

ĐẠI HỌC HUẾ
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

-----*-----

BÁO CÁO TỔNG KẾT
ĐỀ TÀI KHOA HỌC CÔNG NGHỆ CẤP TRƯỜNG
NĂM 2021

Tên đề ~~Đề tài~~ **MÔ HÌNH ISING NGẮN CHO CHUỖI SPIN**
PHẢN SẮT TỪ TRONG TỪ TRƯỜNG

Mã số: T.21 – TN – 06

Chủ nhiệm đề tài: LÊ THỊ TRANG

Thời gian thực hiện: 10 tháng

Huế 10/2021

ĐẠI HỌC HUẾ
TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

-----*-----

BÁO CÁO TỔNG KẾT
ĐỀ TÀI KHOA HỌC CÔNG NGHỆ CẤP TRƯỜNG
NĂM 2021

Tên đề tài: MÔ HÌNH ISING NGANG CHO CHUỖI SPIN
PHẢN SẮT TỪ TRONG TỪ TRƯỜNG

Mã số: T.21 – TN – 06

Chủ nhiệm đề tài: LÊ THỊ TRANG

Demo Version - Select Pdf SDK
Cơ vấn khoa học: TS. PHẠM HƯƠNG THẢO

HỌC VIÊN PHỐI HỢP NGHIÊN CỨU:

HUỲNH THỊ HOA

NGUYỄN THỊ TRÂM

Huế 10/2021

DANH SÁCH NHỮNG THÀNH VIÊN THAM GIA NGHIÊN CỨU ĐỀ TÀI VÀ ĐƠN VỊ PHỐI HỢP CHÍNH

1. Danh sách những thành viên tham gia nghiên cứu đề tài

TT	Họ và tên	Đơn vị	Nhiệm vụ
1	Lê Thị Trang	Khoa Vật Lý – Trường Đại học Sư phạm Huế	Chủ nhiệm đề tài
2	Huỳnh Thị Hoa	Khoa Vật Lý – Trường Đại học Sư phạm Huế	Phối hợp thực hiện
3	Nguyễn Thị Trâm	Khoa Vật Lý – Trường Đại học Sư phạm Huế	Phối hợp thực hiện

Demo Version - Select.Pdf SDK

2. Đơn vị phối hợp chính

MỤC LỤC

DANH SÁCH NHỮNG THÀNH VIÊN THAM GIA NGHIÊN CỨU ĐỀ TÀI VÀ ĐƠN VỊ PHỐI HỢP CHÍNH	i
MỤC LỤC	1
DANH MỤC HÌNH VẼ	3
THÔNG TIN KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU CỦA ĐỀ TÀI	5
MỞ ĐẦU	8
1. Tổng quan tình hình nghiên cứu thuộc lĩnh vực của đề tài trong và ngoài nước ..	8
2. Tính cấp thiết của đề tài	10
3. Mục tiêu của đề tài	10
4. Đối tượng, phạm vi nghiên cứu	10
5. Cách tiếp cận, phương pháp nghiên cứu	10
6. Nội dung nghiên cứu:	11
NỘI DUNG	12
CHƯƠNG 1. NGHIÊN CỨU LÝ THUYẾT TỔNG QUAN	12
1.1. Nguồn gốc của mômen từ nguyên tử	12
1.1.1. Spin và các trạng thái quỹ đạo của electron	12
1.1.2. Mô hình vectơ của nguyên tử	15
1.2. Tính thuận từ của ion tự do	20
1.2.1. Hàm Brillouin	20
1.2.2. Định luật Curie	23
1.3. Trạng thái có từ tính của chất phản sắt từ	25
1.3.1. Tương tác trao đổi Heisenberg và trường phân tử Weiss	25
1.3.2. Lý thuyết trường phân tử đối với chất phản sắt từ	27
CHƯƠNG 2. NGHIÊN CỨU CÁC TÍNH CHẤT NHIỆT ĐỘNG CỦA CHUỖI SPIN PHẢN SẮT TỪ VỚI MÔ HÌNH ISING NGANG TRONG TỬ TRƯỜNG	31
2.1. Giới thiệu	31
2.2. Mô hình và các đại lượng nhiệt động lực học	31
2.2.1. Mômen từ	37
2.2.2. Độ cảm từ	42

2.3. Kết luận chương 2	43
CHƯƠNG 3. KẾT QUẢ TÍNH SỐ VÀ THẢO LUẬN.....	44
3.1. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các tham số trật tự từ.....	44
3.2. Sự phụ thuộc vào từ trường của các tham số trật tự từ	50
3.3. Kết luận chương 3	54
KẾT LUẬN	55
TÀI LIỆU THAM KHẢO	56

Demo Version - Select.Pdf SDK

DANH MỤC HÌNH VẼ

Hình 1.1. Mô hình vectơ của nguyên tử áp dụng cho trường hợp $l = 2$ và từ trường ngoài khác không [18].....	13
Hình 1.2. Tương tác spin quỹ đạo giữa mômen \vec{S} và \vec{L} [18].....	16
Hình 1.3. Áp dụng quy tắc Hund để tìm bội số trạng thái cơ bản của nguyên tử có ba electron ở lớp 4f ($4f^3$) và chín electron lớp 4f ($4f^9$) [18].....	17
Hình 1.4. Sự biến thiên của L , S , và $g\sqrt{J(J+1)}$ trên nhóm Lantan [18].	19
Hình 1.5. Sự phân tách gấp $(2J + 1)$ lần suy biến mức $J = 9/2$ dưới tác dụng của từ trường. Sự phân chia ΔE_H tỉ lệ với cường độ trường [18].	21
Hình 1.6. Độ từ hóa M phụ thuộc vào H/T của một số muối phức thuận từ chứa Gd^{3+} , Fe^{3+} và Cr^{3+} [18].	24
Hình 1.7. Sự thay đổi độ cảm từ theo nhiệt độ của chất phản sắt từ.....	30
Hình 3.1. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hoá, ở đây $H_z = 0$,.....	45
Hình 3.2. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của các mômen từ với các giá trị khác nhau của từ trường ngang H_x , ở đây từ trường dọc $H_z = 0$ và $S = 0.5$	46
Hình 3.3. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ rút gọn của độ cảm từ dọc với các giá trị khác nhau của từ trường ngang H_x , ở đây từ trường dọc $H_z = 0$ và $S = 0.5$	46
Hình 3.4. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ rút gọn của mômen từ dọc với các giá trị khác nhau của từ trường dọc H_z , ở đây từ trường ngang $H_x = 0.1$ và $S = 0.5$	47
Hình 3.5. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ rút gọn của độ cảm từ dọc với các giá trị khác nhau của từ trường dọc H_z , ở đây từ trường ngang $H_x = 0.1$ và $S = 0.5$	48
Hình 3.6. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ rút gọn của mômen từ ngang với các giá trị khác nhau của từ trường dọc H_z , ở đây từ trường ngang $H_x = 0.1$ và $S = 0.5$	49
Hình 3.7. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ rút gọn của năng lượng tự do với các giá trị khác nhau của từ trường dọc H_z , ở đây từ trường ngang $H_x = 0.1$ và $S = 0.5$	49
Hình 3.8. Sự phụ thuộc vào từ trường ngang của độ từ hoá, ở đây $H_z = 0$, $\tau = 0.01$ và $S = 0.5$	50

Hình 3.9. Sự phụ thuộc vào từ trường ngang của độ từ hoá, ở đây $H_z = 0.1$, $\tau = 0.01$ và $S = 0.5$	51
Hình 3.10. Sự phụ thuộc vào từ trường dọc của độ từ hoá, ở đây $H_x = 0$, $\tau = 0.01$ và $S = 0.5$	52
Hình 3.11. Sự phụ thuộc vào từ trường dọc của độ từ hoá, ở đây $H_x = 0.1$, $\tau = 0.01$ và $S = 0.5$	53
Hình 3.12. Mức độ so le của độ từ hoá dưới ảnh hưởng của từ trường ngang và từ trường dọc.....	53
Hình 3.13. Mức độ so le của độ từ hoá dưới ảnh hưởng của từ trường ngang và từ trường dọc.....	54

Demo Version - Select.Pdf SDK

TRƯỜNG ĐẠI HỌC SƯ PHẠM

KHOA VẬT LÝ

THÔNG TIN KẾT QUẢ NGHIÊN CỨU CỦA ĐỀ TÀI

1. Thông tin chung:

- Tên đề tài: Mô hình Ising ngang cho chuỗi spin phản sắt từ trong từ trường
- Học viên thực hiện: Lê Thị Trang
- Lớp: Cao học Vật lý lý thuyết – Vật lý toán
- Khoa: Vật lý Số năm đào tạo: 2 năm
- Người hướng dẫn: TS. Phạm Hương Thảo

2. Mục tiêu đề tài:

Thu được các đại lượng mô tả các tính chất nhiệt động như năng lượng tự do, độ từ hóa và **Demo Version - Select Pdf SDK** mô hình Ising ngang khi có mặt của từ trường.

3. Tính mới và sáng tạo:

Ảnh hưởng quan trọng của từ trường ngang và từ trường dọc lên các tính chất từ của hai phân mạng của chuỗi spin Ising phản sắt từ trong gần đúng trường trung bình đã được chỉ ra. Ngoài ra, nguyên nhân gây ra các sự chuyển pha và hiện tượng so le của độ từ hoá trong chuỗi spin cũng được làm rõ.

4. Kết quả nghiên cứu:

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 đã được chỉ ra. 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 $|m^{z(A)}| < S$. 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.

5. Đóng góp về mặt kinh tế - xã hội, giáo dục và đào tạo, an ninh, quốc phòng và khả năng áp dụng của đề tài:

Đề tài có thể được sử dụng làm tài liệu tham khảo cho sinh viên và học viên cao học có cùng hướng nghiên cứu.

6. Công bố khoa học của sinh viên từ kết quả nghiên cứu của đề tài (*ghi rõ tên tạp chí nếu có*) hoặc nhận xét, đánh giá của cơ sở đã áp dụng các kết quả nghiên cứu (*nếu có*):

01 bài báo đăng trên Tạp chí Khoa học, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế.

Ngày 13 tháng 10 năm 2021

Sinh viên chịu trách nhiệm chính

thực hiện đề tài

Demo Version - Select.Pdf SDK (*ký, họ và tên*)

Nhận xét của người hướng dẫn về những đóng góp khoa học của sinh viên thực hiện đề tài (*phần này do người hướng dẫn ghi*):

.....

Ngày 13 tháng 10 năm 2021

Xác nhận của Khoa

(*ký tên*)

Người hướng dẫn

(*ký, họ và tên*)

Xác nhận của Trường

Demo Version - Select.Pdf SDK

MỞ ĐẦU

1. Tổng quan tình hình nghiên cứu thuộc lĩnh vực của đề tài trong và ngoài nước

Mô hình Ising (1920) là mô hình toán học đơn giản cho các hiện tượng từ trong cơ học thống kê [1]. Mô hình này bao gồm các biến độc lập được gọi là spin, chỉ có thể nhận một trong hai trạng thái là 1 hoặc -1. Từ khi công trình của Ising ra đời [2], từ học trong các hệ một chiều đã trở thành một vấn đề được quan tâm và nghiên cứu liên tục cả về lý thuyết lẫn thực nghiệm. Các nhà nghiên cứu trên thế giới đi sâu vào nghiên cứu chuỗi spin vì chuỗi spin hiện nay đang là đối tượng nghiên cứu cho các tiến trình thông tin lượng tử.

Các tính chất nhiệt động của các hệ từ một chiều với mô hình Ising là một trong những vấn đề thu hút nhiều sự quan tâm của các nhà khoa học trên thế giới, có thể kể đến một số công trình tiêu biểu như sau: mô hình Ising được sử dụng để nghiên cứu sự chuyển pha lượng tử trong các hệ thấp chiều đã được tổng hợp trong công trình [3] bởi S. Suzuki và các đồng sự; nhóm tác giả Z. Huang, F. Zhang, Y. Du [4] sử dụng phương pháp mô phỏng Monte Carlo nghiên cứu hành vi của độ từ hóa của chuỗi spin feri từ với cách sắp xếp phức tạp của các spin khi có trường ngoài; Richard J. C. Dixey và các đồng sự đã sử dụng mô hình Ising cho chuỗi spin sắt từ để nghiên cứu các tính chất của hợp chất LnODCO_3 (ở đây $\text{Ln} = \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}$ và Er) [5].

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 [6], [3]. Mô hình Ising ngang (tranverse 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 [7], có dạng như sau:

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

trong đó, số hạng thứ nhất và thứ hai tương ứng với năng lượng của hệ spin trong từ trường dọc và từ trường ngang, số hạng cuối là tương tác trao đổi theo mô hình Ising giữa các spin lân cận gần nhất.

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 [3]. 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 [8].

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 [9], 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 [10], 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 [11]. 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 [12] 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 đề tài này, chúng tôi nghiên cứu mô hình (1) trong gần đúng trường trung bình cho chuỗi spin AFM .

Vài năm gần đây các hệ từ tính thấp chiều cũng đang thu hút nhiều nhóm trong nước. Nghiên cứu lý thuyết mạnh về vấn đề này có thể kể đến nhóm của Bạch Thành Công tại trường Đại học Khoa học Tự nhiên Hà Nội, đang tập trung vào nghiên cứu các tính chất các hệ spin giả hai chiều, cụ thể là màng mỏng kích thước nanômét sử

dụng phương pháp tích phân phiếm hàm [13], [14] và mô hình Ising ngang đã được sử dụng để mô tả các hành vi từ của màng mỏng sắt từ đơn lớp [15].

2. Tính cấp thiết của đề tài

Để hiểu được hành vi của các loại vật liệu từ, một số mô hình truyền thống như Heisenberg, XY và Ising đã được sử dụng. Theo định lý Mermin- Wagner [16], không tồn tại trật tự từ trong các mô hình Heisenberg thấp chiều với tương tác trao đổi đẳng hướng ở một nhiệt độ xác định. Tuy nhiên, khi xuất hiện tính dị hướng trong các mô hình này thì định lý Mermin- Wagner sẽ bị vi phạm. Trong số các mô hình dị hướng, mô hình Ising ngang đóng một vai trò quan trọng bởi vì tính đơn giản và hữu hiệu để giải thích rộng rãi các loại chuyển pha bao gồm cả chuyển pha lượng tử. Ngoài ra, chuỗi spin là một trong những đối tượng thu hút nhiều sự nghiên cứu của các nhà khoa học, bởi vì bên cạnh tính đơn giản, chuỗi spin hiện nay cũng đang là đối tượng nghiên cứu cho các tiến trình thông tin lượng tử [17].

3. Mục tiêu của đề tài

Thu được các đại lượng mô tả các tính chất nhiệt động như năng lượng tự do, độ từ hóa và độ cảm từ của chuỗi spin phản sắt từ với mô hình Ising ngang khi có mặt của từ trường.

4. Đối tượng, phạm vi nghiên cứu

4.1. Đối tượng nghiên cứu

Các tính chất nhiệt động của chuỗi spin phản sắt từ.

4.2. Phạm vi nghiên cứu

Đề tài chỉ giới hạn nghiên cứu một số tính chất nhiệt động như năng lượng tự do, độ từ hóa và độ cảm từ của chuỗi spin phản sắt từ với mô hình Ising khi có mặt từ trường dọc trong gần đúng trường trung bình.

5. Cách tiếp cận, phương pháp nghiên cứu

5.1. Cách tiếp cận

Nghiên cứu tài liệu (tài liệu cần thiết trên mạng internet), trao đổi thông tin và học hỏi kinh nghiệm từ cố vấn khoa học của đề tài và từ các nhóm nghiên cứu khác.

5.2. Phương pháp nghiên cứu

- Phương pháp gần đúng trường trung bình.
- Phương pháp chéo hóa.
- Phương pháp số

6. Nội dung nghiên cứu:

Nội dung 1: Nghiên cứu mô hình Ising và phương pháp gần đúng trường trung bình.

- 1.1. Mô hình Ising cho hệ spin định xứ
- 1.2. Phương pháp gần đúng trường trung bình

Nội dung 2: Nghiên cứu mô hình Ising ngang trong từ trường dọc.

- 2.1. Mô hình Ising ngang
- 2.2. Phương pháp gần đúng trường trung bình cho mô hình Ising ngang trong từ trường dọc

Nội dung 3: Nghiên cứu các tính chất nhiệt động của chuỗi spin và sự phụ thuộc của các đại lượng nhiệt động vào nhiệt độ và vào từ trường ngoài.

- 3.1. Biểu thức của các đại lượng nhiệt động: Năng lượng tự do, độ từ hóa, độ và cảm từ
- 3.2. Tính số để đưa ra sự phụ thuộc của các đại lượng nhiệt động vào nhiệt độ và vào từ trường ngoài