

Thăng giáng spin do tương tác Hund trong hệ bán dẫn từ pha loãng

Spin fluctuations due to Hund coupling in diluted magnetic semiconductors

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 Môi trường và Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam
^cFaculty of Environment and Natural Science, Duy Tan University, Danang, 550000, Vietnam

(Ngày nhận bài: 13/10/2022, ngày phản biện xong: 26/10/2022, ngày chấp nhận đăng: 20/11/2022)

Tóm tắt

Tính chất động học spin của hệ bán dẫn từ pha loãng do ảnh hưởng của thế tương tác từ được xem xét thông qua khảo sát hàm cảm ứng spin động áp dụng cho mô hình mạng Kondo. Bằng việc áp dụng lý thuyết trường trung bình động, chúng tôi thu được hệ phương trình tự hợp cho phép xác định hàm Green và hàm năng lượng riêng của hạt tải. Trên cơ sở đó, chúng tôi tìm được công thức giải tích cho hàm cảm ứng spin động trong cách tiếp cận Baym-Kadanoff. Kết quả tính số thể hiện rõ bức tranh thăng giáng spin của hệ bán dẫn từ pha loãng ở pha thuận từ. Khi cường độ thế tương tác spin đủ lớn, hàm cảm ứng xuất hiện đỉnh cộng hưởng tại vùng năng lượng nhỏ, thể hiện sự thăng giáng spin khi hệ tiến tới gần điểm chuyển pha thuận-sắt từ. Kết quả này là cơ sở để chúng ta khảo sát chi tiết hơn bức tranh thăng giáng spin của hệ bán dẫn từ pha loãng nói riêng và những hệ có pha tạp từ khác nói chung.

Từ khóa: Thăng giáng spin; hàm cảm ứng spin động; mô hình mạng Kondo; lý thuyết trường trung bình động.

Abstract

Dynamical properties of spin system due to magnetic coupling in diluted magnetic semiconductors are considered by examining dynamical spin susceptibility function evaluated for the Kondo lattice model. In the framework of the dynamical mean-field theory, we find a set of self-consistent equations to evaluate Green function and self-energy of carriers, that help us derive analytical expression of dynamical spin susceptibility function by using Baym-Kadanoff approach. Numerical results reveal a resonance peak at low frequency of the dynamical susceptibility spectrum in case of large magnetic coupling, that indicates an enhancement of the spin fluctuations before the paramagnetic-ferromagnetic transition point. The result can be extended to address in more detail the spin fluctuation properties in the diluted magnetic semiconductors and other doped magnetic materials in general.

Keywords: Spin fluctuations; dynamical spin susceptibility function; Kondo lattice model; dynamical mean-field theory.

* Corresponding Author: Phan Van Nham, Viện Nghiên cứu và Phát triển Công nghệ Cao, Trường Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam; Khoa Môi trường và Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Duy Tân, Đà Nẵng, Việt Nam
Email: phanvannham@duytan.edu.vn

1. Giới thiệu

Khảo sát thăng giáng spin trong hệ bán dẫn từ pha loãng (DMS) đang là chủ đề thu hút sự tập trung nghiên cứu trong thời gian gần đây [1,2]. Trong vật liệu DMS, các ion từ (ví dụ ion Mn^{2+}) được pha tạp với một lượng rất nhỏ trong cấu trúc bán dẫn (ví dụ GaAs) [3,4]. Hệ DMS vì vậy vừa có tính chất từ của hệ pha tạp từ lại vừa có tính chất của một bán dẫn. Đó là cơ sở để phát triển vật liệu áp dụng cho các hệ spintronics khi đồng thời lưu trữ và xử lý thông tin trong cùng một vật liệu. Với những hệ DMS, khi có pha tạp từ, hàm mật độ trạng thái của hệ điện tử thể hiện hai vùng, một vùng tạp do điện tử tương quan mạnh với ion từ còn một vùng dẫn của điện tử trong cấu trúc bán dẫn. Chính những điện tử không lấp đầy trong vùng tạp đóng vai trò quan trọng trong việc hình thành những tính chất thú vị của hệ DMS. Khi đó hệ ở trạng thái kim loại và có tương quan từ mạnh với ion từ pha tạp. Các điện tử này quyết định tính chất từ của hệ. Ở vùng nhiệt độ nhỏ và dải tạp chưa lấp đầy, hệ ở trạng thái sắt từ [3,4]. Khi tăng nhiệt độ, thăng giáng nhiệt phá vỡ cấu trúc trật tự từ và hệ ở trạng thái thuận từ. Bản chất của chuyển pha thuận-sắt từ trong hệ DMS đến nay vẫn còn nhiều tranh cãi và người ta đang tìm hiểu để mô tả rõ cơ chế của chuyển pha này. Một trong những cách tiếp cận để mô tả được bức tranh chuyển pha thuận-sắt từ trong hệ DMS là khảo sát cơ chế thăng giáng từ của hệ ở vùng lân cận điểm chuyển pha. Trong bài báo này, chúng tôi sẽ khảo sát rõ sự thăng giáng spin của hệ khi hệ ở pha thuận từ, ngay trên điểm chuyển pha thuận-sắt từ của hệ.

Để mô tả tính chất vi mô của hệ DMS, chúng tôi sử dụng mô hình Kondo mạng, một mô hình mô tả rất tốt tính chất của hệ lỗ trống trong cấu trúc DMS [3,4]. Với mô hình này, hạt tải là lỗ trống trong dải tạp tương tác từ với mômen từ định xứ của ion từ pha tạp. Khi hệ dải

tạp chưa lấp đầy, hệ ở trạng thái kim loại và vì vậy các hạt tải tương tác sắt từ với các ion từ pha tạp hình thành trật tự từ của hệ khi nhiệt độ thấp. Để đơn giản, chúng tôi xem tương tác từ giữa spin của hạt tải và mômen từ định xứ là tương tác Ising, tức chỉ thành phần z của spin và mômen từ định xứ được xem xét. Việc giản lược này làm cho các tính toán giải tích cũng như tính số tiếp theo của chúng tôi trở nên đơn giản hơn bằng lý thuyết trường trung bình động (DMFT), trong khi đó tính chất tương quan từ của hệ không bị ảnh hưởng [5-7]. Lý thuyết DMFT là một công cụ thành công trong việc giải các bài toán điện tử tương quan mạnh [8] và áp dụng tốt trong việc khảo sát các tính chất từ của hệ DMS [9-11]. Trong bài báo này, bằng việc áp dụng lý thuyết DMFT, chúng tôi thu được hệ phương trình tự hợp, từ đó xác định được hàm Green và hàm năng lượng riêng của hạt tải. Đó là cơ sở để chúng tôi thiết lập công thức giải tích xác định hàm cảm ứng spin động bằng gần đúng Baym-Kadanoff [12,13]. Kết quả tính số của hàm cảm ứng spin động xuất hiện sự tồn tại đỉnh nhọn ở vùng năng lượng thấp. Điều này khẳng định sự cộng hưởng thăng giáng spin của hệ khi thể tương tác từ đủ lớn ở vùng nhiệt độ gần với nhiệt độ chuyển pha thuận-sắt từ. Đó là cơ sở để chúng ta có thể hiểu rõ bức tranh trạng thái spin của hệ trước khi có chuyển pha trật tự. Kết quả của chúng tôi hoàn toàn có thể được mở rộng để khảo sát thăng giáng spin của các hệ có pha tạp từ khác, ví dụ hệ manganite pha tạp.

Bài báo được chia thành 4 phần. Trong phần 2, chúng tôi giới thiệu mô hình mạng Kondo và lời giải của lý thuyết DMFT cũng như các tính toán giải tích để tìm hàm cảm ứng spin động. Phần 3 trình bày kết quả tính số và thảo luận. Cuối cùng là các kết luận, được đưa ra ở phần 4 của bài báo.

2. Mô hình và tính toán giải tích

Để mô tả tính chất của hệ hạt tải trong hệ DMS, chúng tôi sử dụng mô hình mạng Kondo. Trong biểu diễn số lấp đầy, Hamiltonian mô tả hệ hạt tải tương quan từ với các ion từ pha tạp được viết như sau:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + 2J \sum_i \alpha_i S_i^z s_i^z + \mu \sum_i n_i, \quad (1)$$

trong đó, $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) là các toán tử sinh (hủy) hạt tải tại nút i có spin σ , như vậy, số hạng đầu tiên mô tả sự nhảy nút hay động năng của hạt tải với t là tích phân nhảy nút giữa hai hạt tải ở các nút lân cận gần nhất. S_i^z và s_i^z lần lượt là các toán tử spin của mômen từ định xứ và của hạt tải. Ở đây, chúng tôi chỉ quan tâm tới thành phần z của spin, J vì vậy được gọi là thế tương tác Hund giữa spin của hạt tải với spin định xứ. α_i là tham số thể hiện hệ nút i có pha tạp từ nếu $\alpha_i=1$ và không pha tạp từ nếu $\alpha_i=0$. Rõ ràng, nếu $\alpha_i=1$ cho mọi nút mạng i , Hamiltonian (1) trở về mô hình mạng Kondo thông thường. Chú ý rằng, trong Hamiltonian (1), μ là thế hóa.

Hamiltonian trong phương trình (1) được khảo sát trong khuôn khổ của lý thuyết DMFT, khi đó hàm Green của hạt tải trong gần đúng số chiều vô hạn hoàn toàn định xứ, nó chỉ phụ thuộc vào tần số Matsubara ω_n theo công thức

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

với $\omega_n = (2n+1)\pi T$ là tần số Matsubara fermion và T là nhiệt độ tuyệt đối. Trong công thức (2), $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$ là năng lượng riêng của điện tử, cũng hoàn toàn định xứ và chỉ phụ thuộc

vào tần số Matsubara và $\rho(\varepsilon)$ là hàm mật độ trạng thái của hạt tải không tương tác.

Trong lý thuyết DMFT, hàm Green của hạt tải viết ở phương trình (2) phải trùng với hàm Green của hạt tải xác định từ Hamiltonian (1) [5]. Trên cơ sở của tích phân phiếm hàm, ta thu được

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

Ở đây, các hệ số W_{as} đóng vai trò tham số trọng khối, s là hình chiếu của mômen từ định xứ lên trục z . $\mathcal{G}_\sigma(i\omega_n)$ là hàm Green của trường hiệu dụng của trường trung bình động không tương tác. Để thu được hệ phương trình tự hợp, chúng ta sử dụng phương trình Dyson.

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

Trên cơ sở kết quả của hàm Green và năng lượng riêng của hạt tải, chúng ta có thể xác định hàm cảm ứng spin động. Hàm cảm ứng spin động của hệ hạt tải được định nghĩa như sau:

$$\chi(q, i\omega_l) = \int_0^\beta d\tau e^{i\omega_l \tau} \sum_j e^{iqR_j} \langle s^z(R_j, \tau) s^z(0, 0) \rangle,$$

trong đó $\omega_l = 2\pi lT$ là tần số Matsubara boson, $\beta = 1/T$, và

$$s^z(R_i, \tau) = \frac{1}{2} \sum_\sigma c_{i\sigma}^\dagger(\tau) \sigma c_{i\sigma}(\tau)$$

là toán tử spin của hạt tải tại nút thứ i . Trong gần đúng Baym-Kadanoff, hàm cảm ứng spin động có thể viết dưới dạng tường minh

$$\chi(q, i\omega_l) = T \sum_{n\sigma} \frac{\Gamma_\sigma(i\omega_n, i\omega_l)}{\Gamma_\sigma(i\omega_n, i\omega_l) \chi_0^{-1}(q, i\omega_n, i\omega_l) - \Theta_\sigma(i\omega_n, i\omega_l)}, \quad (5)$$

với $\chi_0(q, i\omega_n, i\omega_l)$ là hàm cảm ứng động không tương tác của hệ điện tử lỗ trống, có dạng

$$\chi_0(q, i\omega_n, i\omega_l) = - \sum_k G(k, i\omega_n) G(k+q, i\omega_{n+l})$$

$$\Gamma_{\sigma}(i\omega_n, i\omega_l) = G_{\sigma}(i\omega_n)\Sigma_{\sigma}(i\omega_n)[\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) + \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_{n+1})] \\ + G_{\sigma}(i\omega_n)\{[\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_{n+1})]^2 - J^2\} + (W_{1,-1} - W_{1,1})J\sigma,$$

và

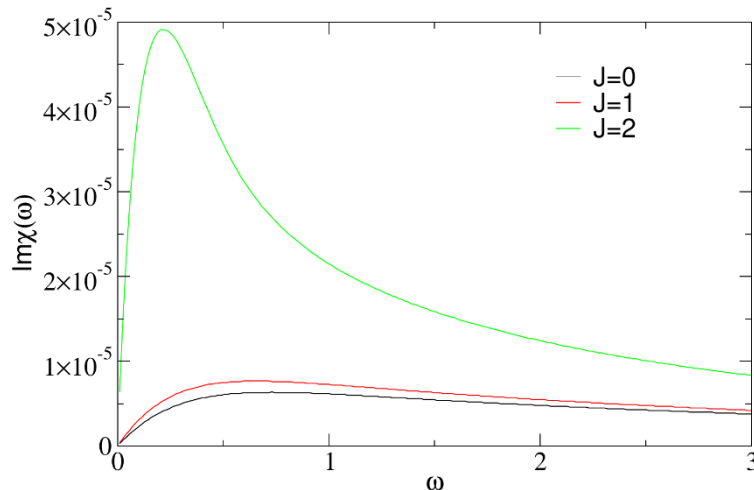
$$\Theta_{\sigma}(i\omega_n, i\omega_l) = \frac{\Sigma_{\sigma}(i\omega_n)}{2G_{\sigma}(i\omega_{n+1})} [\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) + \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_{n+1})] - \Sigma_{\sigma}(i\omega_{n+1})[\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_{n+1})]^2 \\ + \frac{(W_{1,-1} - W_{1,1})J\sigma}{2G_{\sigma}(i\omega_n)G_{\sigma}(i\omega_{n+1})} + J^2\Sigma_{\sigma}(i\omega_{n+1}).$$

Như vậy, chúng ta đã thu được hàm cảm ứng spin động, viết tường minh như là hàm của hàm Green và năng lượng riêng của hạt tải. Với kết quả tính số của lý thuyết trường trung bình động, chúng ta có thể thu được kết quả của hàm cảm ứng spin động như là hàm của cường độ tương tác từ J .

3. Kết quả tính số và thảo luận

Từ kết quả tính toán giải tích chúng ta có thể xác định được hàm Green và năng lượng riêng của hệ hạt tải bằng việc giải số hệ phương trình tự hợp. Bắt đầu bằng tập giá trị cho trước của hàm năng lượng riêng $\Sigma_{\sigma}(i\omega_n)$ từ phương trình (2) ta xác định hàm Green của hạt tải. Thay kết quả vừa tính vào phương trình (4) ta xác định được hàm Green của trường hiệu dụng $\mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n)$, từ đó xác định lại hàm Green của hạt tải theo phương trình (3). Giá trị của hàm Green cùng với hàm Green của trường hiệu dụng $\mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n)$ ở bước trước được sử dụng để tính hàm năng lượng riêng từ phương trình Dyson

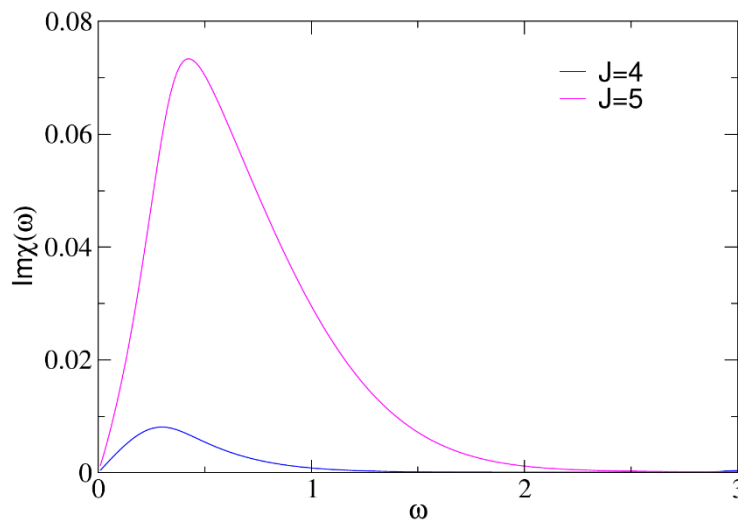
(4). Hàm năng lượng riêng này lại được sử dụng ở phương trình (1) cho vòng lặp tiếp theo. Quá trình giải cứ thế lặp đi lặp lại đến khi sự khác nhau về giá trị năng lượng riêng ở các bước liên kế khác nhau không nhiều thì ta có thể kết thúc vòng lặp. Kết quả ta thu được lời giải tự hợp cho hàm Green và hàm năng lượng riêng của hệ điện tử bằng lý thuyết trường trung bình động. Kết quả này thay vào phương trình (5) cho ta sự phụ thuộc của hàm cảm ứng vào tần số và xung lượng. Trong kết quả dưới đây của hàm cảm ứng, chúng tôi cố định giá trị nhiệt độ $T=0.05$, trong trường hợp giải tập được lấp đầy một nửa $n=x/2$, với $x=0.1$ đảm bảo hệ ở pha thuận từ. Các thang năng lượng được xác định trong đơn vị năng lượng $t=1$. Hàm cảm ứng spin động được giả thiết là định xứ trong gần đúng số chiều vô hạn, nó được xác định như là phép tính tổng tất cả các xung lượng có thể q , $\chi(i\omega_n) = \Sigma_q \chi(q, i\omega_l) / N$, với N là số nút mạng tinh thể.



Hình 1: Phần ảo của hàm cảm ứng spin động phụ thuộc vào tần số cho các giá trị khác nhau của thế tương tác Hund J nhỏ cho trường hợp: $T=0.05$, $n=0.05$, và $x=0.1$

Để mô tả bức tranh thăng giáng spin do ảnh hưởng của thế tương tác từ trong hệ bán dẫn từ pha loãng, chúng tôi khảo sát phần ảo của hàm cảm ứng spin động khi thay đổi thế tương tác Hund. Hình 1 mô tả phần ảo của hàm cảm ứng spin động $Im\chi(\omega)$ như là hàm của tần số ω cho các giá trị khác nhau của J ở nhiệt độ $T=0.05$. Chú ý ở đây chúng tôi đã chuyển biểu diễn theo tần số ảo Matsubara $i\omega_1$ thành tần số thực ω bằng phép kéo dài dải tích $i\omega_1 \rightarrow \omega+i0^+$. Kết quả cho ta thấy khi thế tương tác từ nhỏ $J \leq 1$, hạt tải cư xử như hệ tự do và hầu như không có cấu

trúc đỉnh trong hàm cảm ứng spin động. Tuy nhiên, khi tăng thế tương tác lên $J=2$, đỉnh cộng hưởng xuất hiện một cách rõ ràng hơn ở vùng tần số nhỏ trong phổ của hàm cảm ứng spin động. Chú ý rằng, đỉnh của hàm cảm ứng spin động thể hiện sự tồn tại của trạng thái cộng hưởng phản ánh trạng thái từ kết hợp trong hệ pha tạp từ và độ nhọn của đỉnh tỉ lệ với thời gian sống của trạng thái kết hợp. Điều này khẳng định, khi thế tương tác từ đủ lớn, thăng giáng từ bắt đầu hình thành, hàm cảm ứng spin động xuất hiện đỉnh nhọn tại tần số cộng hưởng.



Hình 2: Phần ảo của hàm cảm ứng spin động phụ thuộc vào tần số cho các giá trị khác nhau của thế tương tác Hund J lớn cho trường hợp: $T=0.05$, $n=0.05$, và $x=0.1$.

Ở Hình 2, chúng tôi mô tả sự phụ thuộc phần ảo của hàm cảm ứng spin động cho các giá trị lớn hơn của thế tương tác Hund J . Rõ ràng, tăng thế tương tác, đỉnh của hàm cảm ứng spin động luôn xuất hiện ở vùng tần số nhỏ, đỉnh càng nhọn khi J càng tăng. Điều này thể hiện thăng giáng từ mạnh tương ứng với sự ổn định trạng thái từ kết hợp khi thế tương tác từ càng lớn. Chú ý rằng, chúng ta đang khảo sát trường hợp dải tạp lấp đầy một nửa. Trong trường hợp này hệ ở trạng thái kim loại thuận từ. Điều này cho chúng ta thấy, khi tăng thế tương tác, tương quan từ làm tăng cường trạng thái từ kết hợp ở gần điểm chuyển pha và hệ có xu hướng chuyển sang trạng thái trật tự sắt từ. Kết quả

này nêu bật lên xu hướng chuyển sang trạng thái trật tự từ của hệ từ pha thuận từ. Nó cũng cho chúng ta biết bản chất thăng giáng từ của hệ khi hệ sắp chuyển sang pha trật tự.

4. Kết luận

Bằng việc sử dụng mô hình mạng Kondo áp dụng cho hệ hạt tải loãng có tương tác từ với spin định xứ ở dạng Hund, chúng tôi đã khảo sát bức tranh thăng giáng spin của hệ bán dẫn từ pha loãng trong pha thuận từ gần với điểm chuyển pha khi thay đổi thế tương tác từ. Trên cơ sở của lý thuyết trường trung bình động, chúng tôi thu được hệ phương trình tự hợp cho phép xác định một cách tự hợp hàm Green và

năng lượng riêng của hạt tải. Đó là cơ sở để chúng tôi xây dựng công thức xác định hàm cảm ứng spin động trong gần đúng Baym-Kadanoff. Kết quả tính số của chúng tôi khẳng định khi thể tương tác Hund đủ lớn, hàm cảm ứng spin động xuất hiện đỉnh nhọn ở vùng tần số thấp. Điều này khẳng định sự tồn tại trạng thái kết hợp từ do thăng giáng spin của hệ khi gần điểm chuyển pha thuận-sắt từ. Trạng thái kết hợp càng trở nên rõ rệt khi tăng thể tương tác từ. Kết quả đóng vai trò quan trọng để mô tả một cách trực quan bức tranh thăng giáng spin của hệ khi hệ có xu hướng hình thành trạng thái trật tự sắt từ ở một nhiệt độ xác định khi thể tương tác từ đủ lớn.

Tài liệu tham khảo

- [1] X. Chen, J. P. F. LeBlanc, and E. Gull, *Nat. Commu.* **8**, 14986 (2017).
- [2] J. Mußhoff, A. Kiani, and E. Pavarini, *Phys. Rev. B* **103**, 075136 (2021).
- [3] T. Jungwirth, J. Wunderlich, V. Novák, K. Olejník, B.L. Gallagher, R.P. Campion, K.W. Edmonds, A.W. Rushforth, A.J. Ferguson, and P. Němec, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 855 (2014).
- [4] T. Dietl and H. Ohno, *Rev. Mod. Phys.* **86**, 187 (2014).
- [5] N. Furukawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **63**, 3214 (1994).
- [6] N. Furukawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **64**, 2754 (1995).
- [7] N. Furukawa, *J. Phys. Soc. Jpn.* **65**, 1174 (1996).
- [8] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M.J. Rozenberg, *Rev. Mod. Phys.* **68**, 13 (1996).
- [9] V.-N. Phan and H.-N. Nguyen, *Phys. Rev. B* **102**, 125202 (2020).
- [10] A. Chattopadhyay, S. DasSarma, and A. J. Millis, *Phys. Rev. Lett.* **87**, 227202 (2001).
- [11] S. DasSarma, E. H. Hwang, and A. Kaminski, *Phys. Rev. B* **67**, 155201 (2003).
- [12] G. Baym and L. P. Kadanoff, *Phys. Rev.* **124**, 287 (1961).
- [13] G. Baym, *Phys. Rev.* **127**, 1391 (1962).