

SỰ CHUYỂN PHA TRONG MỘT HỆ SPIN VẤP TRÊN MẠNG HÌNH VUÔNG VỚI MÔ HÌNH ISING $J_1 - J_2$

Ngô Thị Thuận¹

Hoàng Đình Long²

Huỳnh Lâm Xuân Hoanh²

Nguyễn Như Lê²

Phạm Hương Thảo^{2}*

¹Trường Đại học Y Dược, Đại học Huế

²Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

*Tác giả liên hệ: Phạm Hương Thảo - Email: phamhuongthao@dhsphue.edu.vn

(Ngày nhận bài: 16/10/2023, ngày nhận bài chỉnh sửa: 12/11/2023, ngày duyệt đăng: 18/12/2023)

TÓM TẮT

Trong bài báo này, mô hình Ising $J_1 - J_2$ được sử dụng để nghiên cứu các tính chất từ và sự chuyển pha của một hệ spin vấp trên mạng hình vuông đơn giản khi có mặt của từ trường ngang h^x và từ trường dọc h^z trong phép gần đúng trường trung bình. Từ đó, chúng tôi nhận được các kết quả cho momen từ dọc và độ cảm từ dọc phụ thuộc vào tham số cạnh tranh tương tác $p = J_2/J_1$ và chỉ ra giá trị tới hạn của p ở trạng thái cơ bản, phù hợp với những nghiên cứu trước đây. Ngoài ra, chúng tôi cũng phân tích vai trò của từ trường lên các tính chất của hệ dưới ảnh hưởng của cạnh tranh tương tác.

Từ khóa: Mô hình Ising $J_1 - J_2$, mạng hình vuông, thăng giáng lượng tử, hệ spin vấp, sự chuyển pha

1. Đặt vấn đề

Các hệ spin thấp chiều thể hiện nhiều hiện tượng vật lý thú vị khi có sự hiện diện của từ trường (Vasiliev và nnk., 2018), (Thao, 2022). Ngoài ra, khi đưa vào các hệ này sự cạnh tranh giữa các tương tác trao đổi, hay còn gọi là các hệ spin vấp, làm cho các hiện tượng vật lý trong các hệ như vậy trở nên hấp dẫn hơn (Vasiliev và nnk., 2018), (Hu & Wang, 2017), (Thao, 2021). Với sự hiện diện của từ trường và hiện tượng vấp spin, các hệ này thể hiện những hành vi cực kỳ phức tạp, bị chi phối bởi các hiệu ứng lượng tử, chẳng hạn như sự xuất hiện của các trạng thái ổn định trong đường cong từ hóa (Thao, 2021),

(Hu và nnk., 2013) hoặc các pha từ khác lạ và sự chuyển pha lượng tử xảy ra trong các hệ (Vasiliev và nnk., 2018). Sự chuyển pha lượng tử này có thể xảy ra bằng cách điều chỉnh một số tham số như từ trường, sự dị hướng, sự pha tạp hoặc sự cạnh tranh giữa các tương tác trao đổi (Vasiliev và nnk., 2018), (Thao, 2022), (Thao, 2021). Do đó, theo chúng tôi, nghiên cứu các hệ spin vấp với sự cạnh tranh giữa các tương tác trao đổi lân cận gần nhất sắt từ (FM - $J_1 > 0$) và lân cận gần nhất thứ hai phản sắt từ (AFM - $J_2 < 0$) được đặt trong một từ trường ngoài sẽ đem lại những kết quả nghiên cứu thú vị.

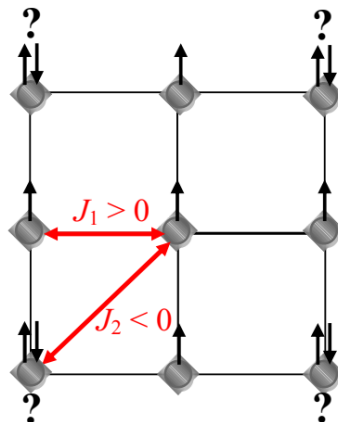
Trong bài báo này, mô hình Ising $J_1 - J_2$ ($J_1 > 0, J_2 < 0$) được sử dụng để nghiên cứu các tính chất và sự chuyển pha của hệ spin vấp trên một mạng hình vuông đơn giản trong phép gần đúng trường trung bình. Trong các hệ như vậy, ảnh hưởng của thăng giáng spin được gây ra bởi hiệu ứng kích thước và sự cạnh tranh giữa các tương tác là rất đáng kể. Tuy nhiên, tính dị hướng mạnh của mô hình Ising sẽ làm suy giảm các thăng giáng spin. Các tính toán trước đây của chúng tôi cũng đã chỉ ra rằng khi sử dụng mô hình Ising thì vai trò của các thăng giáng spin ở nhiệt độ rất thấp là không đáng kể (Thao, 2022), (Thao, 2021), do đó theo chúng tôi phép gần đúng trường trung bình (bỏ qua sự đóng góp của các thăng giáng spin) được sử dụng trong bài báo này là hợp lý và đem lại các kết quả khá chính xác. Ngoài ra, trong bài báo này, sự cạnh tranh giữa các tương tác trao đổi và từ trường có thể đóng vai trò như các thăng giáng lượng tử và gây ra sự chuyển pha trong hệ. Theo như chúng

tôi tìm hiểu, trong suốt thời gian qua mô hình Ising $J_1 - J_2$ được sử dụng rộng rãi để nghiên cứu tính chất của các hệ spin vấp (Kalz và nnk., 2011), (Morán-López và nnk., 1993), (Oitmaa, 2020) một mặt do tính đơn giản của mô hình, mặt khác mô hình có thể mô tả tốt tính chất của nhiều hợp chất trong thực tế như là mặt FeAs của hợp chất $\text{BaFe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ (Xu & Yao, 2018), BaNd_2O_4 (Aczel và nnk., 2014), hay $\text{NdTa}_7\text{O}_{19}$ (Arh và nnk., 2022).

2. Mô hình lý thuyết

Xét một hệ spin vấp gồm N spin S được sắp xếp trên một mạng hình vuông đơn giản như được chỉ ra trong hình 1. Mô hình Ising $J_1 - J_2$ cho hệ spin này được đặt trong một từ trường ngoài $\vec{h} = h^x \vec{e}_x + h^z \vec{e}_z$ có dạng như sau:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{j,j'} J_1 (\vec{r}_j - \vec{r}_{j'}) S_j^z S_{j'}^z - \frac{1}{2} \sum_{j,j'} J_2 (\vec{r}_j - \vec{r}_{j'}) S_j^z S_{j'}^z - g_x \mu_B h^x \sum_j S_j^x - g_z \mu_B h^z \sum_j S_j^z \quad (1)$$



Hình 1: Mô hình spin vấp trên mạng hình vuông đơn giản

Ở đây số hạng thứ nhất trong (1) là tương tác trao đổi theo mô hình Ising giữa các spin lân cận gần nhất, vì hệ có trật tự sắt từ ở trạng thái cơ bản do đó $J_1 > 0$; số hạng thứ hai là tương tác trao đổi theo mô hình Ising giữa các spin lân cận gần nhất thứ hai, vì trong bài báo này chúng tôi xét đến sự cạnh tranh giữa các tương tác trao đổi do đó $J_2 < 0$; hai số hạng cuối trong (1) lần lượt là năng lượng của hệ spin trong từ trường ngang (h^x) và từ trường dọc (h^z), với $g_{x(z)}$ là các thừa số Landé của spin dọc theo trục Ox (Oz) và μ_B là magneton Bohr. Vị trí của spin thứ j trong hệ spin được định nghĩa bởi vector hai chiều $\vec{r}_j = x_j \vec{e}_x + y_j \vec{e}_y$. Từ hình 1 chúng ta có thể thấy là mỗi spin có 4 spin lân cận gần nhất và 4 spin lân cận gần nhất thứ hai.

Hamiltonian (1) được viết lại dưới dạng khai triển Fourier của các toán tử spin trong gần đúng trường trung bình, như sau:

$$H = -\sum_j \frac{y^x}{\beta} S_j^x - \sum_j \frac{y^z}{\beta} S_j^z + \frac{N}{2} J_1 (\vec{k}=0) \langle S^z \rangle \langle S^z \rangle + \frac{N}{2} J_2 (\vec{k}=0) \langle S^z \rangle \langle S^z \rangle, \quad (1)$$

ở đây $J_{1(2)}(\vec{k}) = \sum_{a_{1(2)}} J_{1(2)}(\vec{a}_{1(2)}) e^{-i\vec{k}\vec{a}_{1(2)}}$,

$y^x = \beta g_x \mu_B h^x$ và

$$y^z = \beta g_z \mu_B h^z + \beta J_1 (\vec{k}=0) \langle S^z \rangle + \beta J_2 (\vec{k}=0) \langle S^z \rangle \quad (2)$$

là trường hiệu dụng tác dụng lên các thành phần của mỗi spin, trong đó \vec{a}_1

và \vec{a}_2 lần lượt là khoảng cách giữa các spin lân cận gần nhất và lân cận gần nhất thứ hai. Tiếp theo, chúng tôi sử dụng phép biến đổi sau cho Hamiltonian (1):

$$S_j^x = \frac{y^z}{Y} S_j^x + \frac{y^x}{Y} S_j^z, \quad (3)$$

$$S_j^z = -\frac{y^x}{Y} S_j^x + \frac{y^z}{Y} S_j^z,$$

với

$$Y = \sqrt{(y^x)^2 + (y^z)^2}. \quad (4)$$

Phép biến đổi (3) tương đương với phép quay hệ tọa độ từ hệ Oxz sang hệ $Ox'z'$ sao cho định hướng mới của các spin dưới tác dụng của từ trường ngoài trùng với hướng của trục Oz' (xem (Thảo, 2022)). Từ đó, chúng tôi viết lại Hamiltonian (1):

$$H = -\sum_j \frac{Y}{\beta} S_j^z + \frac{N}{2} J_1 (\vec{k}=0) \langle S^z \rangle \langle S^z \rangle + \frac{N}{2} J_2 (\vec{k}=0) \langle S^z \rangle \langle S^z \rangle. \quad (5)$$

So sánh (1) và (5) chúng ta có thể thấy là Y đóng vai trò của trường hiệu dụng tác dụng lên spin S_j^z trong hệ tọa độ mới $Ox'z'$. Ta có năng lượng tự do của hệ trong gần đúng trường trung bình:

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln(\text{Tr}(e^{-\beta H})) = -\frac{N}{2\beta} \left(\frac{\text{sh}(S+1/2)Y}{\text{sh}(Y/2)} \right) + \frac{N}{2} \{ J_1 (\vec{k}=0) + J_2 (\vec{k}=0) \} m_z^2, \quad (6)$$

ở đây $m_z = \langle S^z \rangle = -\frac{1}{Ng_z \mu_B} \frac{\partial F}{\partial h^z}$ là

momen từ (không thứ nguyên) trên mỗi spin được tính toán từ điều kiện cực trị của năng lượng tự do (6) theo m_z :

$\frac{\partial F}{\partial m_z} = 0$. Từ đó chúng tôi tìm được

thành phần của độ từ hóa theo phương Oz hay còn gọi là độ từ hóa dọc:

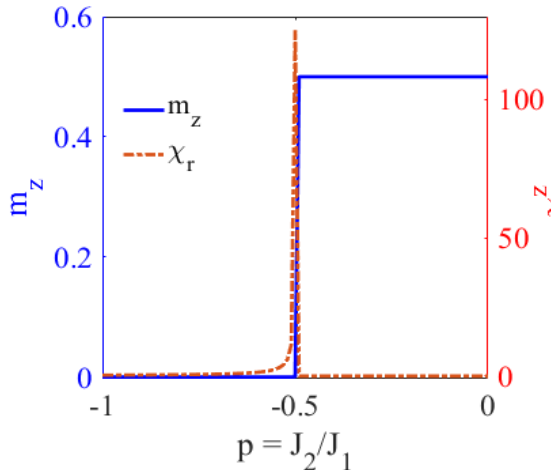
$$m_z = \frac{y^z}{Y} b(Y), \quad (7)$$

với $b(Y)$ là hàm Brillouin :

$$b(Y) = \left(S + \frac{1}{2}\right) \coth\left(S + \frac{1}{2}\right)Y - \frac{1}{2} \coth \frac{Y}{2}. \quad (8)$$

Ngoài ra, chúng tôi cũng xét đến đạo hàm của các momen từ trên mỗi spin theo từ trường dọc hay còn được gọi là độ cảm từ dọc, có dạng như sau:

$$\chi^z = g_z \mu_B \frac{\partial m_z}{\partial h^z}. \quad (9)$$



Hình 2: Sự phụ thuộc vào tham số cạnh tranh tương tác p của các momen từ dọc

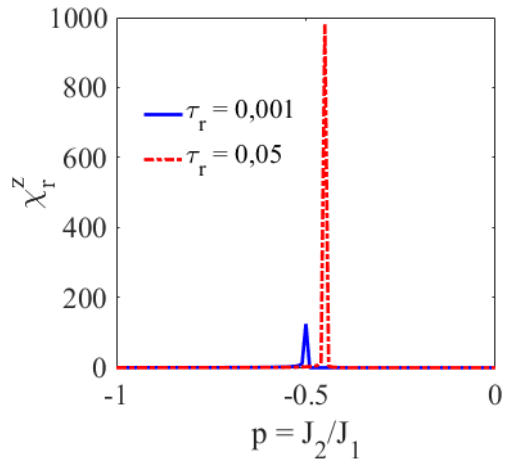
m_z và độ cảm từ dọc χ_r^z , ở đây

$$h_r^z = 0, h_r^x = 0, \tau_r = 10^{-3} \text{ và } S = 0,5$$

Pha FM được mô tả bằng các momen từ khác 0 và định hướng song song với nhau như được chỉ ra trong hình 1, tức là $m_z \neq 0$. Như vậy, trật tự FM của hệ bị phá vỡ hoàn toàn khi $m_z = 0$. Hình 2 biểu diễn sự phụ thuộc của momen từ m_z và độ cảm từ dọc χ_r^z vào tham số cạnh tranh tương tác. Từ

3. Các kết quả tính số và thảo luận

Trong phần này, chúng tôi đưa ra các kết quả tính toán số và thảo luận về các kết quả này. Chúng tôi sử dụng hằng số tương tác trao đổi J_1 giữa các spin lân cận gần nhất làm đơn vị, cụ thể là từ trường ngang và dọc sẽ lần lượt được biểu diễn như $h_r^x = g_x \mu_B h^x / J_1$ và $h_r^z = g_z \mu_B h^z / J_1$, nhiệt độ rút gọn là $\tau_r = k_B T / J_1$, độ cảm từ dọc rút gọn $\chi_r^z = \chi^z J_1 / (g^2 \mu_B^2)$ và tham số cạnh tranh tương tác là $p = J_2 / J_1$.



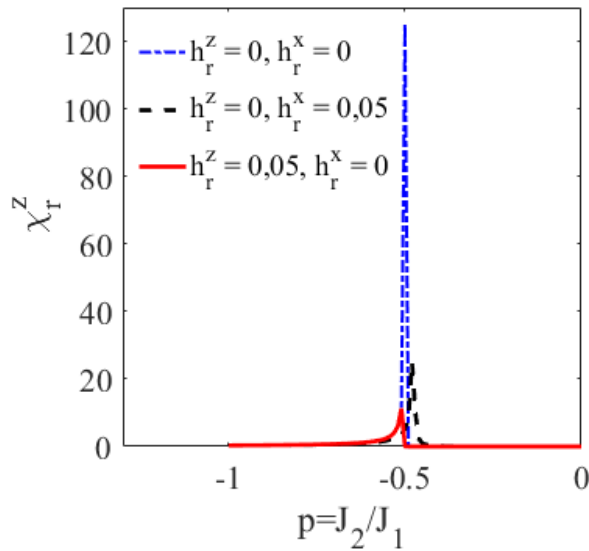
Hình 3: Sự phụ thuộc vào tham số cạnh tranh tương tác p của độ cảm từ dọc χ_r^z khi tăng nhiệt độ τ_r , ở

đây $h_r^z = 0, h_r^x = 0$ và $S = 0,5$

hình 2, giá trị tới hạn $p_c = -0,5$ của tham số cạnh tranh tương tác p ở nhiệt độ rất thấp $\tau_r = 10^{-3}$ khi không có sự hiện diện của từ trường ngoài được xác định ứng với vị trí đỉnh của đường cong biểu diễn χ_r^z theo p và $m_z = 0$, tại đó trật tự FM bị phá vỡ hoàn toàn. Như vậy, chúng ta có thể thấy xuất hiện sự chuyển pha lượng tử được gây ra bởi sự

cạnh tranh tương tác tại $p = p_c$. Các phép tính trong gần đúng trường trung bình của chúng tôi đã đưa ra khá chính xác giá trị tới hạn p_c khi được so sánh với các công trình khác sử dụng các

phương pháp khác nhau như mô phỏng Monte Carlo (Kalz và nnk., 2011) hay kỹ thuật toán tử vi phân (Morán-López và nnk., 1993).



Hình 4: Sự phụ thuộc vào tham số cạnh tranh tương tác p của độ cảm từ dọc χ_r^z với các giá trị khác nhau của từ trường, ở đây, $\tau = 10^{-3}$ và $S = 0,5$

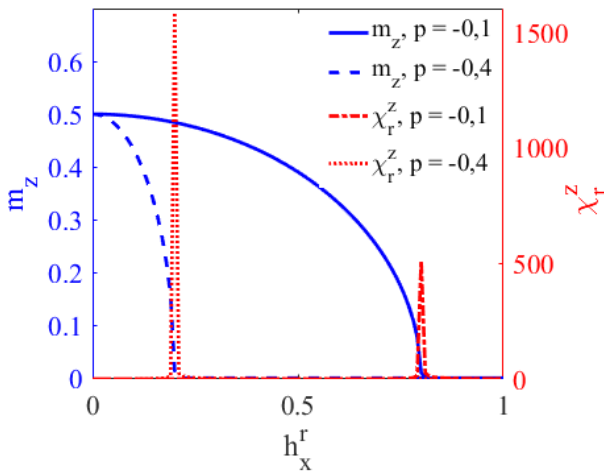
Ngoài ra, chúng tôi cũng chỉ ra ảnh hưởng của thăng giáng nhiệt khi gia tăng nhiệt độ trong hình 3 và vai trò của từ trường dưới ảnh hưởng của cạnh tranh tương tác trong hình 4. Từ hình 3, chúng tôi thấy là khi nhiệt độ tăng thì giá trị tới hạn p_c , tương ứng với vị trí đỉnh của đường cong biểu diễn χ_r^z theo p , cũng thay đổi. Sự xuất hiện của thăng giáng nhiệt đã làm suy giảm ghép cặp FM giữa các spin, do đó độ lớn của giá trị tới hạn $|p_c|$ cũng giảm tương ứng. Từ hình 4, chúng tôi nhận thấy từ trường dọc ủng hộ ghép cặp FM giữa các spin, trong khi đó từ trường ngang lại làm suy giảm ghép

cặp FM này, do đó $|p_c|$ giảm khi tăng h_r^x và tăng khi tăng h_r^z . Như vậy giá trị $|p_c|$ phụ thuộc vào nhiều yếu tố như là nhiệt độ và từ trường.

Để làm rõ hơn quá trình chuyển pha lượng tử diễn ra trong hệ, chúng tôi chỉ ra sự phụ thuộc vào từ trường ngang của momen từ dọc và độ cảm từ dọc trong hình 5 và hình 6 ở nhiệt độ rất thấp $\tau_r = 10^{-3}$. Từ hình 5, chúng tôi có thể xác định được điểm chuyển pha lượng tử được gây ra bởi từ trường ngang tại đỉnh của đường cong biểu diễn χ_r^z theo h_r^x và ứng với $m_z = 0$. Ngoài ra, chúng tôi cũng có thể thấy là

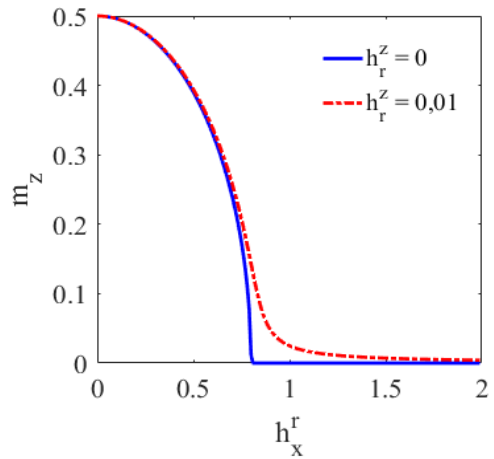
nếu gia tăng sự cạnh tranh tương tác (ứng với tăng giá trị của p hay J_2) thì quá trình chuyển pha được gây ra bởi từ trường ngang diễn ra nhanh hơn, tức là chỉ cần một giá trị nhỏ hơn của từ trường ngang. Trong khi đó, khi gia

tăng từ trường dọc (xem hình 6) để sự chuyển pha xảy ra phải cần giá trị lớn hơn của từ trường ngang do tác dụng làm bền vững hơn trật tự từ FM dọc theo theo phương Oz của từ trường dọc.



Hình 5: Sự phụ thuộc vào từ trường ngang h_x^r của momen từ dọc m_z và độ cảm từ dọc χ_r^z với các giá trị khác nhau của tham số cạnh tranh tương tác p , ở đây $\tau_r = 10^{-3}$, $h_r^z = 0$ và $S = 0,5$

Các hành vi phụ thuộc vào từ trường của momen từ và độ cảm từ dưới ảnh hưởng của cạnh tranh tương tác tương tự cũng đã được chỉ ra cho một số hệ spin FM hoặc AFM (Thao, 2021), (Oitmaa, 2020), trong đó sự chuyển pha cũng được xác định bằng sự gián đoạn trong đường cong biểu diễn sự phụ thuộc của độ cảm từ vào từ trường. Tuy nhiên, mô hình mà chúng tôi đưa ra trong bài báo này vẫn chưa thể đưa ra các kết quả hoàn toàn chính xác, bởi vì chúng tôi đã bỏ qua vai trò của các thăng giáng spin. Do đó, trong thời gian tới chúng tôi dự định sẽ tiếp tục tính



Hình 6: Sự phụ thuộc vào từ trường ngang h_x^r của momen từ dọc m_z với các giá trị khác nhau của từ trường dọc h_r^z , ở đây $\tau_r = 10^{-3}$ và $S = 0,5$

toán cho mô hình tổng quát hơn, đó là mô hình Heisenberg $J_1 - J_2$ và tính đến đóng góp của các thăng giáng spin để thu được mô hình mô tả tốt hơn các tính chất của các hệ thực.

4. Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi đã xác định giá trị tới hạn $p_c = -0,5$ của tham số cạnh tranh tương tác để tại đó xảy ra sự phá vỡ trật tự FM ở trạng thái cơ bản của hệ spin vấp trên một mạng hình vuông với mô hình Ising $J_1 - J_2$ ($J_1 > 0, J_2 < 0$) trong gần đúng trường trung bình và giá trị này khá phù hợp với các kết quả được chỉ ra bởi các công

trình trước đây. Độ lớn của giá trị tới hạn p_c sẽ giảm khi tăng nhiệt độ do sự xuất hiện của thăng giáng nhiệt. Ngoài ra, chúng tôi cũng phân tích vai trò của từ trường ngang và từ trường dọc trong sự giảm hoặc tăng cạnh tranh của các

trương tác trao đổi. Hơn thế nữa, sự chuyển pha được gây ra bởi từ trường ngang dưới ảnh hưởng của cạnh tranh tương tác cũng được xét đến và chỉ ra quá trình chuyển pha diễn ra nhanh hơn khi tăng tham số cạnh tranh tương tác.

LỜI CẢM ƠN:

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế trong nhiệm vụ mã số NCM. T.23 – 01.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- Aczel, A.A., Li, L., Garlea, V.O., Yan, J.Q., Weickert, F., Jaime, M., Maiorov, B., Movshovich, R., Civale, L., Keppens, V., & Mandrus, D. (2014). Magnetic ordering in the frustrated J_1 - J_2 Ising chain candidate BaNd_2O_4 . *Phys. Rev. B*, *90*, 134403. DOI: 10.1103/PhysRevB.90.134403.
- Arh, T., Sana, B., Pregelj, M., Khuntia, P., Jagličić, Z., Le, M.D., Biswas, P.K., Manuel, P., Mangin-Thro, L., Ozarowski, A. & Zorko, A. (2022). The Ising triangular-lattice antiferromagnet neodymium heptatantalate as a quantum spin liquid candidate. *Nat. Mater.*, *21*, 416-422. DOI: 10.1038/s41563-021-01169-y.
- Hu, A.Y., & Wang, H.Y. (2017). Investigation of possible phase transition of the frustrated spin-1/2 J_1 - J_2 - J_3 model on the square lattice. *Sci Rep*, *7*, 10477. DOI: 10.1038/s41598-017-10986-8.
- Hu, Y., Wu, G., Liu, Y., Yang, X., & Du, A. (2013). Defect dependent multiple magnetization plateaus in frustrated spin-chain cobaltate. *J. Magn. Magn. Mater.*, *337-338*, 46-52. DOI: 10.1016/j.jmmm.2013.02.037.
- Kalz, A., Honecker, A., & Moliner, M. (2011). Analysis of the phase transition for the Ising model on the frustrated square lattice. *Phys. Rev. B*, *84*, 174407. DOI: 10.1103/PhysRevB.84.174407.
- Morán-López, J.L., Aguilera-Granja, F., & Sanchez, J.M. (1993). First-order phase transitions in the Ising square lattice with first- and second-neighbor interactions, *Phys. Rev. B*, *48*, 3519. DOI: 10.1103/PhysRevB.48.3519.
- Oitmaa, J. (2020). Frustrated transverse-field Ising model. *J. Phys. A: Math. Theor.*, *53*, 085001. DOI: 10.1088/1751-8121/ab63e6.
- Thao, P. H. (2021). Possible ground states and magnetic-field-tuned phase transitions of a geometrically frustrated ising antiferromagnet on a triangular lattice. *IEEE Magn. Lett.*, *12*, 1-5. DOI: 10.1109/LMAG.2023.3274049.
- Thao, P. H. (2022). Field- and anisotropy-induced magnetic transitions and specific heat of one-dimensional XYZ ferromagnet with single-ion anisotropy. *Phys. Scr.*, *97*(12), 125809. DOI: 10.1088/1402-4896/ac9ca8.

Vasiliev, A., Volkova, O., Zvereva, E., & Markina, M. (2018). Milestones of low-D quantum magnetism. *npj Quantum Mater.*, 3, 18. DOI: 10.1038/s41535-018-0090-7.

Xu, Y., & Yao, D.X.. (2018). Spin glass in the bond-diluted $J_1 - J_2$ Ising model on the square lattice. *Phys. Rev. B*, 97, 224419. DOI: 10.1103/PhysRevB.97.224419.

PHASE TRANSITIONS IN A FRUSTRATED SPIN SYSTEM ON THE SQUARE LATTICE WITH $J_1 - J_2$ ISING MODEL

*Ngo Thi Thuan*¹

*Hoang Dinh Long*²

*Huynh Lam Xuan Hoanh*²

*Nguyen Nhu Le*²

Pham Huong Thao^{2*}

¹Hue University of Medicine and Pharmacy

²Hue University of Education

*Corresponding author: Pham Huong Thao - Email: phamhuongthao@dhsphue.edu.vn

(Received: 16/10/2023, Revised: 12/11/2023, Accepted for publication: 18/12/2023)

ABSTRACT

In this paper, the $J_1 - J_2$ Ising model is used to study the magnetic properties and phase transitions of a frustrated spin system on the simple square lattice in the presence of a transverse magnetic field h^x and a longitudinal magnetic field h^z in the mean field approximation. From there, we get results for the longitudinal magnetic moment and longitudinal magnetic susceptibility that depend on the parameter of competition of the exchange interactions $p = J_2/J_1$ and show a critical value of p in the ground state, in agreement with previous studies. In addition, we also analyze the role of the magnetic field on the properties of the system under the influence of this competition.

Keywords: $J_1 - J_2$ Ising model, quantum fluctuation, frustrated spin system, phase transition