

NGHIÊN CỨU HIỆN TƯỢNG CHUYỂN PHA CỦA VẬT LIỆU TỪ TRONG MÔ HÌNH 2D XY TỔNG QUÁT MẠNG HAI CHIỀU VỚI TƯƠNG TÁC NEMATIC BẬC HAI

Nguyễn Vũ Cẩm Bình¹, Lưu Bích Linh², Bùi Thị Toàn Thư³, Nguyễn Hữu Cường⁴,
Đương Xuân Núi⁵, Nguyễn Khắc Điền⁶, Đào Xuân Việt⁷

^{1,2,3,4,5} Trường Đại học Lâm nghiệp

⁶ Học viện Y Dược học cổ truyền Việt Nam

⁷ Trường Đại học Bách khoa - Hà Nội

TÓM TẮT

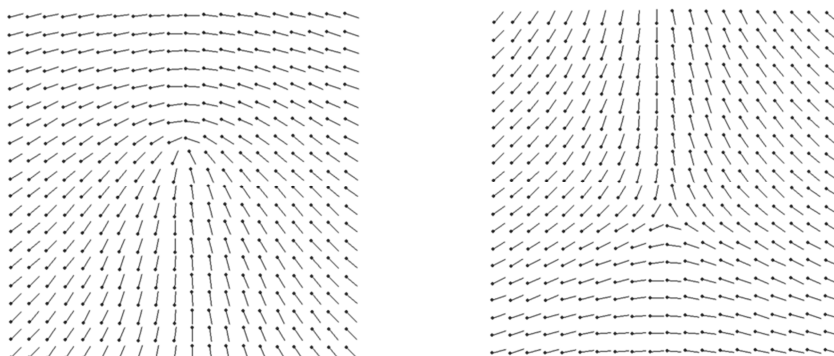
Mô hình XY tổng quát với tương tác nematic bậc hai ($q = 2$) có thể mô tả hiện tượng chuyển pha tại nhiệt độ thấp trong chất siêu lỏng He^3 (Metropolis, 1953), màng tinh thể lỏng (Metropolis, 1953), màng mỏng từ (Korshunov, 1985)... Trong mô hình này, ngoài tương tác trao đổi spin-spin (các cặp xoáy spin nguyên (chu kỳ 2π)) còn có tương tác nematic bậc hai (xuất hiện thêm các cặp xoáy spin bán nguyên (chu kỳ π)). Sự tồn tại đồng thời của các cặp xoáy nguyên và cặp xoáy bán nguyên làm cho mô hình xuất hiện nhiều pha mới và chuyển pha khác thường so với mô hình XY thông thường. Trong mô hình XY tổng quát với tương tác bậc hai, kết quả của các nhóm trước chỉ ra rằng, mô hình này xuất hiện ba pha khác nhau là: pha thuận từ (P), pha nematic (N), pha sắt từ thông thường (F). Tuy nhiên, sự chuyển pha giữa các pha gần điểm 3 ($\Delta \approx 0,35$) trên giản đồ pha trong mô hình này chưa thực sự rõ ràng. Vì vậy, trong nghiên cứu này, chúng tôi tập trung khảo sát và xây dựng lại giản đồ pha của mô hình bằng phương pháp mô phỏng Monte Carlo và quan tâm đến vùng gần điểm 3 trong mô hình. Các đại lượng vật lý thống kê cơ bản được tính toán trong mô hình là độ từ hóa, nhiệt dung riêng, độ tự cảm từ.

Từ khóa: Chuyển pha KT, độ tự cảm, độ từ hóa, mô hình XY tổng quát, tương tác nematic.

I. ĐẶT VẤN ĐỀ.

Mô hình XY tổng quát có thể mô tả tính chất vật lý của vật liệu siêu lỏng He^3 (Metropolis, 1953) và màng tinh thể lỏng (Korshunov, 1985). Korshunov và Lee đề xuất và nghiên cứu tính chất chuyển pha của mô hình này bằng phương pháp nhóm tái chuẩn hóa. Các tác giả tiên đoán mô hình này có 3 pha bao gồm pha mất trật tự ở vùng nhiệt độ cao, pha giả trật tự như mô hình XY thông thường và pha nematic.

Trong mô hình XY tổng quát với tương tác nematic bậc 2 (ngoài tương tác trao đổi spin-spin, còn có tương tác nematic bậc 2) xuất hiện thêm các xoáy spin bán nguyên (chu kỳ π) (hình 1). Các xoáy spin bán nguyên này tương tác với nhau thông qua vách domain hữu hạn. Sự tồn tại đồng thời của xoáy nguyên và xoáy bán nguyên làm cho mô hình XY tổng quát xuất hiện rất nhiều pha và chuyển pha khác thường so với mô hình XY chuẩn.



Hình 1. Xoáy spin bán nguyên dương (haft-vortex) với chu kỳ π (hình trái), xoáy spin bán nguyên âm (anti-haft-vortex) với chu kỳ π (hình phải)

Mô hình XY tổng quát với trường hợp $q = 2$ đã được các nhóm nghiên cứu (Hubscher, 2013; Carpenter, 1989) tính toán bằng phương

pháp mô phỏng Monte Carlo chỉ ra rằng với trường hợp $\Delta > 0,35$ có một chuyển pha KT, với $\Delta \leq 0,35$ xuất hiện 2 chuyển pha 1/2KT từ

pha thuận từ (P) sang pha nematic (N) và chuyển pha bậc 2 từ pha nematic sang pha sắt từ (F). Tuy nhiên kết quả của các nhóm nghiên cứu trước (Hubscher, 2013; Imriska, 2009) chỉ ra rằng sự chuyển pha tại vùng $\Delta \approx 0,35$ chưa thực sự rõ ràng.

Để tiếp tục làm rõ hơn các pha và các chuyển pha trong mô hình này, mô hình 2D XY tổng quát trong mạng hai chiều với tương tác nematic bậc hai được khảo sát lại theo phương pháp mô phỏng Monte Carlo (MC). Để tăng hiệu quả của mô phỏng MC, nhóm tác giả lựa chọn sử dụng thuật toán kết hợp mới là tổ hợp giữa ba thuật toán Metropolis, thuật toán Wolff và thuật toán Over-relaxation tổng quát. Các đại lượng vật lý thống kê như: nhiệt dung riêng (C), độ tự cảm (χ), độ từ hóa (m) được tính toán và phân tích cho mô hình này.

Bài báo này hy vọng đóng góp nhất định vào nỗ lực nghiên cứu phát triển vật lý nhằm phục vụ công tác giảng dạy và nghiên cứu khoa học của Bộ môn Vật lý, Khoa Cơ điện và Công trình, Trường Đại học Lâm nghiệp.

II. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

2.1. Mô hình

Mô hình 2D XY với tương tác nematic bậc hai trong mạng hai chiều hình vuông, tương tác gần giữa các spin lân cận (1 spin chỉ tương tác với bốn spin xung quanh) được mô tả bởi hàm

Hamilton (Metropolis, 1953):

$$H = J \sum_{\langle ij \rangle} \Delta \cos(\theta_i - \theta_j) + (1 - \Delta) \cos 2(\theta_i - \theta_j) \quad (1)$$

Trong đó: θ_i là góc spin thứ i với trục x và có giá trị ngẫu nhiên trong khoảng từ $0 - 2\pi$, $\Delta \in [0, 1]$, $J = 1$ là hằng số tương tác trao đổi. Trong Hamilton, thành phần thứ nhất mô tả tương tác trao đổi giữa các cặp spin lân cận i và j chạy qua mọi vị trí trong toàn bộ mạng tinh thể hình vuông, thành phần thứ hai mô tả tương tác nematic bậc 2.

2.2. Phương pháp nghiên cứu

Để nghiên cứu hiện tượng chuyển pha trong mô hình này, chúng tôi sử dụng phương pháp mô phỏng Monte Carlo (Wolff, 1989). Để tiến hành mô phỏng Monte Carlo cho hệ mạng hai chiều hình vuông với kích thước $N = L \times L$, chúng tôi áp dụng điều kiện biên tuần hoàn và sử dụng thuật toán mới là tổ hợp giữa ba thuật toán Metropolis (Metropolis, 1953), thuật toán Wolff (Wolff, 1989) và thuật toán Over-relaxation (Wolff, 1989) để đưa hệ về trạng thái cân bằng. Điều kiện cân bằng của hệ được kiểm tra thông qua tính toán và so sánh của đại lượng nhiệt dung riêng bằng hai cách trực tiếp và gián tiếp. Các tham số mô phỏng của hệ được trình bày trong bảng 1.

Bảng 1. Các tham số mô phỏng MC

L	N_T	N_r	N_{MC}
16	63	5	2×10^6
32	63	5	2×10^6
64	63	5	2×10^6
128	63	5	2×10^6

L là kích thước hệ; N_T là tổng số điểm nhiệt độ; N_r là tổng số mẫu độc lập; N_{MC} là tổng số bước Monte Carlo (nửa số bước đầu để đưa hệ về trạng thái cân bằng, nửa số bước sau dùng để tính các đại lượng vật lý thống kê của hệ).

2.3. Các đại lượng vật lý

Một số đại lượng vật lý thống kê được tính trong kết quả mô phỏng của chúng tôi.

Nhiệt dung riêng được định nghĩa (Imriska, 2009):

$$C = \frac{1}{N^2 k_B T^2} \left(\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 \right) \quad (\text{với } E = \langle H \rangle) \quad (2)$$

Độ tự cảm từ (Imriska, 2009):

$$\chi = N \frac{[\langle m^2 \rangle] - [\langle m \rangle]^2}{k_B T} \quad (3)$$

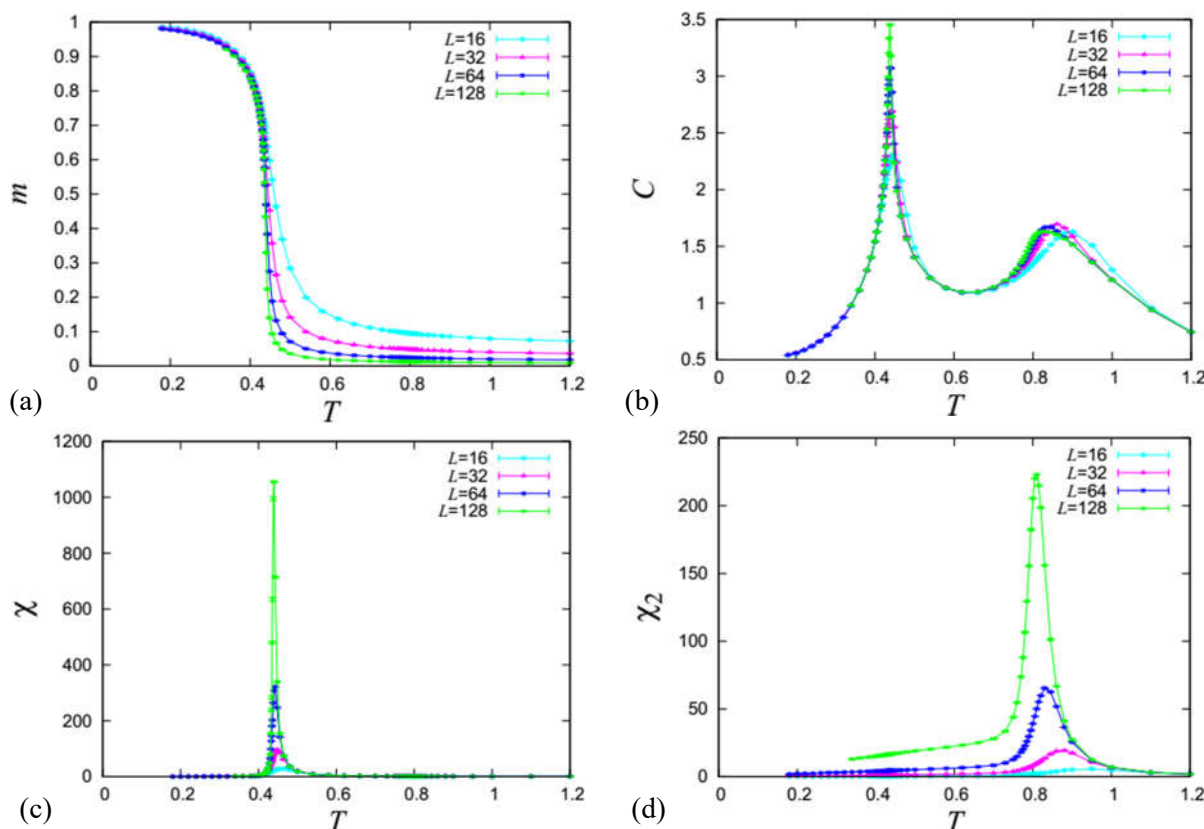
$$\text{với: } m = \frac{1}{N} \left[\left(\sum_i \cos \theta_i \right)^2 + \left(\sum_i \sin \theta_i \right)^2 \right]^{1/2}$$

III. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Trong phần này, chúng tôi sẽ trình bày kết quả mô phỏng cho các giá trị Δ khác nhau ($0 \leq \Delta \leq 1$) với kích thước mạng $L = 16, 32, 64$ và 128 . Nhiệt độ chuyển pha được xác định từ nhiệt dung riêng và từ đó, xây dựng được giản đồ pha của mô hình và so sánh kết quả tính toán với kết quả của nhóm khác.

3.1. Trường hợp $\Delta = 0,2$

Hình 2 trình bày kết quả tính toán các đại lượng vật lý như độ từ hóa (m), nhiệt dung riêng (C), độ tự cảm từ (χ) và độ tự cảm nematic (χ_2) phụ thuộc vào nhiệt độ cho các kích thước mạng khác nhau $L = 16, 32, 64, 128$ cho trường hợp $\Delta = 0,2$.



Hình 2. Các đại lượng vật lý thống kê trường hợp $\Delta = 0,2$

Kết quả mô phỏng cho độ tự cảm từ (Hình 2c) có một đỉnh nhọn tại nhiệt độ T_1 và không phụ thuộc vào kích thước, đây là biểu hiện của chuyển pha bậc hai và phù hợp với kết quả mô phỏng nhiệt dung riêng mô tả trên hình 2b. Tương tự, kết quả mô phỏng độ tự cảm nematic (hình 2d) có một đỉnh tù và phụ thuộc kích thước, đây là biểu hiện của chuyển pha $1/2KT$ từ pha P sang pha N.

Kết quả mô phỏng nhiệt dung riêng có hai đỉnh, dấu hiệu của hai chuyển pha. Khi nhiệt độ tăng dần, đỉnh thứ nhất tại nhiệt độ $T_1 \approx 0,43$. Nhiệt dung riêng có hình dạng nhọn và có biểu hiện phân kỳ phù hợp với kết quả tính toán nhiệt dung riêng cho mô hình three-state Potts của Murtazaev (Murtazaev, 2013), chứng

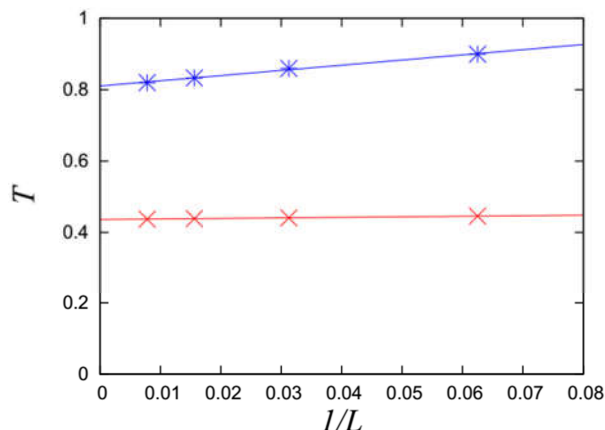
tỏ chuyển pha trong trường hợp này là chuyển pha bậc hai pha N (pha nematic) sang pha F (pha sắt từ). Đỉnh thứ hai của nhiệt dung riêng có hình dạng tù (hình 2b) (Romano, 2006), đây là biểu hiện của chuyển pha $1/2KT$ ứng với chuyển pha từ pha P (pha mất trật tự) sang pha N tại nhiệt độ $T_{KT} \approx 0,81$.

Thông qua lý thuyết kích thước hữu hạn, ta thu được các giá trị nhiệt độ tại các đỉnh phụ thuộc vào kích thước L và ngoại suy với $L \rightarrow \infty$ thì $T_c(L) \rightarrow T_c$ (S. Romano, 2006). Từ các đỉnh của nhiệt dung riêng C_{max} tương ứng với các kích thước mạng $L = 16, 32, 64$ và 128 , ta xác định được nhiệt độ đỉnh $T_c(L)$ tương ứng với các đỉnh này. Nhiệt độ chuyển pha $T_c = T_c(\infty) \approx 0,43$ (hình 2b) được xác định thông

qua sự phụ thuộc kích thước L của $T_c(L)$ theo công thức:

$$T_c(L) = T_c(\infty) \left(1 + AL^{-1/\nu}\right) \quad (4)$$

Hình 3 trình bày giá trị nhiệt chuyển pha $T(L)$ phụ thuộc vào $1/L$ cho trường hợp các kích thước mạng $L = 16, 32, 64, 128$.



Hình 3. Nhiệt độ chuyển pha $T(L)$ phụ thuộc vào $1/L$ cho các kích thước $L = 16, 32, 64, 128$.

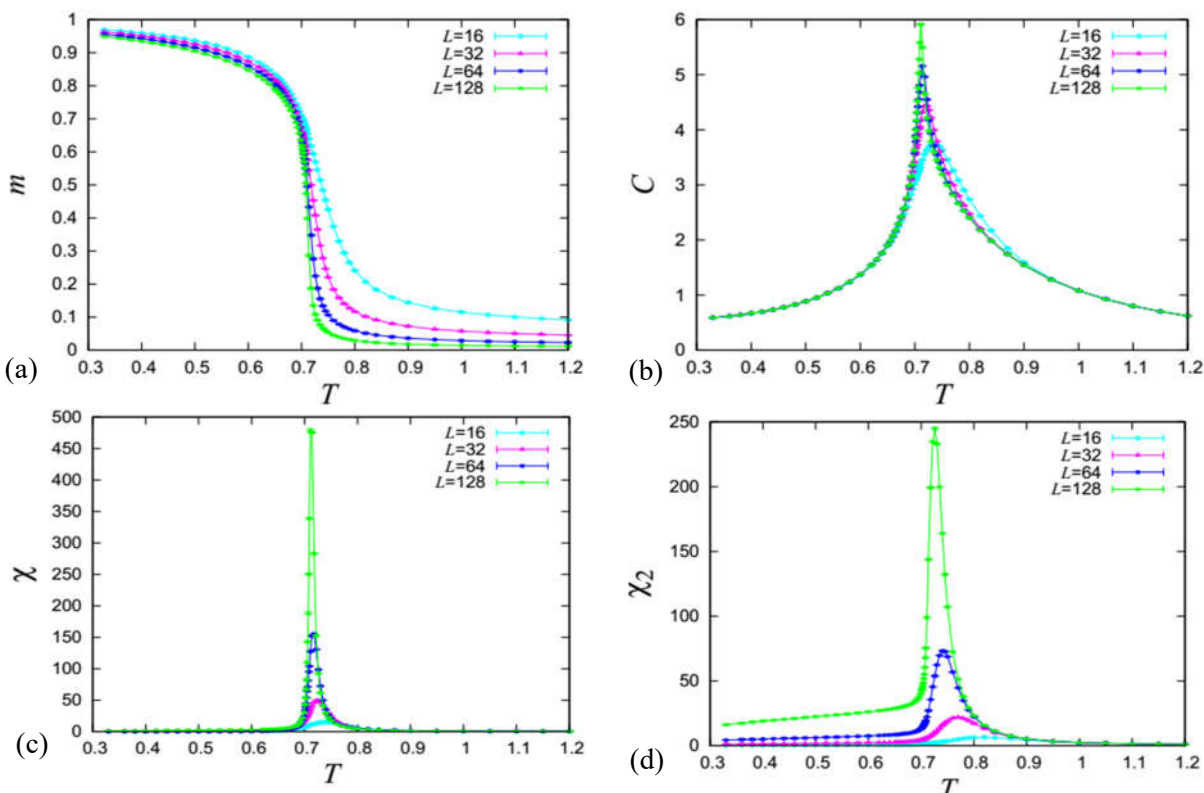
Tương tự, kết quả mô phỏng cho các trường hợp Δ khác (trong vùng $\Delta < 0,35$) phù hợp với kết quả của các nhóm trước tính thông qua đại lượng nhiệt dung riêng đã công bố (Hubscher, 2013).

3.2. Trường hợp $\Delta = 0,35$

Đại lượng độ từ cảm từ mà độ tự cảm nematic chứng tỏ đồng thời có hai chuyển pha tại cùng một nhiệt độ $T_1 = T_2 \approx 0,70$ (hình 4c, hình 4d), đặc biệt không có dấu hiệu rõ ràng

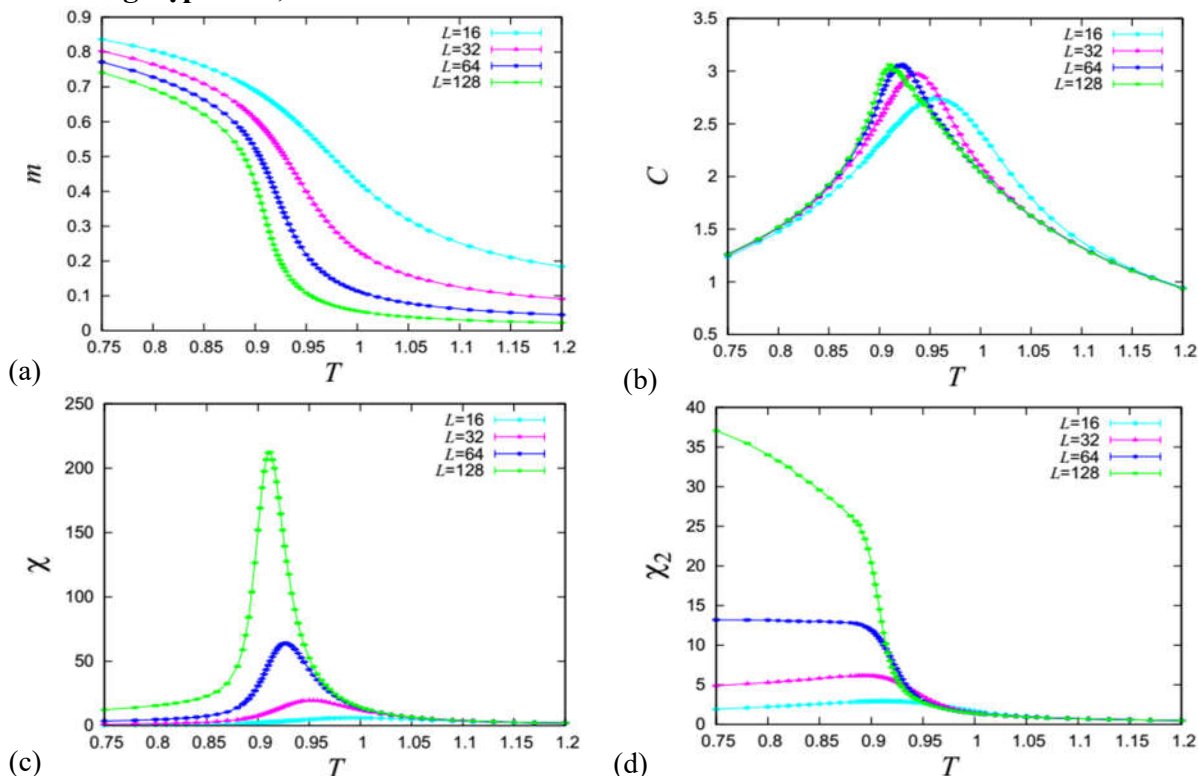
cho chuyển pha KT như các giá trị Δ nằm trong vùng $\Delta < 0,35$. Kết quả này hoàn toàn phù hợp với kết quả tính toán của nhóm trước (Hubscher, 2013).

Trường hợp $\Delta = 0,35$, nhiệt dung riêng C_v có một đỉnh nhọn tại nhiệt độ $T_1 \approx 0,70$ (hình 4b) và vẫn có biểu hiện phân kỳ giống $\Delta = 0,2$, chứng tỏ chuyển pha trong trường hợp này là chuyển pha bậc hai.



Hình 4. Các đại lượng vật lý thống kê trường hợp $\Delta = 0,35$

3.3. Trường hợp $\Delta = 0,7$



Hình 5. Các đại lượng vật lý thống kê trường hợp $\Delta = 0,35$

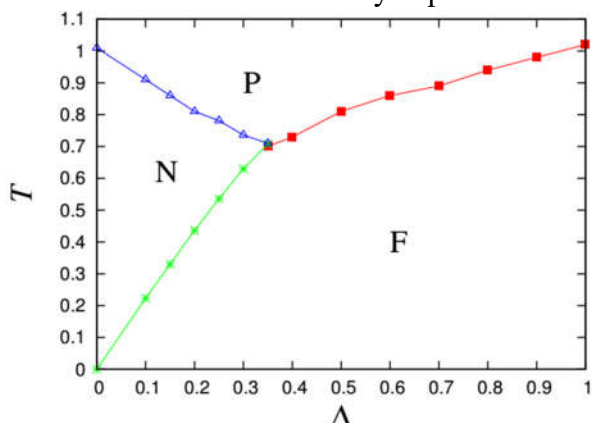
Độ tự cảm từ có một đỉnh tù tại nhiệt độ $T \approx 0,87$ (hình 5c). Khi nhiệt độ tăng dần, đỉnh của độ tự cảm từ phụ thuộc vào kích thước, điều này chứng tỏ đây là chuyển pha KT từ pha P sang pha F. Độ tự cảm nematic không xuất hiện đỉnh, chứng tỏ không có chuyển pha trong trường hợp này.

Trường hợp $\Delta = 0,7$, kết quả mô phỏng nhiệt dung riêng có một đỉnh dấu hiệu của một chuyển pha tại nhiệt độ $T \approx 0,87$ (hình 5b). Khi nhiệt độ tăng dần, đỉnh của nhiệt dung riêng có hình dạng tù và phụ thuộc vào kích thước (U. Wolff, 1989), đây là biểu hiện của chuyển pha KT từ pha P sang pha F.

Như vậy với các giá trị Δ nằm trong vùng $\Delta > 0,35$, kết quả mô phỏng cho thấy chỉ tồn tại một chuyển pha KT từ pha P sang N. Kết luận này hoàn toàn phù hợp với các kết quả của các nhóm khác đã đưa ra trước đây (Hubscher, 2013).

3.4. Giản đồ pha và sự bất thường của nhiệt dung riêng

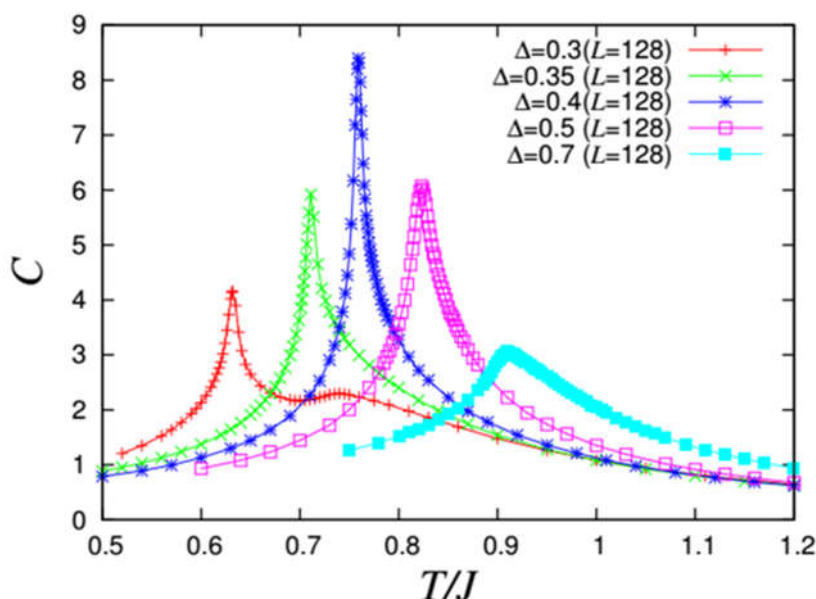
Nhiệt độ chuyển pha được xác định từ nhiệt dung riêng và từ đó, xây dựng được giản đồ pha (Hình 6). Nhiệt độ chuyển pha phù hợp với kết quả tính của Hubscher từ nhiệt dung riêng và có một chút sai khác so với nhiệt độ chuyển pha tính từ helicity modulus.



Hình 6. Giản đồ pha

Kết quả mô phỏng tính toán nhiệt dung riêng tại kích thước mạng $L = 128$ với $\Delta = 0,3, 0,35, 0,4, 0,5$ và $0,7$. Tại điểm 3 trên giản đồ pha (hình 7) ứng với $\Delta = 0,35$ có sự chông chập của ba pha từ pha P sang pha N, từ pha N sang pha F và từ pha P sang pha F, do có sự thay đổi năng lượng lớn nên cao độ nhiệt dung riêng phải có giá trị cực đại. Tuy nhiên, qua

điểm ba, cao độ của nhiệt dung riêng tiếp tục tăng và đạt giá trị cực đại khi $\Delta = 0,4$, sau đó giảm nhanh khi Δ tiến dần về 1 ($\Delta = 0,5, 0,7$). Vì vậy, cần các nghiên cứu sâu hơn nữa để làm rõ vị trí của điểm ba tại 0,35 hay nguyên nhân gì làm cho nhiệt dung riêng giữa các pha quanh điểm 3 với các giá trị Δ khác nhau lại có biểu hiện khác nhau.



Hình 7. Nhiệt dung riêng phụ thuộc vào nhiệt độ tại kích thước mạng $L = 128$ cho các trường hợp $\Delta = 0,3, 0,35, 0,4, 0,45$ và $0,5$

IV. KẾT LUẬN

1. Viết chương trình mô phỏng Monte Carlo cho mô hình XY tổng quát với tương tác nematic bậc hai trong mạng hai chiều hình vuông.

2. Xây dựng giản đồ pha cho mô hình thông qua đại lượng vật lý thống kê nhiệt dung riêng.

3. Kết quả mô phỏng phù hợp với kết quả đã được công bố trước đó. Tuy nhiên, để tiến hành mô phỏng Monte Carlo, chúng tôi sử dụng thuật toán kết hợp gồm: thuật toán Metropolis, thuật toán Wolff và thuật toán Over-relaxation tổng quát để đưa hệ về trạng thái cân bằng.

4. Tuy vậy, các kết quả thu được trong vùng gần điểm ba ($\Delta \approx 0,35$), nhiệt dung riêng có biểu hiện khác thường và đạt cực đại tại $\Delta = 0,4$. Cần các nghiên cứu sâu hơn nữa để làm rõ bản chất vật lý của hiện tượng chuyển pha trong vùng gần điểm ba này.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. N.C. Metropolis et al. (1953). *Equation of State Calculations by Fast Computing Machines*, *J. Chemical Physics*, vol. 21, 1087.
2. S. E. Korshunov (1985). Possible splitting of a phase transition in a 2D XY model. *JETP Letters* 41, 263.
3. D. H. Lee and G. Grinstein (1985). Strings in two-dimensional classical XY models. *Phys. Rev. Lett.* 55, 541.
4. F. C. Poderoso, J. J. Arenzon, and Y. Levin (2011). New Ordered Phases in a Class of Generalized XY Models. *Phys. Rev. Lett.* 106, 067202.
5. Y. Shi, A. Lamacraft, and P. Fendley (2011). Boson pairing and unusual criticality in a generalized XY model. *Phys. Rev. Lett.* 107, 240601.
6. D. M. Hubscher and S. Wessel (2013). Stiffness jump in the generalized XY model on the square lattice. *Phys. Rev. E* 87, 062112.
7. D. B. Carpenter and J. T. Chalker (1989). The phase diagram of a generalised XY model. *J. Phys.: Condens. Matter* 1, 4907.
8. Jakub Imriška (2009). *Phase diagram of a*

modified XY model. Bachelor thesis, Bratislava.

9. S. Romano (2006). Topological transitions in two-dimensional lattice spin models. *Phys. Rev. E* 73, 042701.

10. U. Wolff (1989). Collective Monte Carlo Updating for Spin Systems. *Phys. Rev. Lett.*, 62, 361.

11. A. K. Murtazaev, A. B. Babaev, and G. Ya.

Ataeva, Low Temp (2013). Phase transitions in two-dimensional ferromagnetic Potts model with $q=3$ on a triangular lattice. *Phys* 39, 147.

12. Dương Xuân Núi (2017). Giản đồ pha của mô hình XY tổng quát với tương tác nematic bậc ba, *Hội nghị Vật lý Chất rắn và Khoa học Vật liệu toàn quốc lần thứ X* (Quyển 1), 107.

SIMULATION STUDY OF KOSTERLITZ-THOULESS PHASE TRANSITION OF MAGNETIC MATERIALS IN THE 2D GENERAL XY MODEL WITH 2-FOLD NEMATIC INTERACTIONS

**Nguyen Vu Cam Binh¹, Luu Bich Linh², Bui Thi Toan Thu³,
Nguyen Huu Cuong⁴, Duong Xuan Nui⁵, Nguyen Khac Dien⁶, Dao Xuan Viet⁷**
*^{1,2,3,4,5}Vietnam National University of Forestry
⁶Vietnam University Of Traditional Medicine
⁷Hanoi University of Science and Technology*

SUMMARY

The two-dimensional generalized XY model with 2-fold nematic interactions may represent superfluid He³ (Metropolis, 1953), liquids crystal films (Metropolis, 1953) and thin magnetic film (Korshunov, 1985). In this model, in addition to the spin-spin exchange interaction (integer-vortex pairs with 2π cycle), there is a 2-fold nematic coupling interaction (half-integer-vortex pairs with π cycle). The emergence of both excitations leads to a richer phase diagram than for the conventional XY model. In the two-dimensional generalized XY model with 2-fold nematic interactions, the results of the previous group indicate that this model exits various phases such as the paramagnetic phase (P), the nematic phase (N), the usual ferromagnetic phase (F). However, the nature of phase transition between exotic phases in the region near $\Delta \approx 0.35$ is still remained as open questions. In this study, we re-examine the phase transition of this model focusing on the region near $\Delta \approx 0.35$ by using the extensive Monte Carlo simulation. The basic statistical physics calculated in this model are magnetization, specific heat and susceptibility.

Keywords: General 2D XY model, KT phase transition, magnetization, nematic interaction, susceptibility.

Ngày nhận bài : 10/5/2018

Ngày phản biện : 26/7/2018

Ngày quyết định đăng : 03/8/2018