

Kiedy i dlaczego momenty magnetyczne są sfrustrowane?

Konflikt w kryształach



Przykładem dwuwymiarowej sieci z frustracją jest sieć kagome, spotykana na posadzkach średniowiecznych katedr, jak w San Giusto w Triescie



ANDRZEJ M. OLEŚ

Wydział Fizyki, Astronomii i Informatyki Stosowanej
Uniwersytet Jagielloński, Kraków
a.m.oles@uj.edu.pl
Prof. dr hab. Andrzej M. Oleś
jest kierownikiem Zakładu Kwantowej Teorii Wielu Ciał.

Brak możliwości zrealizowania własnych planów prowadzi u człowieka do frustracji. Czy podobne zjawisko może wystąpić w fizyce? Okazuje się, że tak

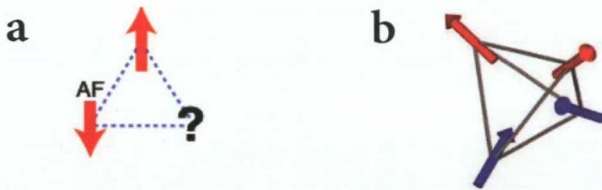
Ten problem dotyczy układów oddziałujących momentów magnetycznych. W pewnych sytuacjach nie udaje się ich ustawić tak, by wszystkie pary realizowały stany korzystne energetycznie. Wówczas mówimy o frustracji oddziaływań, a układ nazywamy układem z frustracją lub układem sfrustrowanym. Zjawiska występujące w układach magnetycznych z konfliktem, czyli frustracją oddziaływań, należą do bardzo intensywnie badanych i nie do końca zrozumianych problemów współczesnej fizyki materii skondensowanej. Zamiast o momentach magnetycznych fizyki

mówią o spinach, które odgrywają rolę analogiczną do igły magnesu, z tą jednak różnicą, że dopuszczamy tylko dwa położenia: w górę (*up*) i w dół (*down*). Tak jest w modelu klasycznym, tzw. modelu Isinga, gdzie dwa stany spinowe możemy oznaczać strzałką w górę i w dół. Zasadniczym problemem w kryształach magnetycznych z frustracją jest występowanie uporządkowania spinów lub jego brak.

Stresująca geometria

Najprostszym układem spinowym z frustracją są trzy spiny oddziałujące antyferromagnetycznie wzdłuż boków trójkąta, czyli w sposób preferujący ich przeciwne ustawienia dla każdej sąsiedniej pary. Jeśli oddziaływanie pomiędzy spinami jest antyferromagnetyczne, to w idealnej sytuacji (przy braku frustracji) energia powinna ulec obniżeniu po uwzględnieniu każdej kolejnej pary przeciwnie skierowanych do siebie spinów. Tak jest dla czterech spinów ustawionych na wierzchołkach kwadratu i oddziałujących wzdłuż jego boków, zwanych wiązaniami. W przypadku trójkąta sytuacja jest inna – stan realizujący minimum energii dla każdej pary nie istnieje i otrzymana energia dla układu trzech spinów Isinga jest taka sama jak energia jednej pary, ponieważ defektu w postaci

Kiedy i dlaczego momenty magnetyczne są sfrustrowane?

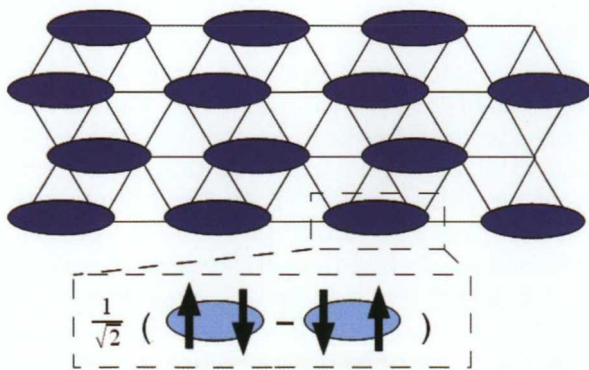


Sfrustrowane spiny oddziałujące antyferromagnetycznie na trójkącie (a).
Ustawienie spinów na tetraedrze w lodzie spinowym – stan *two-in-two-out* (b)

pary równoległych do siebie spinów nie można usunąć. Taki typ frustracji wynikającej z geometrii nosi nazwę frustracji geometrycznej. Ważną cechą charakterystyczną układów z frustracją jest duża liczba stanów o najniższej energii, czyli duża degeneracja stanu podstawowego – dla trójkąta wynosi ona sześć.

W układach opisywanych przez teorię kwantową omówienie takich stanów nie wystarcza, ponieważ spiny podlegają procesowi tzw. wymiany i mogą zamieniać się miejscami. Proces ten prowadzi do obniżenia energii i dlatego dopiero różnica dwóch konfiguracji, wyjściowej i otrzymanej z niej po przestawieniu spinów, jest stanem podstawowym zwanym singletem, który realizuje się dla pary spinów. Znak minus jest istotny i jest konsekwencją symetrii. Również w takim przypadku układ trzech spinów z oddziaływaniem antyferromagnetycznym na trójkącie jest układem sfrustrowanym.

Trójkąty ustawione obok siebie i stykające się wierzchołkami tworzą sieć trójkątną. Innym przykładem dwuwymiarowej sieci z frustracją jest sieć kagome, spotykana na posadzkach średniowiecznych katedr, jak w San Giusto w Trieście. Jeśli spiny kwantowe oddziałują antyferromagnetycznie, takie układy spinów są sfrustrowane, podobnie jak trzy spiny na trójkącie. Powstaje wówczas pytanie, jak powinien wyglądać stan o najniższej energii dla spinów oddziałujących antyferromagnetycznie na sieci trójkątnej. Niestety, dla układów spinów kwantowych w dwóch wymiarach nie jest możliwe podanie ścisłej odpowiedzi na to pytanie, ponieważ rozwiązania ścisłe nie są znane. Konieczne jest stosowanie stanów przybliżonych, które mogą stanowić



Stan uporządkowanych par spinów kwantowych (singletów) na sieci trójkątnej z oddziaływaniem antyferromagnetycznym. Singlet (*valence bond*) jest przedstawiony u dołu. Energia układu jest sumą energii wszystkich par

punkt wyjścia do poszukiwania bardziej realistycznego opisu po uwzględnieniu poprawek kwantowych, uwzględniających naturę uporządkowania lub jego brak dla takiego układu oddziałujących spinów.

Uporządkowane pary

Jednym z możliwych stanów o niskiej energii jest stan uporządkowanych par spinów kwantowych (dimerów) – stany takie noszą nazwę *valence bond*. Energia dla każdej pary tworzącej stan singletowy jest równa najniższej możliwej energii kwantowej dla pary spinów. Zbiór stanów równoważnych energetycznie pokazanemu na rysunku stanowi uporządkowanych w jednym kierunku singletów jest bardzo liczny, ponieważ np. stan dwóch sąsiadujących ze sobą i równoległych do siebie singletów na dwóch bokach rombu w sieci trójkątnej jest równoważny singletom znajdującym się na dwóch pozostałych bokach. Dlatego degeneracja stanu podstawowego jest duża. Oznacza to również, że brakuje porządku w układzie, ponieważ zachodzi konieczność rozważania jednocześnie wszystkich możliwych stanów.

Jeśli fluktuacje pomiędzy stanami o różnym uporządkowaniu dimerów na sieci prowadzą do obniżenia energii, mówimy o rezonansie takich stanów, czyli o stanie bez jakiegokolwiek porządku spinów bądź ich par. Taki stan, w którym spiny kwantowe fluktuują i każdy z możliwych stanów spinowych uczestniczy w tych fluktuacjach, nosi nazwę stanu cieczy spinowej (*spin liquid*). Fluktuacje stabilizujące takie stany prowadzą również do obniżenia degeneracji i często zdarza się, że stan cieczy spinowej jest niezdegenerowany, podobnie jak stan kwantowy pary dwóch spinów (singlet).

Lód spinowy

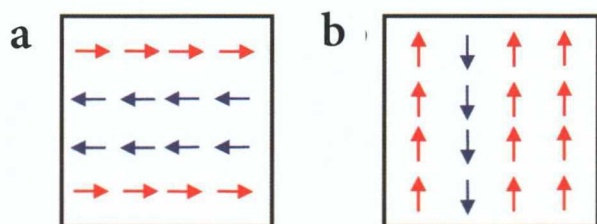
Skoro dla spinów sfrustrowanych możliwy jest stan cieczy spinowej, warto spytać, czy nie jest możliwy również stan krystaliczny, czyli lód spinowy? Stan lodu spinowego (*spin ice*) pojawia się rzeczywiście w trzech wymiarach, na sieci złożonej z tetraedrów stykających się wierzchołkami, tzw. sieci pirochloru realizowanej w tlenkach tytanu, jak np. w $Dy_2Ti_2O_7$. Jony magnetyczne dysprozu (Dy) znajdują się w wierzchołkach każdego tetraedru. Z uwagi na istniejący w tej sieci konflikt oddziaływać każdy tetraedr zawiera dwa spiny skierowane do jego wnętrza i dwa skierowane na zewnątrz, co prowadzi do wypadkowego spinu tetraedru. Te stany spinowe nie zamarzają w niskich temperaturach i entropia pozostaje skończona, co przypomina sytuację w kryształach lodu, gdy powstanie on z wody (H_2O). Linus Pauling zauważył, że w kryształach lodu istnieją wewnętrzne stopnie swobody, ponieważ dwa z sąsiadujących z każdym tlenem atomy wodoru są blisko tlenu, tworząc molekułę H_2O , a dwa pozostałe znajdują się dalej. Liczba takich nierównoważnych konfiguracji szybko rośnie ze wzrostem rozmiarów kryształu lodu i również dla lodu entropia w niskich temperaturach jest skończona.

Na przykładzie spinów oddziałujących antyferromagnetycznie na sieci trójkątnej zauważamy, że frustracja utrud-

nia powstawanie stanów magnetycznie uporządkowanych. Tymczasem na sieciach bez frustracji, w których pętle zamknięte mają parzystą liczbę wiązań, jak np. dla sieci kwadratowej w dwóch wymiarach, powstają zwykle stany uporządkowane: ferromagnetyczny albo antyferromagnetyczny. Zjawisko to nosi nazwę spontanicznego łamania symetrii.

Frustrujące konflikty

Frustracja w układzie magnetycznym może wystąpić nie tylko z powodu geometrii, jak pokazaliśmy powyżej na przykładach sieci trójkątnej i pirochloru, ale może również wynikać z natury oddziaływań. Konflikt oddziaływań w przypadku sieci kwadratowej prowadzi także do bardzo ciekawych stanów, realizowanych w materii skondensowanej oraz w układach zimnych atomów. Frustrację na sieci kwadratowej realizuje tzw. model *compass*, w którym oddziaływania są takie jak w modelu Isinga, ale dotyczą innych składowych spinu w zależności od kierunku wiązania: składowych x wzdłuż linii poziomych (wierszy) oraz składowych y wzdłuż linii pionowych (kolumn) w sieci kwadratowej.



Jednowymiarowy porządek spinów (strzałki) w ferromagnetycznym modelu *compass*, ze spinami ustawionymi: (a) wzdłuż wierszy w stanach left-right; lub (b) wzdłuż kolumn w stanach up-down. Zmiana kierunku wszystkich spinów wzdłuż (a) dowolnego wiersza lub (b) dowolnej kolumny prowadzi do stanów równoważnych o tej samej energii

Ta zależność oddziaływania od kierunku w sieci kwadratowej jest właśnie źródłem frustracji, występującej zarówno dla oddziaływań antyferromagnetycznych, jak i ferromagnetycznych, które preferują to samo ustawienie sąsiednich spinów. W takim układzie, upraszczając nieco rozumowanie, można ustawić spiny tylko wzdłuż wierszy lub kolumn w ramach całego układu, a zatem realizuje się jednowymiarowy stan uporządkowany – albo wszystkie spiny ustawiają się w lewo lub w prawo wzdłuż linii poziomych, albo w górę lub w dół wzdłuż linii pionowych. Błąd w takim stanie uporządkowanym może być łatwo eliminowany dzięki poprawnemu ustawieniu sąsiednich spinów, które zachowują informację o porządku. Dlatego stany takie mogą znaleźć zastosowanie w kwantowym przekazywaniu informacji. Istnieją już nawet konkretne propozycje realizacji urządzeń z chronionymi kubitami, wykorzystujących sieci złącz Josephsona, molekuly polarne lub jony pułapkowane w sieciach optycznych.

Cechą charakterystyczną układów sfrustrowanych jest łatwa zmiana typu uporządkowania spinów przez pole zewnętrzne lub dodatkowe oddziaływania. Przykładem tego

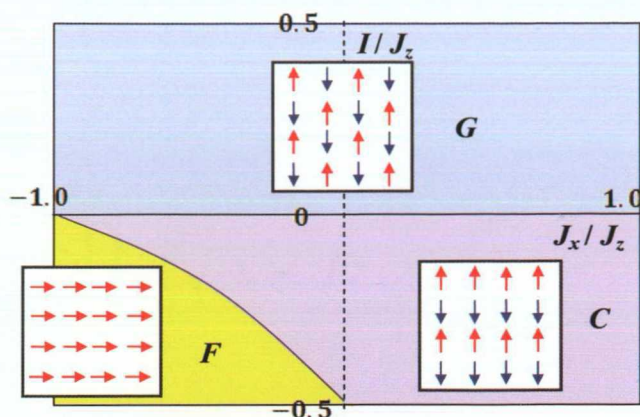


Diagram fazowy modelu *compass*-Heisenberga z oddziaływaniami Isinga J_x i $J_z > 0$ wzdłuż wierszy i kolumn sieci kwadratowej. Stany ferromagnetyczny F oraz antyferromagnetyczne G i C pokazane dla klastra 4×4 powstają w wyniku kwantowych oddziaływań Heisenberga I , które usuwają frustrację i niszczą jednowymiarowe stany uporządkowane otrzymane w modelu *compass*

jest właśnie model *compass*, w którym opisane wyżej zdegenerowane stany z uporządkowaniem jednowymiarowym wzdłuż jednego z kierunków w sieci kwadratowej są zastępowane przez porządek dwuwymiarowy, jeśli uwzględnić dodatkowo oddziaływania kwantowe Heisenberga (stąd nazwa *compass*-Heisenberg). Oddziaływania kwantowe znoszą degenerację i prowadzą do spontanicznego złamania symetrii w całej sieci dwuwymiarowej. W tej sytuacji stany uporządkowane mogą być bardzo różne. Tajemnicą tych układów jest jednak to, że jednowymiarowy porządek spinów preferowany przez sfrustrowane oddziaływania przeżywa w stanach wzbudzonych o niskiej energii w układach nanoskopowych i może być nadal wykorzystany do kwantowego przekazu informacji.

Innym przykładem układu spinów sfrustrowanych na sieci o parzystej liczbie wiązań dla każdej z zamkniętych pętli jest sieć heksagonalna, o wyglądzie plastra miodu. W tym przypadku bardzo ciekawe właściwości ma uogólnienie modelu *compass* (tzw. model Kitaeva), w którym na wiązaniach w trzech różnych kierunkach oddziałują ze sobą trzy kwantowe składowe spinu, po jednej na każdym z nich. Model ten można rozwiązać ściśle i jego stan podstawowy to również stan cieczy spinowej.

Podsumowując, konflikt oddziaływań w układach spinowych prowadzi do nieporządku i silnej degeneracji stanów spinowych. Takie stany powstają, gdy oddziaływania będące w konflikcie nawzajem się równoważą i są niszczone. Gdy konflikt ten znika – wówczas inne oddziaływania, nawet słabe, są istotne i generują stany uporządkowane. Dlatego frustracja w układach spinów może prowadzić do jakościowo nowych rozwiązań, podobnie jak człowiek po przejściu dużego stresu i związanej z nim frustracji zyskuje perspektywę i doświadczenia, które zwykle prowadzą do bardzo wartościowych nowych idei twórczego działania. ■

Chcesz wiedzieć więcej?

- Introduction to Frustrated Magnetism* (2011), eds. Lacroix C., Mendels P., and Mila F. Springer, Heidelberg.
- Balents L. (2010), *Spin Liquids in Frustrated Magnets*, *Nature*, London 464, 199-208.
- Trousseau F., Oleś A.M. and Horsch P. (2012), *Magnetic Properties of Nanoscale Compass-Heisenberg Planar Clusters*, *Phys. Rev. B* 86, 134412/1-22.