



Universiteit
Leiden
The Netherlands

Topological phases and phase transitions in magnets and ice

Keesman, R.

Citation

Keesman, R. (2017, June 7). *Topological phases and phase transitions in magnets and ice. Casimir PhD Series*. Retrieved from <https://hdl.handle.net/1887/49403>

Version: Not Applicable (or Unknown)

License: [Licence agreement concerning inclusion of doctoral thesis in the Institutional Repository of the University of Leiden](#)

Downloaded from: <https://hdl.handle.net/1887/49403>

Note: To cite this publication please use the final published version (if applicable).

Cover Page



Universiteit Leiden



The handle <http://hdl.handle.net/1887/49403> holds various files of this Leiden University dissertation.

Author: Keesman, R.

Title: Topological phases and phase transitions in magnets and ice

Issue Date: 2017-06-07

Samenvatting

Omdat niet iedereen zich innig vertrouwd voelt met natuurkunde volgt hier een samenvatting in het Nederlands. Deze samenvatting is gericht op familie, vrienden, en (andere) leken die graag willen weten waar mijn focus lag de laatste jaren, zonder dat zijzelf al te diep in de stof hoeven te duiken.

Aan de hand van de titel van dit proefschrift, *Topologische Fasen en Faseovergangen in Magneten en Ijs*, hoop ik duidelijk te maken hoe de verschillende hoofdstukken aan elkaar gerelateerd zijn. Daarvoor behandelen we eerst in zijn algemeenheid topologische fasen en faseovergangen om vervolgens inhoudelijk te gaan kijken naar zowel magneten als ijs. Voor deze twee systemen, magneten en ijs, richten we ons eerst op de motivatie om hier onderzoek naar te doen waarna een samenvatting volgt van de bijdrage van deze Thesis aan deze onderzoeksgebieden.

Topologische fasen en faseovergangen

In de natuurkunde wordt het deel van de wereld dat beschreven wordt altijd het systeem genoemd. Alles buiten dit systeem wordt buiten beschouwing gelaten. Als in het systeem een substantie is met een bepaalde eigenschap, dan kan hier vaak een fase aan worden toegeschreven. De fase van een stof beschrijft welke eigenschappen de stof heeft. Denk bijvoorbeeld aan een systeem waarin een pan met water in een ruimte met lucht wordt verhit. De pan, het water, en de lucht zijn in verschillende fasen (vast, vloeibaar, en gasvorming). Hoewel de fase enkele eigenschappen vastlegt van de stof is er nog wel enige vrijheid. Zo kan de temperatuur van het vloeibare water onder normale omstandigheden tussen de 0°C en 100°C liggen. Wanneer genoeg energie wordt toegevoegd aan het water begint het water te koken. Dit is het proces waarbij vloeibaar water onder verwarming wordt omgezet in waterdamp. De fase van het water is veranderd van vloeibaar naar gasvorming en dit proces vindt plaats op de faseovergang.

Naast verscheidene eigenschappen kan een fase ook topologisch niet-triviaal zijn. Een dergelijke fase wordt ook wel een topologische fase ge-

noemd. Aan een topologische fase kan een beschermd geheel getal worden toegekend. Dit getal, zoals het aantal gaten in een object, is beschermd in de zin dat het niet kan worden veranderd zonder een extreme transformatie, zoals het prikken van een gat, toe te brengen aan het systeem. Een niet-extreme transformatie, zoals de buiging of uitrekking van een object, laat dit getal onveranderd. Het verschil tussen deze types van transformaties is dat de niet-extreme transformatie steeds kleiner gemaakt kan worden terwijl dat niet geldt voor extreme transformaties zoals het maken van een gat. Er kan immers geen half gat gemaakt worden. Dit is het type topologische fasen dat vaak genoemd wordt omdat het tot de verbeelding spreekt. De topologische fasen zoals behandeld in deze Thesis daarentegen gaan meer over topologische texturen op een materiaal waarover hieronder meer volgt. Topologische faseovergangen is een ietwat vaag begrip dat slaat op faseovergangen tussen fasen waarvan er minstens één topologisch is of waarbij topologische objecten een relevante rol spelen. Recentelijk (okt 2016) hebben David Thouless, Duncan Haldane, en Michael Kosterlitz de Nobelprijs voor Natuurkunde ontvangen voor *theoretische ontdekkingen van topologische faseovergangen en topologische fasen van materie* [7].

Magneten

Magnetische materialen zijn al bekend sinds de oudheid maar pas na de middeleeuwen zijn er theorieën ontwikkeld die hebben geleid tot onze huidige kennis omtrend magnetisch gedrag. Praktisch gezien zijn magneten overal om ons heen; van de koelkast magneet tot mobieltjes. Magneten zijn belangrijk voor elektronica omdat deze interageren met elektrische stromen. Dit stelt ons er toe in staat om magneten te beïnvloeden en af te tasten met behulp van stroom wat uiteindelijk heeft geleid tot apparaten zoals de magnetische harde schijf.

Om magneten te kunnen begrijpen moeten we onderzoeken wat er gebeurt op microscopisch niveau. Met het Stern–Gerlach experiment is aangetoond dat sommige ongeladen deeltjes, zoals zilver atomen, in een niet-uniform magnetisch veld afgebogen kunnen worden (in verschillende richtingen). Hieruit moet geconcludeerd worden dat sommige elementaire deeltjes een eigenschap, *spin*, moeten hebben die bepaald hoe deze deeltjes beïnvloedt worden door magnetische velden. De spin van een elementair deeltje is een vector; het heeft een grootte en een richting en kan dus worden weergegeven met

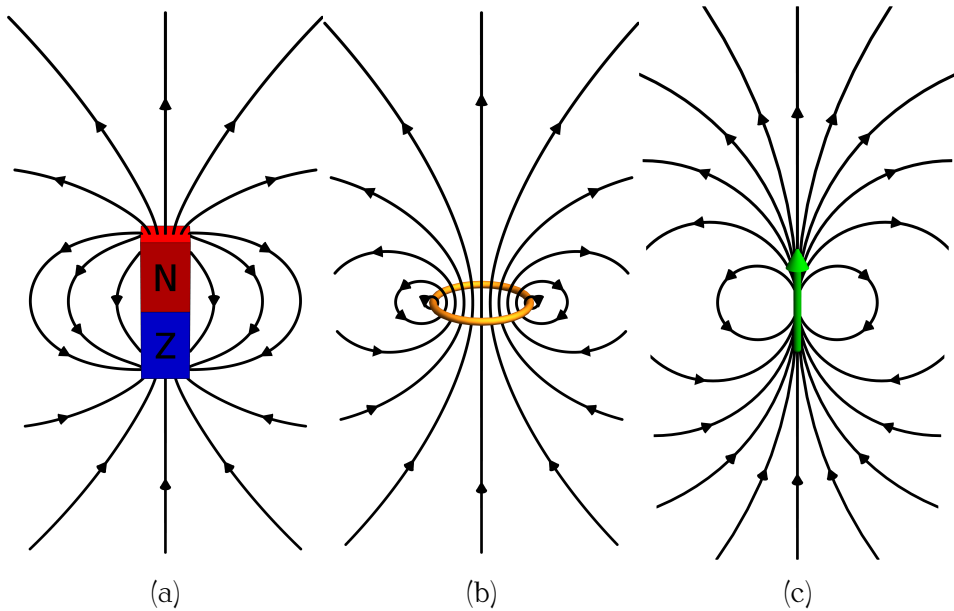
een pijl. Hoewel kwantummechanisch gezien de spin gekwantiseerd is, dat wil zeggen, gelimiteerd in het aantal toegestane richtingen, mogen we (in de klassieke limiet) aannemen dat deze vrij kan draaien in de ruimte.

Ampère's wet, voor het eerst bewezen door Maxwell, laat zien dat bewegende elektrische lading (stroom) een magnetisch veld opwekt. Omgekeerd geldt dat een magnetisch veld geladen deeltjes in beweging kan zetten. Volgens Ampère's wet kunnen we de spin van een elementair deeltje, sterk gerelateerd aan het intrinsiek magnetisch moment, opvatten als een soort intrinsieke elektrische stroom die behouden is in grootte. Anderzijds kan het ook worden opgevat als een magnetische dipool; een oneindig kleine magneet met een noord- en zuidpool. In Figuur 5.1 worden de opgewekte magneetvelden van een stroomkring, een magneet, en een elementair deeltje met spin met elkaar vergeleken. De magneetvelden van een oneindig kleine stroomkring en een oneindig kleine magneet zijn equivalent aan die van de magnetische dipool.

Een deeltje met spin zal enerzijds een magnetisch veld opwekken en anderzijds beïnvloed worden door externe magnetische velden. Door de zogeheten (puur kwantummechanische) Heisenberg interactie is het voor naburige deeltjes in (anti)ferromagneten energetisch voordelig om de spins (anti)parallel te ordenen waardoor in het geval van de ferromagneet een macroscopisch magnetisch veld opgewekt wordt. De configuratie van de spins in een materiaal kan worden beïnvloed door temperatuur, externe magnetische velden, en stromen zonder dat de atomen daarbij van hun vaste plek in het rooster komen.

Deze mogelijke spin texturen wordt vergroot door meer exotische magneten te bekijken zoals in de eerste twee hoofdstukken van dit werk. Hierbij worden naast de Heisenberg interactie, die zorgt voor de (anti)parallelle ordening, ook nog andere type interacties meegenomen. Zo kunnen lagen van verschillende typen materialen een zogenaamde Dzyaloshinskii-Moriya interactie (DMI) bewerkstelligen waarbij naburige spins onder een hoek ten opzichte van elkaar gedraaid willen zijn. Ook kan er anisotropie optreden waarbij spins uit het vlak, of juist in het vlak, de energie verlagen. Typische magneten, zoals ook hier behandeld, proberen de spins ook langs een aangelegd extern magnetisch veld te richten. Al deze interacties bij elkaar zorgen voor een verscheidenheid aan mogelijke grondtoestanden, configuraties met minimale energie, afhankelijk van de parameter waarden.

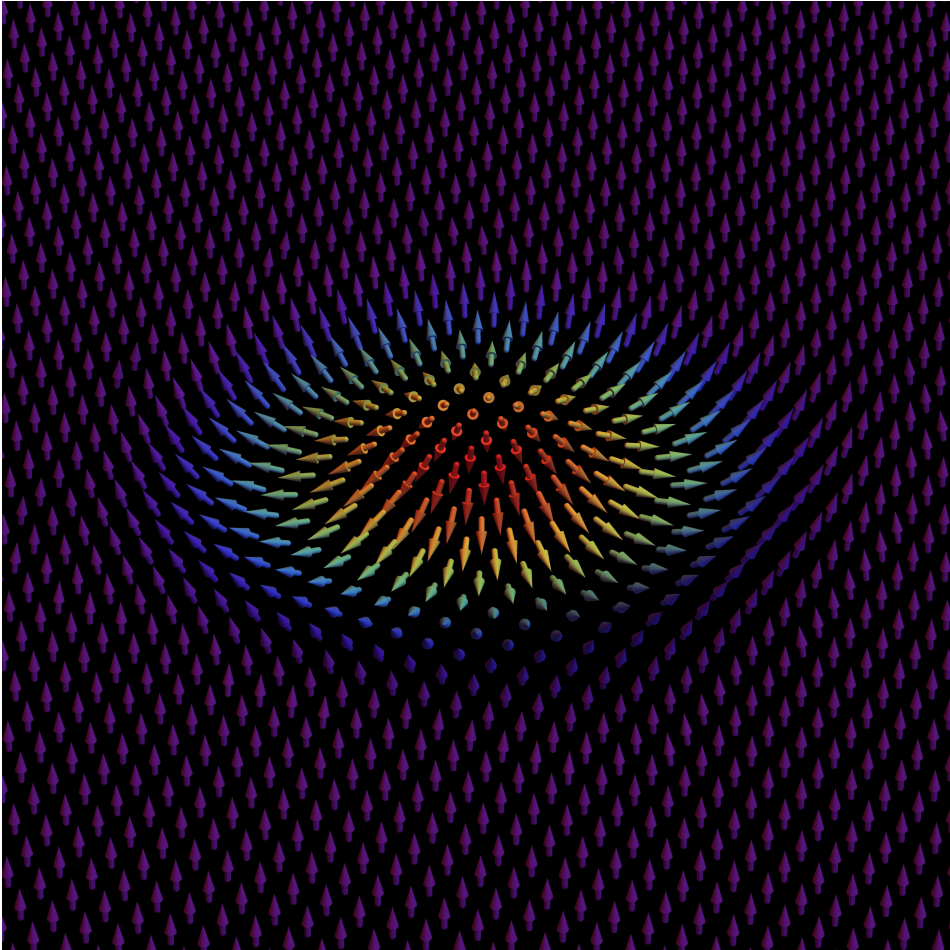
De spin texturen waar in dit werk de focus op ligt zijn degenen met skyrmionen. Skyrmionen zijn topologische objecten, of lokale spin configuraties, die



Figuur 5.1. Magneetvelden voor een magneet (a), een stroomkring (b), en een elementair deeltje met spin (c). De magneetveldlijnen zijn weergegeven door de zwarte lijnen waarbij de pijl de richting van het veld weergeeft. Een elementair deeltje met spin (c) gedraagt zich als een magnetische dipool. De velden lijken vooral op grote afstand van de objecten op elkaar omdat oneindig kleine stroomkringen en oneindig kleine magneten equivalent zijn aan magnetische dipolen.

zich in een zee van spins kunnen bevinden (zie Figuur 5.2). Deze zijn topologisch beschermd en zijn dus in grote mate robuust tegen externe fluctuaties door onder andere de temperatuur.

In het eerste hoofdstuk van deze Thesis onderzoeken we de robuustheid van skyrmionen in ferromagnetische systemen van (on)-eindige grootte wanneer deze onderhevig zijn aan opwarming. Hiervoor is gebruikt gemaakt van computer simulaties die de spins in magnetische systemen nabootsen waarna uit de typische configuraties die gerealiseerd worden relevante informatie gehaald kan worden. Ook laten we zien dat skyrmionen kunnen voorkomen in microscopische draden wat voordelig is wanneer deze daadwerkelijk ingezet moeten worden in elektronische apparaten. De simulaties zijn gebaseerd op een klassiek model en daarom bekijken we ook de invloeden van kwantum



Figuur 5.2. Eén skyrmion in een zee van parallel gerichte spins. Elk pijltje representeert de grootte en richting van de spin van een deeltje. De kleur geeft aan of de spin naar beneden (rood) of omhoog (paars) is gericht. Het skyrmion is een topologisch object dat zich duidelijk onderscheidt van de omliggende homogene spin structuur.

fluctuaties die berekend kunnen worden aan de hand van de klassieke spin configuraties.

In het tweede hoofdstuk onderzoeken we anti-ferromagnetische systemen met computer simulaties en we onderbouwen de resultaten met enkele analytische berekeningen. Voor deze materialen vinden we de globaal anti-

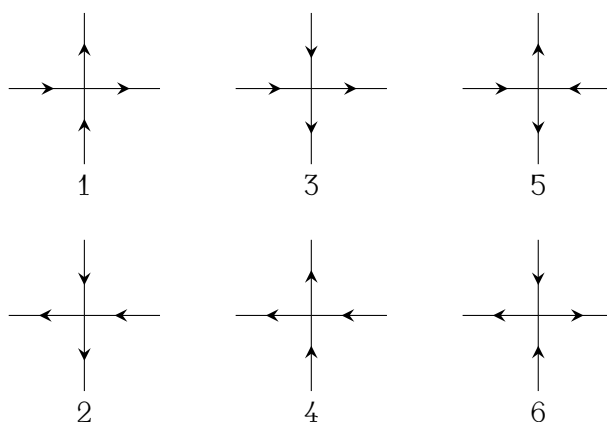
ferromagnetische fase, de spiraal fase, en een nieuwe skyrmionische fase die enkele eigenschappen deelt met de skyrmionische fase in de ferromagneet. Ook voor dit materiaal construeren we een fase-diagram als functie van enkele materiaaleigenschappen. Daarnaast laten we zien dat een enkel skyrmion ook in een anti-ferromagneet gestabiliseerd kan worden in een microscopisch klein vlak wanneer de temperatuur laag genoeg is.

IJs

Net als magneten speelt ijs ook een belangrijke rol in ons leven ook al is het minder voor de hand liggend dan bij magneten. Water heeft de eigenaardige eigenschap dat ijs, de normale variant die wij kennen, een lagere dichtheid heeft dan vloeibaar water waardoor ijs blijft drijven. Dit is van invloed voor de warmte van de aarde die getemperd blijft door grote ijsvlakten die, doordat deze aan de oppervlakte liggen, grote hoeveelheden zonlicht kunnen weerkaatsen. Naast 'normaal' ijs zijn er nog veel meer soorten ijs. Afhankelijk van de druk, de temperatuur, en de manier waarop ijs kristalliseert zijn er ontzettend veel vormen van ijs te produceren die allemaal een andere kristalstructuur kennen. Een enkel watermolecuul bestaat uit een zuurstofatoom waaraan twee waterstofatomen dicht gebonden zijn. De zuurstofatomen in ijs zitten zo dicht bij elkaar dat er tussen hen ook nog bindingen, ook wel waterstofbruggen genoemd, ontstaan tussen waterstofatomen en zuurstofatomen waaraan ze niet dicht gebonden zitten. Deze bindingen stabiliseren de kristalstructuur van ijs.

Ijs zoals behandeld in deze Thesis is een speciale tweedimensionale vierkante vorm van ijs. Hoewel dit nogal theoretisch klinkt is deze vorm van ijs onlangs gerealiseerd[32] door water te vangen tussen twee lagen van grafeen. De watermoleculen liggen in een perfect platte laag op de vertices in een vierkant rooster. Elk van de moleculen vormt waterstofbruggen met twee van de vier burens. Wanneer een waterstofbrug gerepresenteerd wordt door een pijl vanaf het zuurstofatoom waaraan het waterstofatoom gebonden zit heeft elk molecuul twee pijlen naar binnen en twee naar buiten. Dit wordt ook wel de *ijsregel* genoemd. Er bestaan zes mogelijke configuraties, zie Figuur 5.3, per molecuul en daarom wordt dit model ook wel het zes-vertex-model genoemd.

In de laatste twee hoofdstukken kijken we naar een energetisch ijs-model, het F model, waarbij sommige van deze toegestane vertexconfiguraties een andere energie toegekend krijgen dan de andere. Dit zorgt voor een speci-



Figuur 5.3. De ijsregel eist dat er bij elke vertex twee pijlen naar binnen en twee pijlen naar buiten gaan. Dit resulteert in zes toegestane vertex configuraties.

ale oneindige-orde faseovergang van een ongeordende naar een geordende fase. De orde van een faseovergang geeft informatie over de manier waarop fasen in elkaar overgaan en het typische gedrag van oneindige-orde faseovergangen is dat deze juist weinig speciaals doen tijdens de faseovergang. In tegenstelling tot de meeste faseovergangen gebeurt er niet iets speciaals op de faseovergang “maar begint er iets te gebeuren”. Dit maakt het erg moeilijk om deze faseovergang te detecteren. Wij hebben een nieuwe observabele geconstrueerd die per definitie wel uitzonderlijk gedrag vertoont op de faseovergang en laten zien dat deze kan worden gebruikt om de faseovergang te detecteren. Ook maken we duidelijk dat het een redelijk subtiel systeem is waarbij het, zelfs met deze nieuwe observabele, nog steeds erg moeilijk is om scherpe kwantitatieve uitspraken te kunnen doen doordat eindige-grootte effecten een zeer grote rol spelen.

In hoofdstuk drie kijken we naar het F model met periodieke randen, waarbij de pijltjes aan de randen zo gericht zijn dat de tegenovergestelde randen als het ware aan elkaar gelijmd kunnen worden. In hoofdstuk vier kijken we naar nog steeds naar het F model maar dan met speciale randvoorwaarden. Hierbij zijn de pijltjes aan de linker- en rechterrاند naar buiten gericht, en bij de boven- en onderrand naar binnen gericht. In de meeste modellen verdwijnen de effecten van de gekozen randen voor systemen die voldoende groot zijn. Bij het F model blijkt dit niet zo te zijn. Zelfs voor systemen van onein-

dige grootte laten we zien dat het gehele systeem zich anders gedraagt voor deze speciale randen, domein muren genaamd, ten opzichte van periodieke muren.