

ẢNH HƯỞNG CỦA SỰ CẠNH TRANH TƯƠNG TÁC TRAO ĐỔI J_1 - J_2 LÊN CÁC TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG CỦA CHUỖI SPIN S - σ

Phạm Hương Thảo¹

Nguyễn Hữu Cảnh²

TÓM TẮT

Ảnh hưởng của sự cạnh tranh tương tác trao đổi lên các tính chất nhiệt động của chuỗi spin gồm hai phân mạng khác nhau được nghiên cứu trong gần đúng trường trung bình và gần đúng thăng giáng spin sử dụng mô hình J_1 - J_2 , với J_1 là hằng số tương tác trao đổi giữa spin thứ i với các spin lân cận gần nhất và J_2 (J_2') là hằng số tương tác trao đổi giữa spin i với các spin lân cận gần nhất kế tiếp. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ và cường độ từ trường ngoài của các đại lượng nhiệt động được đưa ra trong hai trường hợp (i) $J_1 > 0$, $J_2 > 0$, $J_2' > 0$ (sắt từ-sắt từ) và (ii) $J_1 < 0$, $J_2 > 0$, $J_2' > 0$ (phản sắt từ-sắt từ). Trong trường hợp (ii) trong gần đúng trường trung bình, khi J_1 có giá trị nhỏ, trật tự từ của hệ có thể là feri từ hoặc sắt từ ở nhiệt độ thấp. Các kết quả của chúng tôi trong trường hợp J_1 - J_2 thuộc loại sắt từ-sắt từ khá phù hợp về mặt định tính với các kết quả của nhóm M. Hartel cho chuỗi spin sắt từ J_1 - J_2 .

Từ khóa: Chuỗi spin, các tính chất nhiệt động, mô hình Heisenberg J_1 - J_2 , gần đúng trường trung bình, gần đúng thăng giáng spin

1. Đặt vấn đề

Các tính chất của chuỗi spin là một trong những chủ đề nghiên cứu rộng rãi ở cả hai mảng lý thuyết và thực nghiệm do có nhiều ứng dụng đầy tiềm năng của chuỗi spin. Các nhà nghiên cứu đang xem xét chuỗi spin như một ứng cử viên đầy tiềm năng cho các tiến trình thông tin lượng tử, ví dụ như sử dụng chuỗi spin cho truyền thông lượng tử, đo các trạng thái lượng tử, tạo ra rối lượng tử [1], [2]. Trong số các mô hình được sử dụng để mô tả và giải thích các tính chất của hệ spin lượng tử thì mô hình Heisenberg J_1 - J_2 [3] được sử dụng một cách rộng rãi, trong mô hình này có sự cạnh tranh tương tác giữa tương tác của một spin với các spin lân cận gần nhất (J_1) và tương tác của spin này với

các lân cận gần nhất kế tiếp (J_2). Mô hình này cung cấp một nền tảng tốt để nghiên cứu các tính chất nhiệt động của các hệ từ tính thấp chiều. Trong những năm gần đây sự chú ý này càng được gia tăng do sự phát triển của các vật liệu từ gần với mô hình spin một chiều [4], [5]. Các phép đo sự phụ thuộc từ trường của nhiệt dung riêng và độ từ hóa được nhóm của V. Hardy thực hiện trên các tinh thể $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ [4]. Về mặt lý thuyết, hợp chất này là tập hợp của các chuỗi spin Ising được sắp xếp trên một mạng tam giác. Các tương tác giữa các chuỗi và các spin trong chuỗi lần lượt là sắt từ và phản sắt từ. Phương pháp nhóm tái chuẩn hóa và các tính toán số được nhóm của L.S. Campana sử dụng để nghiên cứu nhiệt dung riêng của

¹Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

²Trường Đại học Nguyễn Huệ

Email: canhdongnai2016@gmail.com

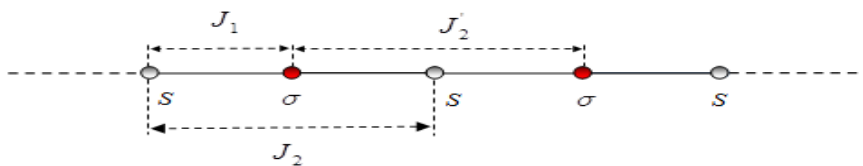
$C_6H_{11}NH_3CuBr_3$ và $C_6H_{11}NH_3CuC_{13}$ [5]. Hai hợp chất này được xây dựng từ các chuỗi spin lượng tử sắt từ và được mô tả bởi mô hình Heisenberg dị hướng. Nhóm của F. Heidrich-Meisner nghiên cứu sự chuyển pha của một chuỗi spin $-1/2$ sắt từ với các tương tác trao đổi dị hướng trong một từ trường ngoài sử dụng phương pháp nhóm chuẩn hóa ma trận mật độ với mô hình Heisenberg J_1 - J_2 [6]. Nhóm của M. Hartel nghiên cứu các tính chất nhiệt động của chuỗi spin $1/2$ với mô hình Heisenberg J_1 - J_2 , tuy nhiên chỉ xét đến trật tự sắt từ của chuỗi [9].

Trong bài báo trước, chúng tôi đã nghiên cứu các tính chất nhiệt động của chuỗi spin trong gần đúng trường trung bình và gần đúng thăng giáng spin sử dụng phương pháp tích phân phiếm hàm [7], tuy nhiên chúng tôi chỉ xét đến tương tác trao đổi giữa các spin lân cận gần nhất. Trong bài báo này chúng tôi nghiên cứu ảnh hưởng của sự cạnh tranh tương tác trao đổi vùng lân cận gần nhất với vùng lân cận gần nhất kế tiếp lên các tính chất nhiệt động của

chuỗi spin tuyến tính với hai phân mạng khác nhau trong mô hình J_1 - J_2 có tính đến các thăng giáng spin cho giá trị spin bất kỳ.

2. Mô hình tính toán

Chúng tôi xét một chuỗi spin tuyến tính gồm N spin S (mô hình Heisenberg) và N spin σ (mô hình Ising, do đó $\sigma = \frac{1}{2}$) nằm xen kẽ lẫn nhau dọc theo hướng Oz (hình 1), như vậy tổng số hạt có trong hệ là $2N$. J_1 là hằng số tương tác trao đổi giữa spin S_j^z với các spin lân cận gần nhất $\sigma_{j\pm 1}^z$, J_2 là hằng số tương tác trao đổi giữa spin S_j^α ($\alpha = x, y, z$) với các spin cùng loại lân cận kế tiếp $S_{j\pm 2}^\alpha$ và J_2' là hằng số tương tác trao đổi giữa các spin σ_j^z với các spin cùng loại lân cận kế tiếp $\sigma_{j\pm 2}^z$.



Hình 1: Chuỗi spin tuyến tính gồm N spin S và N spin σ nằm xen kẽ lẫn nhau dọc theo trục $z'Oz$

Hamiltonian của chuỗi khi có mặt từ trường ngoài $\vec{h} \uparrow \uparrow Oz$ có dạng:

$$\begin{aligned}
H = & -h_1 \sum_{j=1}^N S_j^z - h_2 \sum_{j=1}^N \sigma_j^z - 2 \sum_{j=1}^N J_1 \left(|z_j - z_{j+1}| \right) \sigma_j^z S_{j+1}^z - 2 \sum_{j=1}^N J_1 \left(|z_j - z_{j+1}| \right) S_j^z \sigma_{j+1}^z \\
& - 2 \sum_{j=1}^N J_2 \left(|z_j - z_{j+2}| \right) S_j^\alpha S_{j+2}^\alpha - 2 \sum_{j=1}^N J_2' \left(|z_j - z_{j+2}| \right) \sigma_j^z \sigma_{j+2}^z
\end{aligned} \quad (1)$$

Các thăng giáng spin được định nghĩa như sau:

$$\delta S_j^z = S_j^z - \langle S_j^z \rangle; \delta S_j^x = S_j^x; \delta S_j^y = S_j^y; \delta \sigma_j^z = \sigma_j^z - \langle \sigma_j^z \rangle. \quad (2)$$

Thay (2) vào (1) ta được:

$$\begin{aligned}
H = & - \sum_j \left(h_1 + 8J_1 \langle \sigma^z \rangle + 8J_2 \langle S^z \rangle \right) S_j^z - \sum_j \left(h_2 + 8J_1 \langle S^z \rangle + 8J_2' \langle \sigma^z \rangle \right) \sigma_j^z \\
& + 8NJ_1 \langle \sigma^z \rangle \langle S^z \rangle + 4NJ_2 \langle S^z \rangle \langle S^z \rangle + 4NJ_2' \langle \sigma^z \rangle \langle \sigma^z \rangle \\
& - 4 \sum_{k_z} J_1(k_z) \delta S^z(k_z) \delta \sigma^z(-k_z) - 2 \sum_{k_z, \alpha} J_2(k_z) \delta S^\alpha(k_z) \delta S^\alpha(-k_z) - 2 \sum_{k_z} J_2'(k_z) \delta \sigma^z(k_z) \delta \sigma^z(-k_z),
\end{aligned} \quad (3)$$

trong (3)

$$\delta S_j^\alpha = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\bar{k}} \delta S_{k_z}^\alpha \exp(ik_z z_j), \quad \delta \sigma_j^z = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\bar{k}} \delta \sigma_{k_z}^z \exp(ik_z z_j),$$

và

$$\begin{aligned}
J_1(k_z) &= J_1 \left(\exp(ik_z a) + \exp(-ik_z a) \right) = 2J_1 \cos(k_z a), \\
J_2(k_z) &= J_2 \left(\exp(ik_z 2a) + \exp(-ik_z 2a) \right) = 2J_2 \cos(2k_z a), \\
J_2'(k_z) &= J_2' \left(\exp(ik_z 2a) + \exp(-ik_z 2a) \right) = 2J_2' \cos(2k_z a).
\end{aligned} \quad (4)$$

Từ (3) ta có trường hiệu dụng tác dụng lên mỗi spin của chuỗi có dạng:

$$+ \text{Spin } S_j: y_1 = \beta \left(h_1 + 8J_1 \langle \sigma^z \rangle + 8J_2 \langle S^z \rangle \right). \quad (5)$$

$$+ \text{Spin } \sigma_j: y_2 = \beta \left(h_2 + 8J_1 \langle S^z \rangle + 8J_2' \langle \sigma^z \rangle \right). \quad (6)$$

2.1. Trong gần đúng trường trung bình

Trong gần đúng trường trung bình các thăng giáng spin được bỏ qua do đó

năng lượng tự do của hệ trong gần đúng trường trung bình của hệ có thể nhận được từ (3) với $\delta S^z = 0; \delta \sigma^z = 0$:

$$\begin{aligned}
F_0 = & - \frac{1}{\beta} \ln \left\{ \text{Tr} \left[\exp(-\beta H) \right] \right\} = 8NJ_1 \langle \sigma^z \rangle \langle S^z \rangle + 4NJ_2 \langle S^z \rangle \langle S^z \rangle + 4NJ_2' \langle \sigma^z \rangle \langle \sigma^z \rangle \\
& - \frac{N}{\beta} \ln \left(\frac{\text{sh}(S+1/2)y_1}{\text{sh}(y_1/2)} \right) - \frac{N}{\beta} \ln \left(\frac{\text{sh}(\sigma+1/2)y_2}{\text{sh}(y_2/2)} \right).
\end{aligned} \quad (7)$$

Từ biểu thức năng lượng tự do (7) chúng ta có thể tính được các đại lượng đặc trưng cho các tính chất nhiệt động

của hệ như nội năng, nhiệt dung riêng trong gần đúng trường trung bình. Độ từ

hóa tương đối của mỗi spin trong lý thuyết trường trung bình:

$$m_\sigma = \langle \sigma_j^z \rangle = \frac{\text{Tr}(\sigma_j^z e^{-\beta H_{02}})}{\text{Tr}(e^{-\beta H_{02}})} = b(y_2) = \left(\sigma + \frac{1}{2}\right) \text{cth}\left(\sigma + \frac{1}{2}\right) y_2 - \frac{1}{2} \text{cth} \frac{y_2}{2}. \quad (8)$$

$$m_s = \langle S_j^z \rangle = b(y_1) = \left(S + \frac{1}{2}\right) \text{cth}\left(S + \frac{1}{2}\right) y_1 - \frac{1}{2} \text{cth} \frac{y_1}{2}. \quad (9)$$

với $b(y)$ là hàm Brillouin của đôi số y .

2.2. Trong gần đúng thăng giáng spin

Trong gần đúng thăng giáng spin, chúng tôi chỉ xét trường hợp chuỗi spin với mô hình Ising $S = \sigma = \frac{1}{2}$ ($J_2 = J_1$) và tương tác trao đổi $J_1 - J_2$ thuộc loại tương tác trao đổi sắt từ - sắt từ, lúc này

các spin $S - \sigma$ sắp xếp theo mô hình sắt từ $\uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow \dots \uparrow\uparrow$, do đó $b(y_s) = b(y_\sigma) = b(y_1)$ và $\langle \sigma^z \rangle = \langle S^z \rangle$. Trong trường hợp này Hamiltonian có dạng

$$H = H_0 + H_{\text{int}}, H_0 = H_{00} + H_{01}, H_{\text{int}} = H_{i1} + H_{i2},$$

$$H_{00} = 8NJ_1 \langle S^z \rangle \langle S^z \rangle + 8NJ_2 \langle S^z \rangle \langle S^z \rangle, H_{01} = -\sum_{j=1}^{2N} \frac{y_1}{\beta} S_j^z, y_1 = \left(h_1 + 8J_1 \langle S^z \rangle + 8J_2 \langle S^z \rangle\right). \quad (10)$$

$$H_{i1} = -2 \sum_{k_z} J_1(k_z) \delta S^z(k_z) \delta S^z(-k_z), H_{i2} = -2 \sum_{k_z} J_2(k_z) \delta S^z(k_z) \delta S^z(-k_z).$$

Xét

$$\exp(-\beta H) = \exp(-\beta H_0) \exp(-\beta H_{\text{int}}) = \exp(-\beta H_0) T \exp \left\{ -\int_0^\beta H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right\},$$

với T là toán tử thứ tự thời gian ào $0 \leq \tau \leq \beta$ và

$$H_{\text{int}}(\tau) = H_{i1}(\tau) + H_{i2}(\tau),$$

$$H_{i1}(\tau) = -2 \sum_{k_z} J_1(k_z) \delta S^z(k_z, \tau) \delta S^z(-k_z, \tau), H_{i2}(\tau) = -2 \sum_{k_z} J_2(k_z) \delta S^z(k_z, \tau) \delta S^z(-k_z, \tau),$$

ở đây

$$\delta S_j^z(\tau) = \exp(\tau H_0) \delta S_j^z \exp(-\tau H_0).$$

Ta có

$$\begin{aligned} T \exp \left\{ - \int_0^\beta H_{\text{int}}(\tau) d\tau \right\} &= T \left\{ \exp \left\{ 4 \int_0^\beta \frac{1}{2} \sum_{k_z} J_1(k_z) \delta S^z(k_z, \tau) \delta S^z(-k_z, \tau) d\tau \right\} \right. \\ &\quad \left. \times \exp \left\{ 4 \int_0^\beta \frac{1}{2} \sum_{k_z} J_2(k_z) \delta S^z(k_z, \tau) \delta S^z(-k_z, \tau) d\tau \right\} \right\} \\ &= T \left\{ \exp \left\{ 4 \int_0^\beta \frac{1}{2} \sum_{k_z} (J_1(k_z) + J_2(k_z)) \delta S^z(k_z, \tau) \delta S^z(-k_z, \tau) d\tau \right\} \right\}. \end{aligned} \quad (11)$$

Sử dụng phép biến đổi tích phân Stratonovich – Hubbard (xem [8])

$$\exp \left[\frac{1}{2} \sum_{i,j} x_i \hat{A}_{ij} x_j \right] = \left(\prod_i \int_{-\infty}^{\infty} \frac{dy_i}{\sqrt{2\pi}} \right) \exp \left\{ - \frac{1}{2} \sum_i y_i^2 + \sum_{i,j} x_i A_{ij}^{1/2} y_j \right\}$$

cho số hạng $\exp[\dots]$ dưới toán tử \mathcal{T} trong biểu thức (11), ở đây \hat{A} là ma trận đối xứng, $A_{ij}^{1/2}$ là yếu tố ma trận của ma trận $\hat{A}^{1/2}$, với $(\hat{A}^{1/2})^2 = \hat{A}$, do đó chúng tôi nhận được:

$$\begin{aligned} \exp(-\beta H) &= \exp(-\beta H_0) \times \\ &\int (d\varphi) T \exp \left\{ 4 \left(- \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \varphi_s^z(\vec{q}) \varphi_s^z(-\vec{q}) + \sum_{\vec{q}} (\beta J_1(k_z) + \beta J_2(k_z))^{1/2} \varphi_s^z(\vec{q}) \delta S^z(\vec{q}) \right) \right\}. \end{aligned} \quad (12)$$

trong (12) $\varphi_s^z(\vec{q})$ là phép biến đổi Fourier cho biến trường $\varphi_{k_z}^z(\tau)$ trong khoảng $0 \leq \tau \leq \beta$:

$$\varphi_{k_z}^z(\tau) = \beta^{-1/2} \sum_{\omega} \varphi_{k_z}^z(\omega) e^{i\tau\omega}, \quad (13)$$

ở đây các tần số là $\omega = \frac{2\pi m}{\beta}$, $m = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$; \vec{q} là véc-tơ sóng hai thành phần $\vec{q} = (k_z, \omega)$, $\delta S_{\mu}^{\alpha}(\vec{q}) = \beta^{-1} \int_0^{\beta} e^{i\tau\omega} \delta S_{k_z}^{\alpha}(\tau) d\tau$ và

$$\int (d\varphi) = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varphi_s^z(\vec{q}=0)}{\sqrt{2\pi}} \prod_{\vec{q} \neq 0} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varphi_s^{z,c}(\vec{q})}{\sqrt{\pi}} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{d\varphi_s^{z,s}(\vec{q})}{\sqrt{\pi}}, \quad (14)$$

với $\varphi_s^{z,c}(\vec{q})$ và $\varphi_s^{z,s}(\vec{q})$ là phần thực và phần ảo của biến trường $\varphi_s^z(\vec{q})$,

$$\varphi_s^z(\vec{q}) = \varphi_s^{z,c}(\vec{q}) + i\varphi_s^{z,s}(\vec{q}). \quad (15)$$

Từ (12) chúng tôi tìm biểu diễn tích phân phiếm hàm cho năng lượng tự do:

$$F = -k_B T \ln Z = -k_B T \ln Z_0 + \ln \langle e^{-\beta H_{\text{int}}} \rangle_0 = F_0 + \ln \langle e^{-\beta H_{\text{int}}} \rangle_0 \quad (16)$$

và

$$\ln \langle e^{-\beta H_{\text{int}}} \rangle_0 = \ln \int (d\varphi) \exp \left[4 \left\{ - \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \varphi_s^z(\vec{q}) \varphi_s^z(\vec{q}) - I_{\text{int}}[\varphi_s] \right\} \right], \quad (17)$$

Số hạng thứ hai $I_{\text{int}}[\varphi_S]$ trong (17) là phiếm hàm tương tác:

$$I_{\text{int}}[\varphi_S] = -\ln \left\langle T \exp \left\{ 4 \sum_{\vec{q}} (\beta J_1(k_z) + \beta J_2(k_z))^{1/2} \varphi_S^z(\vec{q}) \delta S^z(\vec{q}) \right\} \right\rangle_0. \quad (18)$$

Theo [8], trong phép gần đúng Gaussian bậc 1, phiếm hàm logarit trong (18) được biểu diễn trong dạng chuỗi như sau:

$$-I_{\text{int}}[\varphi_S] = 4 \sum_{m=2}^{\infty} \frac{1}{m!} \sum_{\vec{q}_1} (\beta J_1(k_{z_1}) + \beta J_2(k_{z_1}))^{1/2} \dots (\beta J_1(k_{z_m}) + \beta J_2(k_{z_m}))^{1/2} \times \varphi_S^{z_1}(\vec{q}_1) \dots \varphi_S^{z_m}(\vec{q}_m) \delta(\omega_1) \delta(\omega_2) \delta(k_{z_1} + k_{z_2}) b'(y_1), \quad (19)$$

với $b(y_1)$ và $b^{(m)}(y_1)$ là hàm Brillouin và các đạo hàm cấp m của hàm.

Tính toán tích phân phiếm hàm biểu diễn trong (17) với $I_{\text{int}}[\varphi_S]$ được cho trong (19), chúng tôi nhận được biểu thức của năng lượng tự do của chuỗi spin khi có tính đến các thăng giáng spin:

$$F = 8N(J_1 + J_2) \left(\langle S^z \rangle \right)^2 - \frac{2N}{\beta} \ln \left(\frac{\text{sh}(S+1/2)y_1}{\text{sh}(y_1/2)} \right) + \frac{2}{\beta} \sum_{k_z} \ln \left(1 - \beta b'(y_1) (J_1(k_z) + J_2(k_z)) \right). \quad (20)$$

Độ từ hóa toàn phần của hệ được đưa ra bởi

$$m_S = \frac{\sum_j \langle S_j^z \rangle}{N} = -\frac{1}{N} \frac{\partial F}{\partial h} = -16(J_1 + J_2) b(y_1) b'(y_1) \frac{\partial y_1}{\partial h} + 2 \frac{\partial \left(\ln \left(\frac{\text{sh}(S+1/2)y_1}{\text{sh}(y_1/2)} \right) \right)}{\partial y_1} \frac{\partial y_1}{\partial h} + \frac{2}{N} \frac{\beta (J_1(k_z) + J_2(k_z)) b''(y_1) \frac{\partial y_1}{\partial h}}{1 - \beta (J_1(k_z) + J_2(k_z)) b'(y_1)}. \quad (21)$$

3. Các tính toán số và thảo luận

Để tính số chúng tôi biểu diễn các đại lượng nhiệt động theo đơn vị của hằng số tương tác trao đổi $|J_1|$ hoặc $|J_2|$, tức là các tham số như cường độ từ trường ngoài được biểu diễn là $h/|J_{1,2}|$, độ cảm từ là $\chi|J_{1,2}|$, nhiệt độ là $k_B T/|J_{1,2}|$, năng lượng tự do là $F/|J_{1,2}|$, nội năng là $U/|J_{1,2}|$ và nhiệt dung riêng C/k_B . Để có thể đưa ra được sự phụ thuộc nhiệt độ và từ trường ngoài của các đại lượng nhiệt động chúng tôi sử dụng phần mềm tính toán số matlab, viết chương trình để giải số hệ phương trình phi tuyến (5) và (6), từ đó tìm dưới

dạng số các đại lượng nhiệt động của chuỗi spin với sự cạnh tranh tương tác trao đổi J_1 - J_2 (J_2 được xét theo J_1).

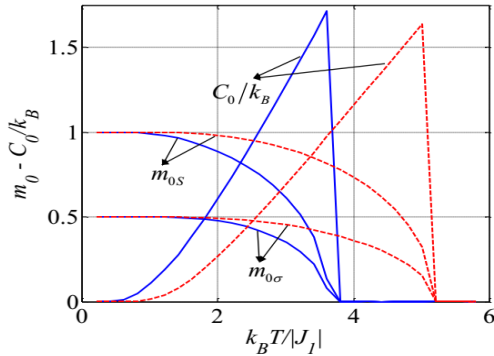
3.1. Trong gần đúng trường trung bình (MFA)

a. Trường hợp tương tác trao đổi sắt từ - sắt từ: $J_1 > 0$ và $J_2 > 0$

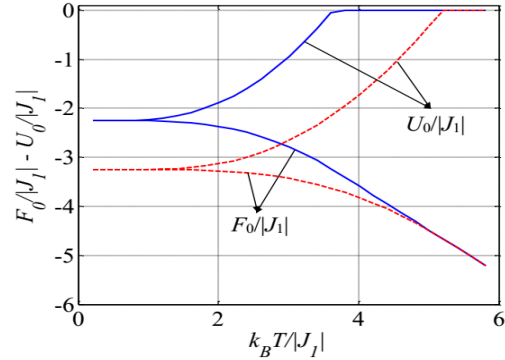
Hình 2 biểu diễn sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các đại lượng nhiệt động khi không có từ trường ngoài với các giá trị khác nhau của J_2 ($J_2 > 0$) và $J_1 > 0$ được giữ không đổi, ở đây chúng tôi lấy $J_2 = J_1$. Dựa vào hình 2.(a) có thể thấy là trong trường hợp $J_1 > 0$, các spin S và σ sắp xếp theo trật tự sắt từ do đó m_{0S}

và $m_{0\sigma}$ nhận các giá trị dương, lúc này J_1 - J_2 hỗ trợ cho nhau, J_2 càng lớn càng gia tăng trật tự từ có trong hệ, dẫn đến nhiệt độ Curie tăng theo J_2 . Đồng thời

cũng có thể thấy có chuyển pha bậc hai trong hệ, đỉnh của đường biểu diễn nhiệt dung riêng C_0/k_B ứng với nhiệt độ chuyển pha của hệ.



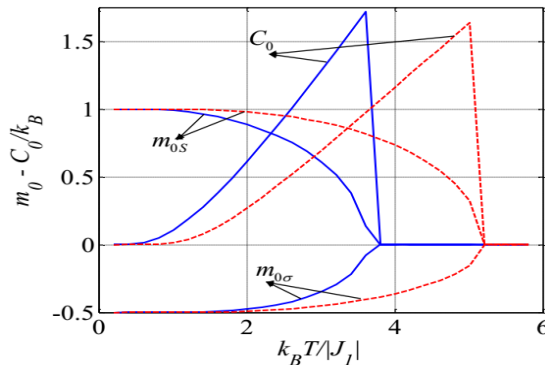
(a)



(b)

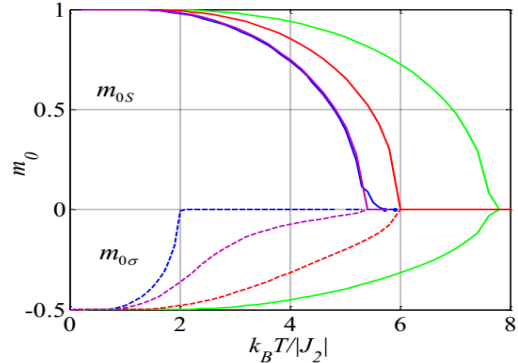
Hình 2: Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các đại lượng nhiệt động của chuỗi spin trong trường hợp $J_1 > 0, J_2 > 0$: $J_2 = 0, 1J_1$ (đường liền nét); $J_2 = 0, 5J_1$ (đường đứt nét), $J_2 = J_2$, ở đây $h=0, S=1, \sigma = 1/2$

b. Trường hợp tương tác trao đổi phản sắt từ - sắt từ: $J_1 < 0$ và $J_2 > 0$



Hình 3: Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các đại lượng nhiệt động của chuỗi spin trong trường hợp $J_1 < 0$ (không đổi), $J_2 > 0$: $J_2 = -0, 1J_1$ (đường liền nét); $J_2 = -0, 5J_1$ (đường đứt nét), $J_2 = J_2$, ở đây $h=0, S=1, \sigma = 1/2$

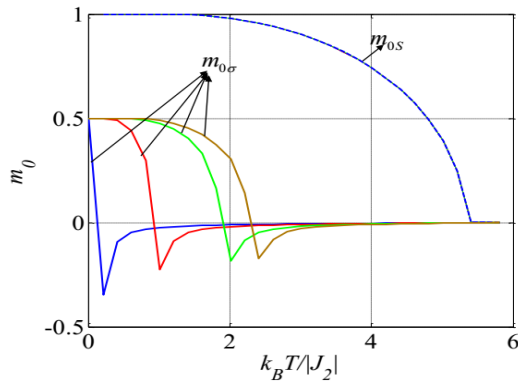
Hình 3 biểu diễn sự phụ thuộc nhiệt độ của các đại lượng nhiệt động khi không có từ trường ngoài với các giá trị khác nhau của J_2 ($J_2 > 0$) và $J_1 < 0$ được



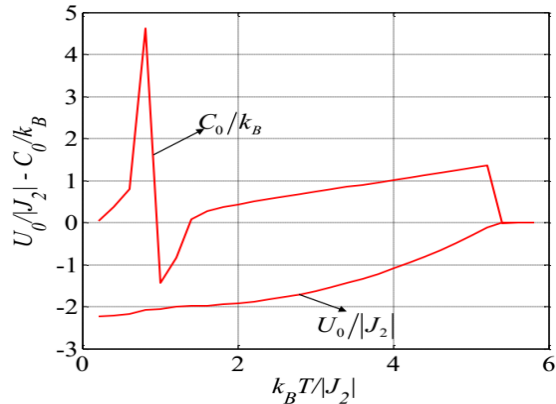
Hình 4: Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa trên mỗi phân mạng của chuỗi spin trong trường hợp $J_2 > 0$ (không đổi), $J_1 < 0$: các đường đi từ trái qua phải lần lượt ứng với $J_1 = 0$; $J_1 = -0, 1J_2$; $J_1 = -0, 5J_2$; và $J_1 = -1, 2J_2$, ở đây $J_2 = J_2, h=0, S=1, \sigma = 1/2$

giữ không đổi. Dựa vào hình 3 có thể thấy là trong trường hợp $J_1 < 0$, các spin S và σ sắp xếp theo trật tự phản sắt từ, do đó m_{0S} nhận các giá trị dương và

$m_{0\sigma}$ nhận các giá trị âm, vì $S=1$ và $\sigma = \frac{1}{2}$ nên hệ tạo thành một chuỗi feri từ, có các tính chất giống như một chuỗi



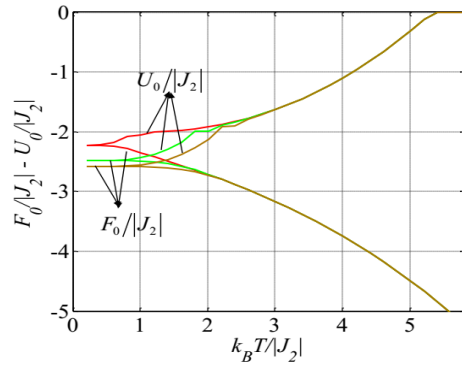
Hình 5: Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa của chuỗi spin trong trường hợp $J_2 > 0$ (không đổi), $J_1 = -0,01J_2$: các đường đi từ trái qua phải lần lượt ứng với $J_2' = 0,1J_2$; $J_2' = 0,5J_2$; $J_2' = J_2$; và $J_2' = 1,2J_2$, ở đây $h=0$, $S=1$, $\sigma = 1/2$



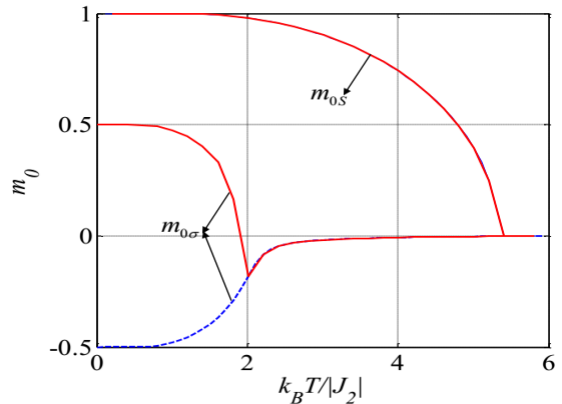
Hình 7: Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của nhiệt dung riêng của chuỗi spin trong trường hợp $J_2 > 0$ (không đổi), $J_1 = -0,010J_2$; $J_2' = 0,5J_2$, ở đây $h=0$, $S=1$, $\sigma = 1/2$

Hình 4 biểu diễn sự phụ thuộc nhiệt độ của các độ từ hóa khi không có từ trường ngoài với các giá trị khác nhau

sắt từ (tuy nhiên khác nhau về trật tự từ), J_2 càng lớn càng gia tăng trật tự từ có trong hệ, dẫn đến nhiệt độ chuyển pha tăng theo J_2 .



Hình 6: Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các đại lượng nhiệt động của chuỗi spin trong trường hợp $J_2 > 0$ (không đổi), $J_1 = -0,010J_2$: các đường đi từ trên xuống dưới lần lượt ứng với $J_2' = 0,5J_2$; $J_2' = J_2$; và $J_2' = 1,2J_2$, ở đây $h=0$, $S=1$, $\sigma = 1/2$

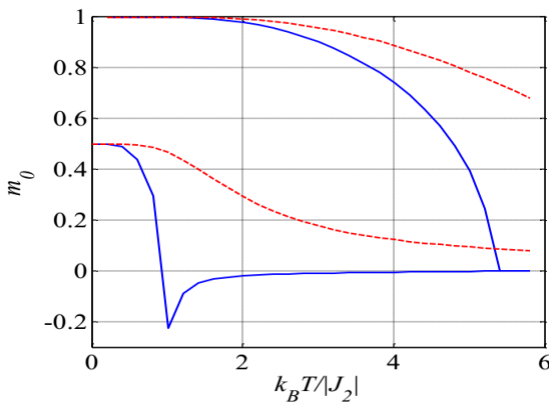


Hình 8: Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa của chuỗi spin trong trường hợp $J_2 > 0$, $J_1 = -0,010J_2$; $J_2' = J_2$, ở đây $h=0$, $S=1$, $\sigma = 1/2$. Đường liền nét ứng với trật tự sắt từ và đường đứt nét ứng với trật tự feri từ của hệ khi $k_B T / |J_2|$ nhỏ của $J_1 (J_1 < 0)$ và $J_2 > 0$ được giữ không đổi. Từ hình 3 có thể thấy là khi $J_1 = 0$, hệ trở thành 2 chuỗi spin S và σ hoàn

toàn độc lập với nhau và có nhiệt độ chuyển pha khác nhau (lúc này chuỗi spin S và σ có thể có trật tự sắt từ ($\uparrow_S \uparrow_\sigma$) hoặc feri từ ($\uparrow_S \downarrow_\sigma$)). Khi $J_1 \neq 0$ ($J_1 < 0$), tức là có tương tác trao đổi giữa spin S và spin σ , chúng tôi đưa ra các trường hợp sau:

+ Nếu J_1 lớn (ví dụ như $|J_1|=0,5J_2$): trật tự từ trong hệ lúc này là feri từ, nhiệt độ chuyển pha tăng dần khi $|J_1|$ tăng dần. Như vậy có thể thấy $|J_1|$ củng cố thêm trật tự feri từ của hệ.

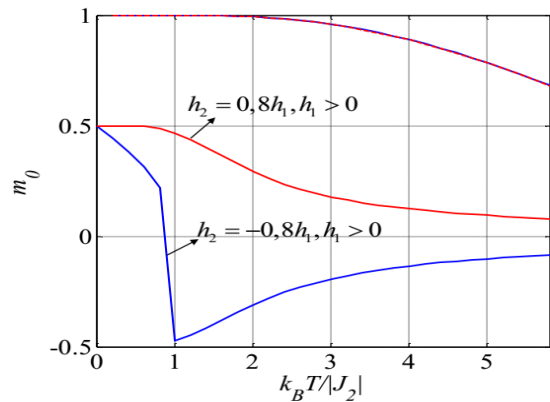
+ Nếu $J_1 < 0$ và có giá trị nhỏ so với J_2 ($|J_1|=0,01J_2$), từ hình 5 chúng ta có



Hình 9: Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa của chuỗi spin với các giá trị khác nhau của từ trường ngoài $h_1=0$ (đường liền nét) và $h_1=2, h_2=0,8h_1$ (đường đứt nét) trong trường hợp $J_2>0, J_1=-0,01J_2: J_2=0,5J_2$, ở đây $S=1, \sigma=1/2$

Trong trường hợp $J_1=-0,01J_2$, chúng tôi tiếp tục xét sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa với các giá trị khác nhau của từ trường ngoài với trật tự ban đầu của hệ là sắt từ được biểu diễn trong hình 9 và hình 10. Trong hình 9 $h_1>0$ và $h_2=0,8h_1$, tức là các spin của 2 phân mạng đều hướng theo hướng

thể thấy là do tương tác trao đổi phản sắt từ giữa $S-\sigma$ rất nhỏ so với tương tác trao đổi sắt từ $S-S$ (J_2) và $\sigma-\sigma$ (J_2') nên cấu trúc từ của hệ có thể là trật tự sắt từ hoặc feri từ. Dựa vào hình 5 có thể thấy là nếu ban đầu hệ có trật tự sắt từ thì khi nhiệt độ tăng dần thì độ từ hóa của spin $m_{0\sigma}$ giảm dần về 0 và sau đó đổi hướng, lúc này hệ chuyển từ trật tự sắt từ sang feri từ. Do đó ở đường biểu diễn sự phụ thuộc vào nhiệt độ của nội năng (hình 6) và nhiệt dung riêng (hình 7) xuất hiện các điểm gián đoạn ứng với sự thay đổi trật tự từ trong hệ.

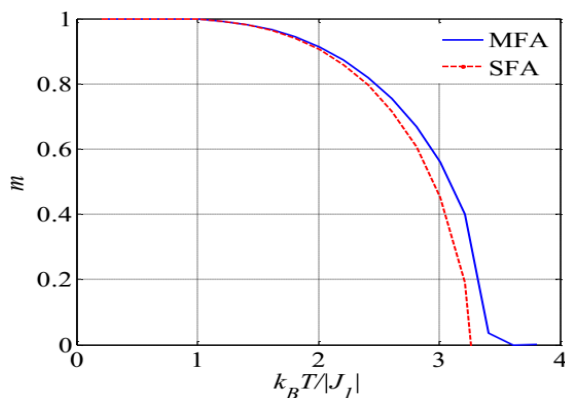


Hình 10: Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa của chuỗi spin khi có từ trường ngoài $h_1=2$, trong trường hợp $J_2>0, J_1=-0,01J_2: J_2=0,5J_2$, ở đây $S=1, \sigma=1/2$

của từ trường ngoài, do có từ trường ngoài đủ lớn nên khi nhiệt độ tăng lên không xuất hiện trật tự feri từ như trong trường hợp không có từ trường ngoài. Trong hình 10, biểu diễn sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa khi $h_1=2, h_2=0,8h_1$ (các spin đều hướng theo hướng của từ trường ngoài) và $h_1=2, h_2=-$

$0,8h_1$ (spin S hướng theo hướng của từ trường ngoài, spin σ hướng ngược với hướng của từ trường ngoài), từ hình 10 ta có thể thấy là trong trường hợp $h_1=2$, $h_2=-0,8h_1$, khi có từ trường ngoài đủ lớn các spin σ ban đầu hướng theo hướng của spin S nhưng sau đó sẽ dần xoay theo hướng ngược lại (do $J_1 < 0$), $|m_{0\sigma}|$ đạt đến giá trị cực đại ($\max(|m_{0\sigma}|) = 0,5$) và giá trị giảm dần về không khi nhiệt độ đạt tới nhiệt độ chuyển pha).

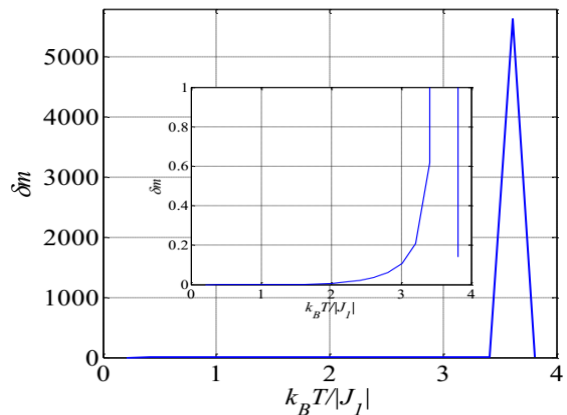
3.2. Trong gần đúng thăng giáng spin (SFA)



Hình 11: Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa của chuỗi spin trong MFA và SFA khi không có từ trường ngoài, ở đây $S = \sigma = 1/2$

Từ hình 12 có thể thấy thăng giáng spin tăng dần từ giá trị 0 ứng với nhiệt độ $k_B T / J_1 = 0$ và đạt đến giá trị cực đại tại điểm chuyển pha của hệ trong gần đúng trường trung bình. Đó là bởi vì trong tính toán của chúng tôi trong gần đúng thăng giáng spin cho năng lượng

Trong gần đúng thăng giáng spin, chúng tôi chỉ xét trường hợp tương tác trao đổi J_1 - J_2 thuộc loại sắt từ-sắt từ. Hình 11 và hình 12 biểu diễn sự phụ thuộc nhiệt độ của độ từ hóa và thăng giáng spin trong gần đúng trường trung bình (MFA) và gần đúng thăng giáng spin (SFA). Từ 2 hình này có thể thấy trong SFA do sự xuất hiện của các thăng giáng spin đã ảnh hưởng đến trật tự từ của hệ, làm giảm nhiệt độ chuyển pha (trong MFA không có các thăng giáng spin).



Hình 12: Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của thăng giáng spin của chuỗi spin trong SFA khi không có từ trường ngoài, ở đây

$$S = \sigma = 1/2$$

tự do và đã lấy $\langle S^z \rangle \approx \langle S^z \rangle_0$. Vấn đề này sẽ được chúng tôi giải quyết trong bài báo sau.

Các đường biểu diễn sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các đại lượng nhiệt động của chuỗi spin sắt từ trong gần đúng trường trung bình và gần đúng thăng giáng spin khá phù hợp về mặt

định tính với các kết quả của nhóm M. Hartel [9].

4. Kết luận

Dựa vào mô hình Heisenberg J_1 - J_2 chúng tôi đã nghiên cứu ảnh hưởng của sự cạnh tranh các tương tác trao đổi giữa các spin lân cận gần nhất (J_1) và các spin lân cận gần nhất kế tiếp (J_2 và J_2') lên các tính chất nhiệt động của chuỗi spin tuyến tính trong gần đúng trường trung bình (MFA) và gần đúng thăng giáng spin (SFA). Các kết quả tính số đã chỉ ra sự phụ thuộc vào nhiệt độ và vào từ trường ngoài của các đại lượng nhiệt động trong 2 phép gần

đúng này. Trong MFA, khi J_1 - J_2 thuộc loại phản sắt từ - sắt từ và $|J_1|$ nhỏ, ban đầu hệ có thể có trật tự sắt từ hoặc feri từ, dưới ảnh hưởng của nhiệt độ và từ trường ngoài, sẽ có các chuyển pha trật tự trong hệ, dẫn đến các điểm gián đoạn trong các đường biểu diễn các đại lượng nhiệt động. Từ các kết quả tính số chúng tôi đã so sánh các kết quả trong MFA và SFA khi J_1 - J_2 thuộc loại sắt từ - sắt từ, chúng tôi thấy rằng các kết quả của chúng tôi khá phù hợp về mặt định tính với các kết quả của nhóm M. Hartel.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. P. Lou and J.Y. Lee (2006), "Block-block entanglement and quantum phase transition in the spin-12XX chain", *Physical Review B*, 74, p. 134402
2. Sima Pouyandeh and Farhad Shahbazi (2015), "Quantum state transfer in XXZ spin chains: A measurement induced transport method", *International Journal of Quantum Information*, 13, p. 1550030
3. J. Sirker, Zheng Weihong, O. P. Sushkov, and J. Oitmaa (2006), " J_1 - J_2 model: First-order phase transition versus deconfinement of spinons", *Physical Review B*, 73, p. 184420
4. V. Hardy and S. Lambert, M. R. Lees and D. McK. Paul ((2003)), "Specific heat and magnetization study on single crystals of the frustrated quasi-one-dimensional oxide $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ ", *Physical Review B*, 68, p. 014424
5. L.S. Campana, A. Caramico O'Auria, U. Esposito, and G. Kamieniarz (1990), "Specific heat of quantum-spin chains: Application to $(\text{C}_6\text{H}_{11}\text{NH}_3)\text{CuBr}_3$ and $(\text{C}_6\text{H}_{11}\text{NH}_3)\text{CuCl}_3$ ", *Physical Review B*, 41
6. F. Heidrich-Meisner, I.P. McCulloch, and A.K. Kolezhuk (2009), "Phase diagram of an anisotropic frustrated ferromagnetic spin-1/2 chain in a magnetic field: A density matrix renormalization group study", *Physical Review B*, 80, p. 144417
7. Phạm Hương Thảo (2017), "Ảnh hưởng của thăng giáng spin lên các tính chất nhiệt động lực học của chuỗi spin lượng tử với mô hình Heisenberg đẳng hướng", *Hue University Journal of Science: Natural Science*, 126, p. 5

8. I.A.Vakarchuk and Yu.K.Rudavskii (1981). “Method of functional intergration in the theory of spin system”, *Theoretical and Mathematical Physics*, 49, p.1002

9. M. Hartel and J. Richter, D. Ihle (2011), “Thermodynamics of the frustrated one-dimensional spin- 1 2 Heisenberg ferromagnet in a magnetic field”, *Physical Review B*, 83, p. 214412

INFLUENCE OF COMPETITION BETWEEN J_1 - J_2 EXCHANGE INTERACTIONS ON THERMODYNAMIC PROPERTIES OF $S - \sigma$ SPIN CHAIN

ABSTRACT

Influence of competition between J_1 - J_2 exchange interactions on thermodynamic properties of $S - \sigma$ spin chain are investigated in mean field approximation and spin fluctuation approximation using J_1 - J_2 model, here J_1 is exchange interation constant between a i^{th} spin with nearest neighbors and J_2 (J_2') is exchange interation constant between the spin with next nearest neighbors. Dependence on temperature and on external magnetic field strength of the thermodynamic quantities are given in two case (i) $J_1 > 0$, $J_2 > 0$, $J_2' > 0$ (ferromagnetic-ferromagnetic) and (ii) $J_1 < 0$, $J_2 > 0$, $J_2' > 0$ (antiferromagnetic-ferromagnetic). In (ii), the magnetic order of the system can be ferromagnetic or ferrimagnetic in range of low temperature. Our numerical results in case of ferromagnetic – ferromagnetic J_1 - J_2 are in agreement with ones of M. Hartel for the J_1 - J_2 spin chain.

Keywords: *Spin chain, thermodynamic properties, J_1 - J_2 Heisenberg model, mean field approximation, spin fluctuation approximation*

(Received: 2/5/2018, Revised: 30/5/2018, Accepted for publication: 24/12/2018)