

MÔ HÌNH ISING CHO CHUỖI SPIN PHẢN SẮT TỪ TRONG TỪ TRƯỜNG

LÊ THỊ TRANG^{1,*}, PHẠM HƯƠNG THẢO²
NGÔ THỊ THUẬN³, NGUYỄN HỮU CẢNH⁴

¹Học viên cao học, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

²Khoa Vật lý, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

³Khoa Cơ bản, Trường Đại học Y dược, Đại học Huế

⁴Trường Đại học Nguyễn Huệ, Biên Hoà, Đồng Nai

*Email: letranglt46@gmail.com

Tóm tắt: Chúng tôi đã nghiên cứu các tính chất của chuỗi Ising phản sắt từ khi có mặt của từ trường ngang h^x và từ trường dọc h^z . Sử dụng phép chéo hoá Hamiltonian và gần đúng trường trung bình, độ từ hoá ngang và độ từ hoá dọc cho hai phân mạng ($\uparrow$ và $\downarrow$) được xác định. Từ đó chúng tôi thảo luận về những ảnh hưởng quan trọng của từ trường ngang và từ trường dọc lên trật tự phản sắt từ của chuỗi Ising. Ngoài ra chúng tôi cũng tìm thấy hiện tượng so le của các độ từ hoá được gây ra bởi sự quay của các spin dưới ảnh hưởng của các từ trường.

Từ khoá: Mô hình Ising ngang, chuỗi spin phản sắt từ, gần đúng trường trung bình, từ trường dọc.

1. GIỚI THIỆU

Gần đây, nghiên cứu các hiệu ứng được gây ra bởi từ trường hỗn hợp (ngang và dọc) trong các hệ spin thấp chiều đã thu hút được nhiều sự quan tâm từ các nghiên cứu ở cả hai mảng lý thuyết và thực nghiệm [1, 2]. Mô hình Ising ngang (transverse Ising model - TIM), tức là mô hình Ising trong từ trường ngang, được giới thiệu lần đầu tiên vào những năm 1960 để nghiên cứu chuyển tiếp trật tự - bất trật tự trong các hệ sắt điện dạng liên kết hydro [3], có dạng như sau:

$$H = -g\mu_B h^z \sum_j S_j^z - h^x \sum_j S_j^x - \sum_j J(\vec{r}_j - \vec{r}_{j+1}) S_j^z S_{j+1}^z. \quad (1)$$

Sau đó, các nhà khoa học đã thực hiện nhiều nghiên cứu để làm rõ hơn các đặc tính của mô hình này. Kết quả là, rất nhiều tính chất cơ bản của quá trình chuyển pha lượng tử ở nhiệt độ không tuyệt đối (0 K) của các hệ lượng tử và các đặc tính ở trạng thái cơ bản của các hệ có sự cạnh tranh tương tác cho đến nay đã được chỉ ra [1]. Ngoài ra, mô hình này cũng đã cung cấp một sự mô tả tốt để phân tích một số vật liệu từ dị hướng trong một trường ngang [4].

Tuy nhiên, đa số các nghiên cứu đều tập trung vào hệ Ising sắt từ trong từ trường hỗn hợp. Ví dụ như, phương pháp nhóm tái chuẩn hoá của TIM với spin $-1/2$ được sử dụng để nghiên cứu sự chuyển pha sắt từ gần nhiệt độ 0 K [5], phương pháp ghép cặp kết hợp được sử dụng để nghiên cứu sự chuyển pha bậc hai theo từ trường ngang trong các hệ

Ising sắt từ với spin -2 [6], hay giản đồ chuyển pha của TIM cho hệ spin -1 với các tương tác ngẫu nhiên được nghiên cứu sử dụng lý thuyết trường hiệu dụng [7]. Các tính chất nhiệt động và tới hạn của TIM cho các hệ sắt từ (FM) và phản sắt từ (AFM) là tương đương nhau, tuy nhiên khi có mặt từ trường ngoài khác không các tính chất này lại khác nhau rất nhiều. Gần đây, hiện tượng từ trường ngang gây ra hiện tượng độ từ hoá so le theo hướng vuông góc với hướng của từ trường ngang và sự chuyển pha liên tục xảy ra ở các giá trị nào đó của từ trường cũng đã được quan sát trong hệ phản sắt từ (AFM) giả một chiều Cs_2CoCl_4 [8] trong sự có mặt của từ trường hỗn hợp.

Như vậy có thể thấy các hiệu ứng được gây ra bởi từ trường hỗn hợp trong các hệ AFM hứa hẹn sẽ đem lại nhiều kết quả thú vị. Do đó, trong bài báo này chúng tôi nghiên cứu mô hình (1) trong gần đúng trường trung bình cho chuỗi spin AFM. Bài báo có cấu trúc như sau: trong phần 2 chúng tôi sẽ đưa ra mô hình lý thuyết và các tính toán giải tích để đưa ra các biểu thức cho các độ từ hoá, các kết quả tính số và thảo luận được đưa ra trong phần 3 để thấy rõ hơn ảnh hưởng quan trọng của các từ trường, trong phần cuối đưa ra các kết luận quan trọng của bài báo.

2. MÔ HÌNH LÝ THUYẾT

Ta xét một chuỗi spin AFM gồm 2 phân mạng A ($\uparrow$) và B ($\downarrow$) với N spin nằm trên phương $x'Ox$. Hamiltonian của mô hình chuỗi spin Ising với tương tác trao đổi giữa các spin lân cận gần nhất và chỉ xét tương tác trao đổi giữa các thành phần của các toán tử spin theo hướng Oz trong một từ trường ngoài $\vec{h} = h^x \vec{e}_x + h^z \vec{e}_z$ được cho bởi:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J(x_i - x_j) S_i^{zA} S_j^{zB} - g\mu_B h^{zA} \sum_i S_i^{zA} - h^{xA} \sum_i S_i^{xA} - g\mu_B h^{zB} \sum_j S_j^{zB} - h^{xB} \sum_j S_j^{xB}. \quad (2)$$

Trong biểu thức (2), số hạng thứ nhất là tương tác trao đổi theo mô hình Ising giữa các spin lân cận gần nhất, vì hệ là AFM do đó $J < 0$. Bốn số hạng cuối lần lượt là năng lượng của hệ spin trong trường ngang (h^x) và trường dọc (h^z) tương ứng với hai phân mạng A và B .

Trong bài báo này, chúng tôi chọn định hướng trung bình của các spin là Oz , do đó các thành phần của các toán tử thăng giáng spin được định nghĩa như sau:

$$\delta S_i^{zA(B)} = S_i^{A(B)z} - \langle S_i^{zA(B)} \rangle, \quad \delta S_i^{xA(B)} = S_i^{xA(B)}, \quad \delta S_i^{yA(B)} = S_i^{yA(B)}, \quad (3)$$

ở đây $\langle \dots \rangle = \text{Tr}(e^{-\beta H} \dots) / \text{Tr}(e^{-\beta H})$ là trung bình nhiệt động lực học và $\beta^{-1} = k_B T$.

Trong gần đúng trường trung bình bỏ qua các thăng giáng spin, tức là $\delta S_i^{\alpha A(B)} = 0$, $\alpha = x, y, z$, vì vậy, Hamiltonian (2) được viết lại dưới dạng khai triển Fourier như sau:

$$H = \frac{N}{2} J(k_x = 0) \langle S_i^{zA} \rangle \langle S_j^{zB} \rangle - h^{xA} \sum_i S_i^{xA} - h^{xB} \sum_j S_j^{xB} - \sum_i \mu h_{hd}^A S_i^{zA} - \sum_j \mu h_{hd}^B S_j^{zB}, \quad (4)$$

ở đây $\mu = g\mu_B$ và trường hiệu dụng tác dụng lên mỗi spin của mỗi phân mạng được cho bởi:

$$h_{hd}^{A(B)} = h^{zA(B)} + \frac{1}{2g\mu_B} \sum_j J(k_x = 0) \langle S_j^{zB(A)} \rangle. \quad (5)$$

Hamiltonian trong (4) được chéo hóa theo phép biến đổi sau (xem [1]):

$$\begin{aligned} S_i^{xA(B)} &= \frac{h_{hd}^{A(B)}}{\gamma^{A(B)}} S_j^{x'A(B)} + \frac{h_l^{A(B)}}{\mu\gamma^{A(B)}} S_i^{z'A(B)}, \\ S_j^{zA(B)} &= -\frac{h^{xA(B)}}{\mu\gamma^{A(B)}} S_i^{x'A(B)} + \frac{h_{hd}^{A(B)}}{\gamma^{A(B)}} S_i^{z'A(B)}, \end{aligned} \quad (6)$$

với:

$$\gamma^{A(B)} = \sqrt{\left(h_{hd}^{A(B)}\right)^2 + \left(\frac{h^{xA(B)}}{\mu}\right)^2}. \quad (7)$$

Trong phép chéo hóa này chúng tôi sử dụng một hệ tọa độ mới $Ox'z'$, tương ứng với phép quay hệ tọa độ theo công thức (6). Từ đó chúng tôi viết lại Hamiltonian (4):

$$H = NJ \langle S_i^{zA} \rangle \langle S_j^{zB} \rangle - \sum_i \mu\gamma^A S_i^{z'A} - \sum_i \mu\gamma^B S_i^{z'B}. \quad (8)$$

Từ (8) ta có thể thấy γ^A và γ^B đóng vai trò của trường hiệu dụng tác dụng lên spin $S_i^{z'A}$ và $S_i^{z'B}$ trong hệ tọa độ mới $Ox'z'$ giống với trường hiệu dụng h_{hd}^A và h_{hd}^B trong (5) của hệ tọa độ cũ Oxz . Ta có năng lượng tự do của hệ trong gần đúng trường trung bình:

$$F_0 = -\frac{1}{\beta} \ln \left(\text{Tr} \left(e^{-\beta H} \right) \right) = NJ m_z^A m_z^B - \frac{N}{\beta} \left(\frac{\text{sh}(S^A + 1/2) Y^A}{\text{sh}(Y^A/2)} \right) - \frac{N}{\beta} \left(\frac{\text{sh}(S^B + 1/2) Y^B}{\text{sh}(Y^B/2)} \right), \quad (9)$$

ở đây

$$Y^{A(B)} = \beta\mu\gamma^{A(B)} = \sqrt{\left(\beta\mu h^{zA(B)} + \beta J m_z^{B(A)}\right)^2 + \left(\beta h^{xA(B)}\right)^2}. \quad (10)$$

Phần tiếp theo chúng tôi tìm các thành phần x và z của độ từ hoá, $m_z^A = \langle S^{zA} \rangle$, $m_z^B = \langle S^{zB} \rangle$ và $m_x^A = \langle S^{xA} \rangle$, $m_x^B = \langle S^{xB} \rangle$. Phương trình trong gần đúng trường trung bình đối với các thành phần m_z^A và m_z^B ở nhiệt độ tới hạn được thiết lập từ điều kiện cực tiểu của năng lượng tự do (9). Ta có:

$$\frac{\partial F_0}{\partial m_z^{A(B)}} = NJm_z^{B(A)} - \frac{N}{\beta} \frac{h_{hd}^{B(A)} \beta J}{\gamma^{B(A)}} \partial \left(\frac{\text{sh}(S^{B(A)} + 1/2) Y^{B(A)}}{\text{sh} \frac{Y^{B(A)}}{2}} \right) / \partial Y^{B(A)} = 0.$$

Từ đó chúng tôi tìm được thành phần của độ từ hoá theo phương Oz hay còn gọi là độ từ hoá dọc:

$$m_z^{A(B)} = \frac{h_{hd}^{A(B)}}{\gamma^{A(B)}} b(Y^{A(B)}). \quad (11)$$

Từ phép biến đổi (6), ta có

$$\begin{aligned} \langle S^{xA(B)} \rangle &= \frac{h_{hd}^{A(B)}}{\gamma^{A(B)}} \langle S^{x'A(B)} \rangle + \frac{h^{xA(B)}}{\mu \gamma^{A(B)}} \langle S^{z'A(B)} \rangle, \\ \langle S^{zA(B)} \rangle &= -\frac{h^{xA(B)}}{\mu \gamma^{A(B)}} \langle S^{x'A(B)} \rangle + \frac{h_{hd}^{A(B)}}{\gamma^{A(B)}} \langle S^{z'A(B)} \rangle. \end{aligned}$$

Mặt khác, trong phép biến đổi mới:

$$\langle S^{x'A(B)} \rangle = 0 \text{ và } \langle S^{z'A(B)} \rangle = \frac{\gamma^{A(B)}}{h_{hd}^{A(B)}} \langle S^{zA(B)} \rangle = b(Y^{A(B)}). \quad (12)$$

Vậy thành phần của độ từ hoá theo phương Ox hay còn gọi là độ từ hoá ngang:

$$m_x^{A,B} = \frac{h^{xA(B)}}{\mu \gamma^{A(B)}} b(Y^{A(B)}), \quad (13)$$

trong đó $b(Y^A)$, $b(Y^B)$ là các hàm Brillouin

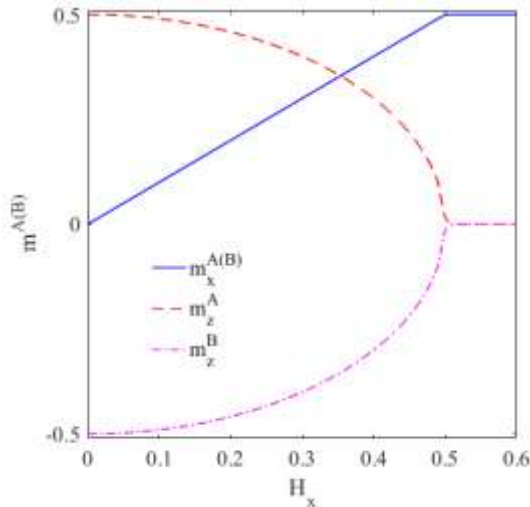
$$b(Y^{A(B)}) = (S^{A(B)} + \frac{1}{2}) \coth(S^{A(B)} + \frac{1}{2}) Y^{A(B)} - \frac{1}{2} \coth \frac{Y^{A(B)}}{2}. \quad (14)$$

3. CÁC KẾT QUẢ TÍNH SỐ VÀ THẢO LUẬN

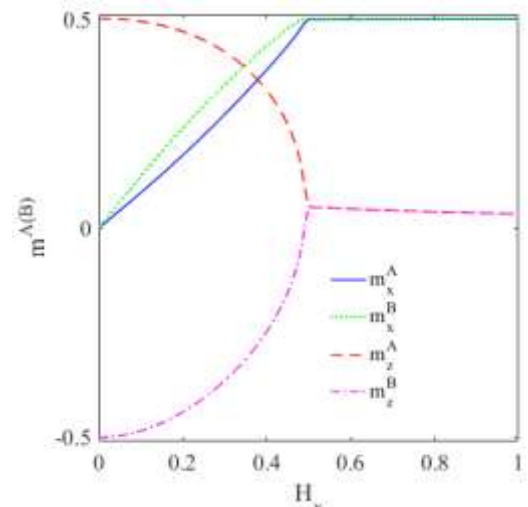
Trong phần tính toán số, chúng tôi sử dụng hằng số tương tác trao đổi $|J|$ giữa các spin lân cận gần nhất trong chuỗi spin làm đơn vị, cụ thể là từ trường ngang và dọc sẽ lần lượt được biểu diễn như $H_x = h^x / |J|$ và $H_z = \mu h^z / |J|$ và nhiệt độ rút gọn là $\tau = k_B T / |J|$.

Hình 1 và hình 2 chỉ ra sự phụ thuộc vào từ trường ngang của độ từ hoá ngang và dọc của hai phân mạng A và B với các giá trị khác nhau của từ trường dọc. Từ hình 1 chúng ta có thể thấy là trong trường hợp không có từ trường dọc ($H_z = 0$), khi tăng từ trường

ngang H_x , $m_z^{A(B)}$ giảm dần về không, trong khi đó $m_x^{A(B)}$ ban đầu từ giá trị 0 tăng dần đến giá trị bão hòa, tức là lúc này trong hệ đang xảy ra một sự chuyển pha từ trạng thái AFM trong đó các spin định hướng theo phương z sang pha FM ở đó các spin sắp xếp theo phương x . Từ đó chúng ta có thể xác định được điểm tới hạn của từ trường ngang H_{xc} , là điểm ứng với $m_z(H_{xc})=0$ và $m_x(H_{xc})$ đạt giá trị bão hòa. Từ hình vẽ 1 chúng tôi xác định được $H_{xc} = 0.502$ và giá trị này phụ thuộc vào giá trị của từ trường dọc H_z . Hành vi phụ thuộc vào từ trường ngang của các độ từ hoá này cũng được quan sát trong hệ Cs_2CoCl_4 [8], sau khi chuyển pha dưới tác dụng của từ trường ngang, hệ Cs_2CoCl_4 được mô tả như một chuỗi trong mô hình XY. Trong trường hợp $H_z \neq 0$, quá trình quay spin theo phương của từ trường ngang diễn ra phức tạp hơn (xem hình 2), lúc này trật tự của các spin A được giữ lại bởi từ trường dọc (bởi vì $\vec{S}_A \uparrow\uparrow \vec{H}_z$) và bị quay dưới tác dụng của trường ngang, trong khi đó các spin B lại quay dưới tác dụng của cả trường dọc (bởi vì $\vec{S}_B \uparrow\downarrow \vec{H}_z$) và trường ngang. Như vậy, có thể thấy được sự cạnh tranh tương tác giữa từ trường dọc, từ trường ngang và tương tác trao đổi, cần chú ý là tương tác trao đổi có tác dụng duy trì trật tự AFM ban đầu của chuỗi spin.



Hình 1. Sự phụ thuộc vào từ trường ngang của độ từ hoá, ở đây $H_z = 0$, $\tau = 0.01$ và $S=0.5$.

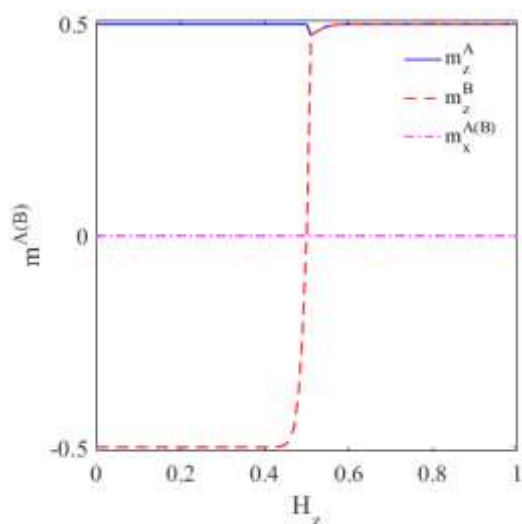


Hình 2. Sự phụ thuộc vào từ trường ngang của độ từ hoá, ở đây $H_z = 0.1$, $\tau = 0.01$ và $S=0.5$.

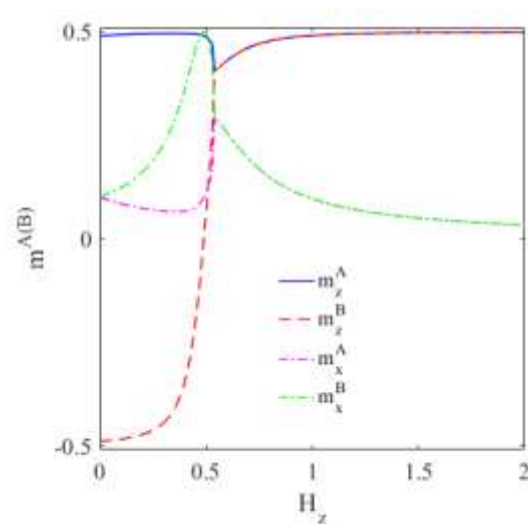
Hình 3 và hình 4 chỉ ra sự phụ thuộc vào từ trường dọc của độ từ hoá ngang và dọc của hai phân mạng A và B với các giá trị khác nhau của từ trường ngang. Từ hình 3 chúng ta có thể thấy là trong trường hợp không có từ trường ngang ($H_x = 0$), độ từ hoá ngang $m_x^{A(B)}$ hoàn toàn bằng không, lúc này chỉ có sự quay của các spin B dưới tác dụng của từ trường dọc, và ở đây chúng ta cũng có thể quan sát thấy sự chuyển pha từ trật tự AFM ($\dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\dots$) sang trật tự FM ($\dots \uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\dots$) khi từ trường dọc đủ lớn. Trong trường hợp $H_x \neq 0$ (xem hình 4), ban đầu độ từ hoá của hệ bao gồm cả hai thành phần dọc và ngang, khi tăng từ trường dọc chúng ta cũng sẽ quan sát thấy sự chuyển pha từ

trật tự AFM (tuy nhiên lúc đầu các spin phân cực không hoàn toàn do sự xuất hiện của các $m_x^{A(B)} \neq 0$, dẫn đến $|m_z^{A(B)}| < S$) sang trật tự FM, tuy nhiên quá trình chuyển pha này diễn ra phức tạp hơn rất nhiều so với trường hợp $H_x = 0$.

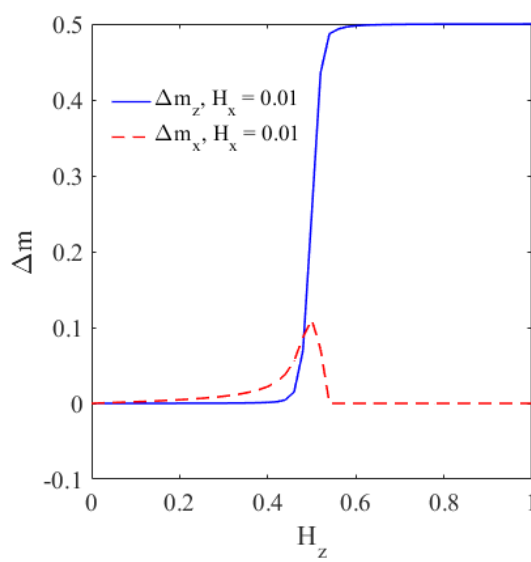
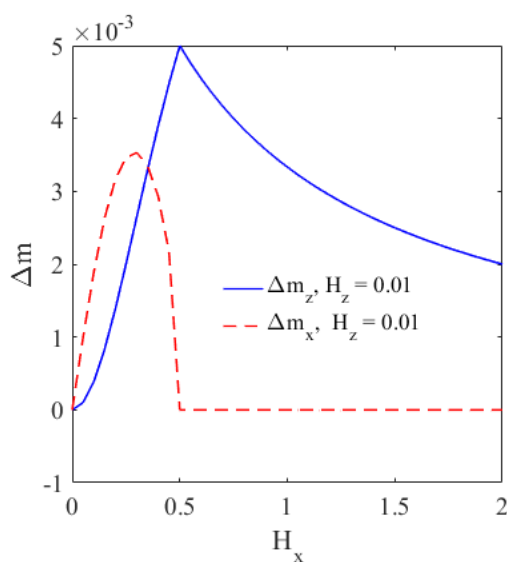
Ngoài ra chúng tôi cũng tìm thấy hiện tượng so le của độ từ hoá được biểu thị qua hai đại lượng $\Delta m_z = \frac{1}{2}(m_z^A - |m_z^B|)$ và $\Delta m_x = \frac{1}{2}(m_x^A - m_x^B)$ (xem hình 5 và hình 6) như được quan sát trong hệ Cs_2CoCl_4 . Hiện tượng này được gây ra bởi sự quay hoàn toàn khác nhau của các spin A và spin B dưới tác dụng của từ trường ngang và từ trường dọc như đã được chỉ ra trong các hình 1, hình 2, hình 3 và hình 4.



Hình 3. Sự phụ thuộc vào từ trường dọc của độ từ hoá, ở đây $H_x = 0$, $\tau = 0.01$ và $S = 0.5$



Hình 4. Sự phụ thuộc vào từ trường dọc của độ từ hoá, ở đây $H_x = 0.1$, $\tau = 0.01$ và $S = 0.5$



Hình 5. Mức độ so le của độ từ hoá dưới ảnh hưởng của từ trường ngang và từ trường dọc

4. KẾT LUẬN

Trong bài báo này, chúng tôi đã chỉ ra các ảnh hưởng quan trọng của từ trường ngang và từ trường dọc lên các độ từ hoá của hai phân mạng của chuỗi spin Ising phản sắt từ trong gần đúng trường trung bình. Từ trường ngang đã làm xuất hiện độ từ hoá ngang $m^x \neq 0$, dẫn đến sự phân cực không hoàn toàn của trật tự phản sắt từ trong chuỗi Ising, tức là $|m^{zA(B)}| < S$. Ngoài ra, dưới tác dụng của các từ trường này, các spin thuộc hai phân mạng quay hoàn toàn khác nhau và là nguyên nhân gây ra các sự chuyển pha và hiện tượng so le của độ từ hoá trong chuỗi spin.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] S. Suzuki, J. I. Inoue, and B. Chakrabarti (2013). *Quantum Ising Phases and Transitions in Transverse Ising Models*, Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag, Berlin.
- [2] J. Rohn, M. Hörmann, C. Genes, and K. P. Schmidt (2020). “Ising model in a light-induced quantized transverse field”, *Phys. Rev. Research*, Vol. 2, No. 2, p.023131 (15), DOI: 10.1103/PhysRevResearch.2.023131.
- [3] P.G. de Gennes (1963). Collective motions of hydrogen bonds, *Solid State Commun.*, Vol. 1, No. 6, pp.132-137, DOI: 10.1016/0038-1098(63)90212-6.
- [4] D. Bitko, T.F. Rosebaum, G. Aeppli (1996). Quantum critical behavior for a model magnet, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 77, No. 5, pp.940-943. DOI: 10.1103/PhysRevLett.77.940.
- [5] D.S. Fisher (1992). Random transverse field Ising spin chains, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 69, No. 3, pp.534-537, DOI: 10.1103/PhysRevLett.69.534.
- [6] O. Canko, E. Albayrak, M. Keskin (2005). The quantum transverse spin-2 Ising model with a bimodal random-field in the pair approximation, *J. Magn. Magn. Mater.*, Vol. 294, No. 1, pp.63-71, DOI: 10.1016/j.jmmm.2004.11.579
- [7] T. Bouziane, M. Saber (2009). The transverse spin-1 Ising model with random interactions, *J. Magn. Magn. Mater.*, Vol. 321, No. 1, pp.17-24, DOI: 10.1016/j.jmmm.2008.07.028.
- [8] M. Kenzelmann, R. Coldea, D. A. Tennant, D. Visser, M. Hofmann, P. Smeibidl, and Z. Tylczynski (2002). Order-to-disorder transition in the XY-like quantum magnet Cs_2CoCl_4 induced by noncommuting applied fields, *Phys. Rev. B*, Vol. 65, No. 14, p.144432 (15), DOI: 10.1103/PhysRevB.65.144432.

Title: ISING MODEL FOR ANTIFERROMAGNETIC SPIN CHAIN IN MAGNETIC FIELDS

Abstract: We have studied properties of the Ising antiferromagnetic spin chain in the presence of a transverse magnetic field h^x and a longitudinal magnetic field h^z . Using Hamiltonian diagonalization and mean field approximation, transverse magnetization and longitudinal magnetization for two sublattices ($\uparrow$ and $\downarrow$) are determined. From these results, we discuss on significant effects of the transverse magnetic field and the longitudinal magnetic field on the antiferromagnetic order of the Ising chain. Besides, we also find out staggered phenomenon of the magnetizations produced by the rotation of the spins under the influence of the magnetic fields.

Keywords: Transverse Ising model, antiferromagnetic spin chain, mean field approximation, longitudinal magnetic field.