

Fragmentation quantique dans les systèmes magnétiques frustrés

Le magnétisme frustré constitue une des voies de recherche moderne susceptibles de mener à la découverte de nouveaux états de la matière. Les “glaces de spins”, et plus généralement les “phases de Coulomb”, en forment un exemple célèbre. A la différence des structures magnétiques ordonnées classiques, ces états magnétiques restent désordonnés jusqu'aux plus basses températures mais présentent des corrélations spin-spin spécifiques. Dans ce contexte, un nouveau concept a été proposé [PRX 4, 011007 (2014)], baptisé “fragmentation magnétique”. Il s’agit d’un état original où le moment magnétique se scinde en deux fragments: l’un forme une phase antiferromagnétique de moment ordonné réduit; l’autre reste fluctuant et forme une phase de Coulomb.

En combinant mesures macroscopiques d'aimantation et expériences de diffusion élastique et inélastique de neutrons, nous avons pu montrer que le composé pyrochlore $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ pourrait être une réalisation de cette théorie [1,2], même si des indices expérimentaux montrent que des phénomènes quantiques encore incompris sont à l’œuvre.

Le but de ce travail de thèse est de comprendre l'origine de la fragmentation dans ce système. On cherchera notamment à déterminer son domaine de stabilité, en étudiant des composés substitués. En effet, en remplaçant une partie du Zirconium (Zr) par du Titane (Ti), ou du Néodyme (Nd) par du Lanthane (La), les interactions magnétiques vont être modifiées. En variant les taux de substitution, nous pourrions explorer le diagramme de phase et sonder l'existence d'un point critique quantique prévu théoriquement. La complémentarité entre mesures macroscopiques et mesures de diffusion des neutrons est une des clefs pour résoudre le Hamiltonien quantique du système et, au-delà, comprendre les mécanismes microscopiques de la fragmentation ainsi que la nature des excitations qui en émergent.

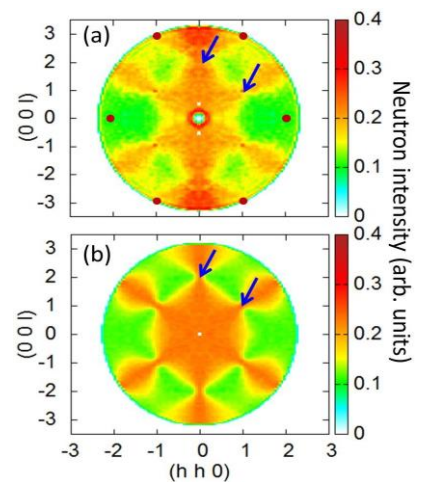


Fig. 1: Diffusion diffuse dans $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$, typique d’une phase de Coulomb. (a) mesure par diffusion de neutrons et (b) simulation numérique.

Le travail de thèse se partagera entre l’Institut Néel (Grenoble) et le LLB (Saclay). Il s’agit à la fois de mesurer l'aimantation et la chaleur spécifique des échantillons jusqu'à très basse température (100 mK) (Institut Néel) et de déterminer finement les structures magnétiques ainsi que le spectre des excitations magnétiques par l'ensemble des techniques de diffusion des neutrons. Ces dernières études se feront au LLB (Saclay) et à l’ILL (Grenoble). Une partie significative de l’analyse des données sera basée sur des outils de simulation numérique, existants pour la plupart, mais aussi à développer le cas échéant.

Financement : Cette thèse est financée par l'Université Grenoble Alpes dans le cadre de la fédération française de neutronique 2FDN

Correspondants :

Sylvain Petit, sylvain.petit@cea.fr, LLB - CEA Saclay, tel : 01 69 08 60 39

Elsa Lhotel, elsa.lhotel@neel.cnrs.fr, Institut Néel – CNRS Grenoble, tel : 04 76 88 19 18

Références:

- [1] Fluctuations and All-In–All-Out Ordering in Dipole-Octupole $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$. E. Lhotel et al, Phys. Rev. Lett. 115, 197202 (2015).
- [2] Observation of magnetic fragmentation in spin ice. S. Petit et al, Nature Physics, 12, 746–750 (2016).
Dynamic kagome ice state. E. Lhotel et al, arXiv:1712.02418.

Quantum fragmentation in frustrated magnets

Magnetic frustration is one of the modern routes in condensed matter physics leading to the discovery of new states of matter. The “spin ice” and more generally, the “Coulomb phases” are celebrated examples of this physics. In contrast with classical magnetically ordered phases, these states remain disordered down to the lowest temperatures, yet form a correlated paramagnet with specific spin-spin correlations. In this context, a new concept has been recently proposed, called “magnetic fragmentation” [PRX 4, 011007 (2014)]. This is an original state where the magnetic moment fragments into two sub-fragments: one of them forms an antiferromagnetic phase with a reduced ordered moment, while the other keeps fluctuating and forms a Coulomb phase.

In combining magnetization measurements, elastic and inelastic neutron scattering experiments, we have shown that the pyrochlore compound $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$ could be a realization of this theory [1,2], even if experimental evidences suggest that still not understood quantum phenomena are at play.

This thesis work aims at understanding the origin of fragmentation in this system. We especially plan to determine its stability range by studying doped samples. Actually, replacing part of the Zirconium (Zr) by Titanium (Ti), or Neodymium (Nd) by Lanthanum (La), magnetic interactions can be modified. Varying the substitution, we will explore the phase diagram and probe the possible existence of a quantum critical point predicted by theory. The complementarity between macroscopic and neutron scattering measurements is one of the key points to determine the quantum Hamiltonian and beyond, understand the microscopic mechanisms of magnetic fragmentation, along with the nature of the spin dynamics that emerge from this peculiar ground state.

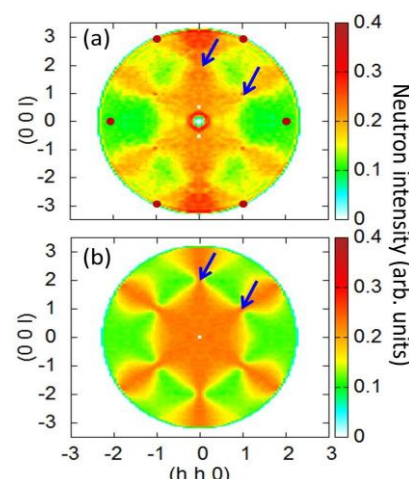


Fig. 2: Diffuse scattering in $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$, expected in a Coulomb phase. (a) neutron scattering measurement. (b) Numerical simulation.

The thesis work will take place both at the Institut Néel (Grenoble) and at LLB (Saclay). It consists in measuring both the magnetization and specific heat down to base temperature (100 mK) (Institut Néel) and to finely determine the magnetic structures as well as the spin excitations spectrum by the different neutron techniques. The latter will be carried out at LLB (Saclay) and at ILL (Grenoble). A large part of the data analysis will be based on numerical simulation tools. Most of them exist today but may be further developed.

Funding: this thesis is funded by the University Grenoble-Alpes with the support of the Fédération française de neutronique 2FDN.

Correspondents :

Sylvain Petit, sylvain.petit@cea.fr, LLB - CEA Saclay, tel : 01 69 08 60 39

Elsa Lhotel, elsa.lhotel@neel.cnrs.fr, Institut Néel – CNRS Grenoble, tel : 04 76 88 19 18

References:

[1] Fluctuations and All-In–All-Out Ordering in Dipole-Octupole $\text{Nd}_2\text{Zr}_2\text{O}_7$. E. Lhotel et al, Phys. Rev. Lett. 115, 197202 (2015).

[2] Observation of magnetic fragmentation in spin ice. S. Petit et al, Nature Physics, 12, 746–750 (2016).
Dynamic kagome ice state. E. Lhotel et al, arXiv:1712.02418.