

Ảnh hưởng của mất trật tự chéo lên hàm cảm ứng spin trong bán dẫn từ pha loãng

Effects of diagonal disorder in spin susceptibility in a diluted magnetic semiconductor

Nguyễn Hữu Nhã^a, Phan Văn Nhâm^{b,c,*}
Nguyen Huu Nha^a, Phan Van Nham^{b,c,*}

^aTrường Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia TP. Hồ Chí Minh, TP. Hồ Chí Minh, Việt Nam
^aDepartment of Theoretical Physics, VNUHCM-University of Science, Ho Chi Minh City, 700000, Vietnam
^bViện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ Cao, Trường Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam
^bInstitute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, 550000, Vietnam
^cKhoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam
^cFaculty of Nature Sciences, Duy Tan University, Da Nang, 550000, Vietnam

(Ngày nhận bài: 06/7/2021, ngày phản biện xong: 12/8/2021, ngày chấp nhận đăng: 27/10/2021)

Tóm tắt

Mất trật tự đóng vai trò rất quan trọng trong các hệ có pha tạp. Trong bài báo này, sự ảnh hưởng của mất trật tự lên tính chất từ trong bán dẫn từ pha loãng được khảo sát thông qua hàm cảm ứng spin cho mô hình mạng Kondo có mất trật tự chéo. Giả thiết mất trật tự chéo chỉ tồn tại khi nút mạng có pha tạp, khi đó, hàm cảm ứng spin hoàn toàn có thể xác định được dựa trên kết quả của lý thuyết trường trung bình động. Khi nhiệt độ giảm, thăng giáng spin tăng và kết quả hệ có thể ở trạng thái trật tự từ khi nhiệt độ đủ thấp. Tùy vào cường độ tương tác từ hay mất trật tự mà hàm cảm ứng tương ứng với các xung lượng khác nhau có thể phân kỳ trước, dẫn tới sự cạnh tranh giữa các trạng thái từ khác nhau trong hệ.

Từ khóa: Hàm cảm ứng spin tĩnh; mất trật tự; bán dẫn từ pha loãng; lý thuyết trường trung bình động.

Abstract

Disorders play important roles in a doping material. This paper discusses the effects of diagonal disorder in magnetic correlations in diluted magnetic semiconductor from signatures of the static spin susceptibility function for the Kondo lattice model. Suppose that the disorder occurs only in a doped lattice site, the static spin susceptibility function thus is able to be found in the framework of dynamical mean-field theory. Numerical results clarify a divergence of the static spin susceptibility when temperature is sufficiently small. Depending on the magnetic coupling and the disorder potential, the spin susceptibility might diverge for each momenta that delivers a complex magnetic instabilities in the system in the low temperature range.

Keywords: static spin susceptibility function, disorder, diluted magnetic semiconductor, dynamical mean-field theory

©2019 Bản quyền thuộc Đại học Duy Tân.

* Corresponding Author: Phan Van Nham; Institute of Research and Development, Duy Tan University, Da Nang, 550000, Vietnam; Faculty of Nature Sciences, Duy Tan University, Da Nang, 550000, Vietnam
Email: phanvannham@duytan.edu.vn

1. Mở đầu

Trong những năm gần đây, với sự phát triển của công nghệ điện tử học spin, vật liệu bán dẫn từ pha loãng trở nên được quan tâm hơn bao giờ hết [1,2]. Ở vật liệu bán dẫn từ pha loãng, các ion từ được pha tạp với nồng độ thấp trong các tinh thể bán dẫn. Bán dẫn từ pha loãng vì vậy vừa thể hiện được tính chất điện (do hạt tải trong bán dẫn) và vừa thể hiện tính chất từ (vì có tương tác từ của hạt tải với ion từ pha tạp). Tính chất từ của hệ vì vậy trở nên hết sức thú vị [3,4]. Khi có pha tạp từ, phổ năng lượng của hạt tải xuất hiện dải tạp. Dải này càng thể hiện rõ khi tăng nồng độ pha tạp cũng như tăng cường độ tương tác từ [5]. Khi dải tạp chưa lấp đầy, hệ tồn tại ở trạng thái sắt từ (FM) giống như các hệ manganite pha tạp [6].

Với các hệ bán dẫn từ pha tạp, ảnh hưởng của mất trật tự đóng vai trò quan trọng. Thực vậy, khi có mất trật tự, nhiệt độ chuyển pha trạng thái FM được cho rằng sẽ bị giảm dần tới phạm vi tồn tại trạng thái FM bị thu hẹp. Điều này cho thấy, khi cường độ tương tác từ tăng cường nhiệt độ chuyển pha FM thì ngược lại, mất trật tự lại làm giảm nhiệt độ chuyển pha FM. Hơn nữa, khi tăng dần nồng độ hạt tải, hay khi dải tạp dần bị lấp đầy, trạng thái FM cũng bị thu hẹp [7]. Đặc biệt, khi dải tạp bị lấp đầy hoàn toàn, trạng thái FM có thể bị biến mất và thay vào đó là trạng thái phản sắt từ (AFM), giống như trong các hệ manganite pha tạp [8]. Điều này gợi ý cho chúng ta thấy, việc nghiên cứu một cách chi tiết bức tranh trật tự từ khi dải tạp của hệ ở trạng thái lấp đầy hoàn toàn là một vấn đề hết sức thú vị.

Thăng giáng từ hay chuyển pha trật tự từ trong hệ có thể được khảo sát bằng xác định độ từ hóa hay hàm cảm ứng spin tĩnh. Trong bài báo này, chúng tôi sử dụng hàm cảm ứng spin tĩnh để nghiên cứu tính chất từ của hệ. Hàm cảm ứng spin tĩnh có thể phụ thuộc vào xung lượng và vì vậy tùy vào giá trị xung lượng, hàm cảm ứng nào đóng vai trò quan trọng sẽ quyết định trạng thái trật tự từ của hệ. Hàm cảm ứng spin trong bài báo này sẽ được tính toán dựa trên lý thuyết trường trung bình động (DMFT) áp dụng cho mô hình mạng Kondo khi tính tới mất trật tự chéo. Với một hệ các hạt tải có tính tới tương tác từ định xứ, mô hình mạng Kondo có thể mô tả một cách đầy đủ tính chất vi mô của hệ trong giới hạn lượng tử. Ngoài ra, lý thuyết DMFT có thể áp dụng một cách dễ dàng để giải quyết bài toán hệ hạt tải trong mô hình mạng Kondo [9]. Tính chất từ của hệ vì vậy có thể được khảo sát một cách chi tiết.

Bài báo này được chia làm bốn phần. Ngoài phần mở đầu, chúng tôi giới thiệu mô hình và lý thuyết trường trung bình động ở phần 2. Phần 3 trình bày kết quả tính toán giải tích cho hàm cảm ứng spin tĩnh. Kết quả tính số và thảo luận cho hàm cảm ứng spin tĩnh được thể hiện trong phần 4. Cuối cùng, phần 5 là phần kết luận của bài báo.

2. Mô hình và lý thuyết trường trung bình động

Để mô tả trạng thái của hạt tải cũng như những tính chất từ tính trong hệ bán dẫn từ pha loãng, chúng tôi sử dụng Hamiltonian được viết trong biểu diễn số lượng tử lấp đầy

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + 2J \sum_i \alpha_i \vec{S}_i \vec{s}_i + U \sum_i \alpha_i n_i - \mu \sum_i n_i \quad (1)$$

trong đó $c_{i\sigma}^\dagger$ và $c_{i\sigma}$ là các toán tử sinh, hủy hạt tải tại nút i có spin σ , toán tử spin tương ứng của hạt tải là $\vec{s}_i = \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^\dagger \vec{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'}$ / 2 với $\vec{\sigma}_{\sigma\sigma'}$ là các ma trận Pauli và $n_i = \sum_{\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$ là toán tử số lấp đầy tương ứng. Số hạng thứ nhất trong Hamiltonian mô tả tích phân nhảy của hạt tải

giữa các nút lân cận gần nhất. Số hạng thứ hai mô tả tương tác từ giữa spin của hạt tải với mômen từ định xứ \vec{S}_i với cường độ J . $\alpha_i=1$ nếu nút i được pha tạp bởi ion từ với xác suất x và $\alpha_i=0$ nếu nút i không được pha tạp. U là giá trị đặc

trung cho độ mất trật tự của hệ hạt tải khi bán dẫn có pha tạp từ và μ là thế hóa.

Trong nội dung bài báo này, Hamiltonian ở (1) được khảo sát bằng áp dụng lý thuyết DMFT. Với lý thuyết DMFT, hàm Green của hạt dẫn có thể được xác định một cách chính xác ở gần đúng số chiều vô hạn. Khi đó, hàm Green được xem như không phụ thuộc vào xung lượng

$$G_{\sigma}(i\omega_n) = \int d\varepsilon \rho(\varepsilon) \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon + \mu - \Sigma_{\sigma}(i\omega_n)}, \quad (2)$$

trong đó $\Sigma_{\sigma}(i\omega_n)$ là năng lượng riêng với $\omega_n = (2n+1)\pi T$ (T là nhiệt độ). Ở gần đúng số chiều vô hạn, năng lượng riêng cũng không phụ thuộc vào xung lượng. $\rho(\varepsilon)$ là hàm mật độ trạng thái của hạt tải không tương tác.

Hàm Green ở phương trình (2) trùng với hàm Green của hạt tải mô tả bởi Hamiltonian (1) khi giả thiết hạt tải nằm trong trường trung bình động [13]. Khi đó ta có thể viết

$$G_{\sigma}(i\omega_n) = \sum_{\alpha s} \frac{W_{\alpha s}}{\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) - (Js\sigma + U)\alpha}. \quad (3)$$

$$\chi(\mathbf{q}) = T^2 \sum_{ijn, \sigma\sigma'} e^{-iq(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \frac{dG_{ii, \sigma}(i\omega_n)}{dh_{j\sigma'}} \Big|_{h=0} \sigma\sigma', \quad (5)$$

Trong đó $h_{j\sigma}$ là từ trường ngoài. Từ đồng nhất thức

$$G_{ii, \sigma}(i\omega_n) = \sum_{lm} G_{il, \sigma}(i\omega_n) G_{lm, \sigma}^{-1}(i\omega_n) G_{mi, \sigma}(i\omega_n),$$

và chú ý rằng $\sum_m G_{lm, \sigma}^{-1}(i\omega_n) G_{mi, \sigma}(i\omega_n) = \delta_{li}$, ta có thể thu được

$$\begin{aligned} \frac{dG_{ii, \sigma}(i\omega_n)}{dh_{j\sigma'}} &= - \sum_{lm} G_{il, \sigma}(i\omega_n) \frac{dG_{lm, \sigma}^{-1}(i\omega_n)}{dh_{j\sigma'}} G_{mi, \sigma}(i\omega_n) \\ &= \sum_{lm} G_{il, \sigma}(i\omega_n) \left[\delta_{lm} \delta_{mj} + \frac{d\Sigma_{lm, \sigma}(i\omega_n)}{dh_{j\sigma'}} \delta_{lm} \right] G_{mi, \sigma}(i\omega_n). \quad (6) \end{aligned}$$

Chú ý rằng, ở đây, chúng ta đã sử dụng biểu diễn của hàm Green phụ thuộc vào từ trường ngoài có dạng

Ở đây, $\mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n)$ là hàm Green của trường hiệu dụng với $W_{\alpha s}$ ($\alpha=0;1$) đóng vai trò như các hệ số trọng khối, được viết một cách chi tiết

$$W_{0s} = \frac{(1-x) \exp \sum_{n\sigma} \ln[\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n)/i\omega_n]}{\text{Tr} \exp \sum_{n\sigma} \ln[\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n)]},$$

và

$$W_{1s} = \frac{x \exp \sum_{n\sigma} \ln\{[\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) - (Js\sigma + U)]/i\omega_n\}}{\text{Tr} \exp \sum_{n\sigma} \ln[\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) - (Js\sigma + U)]}.$$

Hàm Green của hạt tải cũng thỏa mãn điều kiện của phương trình Dyson

$$G_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) = \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) - \Sigma_{\sigma}(i\omega_n). \quad (4)$$

Từ các phương trình (2-4), ta thu được hệ phương trình tự hợp, cho phép xác định hàm Green của điện tử cũng như hàm năng lượng riêng. Điều đó giúp chúng ta xác định được hàm cảm ứng từ tĩnh trong phần tiếp theo.

3. Hàm cảm ứng từ tĩnh

Hàm cảm ứng từ cho ta tín hiệu phản hồi tính chất từ của hệ khi từ trường ngoài tác động vào. Hàm cảm ứng từ vì vậy, có thể được xác định từ kết quả của hàm Green. Thực vậy, ta có thể viết [18]

$$G_{lm,\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{\delta_{lm}[i\omega_n + \mu - h_{l\sigma} - \Sigma_{lm,\sigma}(i\omega_n)] - t_{lm}}$$

với t_{lm} phụ thuộc vào tích phân nhảy nút hiệu dụng t^* và số chiều của hệ [13]. Xem năng lượng riêng như là phiếm hàm của hàm Green, ta có thể viết

$$\frac{d\Sigma_{ll,\sigma}(i\omega_n)}{dh_{j\sigma'}} = \sum_{\nu\sigma''} \frac{d\Sigma_{ll,\sigma}(i\omega_n)}{dG_{ll,\sigma''}(i\omega_\nu)} \frac{dG_{ll,\sigma''}(i\omega_\nu)}{dh_{j,\sigma'}}. \tag{7}$$

Thay (6) vào (5) cùng với (7) ta thu được

$$\chi(\mathbf{q}) = -T^2 \sum_{n\sigma\sigma'} \chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n) \sigma\sigma' + \sum_{n\sigma\sigma'} \chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n) \sigma\sigma' \sum_{\mu\sigma''} \frac{d\Sigma_\sigma(i\omega_n)}{dG_{\sigma''}(i\omega_\nu)} \chi_{\sigma''\sigma'}(\mathbf{q}, i\omega_n).$$

Ở đây

$$\chi_{\sigma\sigma'}(\mathbf{q}, i\omega_n) = -T^2 \sum_{ij,\sigma\sigma'} e^{-i\mathbf{q}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \frac{dG_{ii,\sigma}(i\omega_n)}{dh_{j\sigma'}} \sigma\sigma',$$

Và hàm cảm ứng không tương tác

$$\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k},\sigma} G_\sigma(\mathbf{k} + \mathbf{q}, i\omega_n) G_\sigma(\mathbf{k}, i\omega_n).$$

Chú ý rằng, từ kết quả của hàm năng lượng riêng ở gần đúng DMFT, ta hoàn toàn có thể xem $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$ như là phiếm hàm của hàm Green $G_\sigma(i\omega_n)$ và các hệ số trọng khối $W_{\alpha s}$. Khi đó ta có

$$\frac{d\Sigma_\sigma(i\omega_n)}{dG_{\sigma'}(i\omega_\nu)} = \frac{\partial \Sigma_\sigma(i\omega_n)}{\partial G_{\sigma'}(i\omega_\nu)} \delta_{\sigma\sigma'} \delta_{n\nu} + \sum_{s\alpha} \frac{\partial \Sigma_\sigma(i\omega_n)}{\partial W_{\alpha s}} \frac{dW_{\alpha s}}{dG_{\sigma'}(i\omega_\nu)}.$$

Với kết quả của hàm trọng khối $W_{\alpha s}$ phụ thuộc vào hàm Green cho ở mục trước, chúng ta có thể xác định được biểu thức giải tích cụ thể hơn của hàm cảm ứng từ tĩnh

$$\begin{aligned} \chi(\mathbf{q}) = & -\sum_n \frac{4T^2}{2\chi_0^{-1}(\mathbf{q}, i\omega_n) + \sum_\sigma G_\sigma^{-2}(i\omega_n) - S_{n\sigma}^{-1}} \\ & + \sum_{\alpha s n} \frac{2T^2 \sigma \gamma_{\alpha s}(\mathbf{q})}{2S_{n\sigma} Z_\sigma^{\alpha s}(i\omega_n) \chi_0^{-1}(\mathbf{q}, i\omega_n) + \sum_\sigma G_\sigma^{-2}(i\omega_n) - S_{n\sigma}^{-1}}, \end{aligned} \tag{8}$$

trong đó

$$S_{n\sigma} = \sum_{\alpha s} \frac{W_{\alpha s}}{[Z_\sigma^{\alpha s}(i\omega_n)]^2}$$

còn hàm $\gamma_{\alpha s}(\mathbf{q})$ được xác định từ ma trận với

$$\sum_{\alpha' s'} \Pi_{\alpha s, \alpha' s'}(\mathbf{q}) \gamma_{\alpha' s'}(\mathbf{q}) = \Omega_{\alpha s}(\mathbf{q}),$$

$$\Pi_{\alpha s, \alpha' s'}(\mathbf{q}) = \delta_{\alpha \alpha'} \delta_{s s'} - \sum_{n\sigma} \frac{W_{\alpha s} \Gamma_{\sigma}^{\alpha s}(i\omega_n)}{S_{n\sigma} Z_{\sigma}^{\alpha' s'}(i\omega_n)} - \frac{1}{2} \sum_{n\sigma\sigma'} \frac{R_n(\mathbf{q}) W_{\alpha s} \Gamma_{\sigma}^{\alpha s}(i\omega_n)}{S_{n\sigma} S_{n\sigma'} Z_{\sigma}^{\alpha' s'}(i\omega_n)} \sigma \sigma',$$

$$\Omega_{\alpha s}(\mathbf{q}) = -2 \sum_{n\sigma} \frac{R_n(\mathbf{q}) W_{\alpha s} \Gamma_{\sigma}^{\alpha s}(i\omega_n)}{S_{n\sigma}} \sigma.$$

Ở đây, ta đã dùng ký hiệu

$$\Gamma_{\sigma}^{\alpha s}(i\omega_n) = Z_{\sigma}^{\alpha s}(i\omega_n)^{-1} - G_{\sigma}(i\omega_n)$$

và

$$R_n(\mathbf{q}) = \frac{2}{2\chi_0^{-1}(\mathbf{q}, i\omega_n) + \sum_{\sigma} G_{\sigma}^{-2}(i\omega_n) - S_{n\sigma}^{-1}}$$

Như vậy, ta nhận thấy, hàm cảm ứng phụ thuộc vào xung lượng chỉ thông qua hàm cảm ứng không tương tác $\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n)$. Ở số chiều vô hạn, sự phụ thuộc vào \mathbf{q} có thể được xác định thông qua tham số $X = \sum i \cos qi/D$ [13, 16], cụ thể

$$\chi_0(\mathbf{q}, i\omega_n) \equiv \chi_0(X, i\omega_n) = \frac{-1}{\sqrt{1-X^2}} \int \frac{d\epsilon \rho(\epsilon)}{z-\epsilon} F\left(\frac{z-X\epsilon}{\sqrt{1-X^2}}\right),$$

trong đó $F(z) = \int d\epsilon \rho(\epsilon)/(z-\epsilon)$ là phép biến đổi Hilbert của mật độ trạng thái không tương tác với $z=i\omega_n+\mu-\sum(i\omega_n)$. Chú ý rằng, hàm cảm ứng spin được xác định trong pha thuận từ. Điều đó cho thấy khi hàm cảm ứng có xu hướng phân kỳ, cho ta tín hiệu của sự chuyển pha trạng thái trật tự từ từ trạng thái thuận từ. Tùy thuộc vào sự phân kỳ của hàm cảm ứng từ tại mỗi xung lượng khác nhau mà ta có trạng thái trật tự từ khác nhau. Ví dụ, khi hàm cảm ứng phân kỳ tại $X = -1$ (tương ứng với biên vùng Brillouin $\mathbf{q} = (\pi, \pi, \dots, \pi)$) ta có chuyển pha thuận-phản sắt từ (PM-AF) còn khi hàm cảm ứng phân kỳ tại $X = 1$ (hay tại tâm vùng Brillouin $\mathbf{q} = \mathbf{0}$), ta có chuyển pha thuận – sắt từ (PM-FM).

4. Kết quả tính số và thảo luận

Trong phần này, chúng tôi trình bày kết quả tính số hàm cảm ứng spin tĩnh tính toán giải tích ở phần trên. Với kết quả của hàm Green cũng như năng lượng riêng của hạt tải sau khi giải tự hợp trong gần đúng DMFT, hàm cảm

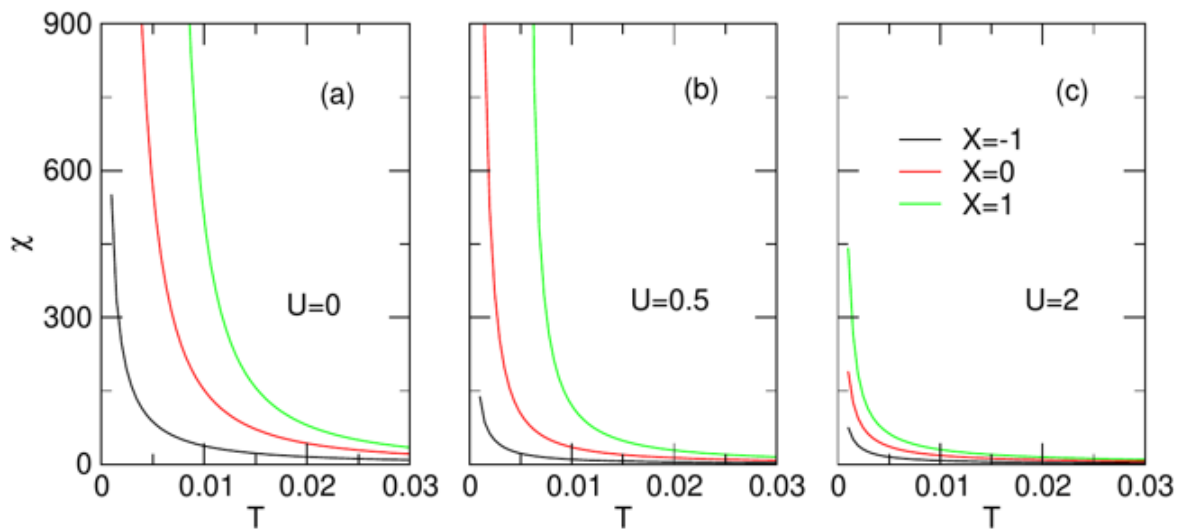
ứng spin tĩnh dễ dàng được xác định theo công thức (8). Trong tính toán của chúng tôi, dải tạp được xem như lấp đầy, tức mật độ hạt tải n và nồng độ pha tạp x là bằng nhau, $n=x$. Ở điều kiện này, như chúng tôi đã đề cập, có thể xuất hiện sự cạnh tranh các trạng thái trật tự từ như trật tự FM và trật tự AFM khi nhiệt độ đủ nhỏ. Bằng việc thay đổi thế tương tác từ J cũng như cường độ mất trật tự U , chúng tôi có thể khảo sát bức tranh thăng giáng từ của hệ khi có ảnh hưởng của mất trật tự lên tính chất từ của hệ.

Xuất phát từ một nhiệt độ đủ lớn, khi đó hệ ở trạng thái thuận từ (PM), hàm cảm ứng spin được xác định có giá trị nhỏ, thể hiện thăng giáng từ yếu. Khi nhiệt độ giảm xuống, thăng giáng nhiệt bị giảm và thay vào đó, thăng giáng từ tăng cường dẫn tới tăng giá trị của hàm cảm ứng spin tĩnh. Nhiệt độ càng giảm thì thăng giáng từ càng đóng vai trò quyết định và khi nhiệt độ đủ nhỏ, hàm cảm ứng spin có thể phân kỳ. Nhiệt độ tại đó hàm cảm ứng spin phân kỳ thể hiện sự phá vỡ đối xứng tự phát và hệ ở một

trạng thái trật tự từ nhất định. Tùy thuộc vào giá trị xung lượng của hàm cảm ứng mà nó phân kỳ, hệ sẽ ở trạng thái trật tự từ khác nhau. Ví dụ, nếu hàm cảm ứng phân kỳ ứng với xung lượng $\mathbf{q}=(0,0,..0)$, hay $X=1$, hệ chuyển sang trạng thái trật tự FM, ngược lại nếu hàm cảm ứng phân kỳ ứng với xung lượng $\mathbf{q}=(\pi, \pi, \dots, \pi)$, hay $X=-1$, hệ chuyển sang trạng thái AFM. Còn nếu hệ phân kỳ ở giá trị trung gian của xung lượng hay $-1 < X < 1$, thì hệ ở trạng thái phân pha khi có sự cạnh tranh giữa trạng thái FM và trạng thái AFM.

Hình 1 mô tả sự phụ thuộc của hàm cảm ứng spin tĩnh χ vào nhiệt độ T khi cường độ tương tác J còn nhỏ, cụ thể $J=1$, cho một số giá trị khác nhau của cường độ mất trật tự. Trong tất cả các trường hợp của cường độ mất trật tự, ta

nhận thấy hàm cảm ứng spin đều tăng dần khi giảm nhiệt độ. Điều này cho thấy, khi giảm nhiệt độ, thăng giáng nhiệt giảm làm giảm bớt ảnh hưởng của thăng giáng nhiệt lên trạng thái spin của hệ và thăng giáng từ đóng vai trò quan trọng. Kết quả hệ có thể ở trạng thái trật tự từ. Với J nhỏ, dải tạp vẫn chưa tách rời so với dải chính, và với các giá trị của U , ta nhận thấy hàm cảm ứng spin tĩnh ứng với $X=1$ luôn phân kỳ trước các giá trị khác của X . Điều này cho thấy, với mọi giá trị của U trong phạm vi chúng ta xét, chúng ta chỉ tìm được trạng thái FM. Khi tăng độ mất trật tự, nhiệt độ mà hàm cảm ứng có thể phân kỳ giảm. Điều đó cho thấy, mất trật tự làm giảm nhiệt độ chuyển pha trạng thái trật tự từ.



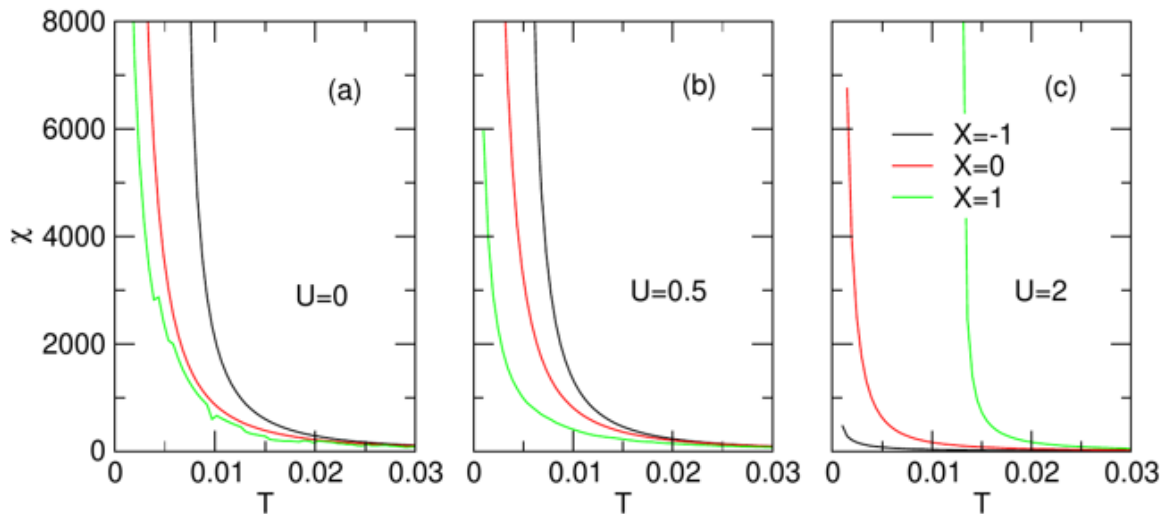
Hình 1: Hàm cảm ứng spin tĩnh phụ thuộc nhiệt độ cho ba giá trị của xung lượng X với $J=1, n=x=0.1$, cho ba giá trị khác nhau của U .

Khi tăng cường độ tương tác từ, chúng ta thu được bức tranh chuyển pha hoàn toàn khác. Thực vậy, Hình 2 cho chúng ta thấy, khi cường độ tương tác từ đủ lớn, $J=3$ chẳng hạn, hàm cảm ứng spin tĩnh với $X=1$ có thể phân kỳ với nhiệt độ nhỏ hơn nhiệt độ mà tại đó hàm cảm ứng spin tĩnh tại $X=-1$ phân kỳ. Điều này cho chúng ta thấy sự cạnh tranh của các trạng thái trật tự từ. Khi U nhỏ, $U < 0.5$ chẳng hạn, Hình 2 (a&b) chỉ ra rằng hệ có thể tồn tại trạng thái AFM khi nhiệt độ nhỏ. Khi U lớn hơn, $U=2$

chẳng hạn, Hình 2(c) cho ta thấy hệ lại ở trạng thái FM khi nhiệt độ giảm hơn nhiệt độ tới hạn. Điều này cho chúng ta thấy vai trò của thể mất trật tự trong sự tồn tại các trạng thái trật tự từ của hệ. Chú ý rằng, chúng ta đang khảo sát cho trường hợp dải tạp là lấp đầy hoàn toàn. Khi đó, với U nhỏ, tương tác từ đóng vai trò chủ đạo và dải tạp lúc này tách rời so với dải dẫn. Kết quả, khi dải tạp lấp đầy, quá trình nhảy nút của hạt tải để tạo trạng thái FM bị ngăn cản, thay vào đó chỉ có quá trình nhảy nút ảo của các hạt tải

dẫn tới trạng thái AFM như trong các hợp chất manganite pha tạp. Khi tăng độ mất trật tự, sự tách biệt giữa dải tạp và dải chính trở nên nhờ

đi, làm cho quá trình nhảy nút tạo trạng thái FM có thể xảy ra và hệ ở trạng thái FM.



Hình 2: Hàm cảm ứng spin tĩnh phụ thuộc nhiệt độ cho ba giá trị của xung lượng X với $J=3$, $n=x=0.1$, cho ba giá trị khác nhau của U .

5. Kết luận

Trong bài báo này, chúng tôi đã khảo sát hàm cảm ứng spin tĩnh cho hệ bán dẫn từ pha loãng bằng áp dụng lý thuyết trường trung bình động cho mô hình mạng Kondo khi có mất trật tự. Ở gần đúng số chiều vô hạn, chúng tôi đã thu được hệ phương trình tự hợp cho phép xác định hàm Green cũng như năng lượng riêng của hạt tải trong hệ. Giả thiết hệ ở trạng thái thuận từ, hàm cảm ứng spin tĩnh cũng được tính toán dựa trên kết quả của lý thuyết trường trung bình động. Kết quả tính số chỉ ra rằng, khi nhiệt độ giảm, ảnh hưởng của thăng giáng nhiệt lên sự sắp xếp trật tự spin của hệ giảm, dẫn tới hàm cảm ứng spin tĩnh tăng. Khi nhiệt độ đủ nhỏ, ta có thể quan sát được sự phân kỳ của hàm cảm ứng spin tĩnh. Nhiệt độ chuyển pha trật tự từ vì vậy được xác định. Với tương tác từ nhỏ, khi dải tạp lấp đầy hoàn toàn, ta chỉ quan sát được trạng thái sắt từ. Cường độ mất trật tự chỉ làm giảm nhiệt độ chuyển pha sắt từ. Tuy nhiên, khi tương tác từ đủ lớn, ta có thể quan sát được sự chuyển pha thuận từ-phản sắt từ khi mất trật tự nhỏ. Tăng dần độ mất trật tự làm cho trạng thái

phản sắt từ bị suy yếu, thay vào đó, ta lại quan sát được trạng thái sắt từ. Nghiên cứu này đóng vai trò quan trọng giúp chúng ta có thể khảo sát chi tiết cạnh tranh trạng thái trật tự từ trong hệ.

Tài liệu tham khảo

- [1] T. Jungwirth, J. Wunderlich, V. Novák, K. Olejník, B.L. Gallagher, R.P. Campion, K.W. Edmonds, A.W. Rushforth, A.J. Ferguson, P. Němec, (2014), Rev. Mod. Phys. 86, 855.
- [2] T. Dietl, H. Ohno, (2014), Rev. Mod. Phys. 86, 187.
- [3] O. Fedorych, E.M. Hankiewicz, Z. Wilamowski, J. Sadowski, (2002), Phys. Rev. B 66, 045201.
- [4] T. Dietl, H. Ohno, F. Matsukura, J. Cibert, D. Ferrand, (2000), Science 287, 1019.
- [5] E.H. Hwang, S.D. Sarma, (2005), Phys. Rev. B 72, 035210.
- [6] A. Chattopadhyay, S.D. Sarma, A.J. Millis, (2001), Phys. Rev. Lett. 87, 227202.
- [7] A. Chattopadhyay, A. J. Millis, S. Das Sarma, (2000), Phys. Rev. B 61, 10738.
- [8] V.-N. Phan, H.-N. Nguyen, (2020), Phys. Rev. B 102, 125202.
- [9] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M.J. Rozenberg, (1996), Rev. Mod. Phys. 68 13.