

Fragmentation quantique dans les systèmes magnétiques frustrés

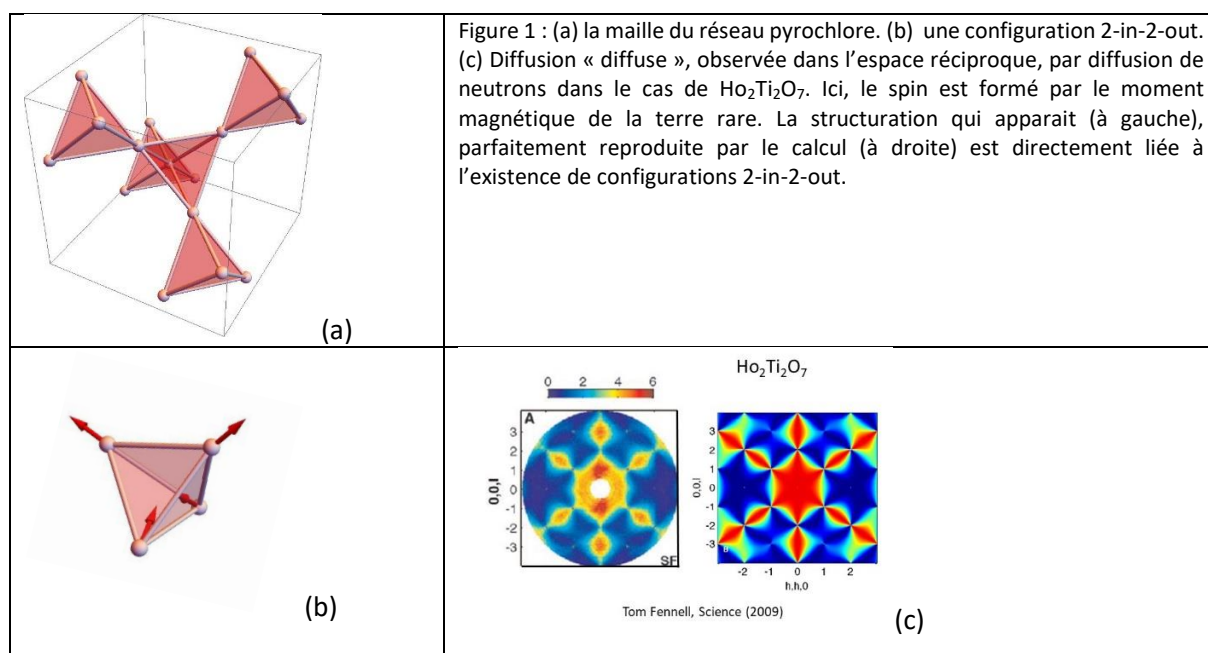
Recherche fondamentale en Physique, Chimie et Instrumentation associée

SIMULATIONS, MODELISATIONS, TRAITEMENT DE DONNEES ET IA A L'ERE DE L'EXASCALE

TECHNOLOGIES QUANTIQUES : DU QUBIT AU CALCULATEUR HYBRIDE

Les dernières décennies de recherches dans le domaine de la matière condensée ont vu l'émergence d'une physique riche et nouvelle, fondée sur la notion de « liquides de spin ». L'intérêt pour ces nouveaux états de la matière provient du fait qu'ils présentent une intrication quantique à grande échelle, une propriété par ailleurs fondamentale pour le calcul quantique. De par sa nature qui exploite directement cette notion d'intrication, un ordinateur quantique permettrait des approches révolutionnaires par rapport aux ordinateurs classiques, pour résoudre rapidement certaines classes de problèmes. L'étude des liquides de spin rejoint donc de très forts enjeux technologiques et le but de ce projet de thèse est de participer à cet effort de recherche fondamentale.

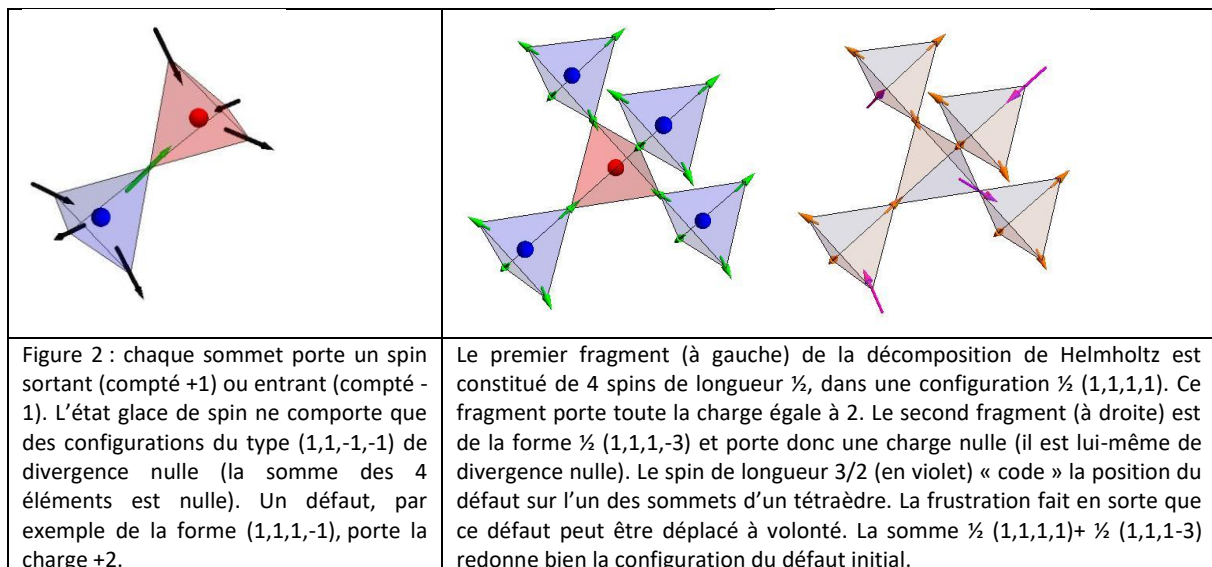
Glace de spin et glace de spin quantique. Les réalisations expérimentales d'un liquide de spin sont en effet rares. Les travaux sur le magnétisme frustré ont pourtant largement contribué à ces recherches, en particulier grâce aux études sur les composés de structure pyrochlore. Dans $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ et $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ par exemple, le spin est formé par le moment magnétique de la terre rare, Holmium (Ho) ou Dysprosium (Dy), laquelle occupe les sites de ce réseau, constitué de tétraèdres joints par leurs sommets (Figure 1a ci-dessous). L'état fondamental de ces deux composés préfigure l'état liquide de spin. Les spins présentent une anisotropie Ising très forte qui les force à s'aligner selon des axes locaux « z » et sont en outre couplés par des interactions ferromagnétiques J^{zz} . Cet état ne présente pas d'ordre magnétique (absence de symétrie brisée), mais les spins s'arrangent néanmoins selon une règle d'organisation locale dite règle de la glace (Figure 1b) et qui stipule que chaque tétraèdre doit comporter 2 spins entrants et 2 spins sortants ("2-in-2-out"), à l'image du désordre des atomes d'hydrogène dans la glace d'eau [1]. L'état fondamental est un état classique qui « choisit », localement, une configuration de ce type. La dégénérescence macroscopique de ces états se traduit par une entropie résiduelle à température nulle, tandis que l'organisation locale des configurations magnétiques peut être observée par diffusion de neutrons (Figure 1c).



Un liquide de spin quantique $U(1)$ se forme dès lors qu'existent des couplages « transverses » qui couplent entre eux les composantes « x » et « y » des spins. L'état fondamental est alors une

superposition quantique macroscopique de tous les états classiques dégénérés, c'est-à-dire un état intriqué. Les calculs théoriques montrent que la glace de spin, rebaptisée dans ce cas glace de spin quantique, est relativement stable vis-à-vis de ces couplages transverses et ne cède la place à des phases ordonnées classiques que si ces derniers sont de l'ordre d'une fraction de J^{zz} [2].

Fragmentation. Plus récemment, de nouvelles expériences ont fait état de situations tout aussi remarquables, notamment dans $\text{Ho}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ et $\text{Dy}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ [3], où l'iridium est un ion magnétique. Son spin s'ordonne de manière classique et crée un champ moléculaire selon l'axe « z » local de chaque terre rare, entrant ainsi en compétition avec J^{zz} . Il semble alors que seule une fraction du spin de l'Holmium ou du Dysprosium ne s'ordonne, le reste continuant de fluctuer. L'interprétation physique de ce phénomène est basée sur une description "électrodynamique" de la glace de spin. En effet, la règle de la glace s'apparente à la condition de divergence nulle d'un champ magnétique « émergent » ($\text{div } \mathbf{B} = 0$). En vertu de la décomposition de Helmholtz, ce champ émergent peut être vu essentiellement comme la somme d'un fragment de divergence nulle et d'un fragment de rotationnel nul, qui en principe porte la « charge ». Dans le langage des spins, celle-ci correspond à des défauts vis-à-vis de la règle de la glace, c'est-à-dire à des configurations où un spin s'est retourné au sein d'un tétraèdre (Figure 2). Ces charges sont aussi appelées monopoles [4,5]. Dans la phase fragmentée, ce fragment de rotationnel nul s'ordonne, tandis que le premier reste libre.



Travail proposé, Fragmentation quantique. Ce travail de thèse est essentiellement un effort numérique pour mieux comprendre ce qu'il advient de la phase fragmentée en présence de termes transverses non nuls. L'idée est de développer et de mettre au point un code de simulation Monte Carlo de ce problème pour:

- déterminer la stabilité des diverses phases, en fonction de l'intensité des couplages, et de la direction du champ interne;
- étudier en détails la dynamique dans chaque région du diagramme des phases, à confronter et à discuter en fonction des résultats des expériences publiées dans la littérature.

Est-ce qu'on obtient alors un nouveau liquide de spin ? Est-il stable ? Quelle est la dynamique des spins ? Est-ce qu'il existerait des phases fragmentées d'un autre type, notamment si le champ interne pointe selon la direction « x » ou « y » ? Dans ce cas, quelles seraient les propriétés de ces phases ?

References

1. C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, eds., Introduction to Frustrated Magnetism (Springer-Verlag, Berlin, 2011).

2. M. J. P. Gingras and P. A. McClarty, Quantum spin ice: a search for gapless quantum spin liquids in pyrochlore magnets, Rep. Prog. Phys. 77, 056501 (2014).
3. E. Lefrancois, V. Cathelin, E. Lhotel, J. Robert, P. Lejay, C. V. Colin, B. Canals, F. Damay, J. Ollivier, B. Fak, L. C. Chapon, R. Ballou, and V. Simonet, Nature Communications 8, 209 (2017).
4. M. E. Brooks-Bartlett, S. T. Banks, L. D. C. Jaubert, A. Harman-Clarke, and P. C. W. Holdsworth, Physical Review X 4, 011007 (2014).
5. S. Petit, E. Lhotel, B. Canals, M. C. Hatnean, J. Ollivier, H. Mutka, E. Ressouche, A. R. Wildes, M. R. Lees, and G. Balakrishnan, Nature Physics 12, 746 (2016).

English version

The last few decades of condensed matter research have seen the emergence of a rich new physics, based on the notion of "spin liquids". Interest in these new states of matter stems from the fact that they exhibit large-scale quantum entanglement, a property that is fundamental to quantum computation. By directly exploiting this notion of entanglement, a quantum computer would enable revolutionary approaches to certain classes of problems, compared with conventional computers. The study of spin liquids is therefore a key technological issue, and the aim of this thesis project is to contribute to this fundamental research effort.

Spin ice and quantum spin ice. Experimental realizations of a spin liquid are indeed rare. However, work on frustrated magnetism has made a major contribution to this research, in particular through studies on compounds with a pyrochlore structure. In $\text{Ho}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ and $\text{Dy}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$, for example, the spin is formed by the magnetic moment of the rare earth, Holmium (Ho) or Dysprosium (Dy), which occupies the sites of this lattice, made up of tetrahedra joined by their vertices (Figure 1a below). The ground state of these two compounds prefigures the liquid spin state. The spins exhibit very strong Ising anisotropy, forcing them to align along local "z" axes, and are additionally coupled by J^{zz} ferromagnetic interactions. This state has no magnetic order (no broken symmetry), but the spins nevertheless arrange themselves according to a local organization rule known as the ice rule (Figure 1b), which stipulates that each tetrahedron must have 2 incoming and 2 outgoing spins ("2-in-2-out"), similar to the disorder of hydrogen atoms in water ice [1]. The ground state is a classical state that locally "chooses" such a configuration. The macroscopic degeneracy of these states results in residual entropy at zero temperature, while the local organization of magnetic configurations can be observed by neutron scattering (Figure 1c).

A $U(1)$ quantum spin liquid is formed when there are additional "transverse" couplings that couple together the "x" and "y" components of the spins. The ground state is then a macroscopic quantum superposition of all degenerate classical states, i.e. an entangled state. Theoretical calculations show that spin ice, renamed quantum spin ice in this case, is relatively stable with respect to these transverse couplings and only gives way to classical ordered phases if the latter are of the order of a fraction of J^{zz} [2].

Fragmentation. More recently, new experiments have reported equally remarkable situations. In $\text{Ho}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ or $\text{Dy}_2\text{Ir}_2\text{O}_7$ [3], iridium is a magnetic ion. Its spin orders itself in the classical way and creates a molecular field along the local "z" axis of each rare earth, thus competing with J^{zz} . It then appears that only a fraction of the Holmium or Dysprosium spin is ordered, the rest continuing to fluctuate. The physical interpretation of this phenomenon is based on an "electrodynamics" description of spin ice. Indeed, the ice rule is akin to the zero divergence condition of an "emergent" magnetic field ($\text{div } \mathbf{B} = 0$). By virtue of the Helmholtz decomposition, this emergent field can be seen essentially as the sum of a zero divergence fragment and a zero rotational fragment, which in principle carries the "charge". In the language of spins, the latter corresponds to defects with respect to the ice rule, i.e.

configurations where a spin has flipped within a tetrahedron (Figure 2). These charges are also known as monopoles [4,5]. In the fragmented phase, this zero-spin fragment becomes ordered, while the first remains free.

Proposed work, Quantum fragmentation. This thesis work is essentially a numerical effort to better understand what happens to the fragmented phase in the presence of non-zero transverse terms. The idea is to develop and a Monte Carlo simulation code for this problem in order to:

- determine the stability of the various phases, as a function of coupling intensity and internal field direction;
- study in detail the dynamics in each region of the phase diagram, to be compared and discussed with the results of experiments published in the literature.

Do we then obtain a new spin liquid? Is it stable? What are the spin dynamics? Could there be fragmented phases of a different type, especially if the internal field points in the "x" or "y" direction? If so, what would be the properties of these phases?