Tạp chí Khoa học Đại học Huế: Khoa học Tự nhiên; ISSN 1859-1388

*Tập 126, Số 1D, 2017, Tr. 5-16; DOI: 10.26459/hueuni-jns.v126i1D.4478*

# 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

**Phạm Hương Thảo***

Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế

**Tóm tắt:** Sự phụ thuộc vào nhiệt độ và từ trường ngoài của các tính chất nhiệt động lực học như thăng giáng spin, độ từ hóa, độ cảm từ và năng lượng tự do của chuỗi spin lượng tử sắt từ được nghiên cứu bằng phương pháp tích phân phiếm hàm với mô hình Heisenberg đẳng hướng. Các kết quả trong gần đúng trường trung bình (MFA) và gần đúng thăng giáng spin (SFA) được chỉ ra và được so sánh với kết quả của các tác giả khác. Ngoài ra, ảnh hưởng của thăng giáng spin đã làm cho trật tự từ không tồn tại trong các hệ spin một chiều và hai chiều với tương tác trao đổi vùng hữu hạn trong mô hình Heisenberg đẳng hướng khi không có từ trường ngoài.

**Từ khóa:** chuỗi spin, phương pháp tích phân phiếm hàm, thăng giáng spin, mô hình Heisenberg đẳng hướng, các tính chất nhiệt động lực học

## 1 Giới thiệu

Việc nghiên cứu các hệ spin thấp chiều đang thu hút nhiều sự quan tâm bởi việc chế tạo ra các vật liệu mới, trong đó các hợp chất sắt từ đóng một vai trò quan trọng. Về mặt lý thuyết, các tính chất nhiệt động lực học của chuỗi spin sắt từ đã được nghiên cứu bằng phép biến đổi Jordan-Wigner và phép biến đổi Gaussian với mô hình Heisenberg XXZ ($S$=1/2) [1]; lý thuyết hàm Green bậc hai và mô phỏng Monte Carlo cho các hệ sắt từ 1 chiều và 2 chiều với $S$ bất kỳ trong một từ trường, cung cấp một mô tả khá tốt cho trật tự từ vùng ngắn và các tính chất nhiệt động học của các hệ [2]; phép biến đổi Jordan – Wigner trong gần đúng trường trung bình với mô hình Heisenberg XYZ ($S$=1/2) [3]. Bên cạnh đó các tính chất nhiệt động lực học của chuỗi spin phản sắt từ Heisenberg lượng tử với $S$=1/2, 1 và 3/2 cũng được nghiên cứu bằng phương pháp nhóm chuẩn hóa ma trận chuyển [4]. Các tính chất của các hệ này bị ảnh hưởng mạnh bởi các thăng giáng spin (thăng giáng nhiệt và thăng giáng lượng tử) [5], [6]. Khi số chiều của các hệ bị giảm, các thăng giáng nhiệt được tăng cường một cách đáng kể, điều này dẫn tới trật tự từ của hệ bị suy giảm. Tuy nhiên một vài mô hình [1] – [4] đã không đưa vào các thăng giáng spin và không đưa ra kết quả thỏa mãn nguyên lý Mermin-Wagner. Mermin – Wagner [6] đã chỉ ra một cách tổng quát rằng các mô hình Heisenberg đẳng hướng hai chiều và một chiều với các tương tác vùng hữu hạn không thể là sắt từ hoặc phản sắt từ ở nhiệt độ khác không khi không

* *Liên hệ: hthao82@gmail.com*

Nhận bài: 18-3-2017; Hoàn thành phản biện: 21-7-2017; Ngày nhận đăng: 7-9-2017

có từ trường ngoài. Trong bài báo này, tôi nghiên cứu ảnh hưởng của các thăng giáng spin lên các tính chất nhiệt động lực học của chuỗi spin sắt từ, trong trường hợp các spin chỉ thực hiện tương tác trao đổi với các spin lận cận gần nhất, sử dụng mô hình Heisenberg đẳng hướng cho spin *S* bất kỳ bằng phương pháp tích phân phiếm hàm. Phương pháp tích phân phiếm hàm đã được sử dụng để nghiên cứu các hệ spin 2 chiều [7] – [8] và 3 chiều [9] và đã đưa ra các kết quả phù hợp tốt với các lý thuyết nhiệt động lực học của các hệ spin sắt từ [10]. Ngoài ra, các kết quả trong công trình này còn được so sánh với các kết quả của nhóm I. Juhász Junger [2].

## 2 Mô hình tính toán

Xét mô hình Heisenberg đẳng hướng cho chuỗi spin lượng tử gồm *N* spin nằm dọc theo hướng *z* trong một từ trường ngoài $\vec{h} \uparrow\uparrow Oz$:

$$H = -\sum_j hS_j^z - \frac{1}{2}J\sum_j\left[S_j^x S_{j+1}^x + S_j^y S_{j+1}^y + S_j^z S_{j+1}^z\right], \tag{1}$$

ở đây $J$ là hằng số tương tác trao đổi giữa spin $S_j^\alpha$ ($\alpha = x, y, z$) với các spin lân cận gần nhất và $\left(\vec{S}_j\right)^2 = S_j^x S_j^x + S_j^y S_j^y + S_j^z S_j^z = S(S+1)$. Khi đưa trường phân tử (trường Weiss) vào số hạng đầu của (1) và thực hiện phép biến đổi Fourier cho các toán tử spin (1) có thể được viết lại như sau:

$$H = \frac{1}{2}NJ(k_z=0)\left\langle S^z\right\rangle\left\langle S^z\right\rangle - \sum_j\left(h + J(k_z=0)\left\langle S^z\right\rangle\right)S_j^z - \frac{1}{2}\sum_{k_z,\alpha}J(k_z)\delta S^\alpha(k_z)\delta S^\alpha(k_z), \tag{2}$$

ở đây
$$J(k_z) = \sum_j J(|z_j - z_{j+1}|)\exp\left[ik_z(z_j - z_{j+1})\right] \tag{3}$$

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

Trong (2) các thành phần của các toán tử thăng giáng spin được định nghĩa như sau:

$$\delta S_j^z = S_j^z - \left\langle S_j^z\right\rangle, \ \delta S_j^x = S_j^x, \ \delta S_j^y = S_j^y, \tag{5}$$

ở đây $\langle\ldots\rangle = \mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}\ldots\right)\big/\mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\beta H}\right)$ là trung bình nhiệt động học và $\beta^{-1} = k_\mathrm{B}T$, do đó $\langle\ldots\rangle_0 = \mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\beta H_0}\ldots\right)\big/\mathrm{Sp}\left(\mathrm{e}^{-\beta H_0}\right)$, với

$$H_0 = NJ\left(k_z = 0\right)\left\langle S^z\right\rangle\left\langle S^z\right\rangle - \sum_j\left(h + J(k_z = 0)\left\langle S^z\right\rangle\right)S_j^z = NJ\left(k_z = 0\right)\left\langle S^z\right\rangle\left\langle S^z\right\rangle - \sum_j yS_j^z, \quad (6)$$

ở đây $y$ là trường hiệu dụng tác dụng lên các spin của chuỗi:

$$y = \beta h + \beta J\left(k_z = 0\right)\left\langle S^z\right\rangle. \quad (7)$$

Năng lượng tự do trung bình trên mỗi spin của hệ có dạng:

$$F = -\frac{1}{N}\beta^{-1}\ln\mathrm{Tr}\left(\exp\left(-\beta H\right)\right) = F_0 - \frac{1}{N}\beta^{-1}\ln\left\langle \hat{T}\exp\left\{\sum_{k_z,\alpha} J\left(k_z\right)\delta S^\alpha\left(k_z\right)\delta S^\alpha\left(k_z\right)\right\}\right\rangle_0, \quad (8)$$

với

$$F_0 = -\frac{1}{N}\beta^{-1}\ln\mathrm{Tr}\left(\exp\left(-\beta H_0\right)\right) = J\left(k_z = 0\right)\left\langle S^z\right\rangle\left\langle S^z\right\rangle - \frac{1}{\beta}\ln\frac{\mathrm{sh}(S + 1/2)y}{\mathrm{sh}\left(y/2\right)} \quad (9)$$

và

$$\begin{aligned}\Delta F\left[\varphi\right] &= -\frac{1}{N}\beta^{-1}\ln\left\langle \hat{T}\exp\left\{\sum_{k_z,\alpha} J\left(k_z\right)\delta S^\alpha\left(k_z\right)\delta S^\alpha\left(k_z\right)\right\}\right\rangle_0 = \\ &\frac{1}{N}\beta^{-1}\ln\int\left(\mathrm{d}\varphi\right)\exp\left[-\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\vec{q}}\varphi^\alpha\left(\vec{q}\right)\varphi^\alpha\left(-\vec{q}\right)\right]I\left[\varphi\right],\end{aligned} \quad (10)$$

với

$$\begin{aligned}I\left[\varphi\right] &= \left\langle \mathrm{T}\exp\left\{\sum_{l,\vec{q}}\beta^{1/2}J^{1/2}\left(k_z\right)\varphi^l\left(\vec{q}\right)\delta S^l\left(\vec{q}\right)\right\}\right\rangle_0 \\ &= \exp\left\{\sum_{m\ge 1}\frac{1}{m!}\sum_{\vec{q}_1,l_1}\cdots\sum_{\vec{q}_m,l_m}\sqrt{\beta J\left(k_{z1}\right)\ldots\beta J\left(k_{zm}\right)}\left\langle \mathrm{T}\delta S^l\left(\vec{q}_1\right)\ldots\delta S^l\left(\vec{q}_m\right)\right\rangle_0\varphi^l\left(\vec{q}_1\right)\ldots\varphi^l\left(\vec{q}_m\right)\right\}.\end{aligned} \quad (11)$$

ở đây $\vec{q} = \left(k_z, \omega\right)$ là véctơ sóng hai thành phần với $\omega = 2\pi n/\beta$, $n = 0, \pm 1, \pm 2, \ldots$, và $\left(\mathrm{d}\varphi\right)$ được định nghĩa bởi [12]:

$$\left(\mathrm{d}\varphi\right)=\prod_{\alpha}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}\varphi^{\alpha}\left(0\right)}{\sqrt{2\pi}}\prod_{\vec{q}\neq 0}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}\varphi^{\alpha,\mathrm{c}}\left(\vec{q}\right)}{\sqrt{\pi}}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\mathrm{d}\varphi^{\alpha,\mathrm{s}}\left(\vec{q}\right)}{\sqrt{\pi}},\tag{12}$$

$\varphi^{\alpha,\mathrm{c}}\left(\vec{q}\right)$ và $\varphi^{\alpha,\mathrm{s}}\left(\vec{q}\right)$ là thành phần ảo và thực của biến trường $\varphi^{\alpha}\left(\vec{q}\right)$. Các ký hiệu còn lại trong (11) được đưa ra như bên dưới:

$$\begin{gathered}l=\pm,\ z;\ \varphi^{\pm}\left(\vec{q}\right)=\frac{1}{2}\left[\varphi^{x}\left(\vec{q}\right)\pm i\varphi^{y}\left(\vec{q}\right)\right];\delta S^{\pm}\left(\vec{q}\right)=S^{\pm}\left(\vec{q}\right)=S^{x}\left(\vec{q}\right)\pm iS^{y}\left(\vec{q}\right);\\ \delta S^{z}\left(\vec{q}\right)=S^{z}\left(\vec{q}\right)-\delta\left(\vec{q}\right)N^{1/2}\left\langle S^{z}\right\rangle;\delta\left(\vec{q}\right)=\delta\left(k_{z}\right)\delta\left(\omega\right).\end{gathered}\tag{13}$$

Trong phép gần đúng Gauss, tôi tìm ra được biểu thức cụ thể cho $\Delta F$ sử dụng tích phân phiếm hàm như sau:

$$\begin{aligned}\Delta F&=\frac{1}{2\beta N}\sum_{k_z}\ln\left(1-\beta\mathrm{b}'\left(y\right)J\left(k_z\right)\right)+\frac{1}{\beta N}\sum_{k_z}\ln\left[1-\exp\left(-y+\beta\mathrm{b}\left(y\right)J\left(k_z\right)\right)\right]\\&-\frac{1}{\beta N}\sum_{k_z}\ln\left[1-\exp\left(-y\right)\right].\end{aligned}\tag{14}$$

Trong bài báo này tôi chỉ xét tương tác trao đổi giữa spin $j$ với các spin lân cận gần nhất để nghiên cứu ảnh hưởng của các thăng giáng spin lên các tính chất nhiệt động học của chuỗi spin tuyến tính, do đó:

$$J\left(k_z\right)=2J\cos\left(k_z.a\right),\tag{15}$$

với $a$ là hằng số mạng của chuỗi spin.

Để tính độ từ hóa của hệ trong gần đúng thăng giáng spin tôi xét các hàm tương quan giữa các thăng giáng của các thành phần spin trong phép gần đúng Gauss:

$$G_{j_1j_2}^{\alpha}(\beta_1,\beta_2)=\left\langle\hat{\mathrm{T}}\,\delta S_{j_1}^{\alpha}\left(\beta_1\right)\delta S_{j_2}^{\alpha}\left(\beta_2\right)\right\rangle.\tag{16}$$

Phép biến đổi Fourier của các hàm tương quan spin có dạng như sau:

$$G_{\mathrm{f}}^{\alpha}\left(k_z,\omega\right)=\frac{1}{\beta}\int_{0}^{\beta}\sum_{z}G^{\alpha}\left(z,\tau\right)\exp\left[-\,\mathrm{i}\omega\tau-\mathrm{i}k_z z\right]d\tau.\tag{17}$$

Trong (17), $\tau$ là biến thời gian, $\tau = \beta_1 - \beta_2$ và $z = z_{j_1} - z_{j_2}$. Hàm spin định xứ được rút ra từ (16) và (17) khi $\tau = 0,\ z = 0$:

$$\left\langle \delta \vec{S}^2 \right\rangle = \sum_{\alpha} G^{\alpha}(0,0) = \frac{1}{N} \sum_{\alpha, k_z, \omega} G_{\mathrm{f}}^{\alpha}\left(k_z, \omega\right) = \left\langle \delta S^x \delta S^x \right\rangle + \left\langle \delta S^y \delta S^y \right\rangle + \left\langle \delta S^z \delta S^z \right\rangle, \tag{18}$$

với

$$\begin{aligned} \left\langle \delta S^z \delta S^z \right\rangle &= \frac{1}{N} \sum_{k_z, \omega} G_{\mathrm{f}}^{z}\left(k_z, \omega\right) = \frac{\mathrm{b}'\left(y\right)}{N} \sum_{k_z} \frac{1}{1 - \beta \mathrm{b}'\left(y\right) J\left(k_z\right)}, \\ \left\langle \delta S^x \delta S^x \right\rangle &= \frac{1}{N} \sum_{k_z, \omega} G_{\mathrm{f}}^{x}\left(k_z, \omega\right) = \frac{\mathrm{b}\left(y\right)}{N} \sum_{k_z} \frac{1}{\exp\left(y - \beta \mathrm{b}\left(y\right) J\left(k_z\right)\right) - 1}, \\ \left\langle \delta S^y \delta S^y \right\rangle &= \frac{1}{N} \sum_{k_z, \omega} G_{\mathrm{f}}^{y}\left(k_z, \omega\right) = \frac{\mathrm{b}\left(y\right)}{N} \sum_{k_z} \frac{1}{\exp\left(y - \beta \mathrm{b}\left(y\right) J\left(k_z\right)\right) - 1}, \end{aligned} \tag{19}$$

ở đây $\mathrm{b}''\left(y\right)$ là đạo hàm bậc nhất của hàm Brillouin. Từ (19) ta có công thức để tính thăng giáng spin $\delta m$, độ từ hóa tương đối trên mỗi spin $m$ và độ cảm từ trên mỗi spin $\chi$ của chuỗi spin:

$$\delta m = \left( \left\langle \delta \vec{S}^2 \right\rangle \right)^{1/2}, \tag{20}$$

$$m = \left\langle S^z \right\rangle = \left\{ S\left(S+1\right) - \left\langle \delta \vec{S}^2 \right\rangle \right\}^{1/2}, \tag{21}$$

và

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial h} = -\frac{1}{2mN} . \frac{\partial y}{\partial h} \sum_{k_z} \left( \begin{array}{l} \dfrac{\mathrm{b}''\left(y\right)}{\left(1 - \beta \mathrm{b}'\left(y\right) J\left(k_z\right)\right)^2} + \\ 2\left( \begin{array}{l} \dfrac{\mathrm{b}'\left(y\right)}{\exp\left(y - \beta \mathrm{b}\left(y\right) J\left(k_z\right)\right) - 1} - \\ \dfrac{\mathrm{b}\left(y\right) \exp\left(y - \beta \mathrm{b}\left(y\right) J\left(k_z\right)\right)\left(1 - \beta \mathrm{b}'\left(y\right) J\left(k_z\right)\right)}{\left(\exp\left(y - \beta \mathrm{b}\left(y\right) J\left(k_z\right)\right) - 1\right)^2} \end{array} \right) \end{array} \right), \tag{22}$$

ở đây $\mathrm{b}''\left(y\right)$ là đạo hàm cấp hai của hàm Brillouin.

Trong gần đúng trường trung bình (MFA), tức là bỏ qua các thăng giáng spin (5), lúc đó ta có:

$$m_0 = \langle S^z \rangle_0 = \mathrm{b}(y_0), \tag{23}$$

với
$$y_0 = \beta h + \beta J(k_z = 0)\langle S^z \rangle_0 = \beta h + \beta J(k_z = 0)\mathrm{b}(y_0). \tag{24}$$

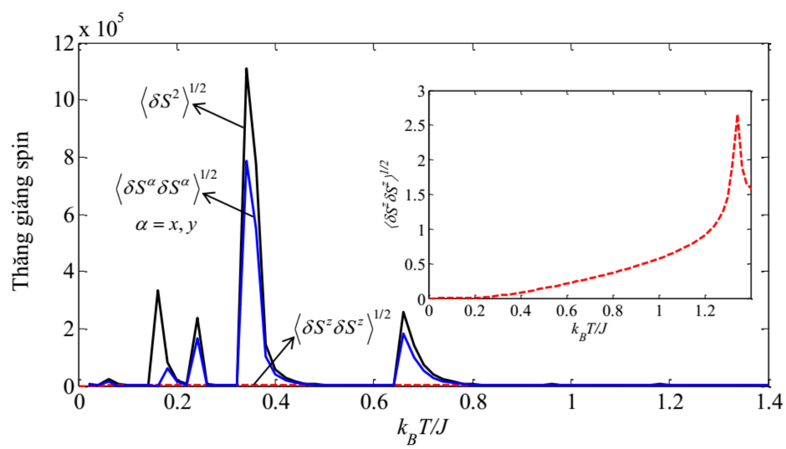
Lúc đó năng lượng tự do và độ cảm từ của mỗi spin có dạng:

$$\begin{gathered} F_0 = \frac{1}{2}.J(0)\mathrm{b}^2(y_0) - \frac{1}{\beta}.\ln\frac{\mathrm{sh}(S+1/2)y_0}{\mathrm{sh}\dfrac{y_0}{2}}, \\ \chi_0 = \frac{\partial \mathrm{b}(y_0)}{\partial h}. \end{gathered} \tag{25}$$

## 3 Kết quả tính toán và thảo luận

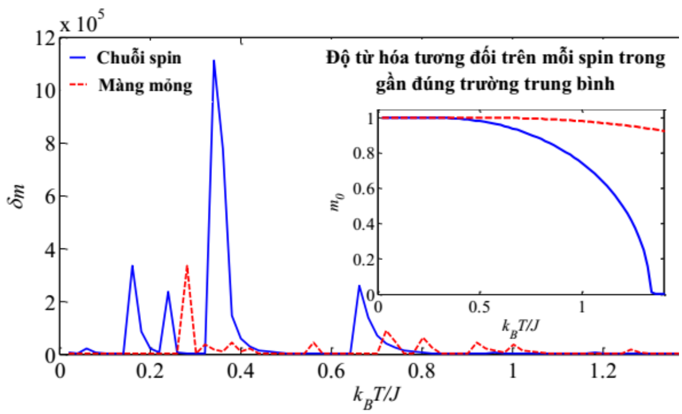
Để tính toán số tôi biểu diễn các đại lượng nhiệt động lực học theo đơn vị của hằng số tương tác trao đổi $J$, tức là các tham số như cường độ từ trường ngoài được biểu diễn là $h/J$, độ cảm từ là $\chi J$, nhiệt độ là $k_B T/J$ và năng lượng tự do là $F/J$.

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

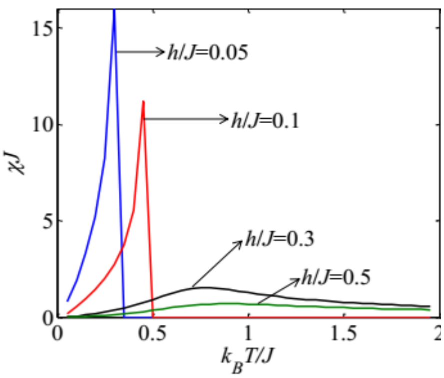



**Hình 1.** Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các thành phần của thăng giáng spin khi không có từ trường ngoài $h/J$=0,0. Hình chèn vào chỉ ra thành phần $z$ của thăng giáng spin.

Đầu tiên, thông qua các kết quả tính số tôi muốn chỉ ra trong các hệ thấp chiều khi không có từ trường ngoài với mô hình Heisenberg đẳng hướng không tồn tại trật tự từ (sắt từ hoặc phản sắt từ) nếu tương tác giữa các spin là tương tác vùng hữu hạn. Hình 1 chỉ ra sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các thành phần của thăng giáng spin của chuỗi spin tuyến tính khi không có từ trường ngoài. Chúng ta có thể thấy là thành phần $z$ của thăng giáng spin nhỏ hơn rất nhiều so với thành phần $x$ và $y$. Đó là bởi vì trong bài báo này tôi xét từ trường ngoài và do đó là trường trung bình theo phương $z$ bên cạnh thăng giáng spin $\delta S^z$, còn theo phương $x$ và $y$ tôi chỉ xét các thăng giáng $\delta S^x$ và $\delta S^y$ (xem công thức (5)). Vì vậy thăng giáng spin toàn phần rất lớn dẫn đến trật tự từ của các hệ thấp chiều bị phá hủy (xem công thức (21)).

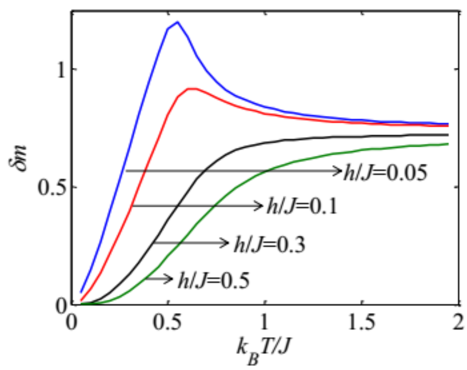



**Hình 2.** Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của thăng giáng spin trong hai trường hợp (i) chuỗi spin và (ii) màng mỏng. Hình chèn vào chỉ ra độ từ hóa tương đối trên mỗi spin của chuỗi spin và màng mỏng trong MFA.

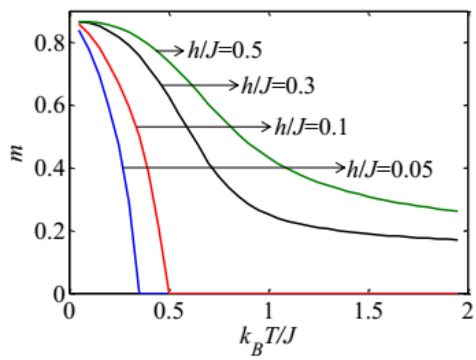



**Hình 3.** Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ cảm từ với các giá trị khác nhau của từ trường $h/J$ trong SFA.

Hình 2 chỉ ra sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các thăng giáng spin của chuỗi spin và màng mỏng [7] khi không có từ trường ngoài, $h/J$=0,0. Khi so sánh thăng giáng của chuỗi spin với thăng giáng của màng mỏng, có thể thấy là thăng giáng spin tăng khi số chiều của các hệ giảm. Kết quả này chỉ ra là các thăng giáng spin đóng một vai trò quan trọng trong các hệ thấp chiều. Ngoài ra, trong hình 2 cũng chỉ ra sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa tương đối trên mỗi spin trong gần đúng trường trung bình (hình chèn vào trong hình 2), với $m_0 = \left\langle S^z \right\rangle_0 = \mathrm{b}\left(y_0\right)$. Như vậy trong gần đúng trường trung bình có tồn tại nhiệt độ tới hạn $k_B T_C / J \neq 0$ trong cả hai hệ, tuy nhiên khi xét đến các thăng giáng spin thì trật tự từ không còn nữa, kết quả này hoàn toàn phù hợp với nguyên lý Mermin-Wagner [6].



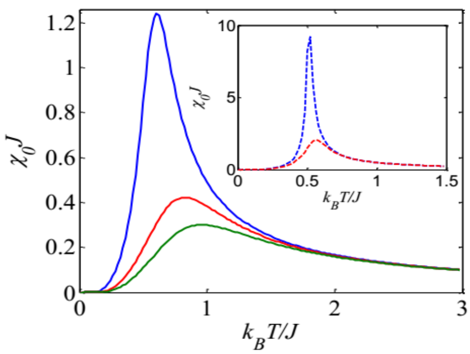

**Hình 4.** Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của thăng giáng spin với các giá trị khác nhau của từ trường ngoài, ở đây $S$=1/2.



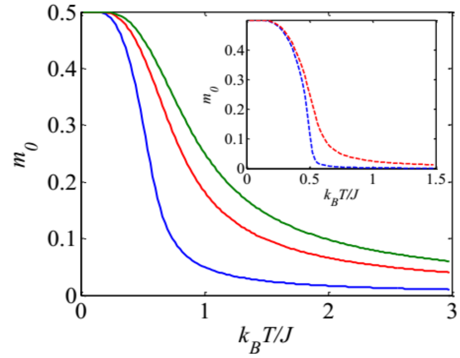

**Hình 5.** Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa với các giá trị khác nhau của từ trường ngoài trong SFA, ở đây $S$=1/2.

Hình 3 - 5 chỉ ra sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ cảm từ, thăng giáng spin và độ từ hóa của chuỗi spin với các giá trị khác nhau của từ trường $h/J$ trong gần đúng thăng giáng spin (SFA). Từ các hình này có thể thấy là khi từ trường ngoài càng lớn thì các thăng giáng nhiệt càng nhỏ. Đây là kết quả của sự cạnh tranh giữa năng lượng nhiệt và năng lượng từ (được gây ra bởi từ trường ngoài). Khi từ trường nhỏ (ví dụ $h/J$=0,05 và $h/J$=0,1), thông qua đường biểu diễn độ cảm từ chúng ta có thể thấy có chuyển pha bậc hai trong hệ (điểm kì dị của đường cong biểu diễn $\chi J$ theo $k_BT/J$), khi từ trường lớn, ví dụ $h/J$=0,3 và $h/J$=0,5, chúng ta không thể tìm thấy điểm chuyển pha này, như được chỉ ra trong hình 4 cho độ từ hóa. Đó là bởi vì dưới tác dụng của từ trường lên hệ spin, rất khó để phá vỡ trật tự từ của hệ.

Mặc khác từ hình 3 có thể thấy độ cảm từ $\chi J$ triệt tiêu khi $k_BT/J$ rất nhỏ, do đó $\chi J$ có một đỉnh cực đại ở $T_m$, ở đây $T_m$ tăng và độ cảm của $\chi J$ giảm khi từ trường ngoài tăng, kết quả này hoàn toàn phù hợp với kết quả được chỉ ra trong [2] của nhóm tác giả I. Juhász Junger cho $S$=1/2 với mô hình Heisenberg đẳng hướng sử dụng lý thuyết hàm Green bậc hai.

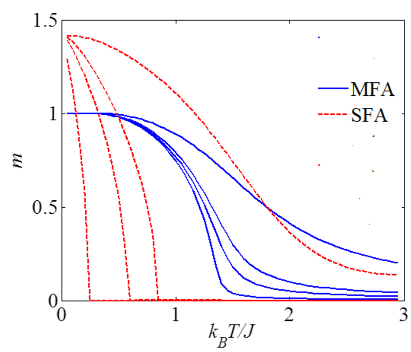



**Hình 6.** Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ cảm từ trong MFA với các giá trị khác nhau của từ trường *h*/*J*=0,1, 0,4 và 0,6 lần lượt tương ứng với các đường từ trên xuống. Hình chèn vào ứng với trường thấp hơn *h*/*J*=0,01 và 0,05, ở đây *S*=1/2.

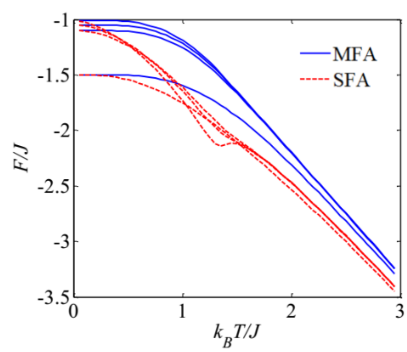



**Hình 7.** Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa trong MFA với các giá trị khác nhau của từ trường *h*/*J*=0,1, 0,4 và 0,6 lần lượt tương ứng với các đường từ trái sang phải theo chiều tăng của $k_BT/J$. Hình chèn vào ứng với trường thấp hơn *h*/*J*=0,01 và 0,05, ở đây *S*=1/2.

Ngoài ra, sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ cảm từ và độ từ hóa trong gần đúng trường trung bình còn được chỉ ra trong hình 6 và hình 7. Các kết quả về sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa và độ cảm từ trong MFA của công trình này phù hợp với các kết quả của nhóm tác giả I. Juhász Junger [2] tốt hơn so với trong gần đúng thăng giáng spin. Đó là bởi vì trong [2] mặc dù có xét đến các hàm tương quan spin-spin tuy nhiên các thăng giáng vẫn chưa được tính đến.




**Hình 8.** Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa với các giá trị khác nhau của từ trường *h*/*J* trong MFA và SFA, các đường đi từ trong ra ngoài lần lượt tương ứng với *h*/*J*=0,01, 0,05, 0,1 và 0,5, ở đây *S*=1.




**Hình 9.** Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của năng lượng tự do với các giá trị khác nhau của từ trường *h*/*J* trong MFA và SFA, các đường đi từ trên xuống dưới lần lượt tương ứng với *h*/*J*=0,01, 0,05, 0,1 và 0,5, ở đây *S*=1.

Hình 8 và hình 9 chỉ ra độ từ hóa và năng lượng tự do của mỗi spin với các giá trị khác nhau của $h/J$ trong MFA và SFA. Từ 2 hình này có thể thấy là trong SFA khi trường nhỏ, ví dụ $h/J$=0,01, các thăng giáng spin vẫn còn khá lớn do đó ảnh hưởng đến các tính chất nhiệt động lực học của hệ. Khi trường lớn, ví dụ $h/J$=0,5, lúc này các thăng giáng spin khá ổn định (xem hình 4) do đó sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các đại lượng nhiệt động lực học trong SFA gần giống như trong MFA.

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

Hình 10 chỉ ra sự phụ thuộc vào từ trường ngoài của độ từ hóa $m$ và thăng giáng spin $\delta m$ khi $k_BT/J$=0,5. Từ các kết quả tính số có thể thấy là thăng giáng spin giảm nhanh khi tăng từ trường ngoài và đạt tới giá trị 0 khi từ trường ngoài đủ lớn, trong khi đó độ từ hóa lại tăng theo từ trường ngoài và cuối cùng đạt tới hằng số khi tất cả các spin đều định hướng theo từ trường ngoài. Đây là kết quả của việc "cố định" spin bởi từ trường ngoài, vì vậy dẫn tới sự biến mất của các thăng giáng spin. Ngoài ra, từ hình vẽ này một lần nữa chúng tôi muốn nhấn mạnh vào tầm quan trọng của các thăng giáng spin khi số chiều của hệ từ giảm, thăng giáng spin tăng khi hệ giảm từ 2 chiều sang 1 chiều.

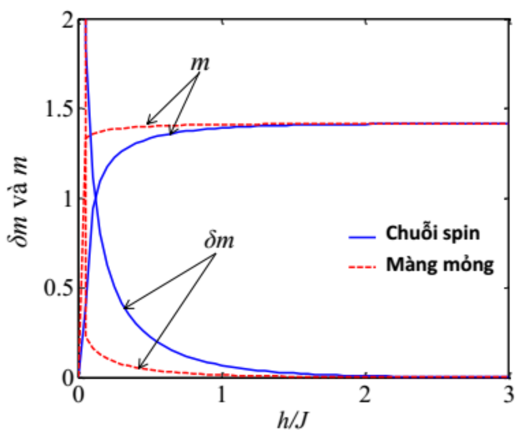



**Fig. 10. Hình 10.** Sự phụ thuộc vào từ trường ngoài của độ từ hóa và thăng giáng spin, ở đây $S$=1 và $k_BT/J$=0,5.

## 4 Kết luận

Từ mô hình Heisenrberg đẳng hướng tôi đã nghiên cứu ảnh hưởng của thăng giáng spin lên các tính chất nhiệt động lực học của chuỗi spin khi không có từ trường ngoài và khi có từ trường ngoài hữu hạn. Các kết quả chỉ ra là trật tự từ không tồn tại trong các hệ thấp chiều khi không có từ trường ngoài do sự đóng góp của các thăng giáng spin lớn ở nhiệt độ khác không, kết quả này hoàn toàn phù hợp với nguyên lý Mermin – Wagner. Ngoài ra, từ các kết quả tính toán số cho chuỗi spin và màng mỏng tôi cũng chỉ ra thăng giáng spin được tăng cường khi số chiều giảm. Sự xuất hiện của từ trường ngoài là nguyên nhân của sự suy giảm và biến mất của các thăng giáng spin. Tuy nhiên, mô hình tôi sử dụng vẫn còn có một số hạn chế, thứ nhất là mô hình mô tả hệ spin định xứ, thứ hai mô hình chỉ xét đến tương tác trao đổi giữa các spin lân cận gần nhất và thứ ba là mặc dù trong mô hình tôi đã đưa vào các thăng gián spin làm chính xác hóa thêm các kết quả của lý thuyết trường trung bình được phát triển bởi các tác giả khác, tuy nhiên các tính toán mới dừng lại ở gần đúng Gauss bậc thấp nhất. Do đó để đạt được kết quả tốt và gần hơn với hệ thực, tôi cần phát triển các tính toán của mình cho phép gần đúng Gauss bậc cao hơn có xét tới tính linh động của hệ spin với các tương tác trao đổi ở vùng xa hơn. Những vấn đề này sẽ được giải quyết trong thời gian tới.

## Lời cảm ơn

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Đại học Huế thông qua đề tài mã số DHH2016-03-83.

## Tài liệu tham khảo


1. Goncalvesa L. L., Coutinhoa L. P. S., de Limab J. P. (2005), Static and dynamic properties of the XXZ chain with long-range interactions, *Physica A*, **345**, 71.
2. Junger I. J., Ihle D., Bogacz L. and Janke W. (2008), Thermodynamics of Heisenberg ferromagnets with arbitrary spin in a magnetic field, *Physical Review B*, **77**, 174411.
3. Li J., Lei S. (2008), Thermodynamic properties of the spin-1/2 ferromagnetic Heisenberg chain with long-range interactions, *Physics Letters A*, **372**, 4086.
4. Xiang T. (1998), Thermodynamics of quantum Heisenberg spin chains, *Physical Review B*, **58**, 9142.
5. Katanin A. A., Irkhin V. Yu. (2007), Magnetic order and spin fluctuations in low-dimensional insulating systems, *Physics – Uspekhi*, **50(6)**, 613.
6. Mermin N. D., Wagner H. (1966), Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models, *Physical Review Letters*, **17**, 1133.
7. Bach Thanh Cong, Pham Huong Thao (2013), Thickness dependent properties of magnetic ultrathin films, *Physica B*, **426**, 144.
8. Bach Thanh Cong, Pham Huong Thao, Nguyen Tu Niem (2014), Role of interactions in size-dependent Curie temperature of magnetic ultrathin films, *IEEE Transactions on Magnetics*, **50**, 1100104.
9. Varkarchuk I. A., Rudavskii Yu. K., Method of functional integration in the theory of spin systems, *Theoretical and Mathematical Physics*, **49**, 1002.

10. Vaks V. G., Larkin A. I., Pikin S. A. (1967), Thermodynamics of an ideal ferromagnetic substance, *Soviet Physics JETP*, **26**, 188.

# INFLUENCE OF SPIN FLUCTUATION ON THERMODYNAMIC PROPERTIES OF QUANTUM SPIN CHAIN WITH ISOTROPIC HEISENBERG MODEL

**Pham Huong Thao***

HU – University of Education, Vietnam

**Abstract:** Dependence of the thermodynamic properties of the quantum spin chain on temperature and external magnetic field is investigated using the functional integral method with short range exchange interaction in isotropic Heisenberg model. The results in mean field approximation (MFA) and spin fluctuation approximation (SFA) are showed and compared with ones of other authors. Besides, the spin fluctuation breaks magnetic order in low dimensional spin systems with the short range exchange interaction in the isotropic Heisenberg model without the external magnetic field.

**Keywords:** spin chain, functional integral method, spin fluctuation, isotropic Heisenberg model, thermodynamic properties