable inhomogeneous states, which can produce a finite correlation length at arbitrarily low temperatures, are found for a Heisenberg ferromagnet.

$$H_H = -\frac{JS^2}{2} \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j,$$

$$\sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{n}_i \cdot \mathbf{n}_j \xrightarrow{\text{NLSM}} \int d^2x [\nabla \mathbf{n}(\mathbf{x})]^2 \quad Q = \int_{\mathbb{R}} \frac{dx}{4\pi} q(\mathbf{x}, t)$$

$q(\mathbf{x}, t) = \mathbf{n} \cdot (\partial_x \mathbf{n} \times \partial_y \mathbf{n})$

Topological charge

- A skyrmion is a local, stable, soliton - like solution of a nonlinear field theory
- These particles persist due to topological-protection, which is characterised by a **topological integer** (winding number=topological charge).

These states may have lower energy if inversion symmetry is broken

Two dimensional (baby) skyrmion

17

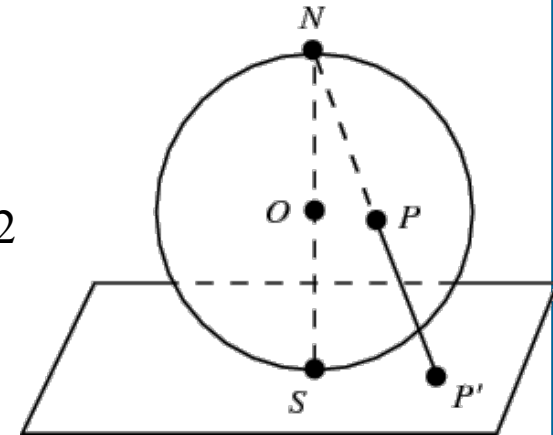
In two dimensions we have $\mathbb{R}_2 \rightarrow S_2$ and spin variables span S_2

Magnetic Skyrmions belong the homotopy group:

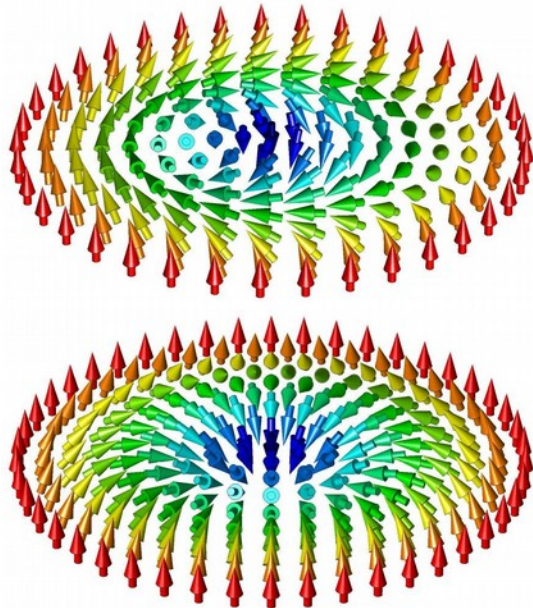
Spins with fixed length on a 2-dimensional plane

Order parameter (3D vector) space = surface of a sphere (two angles) = S^2

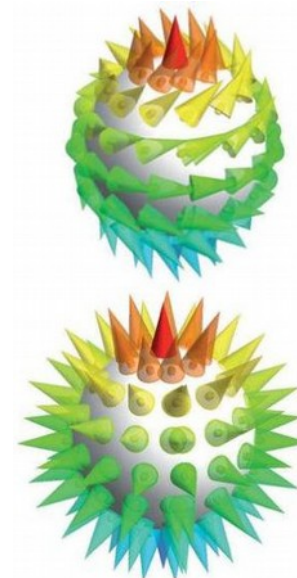
i.e. we care about $\Pi_2(S_2) = \mathbb{Z}$



Real Space



Same topological number



$Q=1$

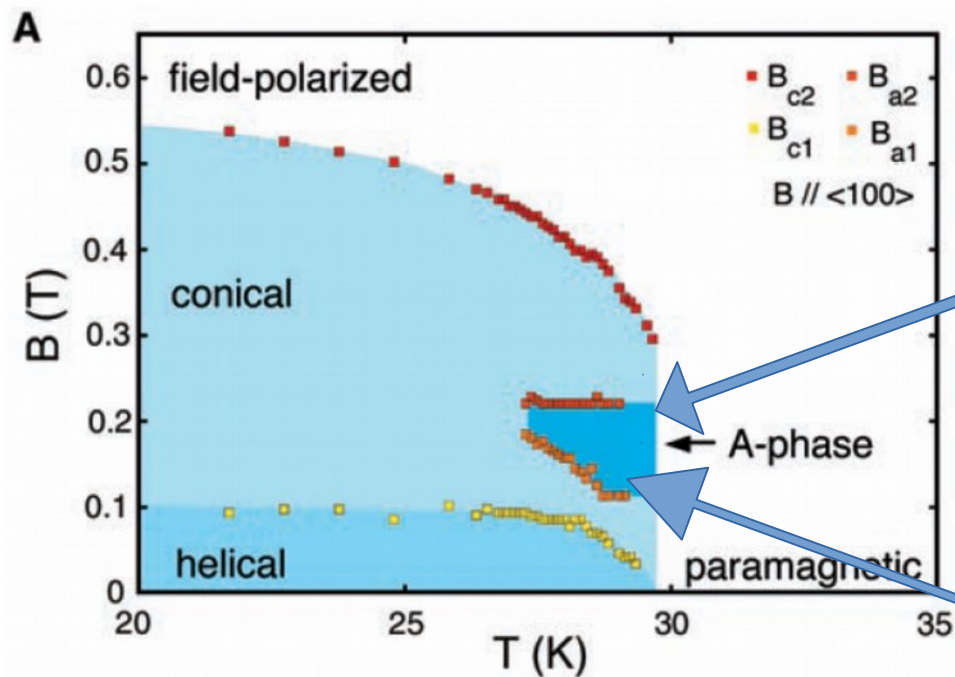
Important property: fields of different sectors cannot be continuously transformed to another $Q \neq 1$

Discovery of skyrmion lattice in MnSi

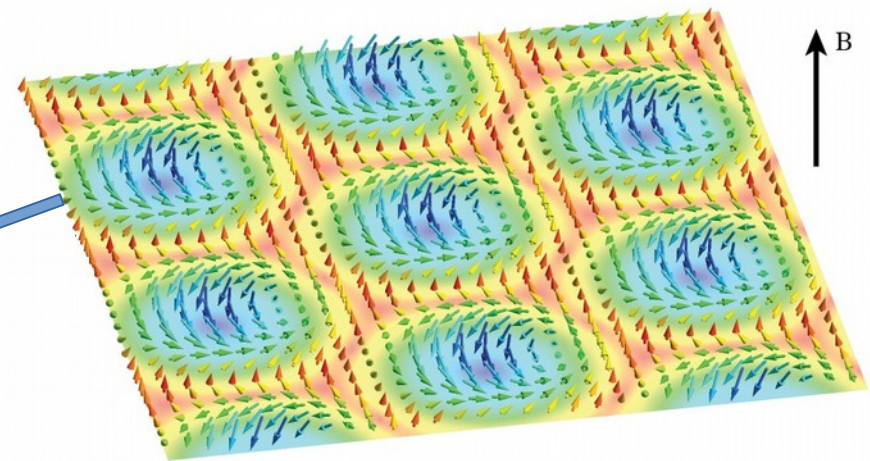
18

- 1989 Bogdanov-Yablonskii Predicted a Skyrmion lattice in a 2D ferromagnet
- 2009 Mühlbauer et al Observed it in MnSi

Phase diagram

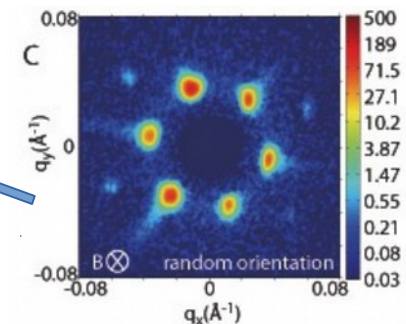


Skyrmion spin lattice (A-phase) driven by thermal fluctuations



MF theory: Landau free energy

$$F[\mathbf{M}] = \int d^2r [r_0 \mathbf{M}^2 + J(\nabla \mathbf{M})^2] + 2D\mathbf{M} \cdot (\nabla \times \mathbf{M}) + b\mathbf{M}^4 \quad \mathbf{B} \cdot \mathbf{M}$$

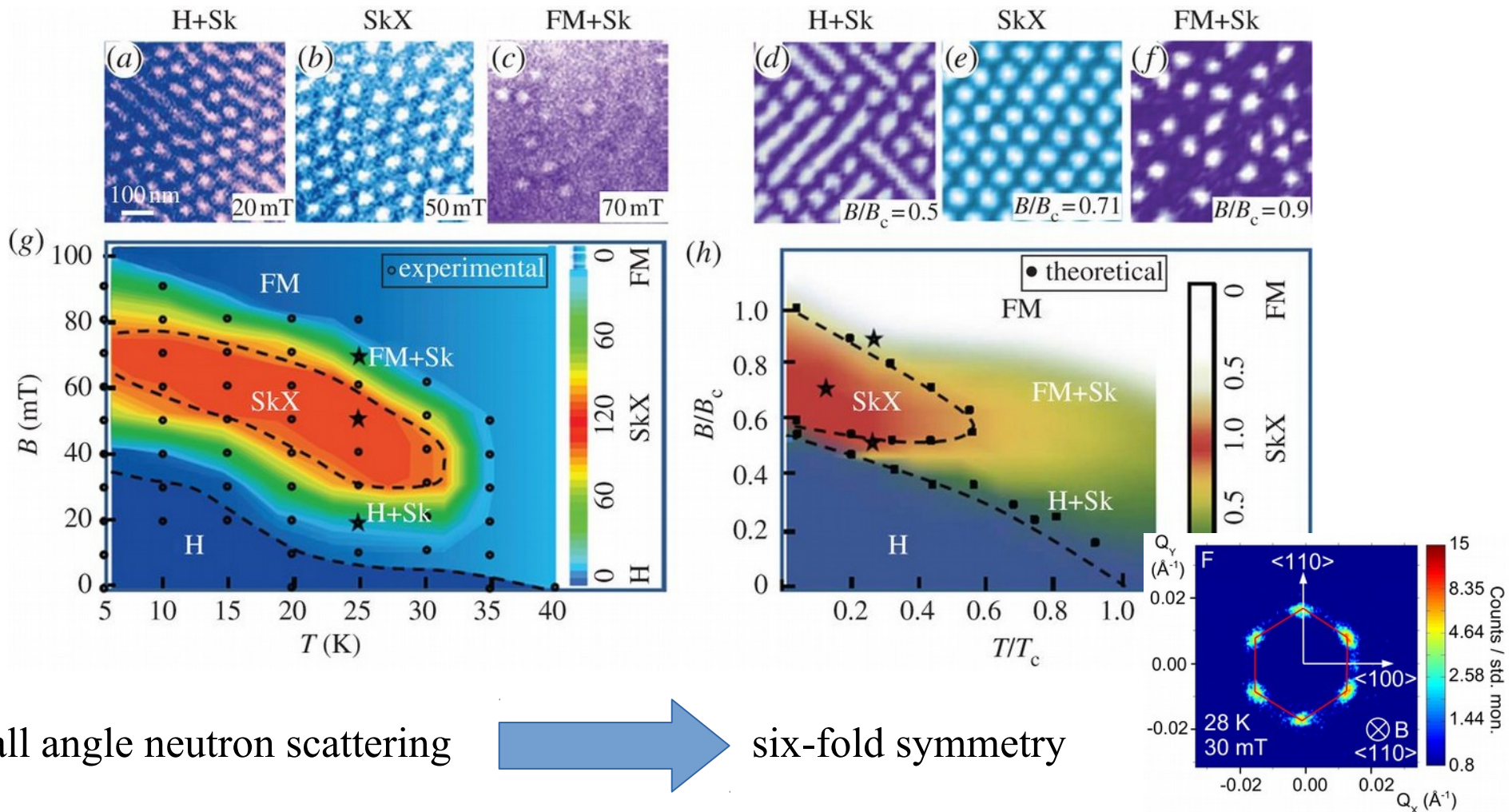


Discovery of skyrmion lattice in MnSi

19

Another case: $\text{Fe}_{1-x}\text{Co}_x\text{Si}$, theory and experiment

W. Münzer et al. PRB (2010) $x = 0.2, 0.25, \dots$



Antiferromagnetic triangular lattice

21

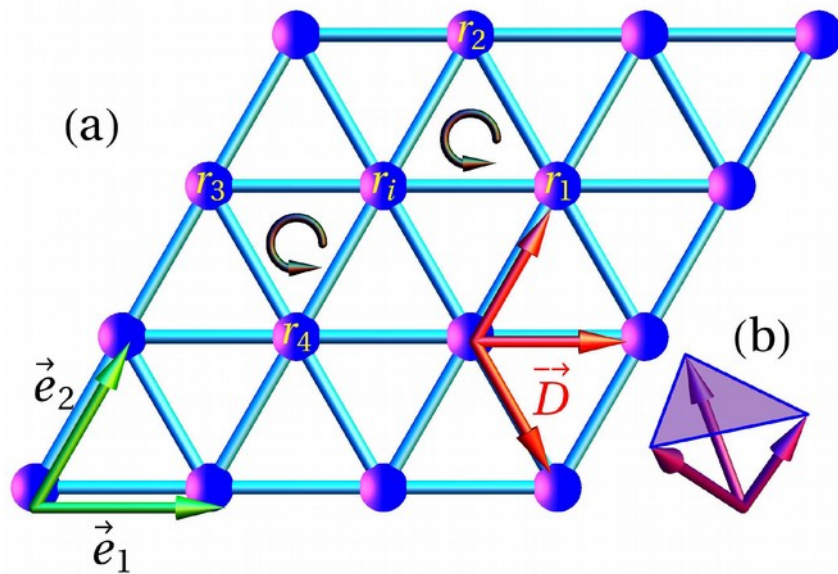
Possible new state: AF-SkX

Simple model including:
frustration + low dimensionality
+ anisotropic interaction

$$H_S = J \sum_{\langle \mathbf{r}, \mathbf{r}' \rangle} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}'} + \kappa \delta \hat{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{S}_{\mathbf{r}} \times \mathbf{S}_{\mathbf{r}'}) - h \sum_{\mathbf{r}} S_{\mathbf{r}}^z$$

$$\text{with } \delta \hat{\mathbf{r}} = (\mathbf{r} - \mathbf{r}') / |\mathbf{r} - \mathbf{r}'|$$

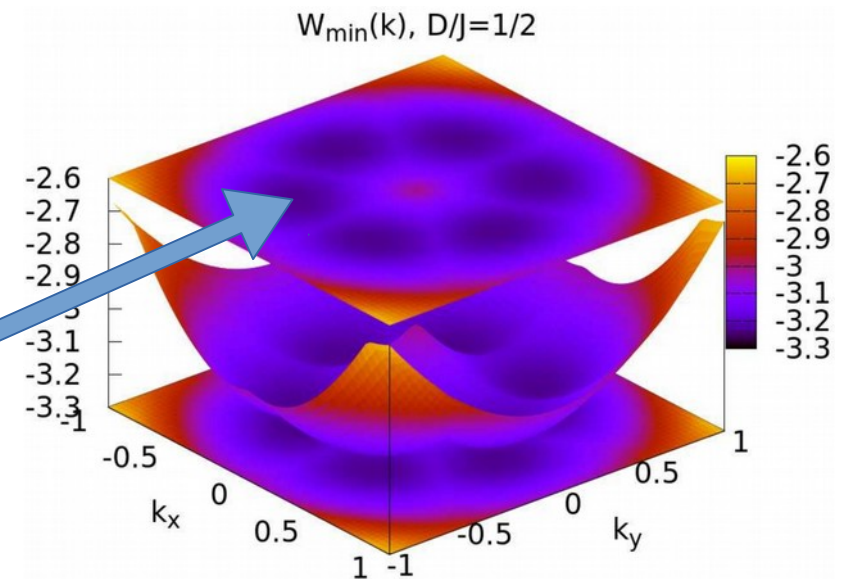
The lattice



six-fold symmetry

First: magnon dispersion at $T=0$ and $h=0$

→ Luttinger- Tisza approximation

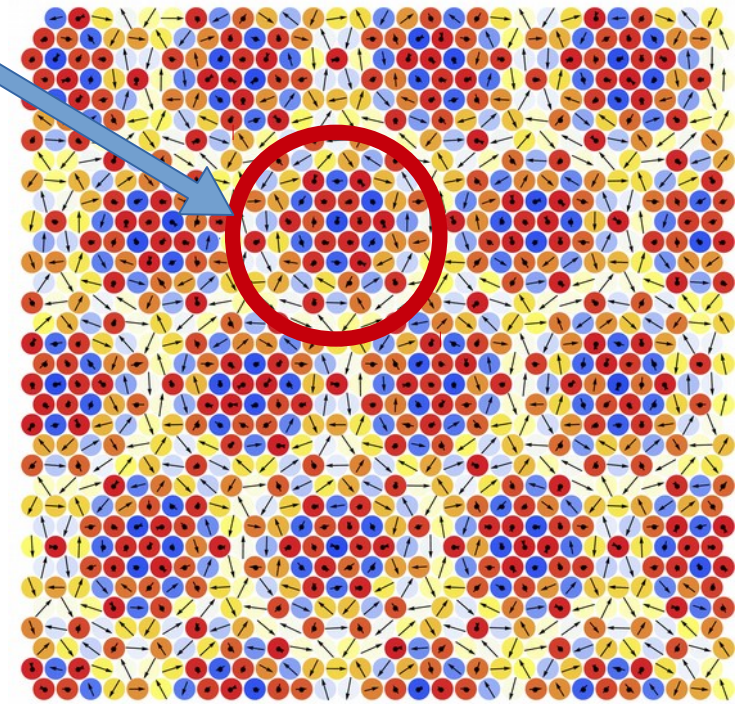
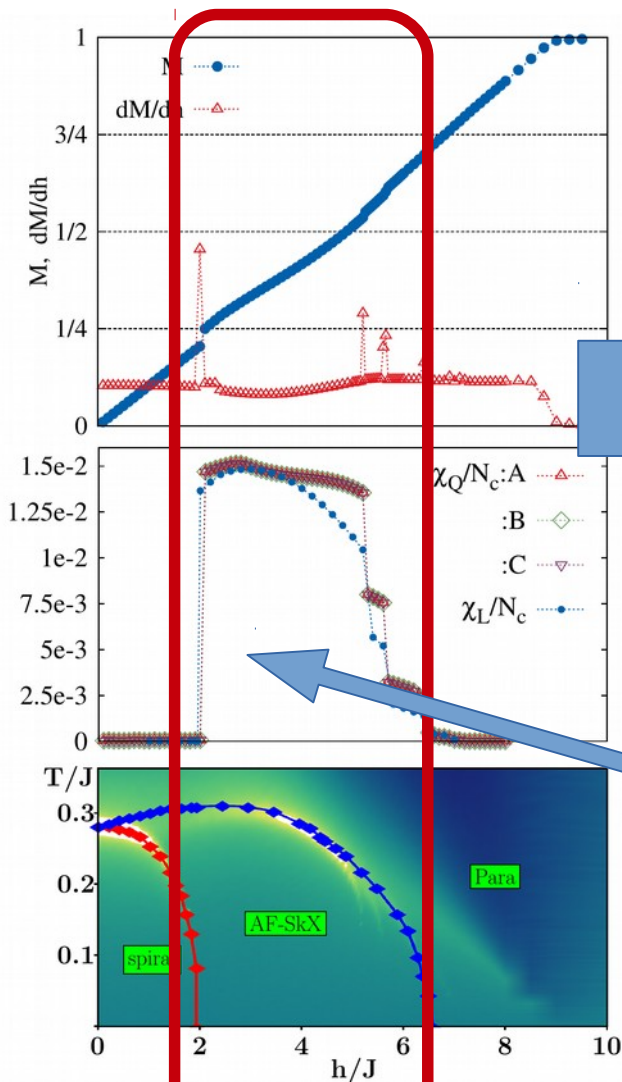


Results at finite low temperature

22

MC simulations

quite similar to skyrmion... or not?



Topological order parameter

Scalar chirality

$$C_Q = \frac{1}{4\pi} \sum_{\mathbf{r}} \mathbf{S}_{\mathbf{r}} \cdot (\mathbf{S}_{\mathbf{r}'} \times \mathbf{S}_{\mathbf{r}''})$$

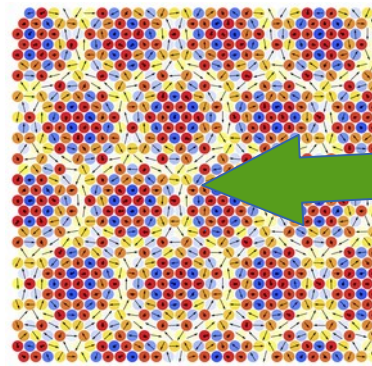
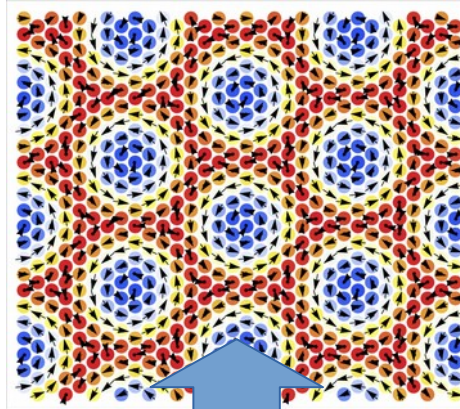
constant in a wide range of magnetic field ... very stable skyrmions !!!

Skyrmion lattices

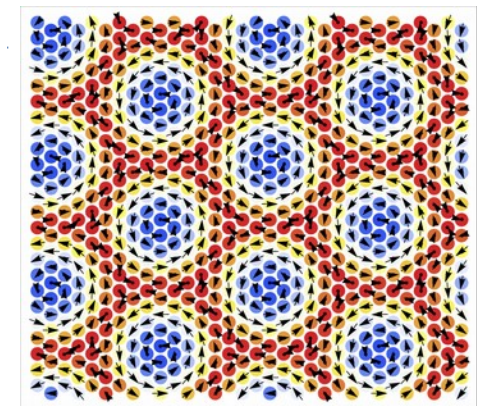
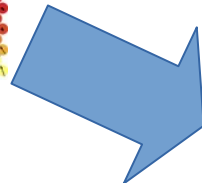
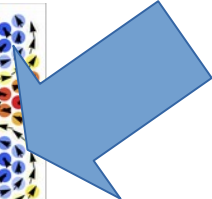
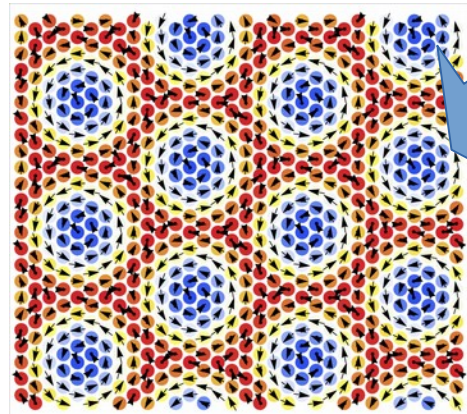
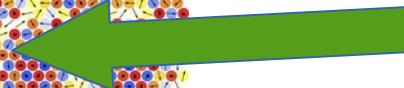
23

Looked by sublattice

Three interpenetrated
skyrmion's crystal



Hidden order

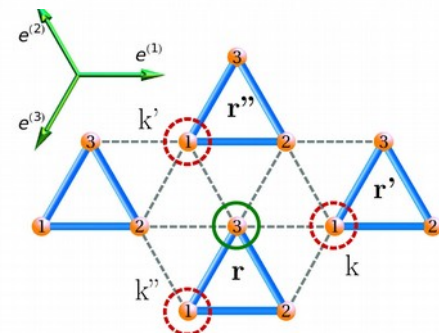
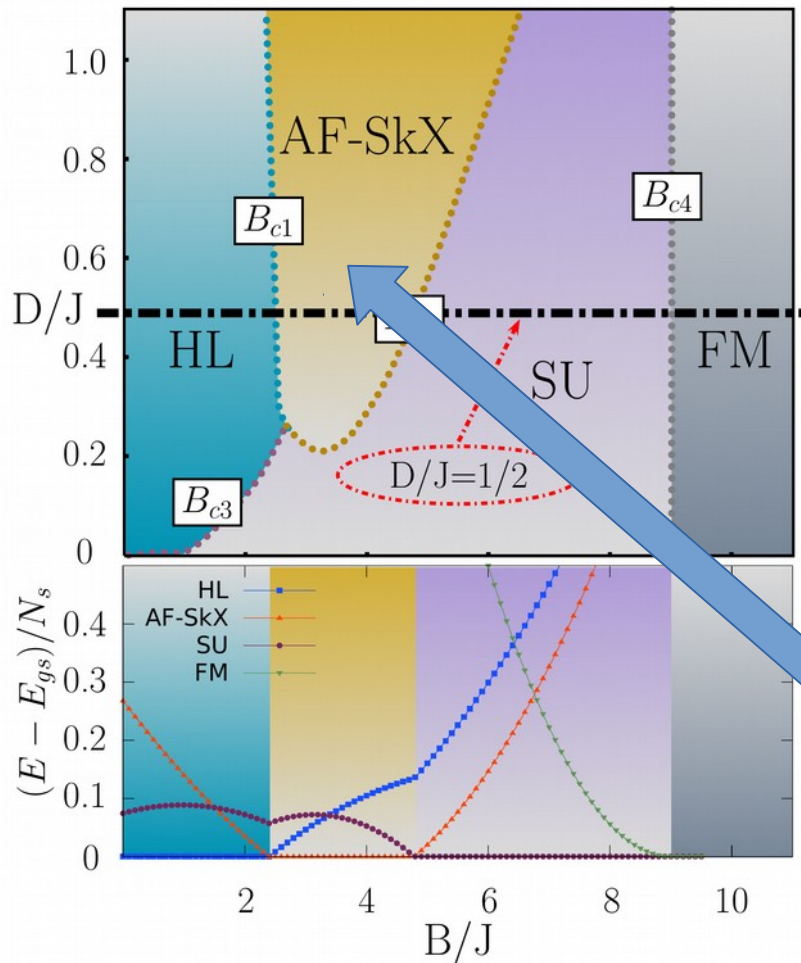


Low energy effective model

could serve as a first step to analyze the co localized spins and conduction-electron spin

We study the continuum limit of microscopic model

$$\Rightarrow \mathbf{S}_j^k = \mathbf{S}_j + a \left[\mathbf{e}_{ij}^{(k)} \cdot \nabla \right] \mathbf{S}_j + \frac{a^2}{2} \left[\mathbf{e}_{ij}^{(k)} \cdot \nabla \right]^2 \mathbf{S}_j + \mathcal{O}(a^3)$$



$$H = \sum_{i=1}^3 H_i + H_M$$

$$H_i = a^2 \frac{J}{8} \mathbf{S}_i \nabla^2 \mathbf{S}_i + a \frac{D}{4} \mathbf{S}_i \cdot (\nabla \times \mathbf{S}_i) + \frac{1}{3} \mathbf{S}_i$$

$$H_M = \frac{J}{2} (\mathbf{M}^2 - 3), \quad \mathbf{M} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2 + \mathbf{S}_3$$

Effective model consists of three independent Hamiltonian densities (H_i) similar to those found in the context of ferromagnetic systems.

$$Q_{\text{top}} = \frac{1}{4\pi} \int_{u.c.} \mathbf{n} \cdot (\partial_x \mathbf{n} \times \partial_y \mathbf{n}) d^2 r$$

Muchas gracias!