

ẢNH HƯỞNG CỦA TƯƠNG TÁC TRAO ĐỔI VÙNG XA LÊN CÁC TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG LỰC HỌC CỦA CHUỖI SPIN LƯỢNG TỬ VỚI MÔ HÌNH HEISENBERG XXZ

PHẠM HƯƠNG THẢO
NGUYỄN THỊ PHƯƠNG THẢO, TRẦN THỊ HƯƠNG THỦY
Khoa Vật lý, trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế
Email: hthao82@gmail.com

Tóm tắt: Các tính chất nhiệt động lực học của chuỗi spin lượng tử được nghiên cứu bằng cách dùng phương pháp tích phân phiếm hàm với mô hình sắt từ XXZ một chiều và tương tác trao đổi vùng xa giữa các thành phần z của các spin. Sự phụ thuộc nhiệt độ và cường độ từ trường ngoài của các đại lượng nhiệt động lực học được đưa ra. Bên cạnh đó, ảnh hưởng của tương tác trao đổi vùng xa lên các tính chất này cũng được nghiên cứu. Các kết quả tính số của chúng tôi khá phù hợp với các kết quả tính số cho chuỗi spin XXZ của các tác giả khác.

Từ khóa: chuỗi spin, phương pháp tích phân phiếm hàm, tương tác vùng xa, các tính chất nhiệt động lực học, mô hình Heisenberg XXZ.

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Các hệ từ tính 1 chiều biểu hiện đa dạng các hiện tượng thú vị liên quan đến bản chất spin lượng tử của hệ, do đó thu hút nhiều sự quan tâm trong thời gian gần đây. Các tính chất nhiệt động học của các hệ từ 1 chiều là một trong những chủ đề nghiên cứu sôi động nhất cả về mặt lý thuyết lẫn thực nghiệm [1], [2], [3], [4], [5]. Trong số các mô hình được sử dụng để mô tả tương tác spin, mô hình Heisenberg lượng tử đóng một vai trò cơ bản và quan trọng. Từ khía cạnh tương tác trao đổi dị hướng, có ba loại mô hình Heisenberg, đó là mô hình XXX, XXZ và XYZ. Các mô hình này cung cấp một nền tảng tốt để nghiên cứu các tính chất nhiệt động học của các hệ từ tính thấp chiều. Về mặt lý thuyết, Tao Xiang [3] sử dụng phương pháp nhóm tái chuẩn hóa ma trận để nghiên cứu các tính chất nhiệt động lực học của chuỗi spin Heisenberg lượng tử với $S=1/2$ và $S=3/2$. J. Sznajd nghiên cứu các tính chất nhiệt động lực học và thăng giáng lượng tử của chuỗi spin ghép cặp [4]. Hơn thế nữa, các tính chất nhiệt động lực học của hệ spin $1/2$ với mô hình XXZ và XYZ với các tương tác vùng xa trong từ trường ngoài đã được nghiên cứu sử dụng phép biến đổi Jordan-Wigner [5]. Trong [5], nhóm Li Jialiang đã đưa ra các kết quả cho $S=1/2$ trong gần đúng trường trung bình. Tuy nhiên, phương pháp tích phân phiếm hàm mới được sử dụng để nghiên cứu hệ spin ba chiều [6] và hệ spin giả hai chiều [7], [8]. Trong bài báo này chúng tôi nghiên cứu ảnh hưởng của tương tác trao đổi vùng xa và dị hướng trao đổi lên các tính chất nhiệt động học của chuỗi spin tuyến tính trong mô hình XXZ sử dụng phương pháp tích phân phiếm hàm có tính đến các thăng giáng spin cho giá trị spin S bất kỳ và so sánh với các kết quả của nhóm Li Jialiang.

2. MÔ HÌNH VÀ CÁC ĐẠI LƯỢNG NHIỆT ĐỘNG LỰC HỌC

Hamiltonian của mô hình chuỗi spin XXZ với tương tác trao đổi vùng xa đồng nhất theo hướng z trong một trường ngoài \vec{h} ($\vec{h} \uparrow \uparrow O_z$) được cho bởi:

$$H = -\sum_j h S_j^z - \frac{1}{2} J \sum_j [S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y] - \frac{1}{2} \frac{I}{N} \sum_{j,j'} S_j^z S_{j'}^z, \quad (1)$$

ở đây I là hằng số tương tác trao đổi vùng xa giữa spin S_j^z với các spin $S_{j'}^z$, N là số spin của chuỗi, J là hằng số tương tác trao đổi giữa spin S_j^α với các spin lân cận gần nhất S_{j+1}^α ($\alpha = x, y$) và $\left(\vec{S}_j\right)^2 = S_j^x S_j^x + S_j^y S_j^y + S_j^z S_j^z = S(S+1)$.

Viết lại (1) dưới dạng:

$$H = H_0 + H_{\text{int}},$$

$$H_0 = \frac{1}{2} N I (k_z = 0) \langle S^z \rangle \langle S^z \rangle - \sum_j (h + I(k_z = 0) \langle S^z \rangle) S_j^z, \quad (2)$$

$$H_{\text{int}} = -\frac{1}{2} \sum_{k_z} \sum_{\alpha=x,y} J(k_z) \delta S^\alpha(k_z) \delta S^\alpha(k_z) - \frac{1}{2} \sum_{k_z} I(k_z) \delta S^z(k_z) \delta S^z(k_z),$$

ở đây

$$I(k_z) = 2 \frac{I}{N} \left(\cos(k_z \cdot a) + \cos(k_z \cdot 2a) + \dots + \cos\left(k_z \cdot \frac{Na}{2}\right) \right), \quad (3)$$

$$J(k_z) = 2J \cos(k_z \cdot a),$$

và

$$S^\alpha(k_z) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j S_j^\alpha \exp[-ik_z z_j], \quad (\alpha = x, y, z), \quad (4)$$

với a là hằng số mạng của chuỗi spin. Các thành phần của các toán tử thăng giáng spin trong (2) được định nghĩa như sau:

$$\delta S_j^z = S_j^z - \langle S_j^z \rangle, \quad \delta S_j^x = S_j^x, \quad \delta S_j^y = S_j^y, \quad (5)$$

ở đây $\langle \dots \rangle = \text{Tr}(e^{-\beta H} \dots) / \text{Tr}(e^{-\beta H})$ và $\beta^{-1} = k_B T$.

Từ (2) ta có thể nhận được biểu thức cho hàm trạng thái Z dưới dạng phiếm hàm:

$$Z = \text{Tr}[\exp(-\beta H)] = \text{Tr} \left[\exp(-\beta H_0) \mathbb{T} \exp \left\{ -\int_0^\beta H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right\} \right], \quad (6)$$

hay

$$\ln Z = -N\beta I(k_z = 0) \langle S^z \rangle \langle S^z \rangle + N \ln \frac{\text{sh}(S+1/2)y}{\text{sh}(y/2)} -$$

$$-\ln \int (d\varphi) \exp \left[-\sum_{\alpha, \vec{q}} \varphi^\alpha(\vec{q}) \varphi^\alpha(-\vec{q}) + \ln \left\langle \hat{\mathbb{T}} \exp \left\{ \sum_{\vec{q}} \beta^{1/2} (I(k_z))^{1/2} \varphi^z(\vec{q}) \delta S^z(\vec{q}) + \sum_{l=\pm, \vec{q}} \beta^{1/2} (J(k_z))^{1/2} \varphi^l(\vec{q}) \delta S^l(\vec{q}) \right\} \right\rangle_0 \right], \quad (7)$$

$$\text{ở đây} \quad y = \beta h + \beta I(k_z = 0) \langle S^z \rangle, \quad (8)$$

$\vec{q} = (k_z, \omega)$ là véctơ sóng hai thành phần, $\omega = 2\pi n / \beta$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, và $(d\varphi)$ được định nghĩa trong [6]:

$$(d\varphi) = \prod_{\alpha} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varphi^\alpha(0)}{\sqrt{2\pi}} \prod_{\vec{q} \neq 0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varphi^{\alpha,c}(\vec{q})}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varphi^{\alpha,s}(\vec{q})}{\sqrt{\pi}}. \quad (9)$$

Phần thực và phần ảo của biến trường $\varphi^\alpha(\vec{q})$ được ký hiệu là $\varphi^{\alpha,c}(\vec{q})$ và $\varphi^{\alpha,s}(\vec{q})$.

Các ký hiệu còn lại trong (7) là:

$$\langle \dots \rangle_0 = \text{Tr}(e^{-\beta H_0} \dots) / \text{Tr}(e^{-\beta H_0});$$

$$\varphi^\pm(\vec{q}) = \frac{1}{2} \left[\varphi^x(\vec{q}) \pm i\varphi^y(\vec{q}) \right]; \quad \delta S^\pm(\vec{q}) = S^\pm(\vec{q}) = S^x(\vec{q}) \pm iS^y(\vec{q}); \quad (10)$$

$$\delta S^z(\vec{q}) = S^z(\vec{q}) - \delta(\vec{q}) N^{1/2} \langle S^z \rangle; \quad \delta(\vec{q}) = \delta(k_z) \delta(\omega).$$

Từ (7) - (10), chúng tôi tìm ra biểu thức cụ thể cho $\ln Z$ của chuỗi spin tuyến tính với mô hình XXZ trong phép gần đúng Gaussian bậc một:

$$\ln Z = -\frac{N}{2} \cdot \beta I(0) \left(\langle S^z \rangle \right)^2 + N \cdot \ln \frac{\text{sh}(S+1/2)y}{\text{sh} \frac{y}{2}} - \frac{1}{2} \sum_{k_z} \ln(1 - \beta b'(y) I(k_z))$$

$$- \sum_{k_z} \ln \left[\frac{1 - \exp(-y + \beta b(y) J(k_z))}{1 - \exp(-y)} \right], \quad (11)$$

với $b(y)$ là hàm Brillouin.

Trong gần đúng trường trung bình, tức là bỏ qua các thăng giáng spin $\delta S_j^\alpha = 0$, lúc đó ta có $\langle S^z \rangle = \langle S^z \rangle_0 = b(y_0)$ với $y_0 = \beta h + \beta I(k_z = 0) \langle S^z \rangle_0$, do đó:

$$\ln Z_0 = -\frac{N}{2} \cdot \beta I(0) (b(y_0))^2 + N \cdot \ln \frac{\text{sh}(S+1/2)y_0}{\text{sh} \frac{y_0}{2}}. \quad (12)$$

Từ (11) và (12) chúng tôi có thể tính được các đại lượng nhiệt động lực học của chuỗi spin như năng lượng tự do F , nội năng U và nhiệt dung riêng C trong gần đúng trường trung bình (MFA) và gần đúng thăng giáng spin (SFA).

Thăng giáng spin δm có thể tính được thông qua các hàm tương quan giữa các thăng giáng (5) của các thành phần spin:

$$\delta m = \left(\left\langle \delta \vec{S}^2 \right\rangle \right)^{1/2}, \quad (13)$$

với

$$\left\langle \delta \vec{S}^2 \right\rangle = \left\langle \delta S^x \delta S^x \right\rangle + \left\langle \delta S^y \delta S^y \right\rangle + \left\langle \delta S^z \delta S^z \right\rangle, \quad (14)$$

$$\left\langle \delta S^z \delta S^z \right\rangle = \frac{b'(y)}{N} \sum_{k_z} \frac{1}{1 - \beta b'(y) I(k_z)},$$

$$\left\langle \delta S^\alpha \delta S^\alpha \right\rangle = \frac{b(y)}{N} \sum_{k_z} \frac{1}{\exp(y - \beta b(y) J(k_z)) - 1}, \quad \alpha = x, y, \quad (15)$$

ở đây $b'(y)$ là đạo hàm cấp một của hàm Brillouin.

Trong lý thuyết thăng giáng spin, khi tính đến bậc một của gần đúng Gaussian, chúng tôi nhận được biểu thức cho độ từ hóa tương đối của mỗi spin:

$$m = \langle S^z \rangle = \sqrt{\left(\vec{S} \right)^2 - \sum_{\alpha=x,y,z} \langle \delta S^\alpha \delta S^\alpha \rangle} = \left\{ S(S+1) - \left\langle \delta \vec{S}^2 \right\rangle \right\}^{1/2}. \quad (16)$$

Từ (16) chúng tôi tính được độ cảm từ của mỗi spin có dạng

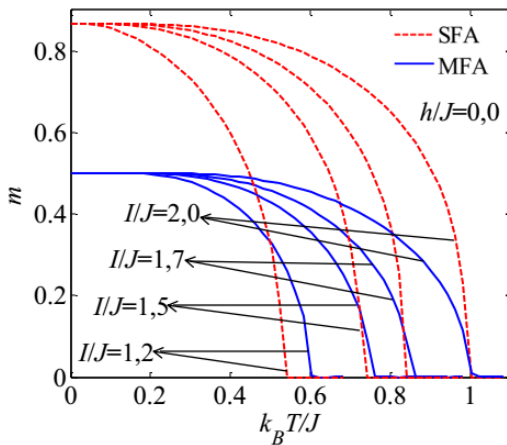
$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = -\frac{1}{2mN} \cdot \frac{\partial y}{\partial h} \sum_{k_z} \left[\frac{b''(y)}{(1 - \beta b'(y)I(k_z))^2} + \frac{b'(y)}{\exp(y - \beta b(y)J(k_z)) - 1} - \frac{b(y)\exp(y - \beta b(y)J(k_z))(1 - \beta b'(y)J(k_z))}{(\exp(y - \beta b(y)J(k_z)) - 1)^2} \right], \quad (17)$$

ở đây $b''(y)$ là đạo hàm cấp hai của hàm Brillouin.

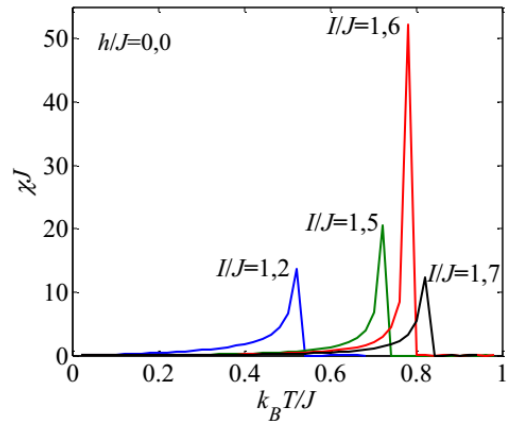
3. TÍNH TOÁN SỐ VÀ THẢO LUẬN

Trong phần tính toán số, chúng tôi sử dụng hằng số tương tác trao đổi giữa các spin lân cận gần nhất J như một thang đo năng lượng mới, cụ thể trường ngoài sẽ được biểu diễn như h/J , tham số tương tác vùng xa là I/J , nhiệt độ là $k_B T/J$ và nhiệt dung riêng là C/k_B .

3.1. Sự phụ thuộc nhiệt độ của các đại lượng nhiệt động lực học

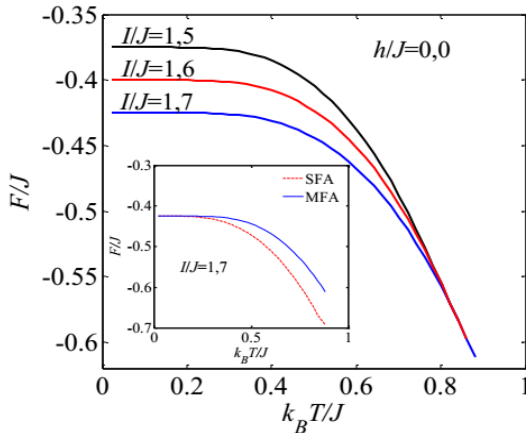


Hình 1. Sự phụ thuộc nhiệt độ của độ từ hóa tương đối với các giá trị khác nhau của tham số tương tác vùng xa I/J khi không có từ trường ngoài trong gần đúng trường trung bình (MFA) và gần đúng thăng giáng spin (SFA), ở đây $S=1/2$.

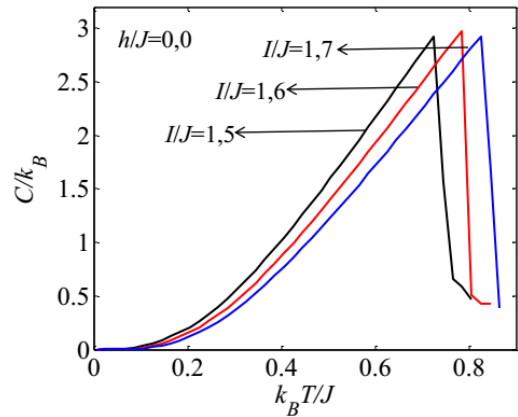


Hình 2. Sự phụ thuộc nhiệt độ của độ cảm từ với các giá trị khác nhau của tham số tương tác vùng xa I/J khi không có từ trường ngoài trong SFA, ở đây $S=1/2$.

Đầu tiên chúng tôi tính toán sự phụ thuộc nhiệt độ của các đại lượng nhiệt động lực học với các giá trị khác nhau của tham số tương tác vùng xa I/J khi không có từ trường ngoài với $S=1/2$. Khi $h/J=0,0$, độ từ hóa, năng lượng tự do và độ cảm từ trên mỗi spin như các hàm của nhiệt độ ở $I/J=1,2, 1,5, 1,6, 1,7$ và $2,0$ được chỉ ra trong các hình 1, 2, 3 và 4. Các kết quả tính số chỉ ra có chuyển pha bậc hai với các tham số được đưa ra như trên (hình 2 và 4) và nhiệt độ tới hạn $k_B T_c/J$ tăng theo tương tác vùng xa. Đây là bởi vì khi I/J tăng, hai số hạng trong H_0 của Hamiltonian H đóng một vai trò chính khi tương tác vùng xa đủ lớn và chiếm ưu thế so với tương tác giữa các thăng giáng spin trong H_{int} , do đó làm tăng trật tự từ trong hệ spin. Kết quả này hoàn toàn phù hợp với các kết quả được chỉ ra trong [5] bởi Li Jialiang và Lei Shuguo, đặc biệt đối với năng lượng tự do F/J trong MFA, các kết quả tính số khá phù hợp. Tuy nhiên, trong đồ thị biểu diễn nhiệt dung riêng C/k_B theo nhiệt độ, các kết quả của chúng tôi chỉ ra một đỉnh không liên tục, đây là điểm chuyển pha bậc 2 của hệ spin và cũng phù hợp với đồ thị biểu diễn độ cảm từ χJ theo nhiệt độ.



Hình 3. Sự phụ thuộc nhiệt độ của năng lượng tự do với các giá trị khác nhau của tham số tương tác vùng xa I/J khi không có từ trường ngoài trong SFA, ở đây $S=1/2$. Hình chèn vào chỉ ra năng lượng tự do trong SFA và MFA với $I/J=1,7$.



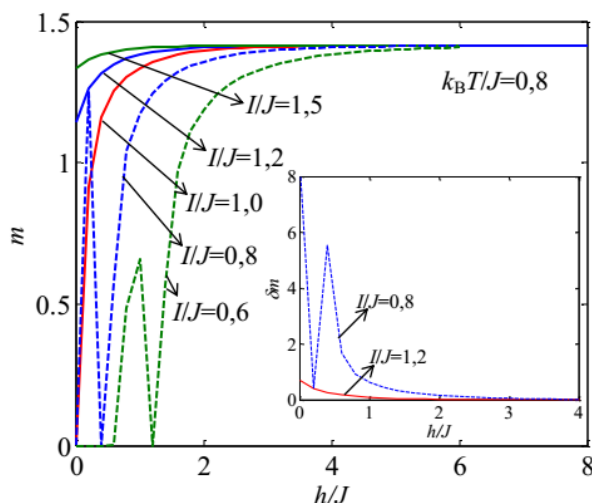
Hình 4. Sự phụ thuộc nhiệt độ của nhiệt dung riêng với các giá trị khác nhau của tham số tương tác vùng xa I/J khi không có từ trường ngoài trong SFA, ở đây $S=1/2$.

Hơn thế nữa, từ hình 1 chúng ta cũng có thể thấy là khi I/J càng tăng, nhiệt độ tới hạn trong SFA càng tiến gần tới kết quả trong MFA, đó là vì khi tương tác vùng xa càng lớn sẽ làm giảm đi các thăng giáng spin trong hệ.

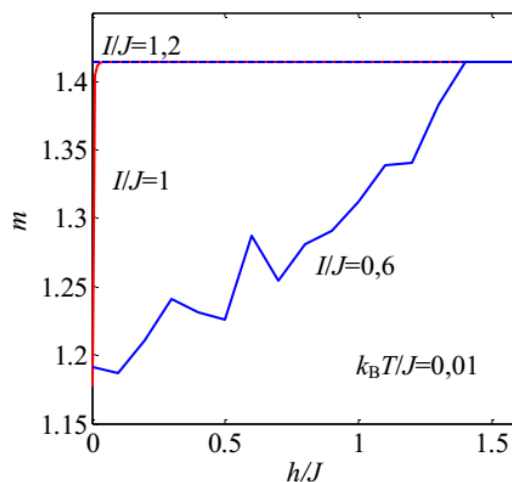
3.2. Sự phụ thuộc từ trường ngoài của các đại lượng nhiệt động lực học

Sự phụ thuộc từ trường ngoài của độ từ hóa được chỉ ra trong hình 5 khi nhiệt độ lớn $k_B T/J=0,8$ và hình 6 khi nhiệt độ nhỏ $k_B T/J=0,01$ với các giá trị khác nhau của I/J . Từ các kết quả tính số trong các hình này có thể thấy là độ từ hóa tăng theo từ trường ngoài và cuối cùng đạt tới hằng số khi tất cả các spin định hướng hoàn toàn theo từ trường ngoài. Đây là kết quả của sự cạnh tranh giữa năng lượng nhiệt và năng lượng từ (được gây ra

bởi từ trường ngoài) của chuỗi spin. Mặc khác từ 2 hình này ta còn thấy rằng khi nhiệt độ lớn dẫn đến thăng giáng spin lớn, do đó với những trường hợp có tương tác vùng xa nhỏ ($I/J=0,6$ và $0,8$ trong hình 5), lúc này các thăng giáng spin chiếm ưu thế nên khi từ trường nhỏ độ từ hóa vẫn chưa ổn định, khi I/J tăng lên làm giảm dần các thăng giáng spin dẫn đến sự ổn định hơn của độ từ hóa. Khi nhiệt độ nhỏ dẫn đến thăng giáng spin nhỏ (hình 6), khi $h/J=0,0$ độ từ hóa trong các trường hợp I/J khác nhau đều có giá trị khác 0, đây chính là độ từ hóa tự phát có trong mỗi vật liệu sắt từ và với trường hợp $I/J=0,6$ độ từ hóa cũng chưa ổn định trong đoạn đầu của h/J .

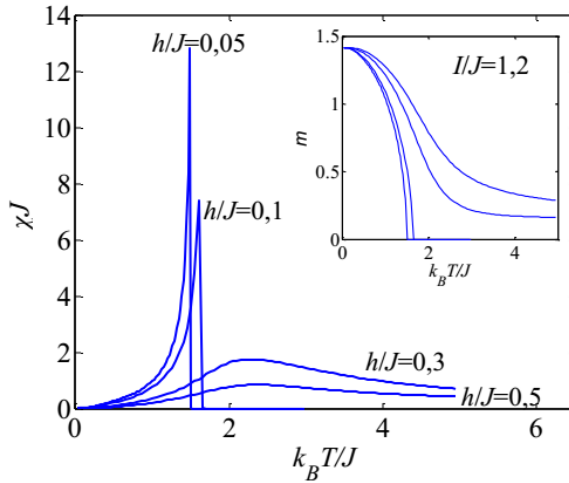


Hình 5. Sự phụ thuộc từ trường ngoài của độ từ hóa với các giá trị khác nhau của tham số tương tác vùng xa I/J , ở đây $S=1$ và $k_B T/J=0,8$. Hình chèn vào chỉ ra thăng giáng spin.



Hình 6. Sự phụ thuộc từ trường ngoài của độ từ hóa với các giá trị khác nhau của tham số tương tác vùng xa I/J , ở đây $S=1$ và $k_B T/J=0,01$.

Hình 7 chỉ ra sự phụ thuộc nhiệt độ của độ cảm từ và độ từ hóa khi $I/J=1,2$ với các giá trị khác nhau của h/J . Có thể thấy khi h/J tăng dần, đỉnh của độ cảm từ cũng dịch dần về phía tăng của nhiệt độ, kết quả này tương ứng với nhiệt độ chuyển pha tăng dần và biến mất khi từ trường ngoài đủ lớn, như vậy trật tự từ của hệ spin không thể bị phá hủy một cách hoàn toàn bởi một nhiệt độ hữu hạn khi có từ trường ngoài đủ lớn.



Hình 7. Sự phụ thuộc nhiệt độ của độ cảm từ với các giá trị khác nhau của từ trường ngoài khi $I/J=1,2$, ở đây $S=1$. Hình chèn vào chỉ ra sự phụ thuộc nhiệt độ của độ từ hóa, các đường cong đi từ trái qua phải tương ứng với h/J tăng dần từ 0,05 - 0,5

Sự phụ thuộc nhiệt độ và từ trường ngoài của mỗi đại lượng nhiệt động lực học trong tính toán của chúng tôi hoàn toàn phù hợp với lý thuyết nhiệt động lực học cho hệ sắt từ [9].

4. KẾT LUẬN

Dựa vào mô hình Heisenberg XXZ với các tương tác vùng xa đồng nhất giữa các thành phần z của các toán tử spin trong một từ trường ngoài và áp dụng phương pháp tích phân phẩm hàm, các tính chất nhiệt động lực học của chuỗi spin tuyến tính đã được nghiên cứu, cụ thể là ảnh hưởng của tham số tương tác vùng xa I/J lên các tính chất nhiệt động lực học của chuỗi trong gần đúng trường trung bình và trong gần đúng thăng giáng spin. Các kết quả tính số phù hợp khá tốt với các kết quả của các tác giả khác trong cùng điều kiện. Hơn thế nữa, sự phụ thuộc nhiệt độ và từ trường ngoài của mỗi đại lượng nhiệt động lực học trong tính toán của chúng tôi hoàn toàn phù hợp với lý thuyết nhiệt động lực học cho hệ sắt từ.

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ nghiên cứu khoa học của Đại học Huế trong đề tài mã số DHH2016-03-83.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] Sugano, T. - Blundell, S.J. - Lancaster, T. - Pratt, F.L. - Mori, H. (2010). “Magnetic order in the purely organic quasi-one-dimensional ferromagnet 2-benzimidazolyl nitronyl nitroxide”, *Physical Review B*, 82, p. 180401(R).
- [2] Shirako, Y. - Satsukawa, H. - Wang, X. X. - Li, J. J. - Guo, Y. F. - Arai, M. - Yamaura, K. - Yoshida, M. - Kojitani, H. - Katsumata, T. - Inaguma, Y. - Hiraki, K. - Takahashi, T. - Akaogi, M. (2011), “Integer spin-chain antiferromagnetism of the 4d oxide CaRuO_3 with post-perovskite structure”, *Physical Review B*, 83, p. 174411.
- [3] Xiang, T. (1998). “Thermodynamics of quantum Heisenberg spin chains”, *Physical Review B*, 58, p. 9142.

- [4] Sznajd, J. (2009). “*Thermodynamics, geometrical frustration and quantum fluctuations in coupled spin chains*”, *Condensed Matter Physics*, 12, p. 697.
- [5] Li, J. - Lei, S. (2008). “Thermodynamic properties of the spin 1/2 ferromagnetic Heisenberg chain with long-range interactions”, *Physics Letters A*, 372, p. 4086.
- [6] Vakarchuk, I.A. - Rudavskii, Yu.K. (1981). “Method of functional intergration in the theory of spin system”, *Theoretical and Mathematical Physics*, 49, p.1002.
- [7] Bach, T.C. - Pham, H.T. (2013). “Thickness dependent properties of magnetic ultrathin films”, *Physica B*, 426, p. 144.
- [8] Bach, T.C. - Pham, H.T. - Nguyen, T.N. (2014). “Role of interactions in size-dependent Curie temperature of magnetic ultrathin films”, *Ieee Transactions On Magnetics*, 50, p. 1100104.
- [9] Chikazumi, S. (1997). *Physics of Ferromagnetism*, Oxford University Press Inc., New York.

Title: INFLUENCE OF LONG-RANGE INTERACTION ON THERMODYNAMIC PROPERTIES OF QUANTUM SPIN CHAIN WITH XXZ HEISENBERG MODEL

Abstract: The thermodynamic properties of the quantum spin chain are investigated using the functional integral method with the one-dimensional XXZ ferromagnetic model and long-range exchange interactions among the z components of the spins. Temperature dependence and external magnetic field strength of the thermodynamic quantities are given. Besides, influence of the long-range exchange interaction on these properties of the spin chain is also studied. Our numerical results are quite in agreement with ones of other authors for the XXZ spin chain.

Keywords: spin chain, functional integral method, long-range interaction, thermodynamic properties, XYZ Heisenberg model.