

**ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI
TRƯỜNG ĐẠI HỌC CÔNG NGHỆ**

NGUYỄN THỊ KIM OANH

**NGHIÊN CỨU ĐẶC TÍNH PHA VÀ CHUYỂN PHA
DI THƯỜNG TRONG MẠNG NANO**

LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LIỆU VÀ LINH KIỆN NANO

HÀ NỘI - 2021

**ĐẠI HỌC QUỐC GIA HÀ NỘI
TRƯỜNG ĐẠI HỌC CÔNG NGHỆ**

NGUYỄN THỊ KIM OANH

**NGHIÊN CỨU ĐẶC TÍNH PHA VÀ CHUYỂN PHA
DI THƯỜNG TRONG MẠNG NANO**

Chuyên ngành: Vật liệu và linh kiện nano

Mã số: 944012801.QTD

LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LIỆU VÀ LINH KIỆN NANO

NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC:

- 1. GS.TS. Bạch Thành Công**
- 2. TS. Đặng Đình Long.**

HÀ NỘI - 2021

LỜI CẢM ƠN

Lời đầu tiên tôi xin bày tỏ lòng cảm ơn sâu sắc tới **GS.TS Bạch Thành Công** – Khoa Vật lý, Trường Đại học KHTN – ĐHQG Hà Nội và **TS. Đặng Đình Long** – Trường THPT Lương Văn Can, Hà Nội đã truyền cảm hứng nghiên cứu khoa học cũng như định hướng cho tôi trong các nghiên cứu. Các thầy đã rất tận tụy hướng dẫn, giảng giải và động viên tôi trong suốt quá trình thực hiện luận án này. Kính chúc các thầy và gia đình luôn mạnh khỏe và hạnh phúc.

Để hoàn thành được luận án này, tôi cũng đã nhận được rất nhiều sự giúp đỡ của **TS. Bạch Hương Giang** – Khoa Vật lý Trường Đại học KHTN – ĐHQG Hà Nội, người đã luôn đồng hành, hỗ trợ và giúp đỡ tôi nhiệt tình trong các nghiên cứu. Cảm ơn chị thân yêu và chúc sức khỏe chị và mọi điều may mắn!

Lời cảm chân thành nhất tôi xin được gửi đến các thầy cô bộ môn và các cán bộ của **Khoa Vật lý kỹ thuật và công nghệ Nano**, Trường Đại học Công nghệ - ĐHQG Hà Nội đã giảng dạy tận tình cho tôi những bài học bổ ích, giúp tôi tích lũy được các kiến thức chuyên môn quý báu cũng như tạo điều kiện thuận lợi nhất để tôi hoàn thành quá trình học tập.

Cuối cùng xin được gửi tới bố mẹ, đặc biệt là chồng và các con thân yêu. Những người đã luôn sát cánh, động viên, tạo mọi điều kiện để tôi vượt qua mọi khó khăn, thử thách, hoàn thành tốt quá trình nghiên cứu.

Cảm ơn đề tài **NAFOSTED 103.01-2019.324** đã tạo điều kiện tốt nhất để tôi hoàn thành luận án này.

Xin chúc tất cả mọi người luôn mạnh khỏe và đạt nhiều thành công!

Hà Nội ngày tháng năm 2021

Nguyễn Thị Kim Oanh

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan đây là công trình nghiên cứu của tôi dưới sự hướng dẫn của GS.TS Bạch Thành Công và TS. Đặng Đình Long. Luận án không có sự sao chép tài liệu, công trình nghiên cứu của người khác. Những kết quả và các số liệu trong luận án chưa được công bố trong các công trình của người khác. Nếu không đúng như thông tin đã nêu ở trên, tôi xin hoàn toàn chịu trách nhiệm.

Hà Nội ngày tháng năm 2021

Tác giả

Nguyễn Thị Kim Oanh

MỤC LỤC

LỜI CẢM ƠN	i
LỜI CAM ĐOAN	ii
CÁC KÝ HIỆU TRONG LUẬN ÁN.....	vi
DANH SÁCH CÁC TỪ VIẾT TẮT TRONG LUẬN ÁN.....	ix
DANH SÁCH CÁC BẢNG SỐ LIỆU TRONG LUẬN ÁN	x
DANH SÁCH CÁC HÌNH VẼ TRONG LUẬN ÁN.....	xi
MỞ ĐẦU.....	1
CHƯƠNG 1: TỔNG QUAN VỀ PHA VÀ CHUYỂN PHA	6
1.1. Pha và đặc trưng pha	6
1.1.1. Định nghĩa pha.....	6
1.1.2. Chuyển pha và phân loại chuyển pha.....	7
1.1.3. Tham số trật tự.....	10
1.1.4. Hiện tượng tới hạn	11
1.2. Chuyển pha từ.....	12
1.2.1. Lý thuyết Landau cho chuyển pha từ	12
1.2.2. Số mũ tới hạn trong chuyển pha từ.....	16
1.3. Chuyển pha lượng tử	17
1.3.1. Cơ chế lượng tử và vùng tới hạn	17
1.3.2. Một số pha lượng tử dị thường.....	19
1.3.2.1. Pha siêu chảy (Pha SF).....	19
1.3.2.2. Pha siêu tinh thể (Pha SS).....	21
CHƯƠNG 2: QUÁ TRÌNH TỪ HÓA LOẠI I TRONG PEROVSKITE MANGAN	23
2.1. Mô hình Ising với tương tác sắt từ (FM) - phản sắt từ (AF) cạnh tranh	25
2.2. Giải tích trường trung bình cho mô hình Ising có cạnh tranh tương tác ...	26
2.3. Chuyển pha từ trong mô hình Ising cạnh tranh tương tác	32
2.3.1. Ứng dụng mô hình Ising khảo sát đường từ hóa trong vật liệu $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.95}\text{Co}_{0.05}\text{O}_3$	26

2.3.2. Sự phụ thuộc của từ trở vào từ trường ngoài.....	34
2.3.2.1. Đường từ trở ở các nhiệt độ khác nhau.....	34
2.3.2.2. Đường từ trở ở nhiệt độ thấp khi xác suất của tương tác và thăng giáng của tích phân trao đổi thay đổi.....	36
Kết luận chương 2	40
CHƯƠNG 3: BƯỚC NHẢY TỪ PHÂN SỐ TRONG MÔ HÌNH ISING CHO MẠNG SHASTRY – SUTHERLAND.....	41
3.1. Mạng Shastry – Sutherland	41
3.2. Mô hình Ising mất trật tự cho mạng Shastry – Sutherland	44
3.3. Phương pháp mô phỏng Monte Carlo (MC).....	45
3.3.1. Thuật toán Metropolis.....	45
3.3.2. Áp dụng cho mô hình Ising	47
3.4. Chuyển pha trong mô hình Ising cho mạng Shastry – Sutherland	48
3.4.1. Kiểm tra hiệu ứng kích thước hữu hạn.....	49
3.4.2. Ảnh hưởng của nhiệt độ lên đường cong từ hóa.....	50
3.4.3. Ảnh hưởng của thăng giáng và cường độ tương tác lên đường cong từ hóa	51
3.4.4. Ảnh hưởng của phân bố xác suất lên đường cong từ hóa	54
3.4.4.1. Cường độ tương tác giữa các lân cận gần nhất nhỏ $J/J' = 0.5$	54
3.4.4.2. Cường độ tương tác giữa các lân cận gần nhất lớn $J/J' = 1$	56
3.4.5. Khảo sát năng lượng của hệ thống	58
Kết luận chương 3	61
CHƯƠNG 4: CHUYỂN PHA TRONG MÔ HÌNH HẠT BOSON BOSE – HUBBARD DƯỚI TÁC DỤNG CỦA THỂ NĂNG GHIM TUẦN HOÀN.....	62
4.1. Mô hình Bose – Hubbard	62
4.1.1. Đặc tính vật lý của mô hình.....	62
4.1.2. Mô hình Bose-Hubbard mở rộng.....	66
4.2. Phương pháp Monte Carlo lượng tử (QMC)	68
4.2.1. Tích phân đường	68

4.2.2. Thuật toán Worm cho mạng boson	70
4.2.2.1. Biểu diễn tích phân đường cho mạng boson.....	70
4.2.2.2. Lấy mẫu Worm	72
4.3. Biểu hiện pha siêu tinh thể dưới tác dụng của thế năng ghim tuần hoàn cho mạng vuông	78
4.3.1. Mô hình hạt boson lõi cứng	79
4.3.1.1. Hamiltonian của mô hình.....	79
4.3.1.2. Khảo sát đường cong (ρ, μ).....	79
4.3.1.3. Khảo sát các tham số trật tự	81
4.3.2. Mô hình hạt boson lõi mềm	83
4.3.2.1. Hamiltonian của mô hình.....	84
4.3.2.2. Khảo sát giản đồ pha	84
4.3.2.3. Khảo sát đường cong (ρ, μ).....	87
4.3.2.4. Khảo sát các tham số trật tự	88
4.3.2.5. Khảo sát ảnh hưởng của cường độ tương tác U	91
Kết luận chương 4	96
KẾT LUẬN	97
DANH MỤC CÁC CÔNG TRÌNH LIÊN QUAN ĐẾN LUẬN ÁN.....	99
TÀI LIỆU THAM KHẢO	100

CÁC KÝ HIỆU TRONG LUẬN ÁN

STT	Ký hiệu	Ý nghĩa
1	F	Năng lượng tự do
2	T	Nhiệt độ tuyệt đối
3	S_e	Entropy
4	U	Nội năng
5	H_E	Enthalpy
6	G	Năng lượng tự do Gibbs
7	P	Áp suất
8	V	Thể tích
9	C_p	Nhiệt dung riêng
10	η	Tham số trật tự
11	ξ	Độ dài tương quan
12	t	Thời gian đặc trưng
13	\mathcal{F}	Lực suy rộng
14	M	Mômen từ
15	B	Cảm ứng từ
16	χ_0	Độ cảm từ ở 0 K
17	χ_T	Độ cảm từ ở nhiệt độ T
18	$\alpha', \beta', \gamma', \delta, \nu$	Các số mũ tới hạn

19	r	Tham số điều khiển
20	r_c	Tham số điều khiển tới hạn
21	k_B	Hằng số Boltzmann
22	\hbar	Hằng số Planck (chia cho 2π)
23	ω_c	Tần số góc
24	z	Số mũ tới hạn nhiệt động
25	N	Số hạt
26	N_0	Tổng số hạt ngưng tụ
27	$\bar{\rho} = \frac{N}{V}$	Mật độ hạt trung bình trong một đơn vị thể tích
28	$\rho(\mathbf{r})$	Mật độ hạt địa phương tại điểm \mathbf{r}
29	$\bar{\rho}_s = \frac{N_0}{V}$	Mật độ hạt ngưng tụ trong một đơn vị thể tích
30	$\rho = \frac{N}{N_s}$	Mật độ hạt trung bình trên 1 nút mạng
31	$\rho_s = \frac{N_0}{N_s}$	Mật độ hạt siêu chảy
32	$S(\mathcal{Q})$	Hệ số cấu trúc tĩnh
33	S	Spin
34	\mathcal{H}	Hamiltonian
35	J, J'	Các tích phân trao đổi
36	μ_B	Magneton Bohr

37	h	Từ trường ngoài (không thứ nguyên)
38	Δ	Độ thăng giáng
39	p	Xác suất thăng giáng
40	z	Số lân cận gần nhất
41	τ	Nhiệt độ (không thứ nguyên)
42	β	Nghịch đảo của nhiệt độ
43	m	Mômen từ tỷ đối
44	ρ_0, ρ_h	Điện trở suất khi không có và có từ trường ngoài
45	J_H	Năng lượng trao đổi Hund
46	\bar{h}	Từ trường ngoài trong đơn vị năng lượng
47	N_s	Số nút mạng
48	t	Tham số bước nhảy giữa các nút mạng
49	μ	Thế hóa học trung bình
50	μ_i	Thế năng ghim hạt trên mỗi nút mạng
51	ε	Giá trị thế năng ghim trên nút mạng xác định
52	V_{mn}	Cường độ tương tác giữa các vị trí lân cận gần nhất
53	V_{mnn}	Cường độ tương tác giữa các vị trí lân cận gần nhì
54	κ	Hệ số nén

Trong luận án, các đại lượng vectơ được kí hiệu in đậm

DANH SÁCH CÁC TỪ VIẾT TẮT TRONG LUẬN ÁN


STT	Từ viết tắt	Từ tiếng Anh	Nghĩa tiếng Việt
1	AF	Antiferromagnetic	Phản sắt từ
2	CDW	Charge density wave	Sóng mật độ điện tích
3	CP	Closed path	Đường kín
4	DLRO	Diagonal-long-range-order	Trật tự đường chéo tầm xa
5	FM	Ferromagnetic	Sắt từ
6	MC	Monte Carlo	Monte Carlo
7	MI	Mott insulator	Điện môi Mott
8	MR	Magnetoresistance	Từ trở
9	NN	Nearest - neighbor	Lân cận gần nhất
10	NNN	Next - nearest - neighbor	Lân cận gần nhì
11	ODLRO	Off-diagonal-long-range-order	Trật tự ngoài đường chéo tầm xa
12	QCP	Quantum critical point	Điểm tới hạn lượng tử
13	QMC	Quantum Monte Carlo	Monte Carlo lượng tử
14	SF	Superfluid	Siêu chảy
15	SS	Supersolid	Siêu tinh thể
16	UUD	Up – up - down	Hướng lên – hướng lên – hướng xuống

DANH SÁCH CÁC BẢNG SỐ LIỆU TRONG LUẬN ÁN

Bảng 2.1: So sánh giá trị mômen từ và từ trường tới hạn giữa lý thuyết và thực nghiệm cho mẫu $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.95}\text{Co}_{0.05}\text{O}_3$ [66].....	34
Bảng 2.2: So sánh giá trị từ trở và từ trường tới hạn giữa lý thuyết và thực nghiệm cho mẫu $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.97}\text{Ga}_{0.03}\text{O}_3$ [104].....	38

DANH SÁCH CÁC HÌNH VẼ TRONG LUẬN ÁN

Hình 1.1: Ví dụ về một số trạng thái của vật chất [45].	7
Hình 1.2: Sự biến đổi của năng lượng tự do G , enthalpy H_E , entropy S_e , thể tích V và nhiệt dung C_p theo nhiệt độ trong trường hợp (a) không có chuyển pha, (b) chuyển pha loại I và (c) chuyển pha loại II [69].	9
Hình 1.3: Sự phụ thuộc của tham số trật tự vào nhiệt độ trong chuyển pha loại I và chuyển pha loại II [44].	10
Hình 1.4: (a) Sự phụ thuộc của hàm năng lượng tự do Hemholtz vào giá trị mômen từ khi không có trường ngoài, (b) Sự phụ thuộc của năng lượng tự do vào mômen từ khi có trường ngoài, (c) Đường từ nhiệt (M, T) trong trường ngoài $H = 0$, (d) Đường từ hóa (M, H) tương ứng với nhiệt độ xác định ở trên và dưới nhiệt độ Curie T_C [70].	14
Hình 1.5: Đường cong từ hóa cho chuyển pha meta từ trong trường ngoài. Khi $H < H_C$ mômen từ có giá trị là M_1 và $H > H_C$ mômen từ có giá trị M_2 ; Đường chuyển pha loại 1 từ M_1 tới M_2 [70].	15
Hình 1.6: Bức tranh pha xung quanh điểm chuyển pha lượng tử tại $T = 0$ K và tham số điều khiển $r = r_c$ [4].	18
Hình 2.1: Mô hình mạng Ising spin 2 chiều với tương tác giữa 4 lân cận gần nhất (ký hiệu 1, 2, 3, 4 xung quanh nút J).	26
Hình 2.2: Đồ thị so sánh kết quả lý thuyết và thực nghiệm [66] cho đường cong từ hóa, các tham số của đường lý thuyết là $z = 4, p = 0.41, \Delta = 1.04$.	33
Hình 2.3: Đồ thị sự phụ thuộc của từ trở tỷ đối ρ_h/ρ_0 vào từ trường ngoài h ở các nhiệt độ τ khác nhau với $z = 4, p = 0.41, \Delta = 1.04, S_{t_{2g}} = 3/2, J_H/J = 3$.	35

Hình 2.4: Đồ thị phụ thuộc của từ trở tỷ đối vào từ trường ngoài cho hai giá trị phân bố xác suất khác nhau $p = 0.2$ và $p = 0.4$ với $z = 4, \Delta = 1.03, \tau = 0.01, S_{t_{2g}} = 3/2, J_H/J = 3$	36
Hình 2.5: Đồ thị từ trở tỷ đối phụ thuộc vào thăng giáng Δ khác nhau với $z = 4, p = 0.2, \tau = 0.01, S_{t_{2g}} = 3/2, J_H/J = 3$	37
Hình 2.6: Đồ thị so sánh đường từ trở theo lý thuyết và thực nghiệm cho mẫu $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.97}\text{Ga}_{0.03}\text{O}_3$ [104]. Đường cong lý thuyết được vẽ ở các tham số $z = 4, \Delta = 1.03, \tau = 0.001, p = 0.35, S_{t_{2g}} = 3/2, J_H/J = 3$	38
Hình 3.1: Mạng Shastry – Sutherland với NN J và NNN J'	41
Hình 3.2: Phác họa một số cấu trúc trạng thái cơ bản của mô hình Ising trên mạng Shastry - Sutherland: (a) pha Ising – dimer có hai spin sắp xếp đối song song trên đường chéo Shastry - Sutherland, (b) pha Neel được tạo ra từ tập hợp cấu hình  (c) pha 1/3 hình thành từ tập hợp cấu hình 2 spin hướng lên và 1 spin hướng xuống trong mỗi tam giác con có chứa đường chéo Shastry – Sutherland còn được gọi là cấu hình UUD. Chấm tròn tô đậm biểu diễn spin hướng lên, chấm tròn trắng biểu diễn spin hướng xuống.	43
Hình 3.3: Sơ đồ thuật toán Metropolis cho mô hình Ising.....	48
Hình 3.4: Đồ thị phụ thuộc của mômen từ tỷ đối m vào từ trường ở các kích thước mạng khác nhau với tỷ số (a) $J/J' = 0.5$ và (b) $J/J' = 1$ ở $\tau = 0.01$ trong mạng Shastry – Sutherland không có nhiễu loạn.....	49
Hình 3.5: Đồ thị phụ thuộc của mômen từ tỷ đối m vào từ trường ở các nhiệt độ khác nhau với tỷ số $J/J' = 1$ trong mạng Shastry – Sutherland không có nhiễu loạn.	50
Hình 3.6: Đồ thị mômen từ tỷ đối m phụ thuộc vào trường ngoài với $J/J' = 0.5$ ở $\tau = 0.01, p = 0.1$ khi độ thăng giáng khác nhau được thêm vào trong các tương tác (a) NN, (b) NNN và (c) cả hai tương tác.....	51

Hình 3.7: Đồ thị mômen từ tỷ đối m phụ thuộc vào trường ngoài với $J/J' = 1$ ở $\tau = 0.01$, $p = 0.1$ khi độ thẳng giáng khác nhau được thêm vào trong các tương tác (a) NN, (b) NNN và (c) cả hai tương tác.....	52
Hình 3.8: Đồ thị mômen từ tỷ đối m phụ thuộc vào trường ngoài ở các giá trị xác suất phân bố khác nhau với $J/J' = 0.5$, $\tau = 0.01$, $\Delta = 0.2$ khi độ mất trật tự được thêm vào trong tương tác NN, NNN và cả hai loại tương tác.	54
Hình 3.9: Đồ thị mômen từ tỷ đối m phụ thuộc vào trường ngoài ở các giá trị với $J/J' = 0.5$, $\tau = 0.01$, $\Delta = 0.5$ khi độ mất trật tự được thêm vào trong tương tác NN, NNN và cả hai loại.	55
Hình 3.10: Đồ thị mômen từ tỷ đối m phụ thuộc vào trường ngoài ở các giá trị xác suất phân bố khác nhau với $J/J' = 1$, $\tau = 0.01$, $\Delta = 0.2$ khi độ mất trật tự được thêm vào trong tương tác NN, NNN và cả hai loại tương tác.	56
Hình 3.11: Đồ thị mômen từ tỷ đối m phụ thuộc vào trường ngoài ở các giá trị xác suất phân bố khác nhau với $J/J' = 1$, $\tau = 0.01$, $\Delta = 0.5$ khi độ mất trật tự được thêm vào trong tương tác NN, NNN và cả hai loại tương tác.	58
Hình 3.12: Đồ thị năng lượng trung bình tính trên một spin (trong đơn vị $J'=1$) phụ thuộc vào xác suất p với $J/J' = 0.5$, $\tau = 0.01$, $h = 0$ khi thẳng giáng được thêm vào cả trong tương tác ở cả vị trí NN và NNN.	59
Hình 4.1: Minh họa ý nghĩa của số hạng động năng t và thế năng tương tác U của Hamiltonian mô hình Hubbard.....	63
Hình 4.2: Hình ảnh biểu diễn pha SF (hình trên) và pha điện môi Mott (hình dưới) của các hạt boson trên mạng quang học [41].	65
Hình 4.3: Bức tranh pha cơ bản của mô hình Bose-Hubbard [39].	65
Hình 4.4: Phác họa cấu trúc tinh thể (a) dạng ô bàn cờ, (b) và (c) dạng sọc và (d) dạng sao.....	67
Hình 4.5: Mô hình mạng boson tương tác lõi mềm.	67

Hình 4.6: Đường nét liền mô tả sự phát triển trong không gian cấu hình của một hạt trong mạng 1 chiều với 6 nút. Các đoạn uốn gập (“kink”) thẳng đứng tương ứng với quá trình hạt nhảy từ một vị trí sang vị trí NN, đường liền nằm ngang mô tả thời gian hạt ở tại một vị trí trong mạng. Đường nét đứt thể hiện không gian cấu hình không bị hạt chiếm giữ trong quá trình phát triển.	72
Hình 4.7: Hình ảnh minh họa cấu hình trong khu vực hàm Green với 5 nút mạng. Đường thẳng đứng mô tả các đoạn uốn gập (“kink”) tương ứng quá trình nhảy của một hạt sang vị trí NN, nét liền đơn nằm ngang biểu thị vị trí bị chiếm giữ một lần, nét liền đôi nằm ngang biểu thị vị trí có hai chiếm giữ, nét đứt thể hiện vị trí không có chiếm giữ. Hai vòng tròn đánh dấu sự gián đoạn trong đường thể giới tương ứng với toán tử Worm.....	73
Hình 4.8: Hình ảnh minh họa cập nhật sinh/hủy Worm.	74
Hình 4.9: Hình ảnh minh họa cập nhật dịch chuyển thời gian.	75
Hình 4.10: Hình ảnh minh họa cập nhật dịch chuyển không gian.....	76
Hình 4.11: Cấu trúc thế năng ghim tuần hoàn trong mạng vuông hai chiều trong đó chấm tròn tô đậm biểu diễn các vị trí bị ghim, chấm tròn trắng biểu diễn các vị trí không bị ghim.	79
Hình 4.12: Đồ thị phụ thuộc của mật độ hạt ρ vào thế hóa học μ trong các giá trị thế năng ghim tuần hoàn ε khác nhau với $V_m = 6t$	80
Hình 4.13: Đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của hệ số cấu trúc tĩnh $S(Q)$ và mật độ siêu chảy ρ_s vào mật độ hạt ρ ở các giá trị thế năng ghim tuần hoàn: (a) $\varepsilon = 0.5t$, (b) $\varepsilon = 5t$ và (c) $\varepsilon = 15t$ với $V_m = 6t$	82
Hình 4.14: Cấu trúc thế năng ghim tuần hoàn trong mạng vuông hai chiều trong đó chấm tròn tô đậm biểu diễn các vị trí bị ghim, chấm tròn trắng biểu diễn các vị trí không bị ghim.	84

Hình 4.15: Đồ thị hàm (U, ε) biểu diễn đường biên pha giữa trạng thái cơ bản là SF và CDW ở các mật độ hạt khác nhau $\rho = 1/2, 1$ và $3/2$	85
Hình 4.16: Phác họa cấu hình các hạt boson trong trật tự CDW ở mật độ hạt lần lượt là $\rho = 1/2$ (A), 1 (B) và $3/2$ (C).	85
Hình 4.17: Đồ thị mật độ hạt ρ phụ thuộc vào thế hóa học μ cho các giá trị thế năng ghim khác nhau với cường độ tương tác $U = 8t$	87
Hình 4.18: Đồ thị phụ thuộc của mật độ siêu chảy ρ_s và hệ số cấu trúc tĩnh $S(\pi, 0)$ vào mật độ hạt ở các giá trị thế năng ghim khác nhau khi $U = 8t$	89
Hình 4.19: Đồ thị tham số trật tự là mật độ SF ρ_s và hệ số cấu trúc tĩnh $S(\pi, 0)$ phụ thuộc vào nghịch đảo kích thước mạng ở mật độ hạt $\rho \approx 0.83$. Đường nét đứt biểu diễn ngoại suy đến kích thước mạng lớn vô cùng.	90
Hình 4.20: Đồ thị mật độ hạt ρ phụ thuộc vào thế hóa học trung bình μ với thế năng ghim $\varepsilon = 20t$ ở hai giá trị tương tác $U = 4t$ và $U = 8t$	92

MỞ ĐẦU

Nghiên cứu mô hình mạng spin luôn nhận được những quan tâm đặc biệt trong lý thuyết chất rắn hiện đại. Với sự phát triển mạnh mẽ của ngành Vật lý tính toán kết hợp mô phỏng đã đạt được nhiều thành tựu về phương pháp luận để mô tả và giải thích thành công các hiện tượng thú vị xảy ra trong các loại vật liệu. Đối với hệ từ tính tương quan mạnh, các mô hình spin có ý nghĩa quan trọng trong hiểu biết và dự đoán các tính chất vật lý của hệ cũng như của họ vật liệu từ tính tương ứng.

Lớp các vật liệu từ nhận được sự chú ý đặc biệt gần đây là các vật liệu mà cấu trúc từ của chúng có chứa các đám nguyên tử từ tính khác nhau tương tác với nhau [31, 93, 104], các nam châm từ có hiện tượng vấp spin (hoặc trắc trở spin) (spin frustration¹) [83, 101, 107].... Trong các vật liệu này quá trình chuyển pha đều xảy ra dưới tác dụng của từ trường ngoài. Quá trình từ hóa lý thú được quan tâm nghiên cứu nhiều là quá trình từ hóa loại I với đặc trưng là các bước nhảy trong đường cong từ hóa. Các bước nhảy này trong đường cong từ của các đa tinh thể perovskite Mangan [66, 104] đều liên quan đến sự cạnh tranh của các đám sắt từ (FM) và phản sắt từ (AF) cùng tồn tại ở vùng nhiệt độ xác định. Các đám FM và AF hình thành từ cạnh tranh tương tác siêu trao đổi giữa các ion Mangan cùng hóa trị với các tương tác trao đổi kép giữa các ion Mangan khác hóa trị. Khi trường ngoài được đặt vào, sự thay đổi đột ngột của các đám FM, AF tương tác cạnh tranh đã gây ra các bước nhảy từ dẫn tới chuyển pha loại I.

Hiện tượng thú vị này cũng xảy ra trong các vật liệu từ có cấu trúc hình học vấp như $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ [97] và tetraboxit đất hiếm RB_4 [15, 94, 105, 106]. Các hợp chất này bao gồm lớp liên kết yếu của các ion từ sắp xếp trong mạng tương đương với mạng hình học Shastry – Sutherland [34, 85]. Mạng Shastry – Sutherland nhận được sự chú ý đặc biệt trong các thí nghiệm cho vật liệu $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ và tetraboxit đất hiếm RB_4 . Người ta đã quan sát thấy chuỗi bước nhảy xảy ra ở các giá trị phân số của mômen từ tỷ đối. Các kết quả này đã kích thích nỗ lực nghiên cứu của các

¹ Vấp (trắc trở) spin “spin frustration” là hiện tượng cạnh tranh tương tác trong hệ thống mà tất cả không được thỏa mãn đồng thời

nhà khoa học về mạng hình học vấp Shastry – Sutherland. Trong hệ thống vấp spin, không thể xây dựng được trạng thái cơ bản với hàm năng lượng cực tiểu và cấu trúc hình học vấp được biết đến là loại hình học có tính chất biến đổi trong tương tác như hỗn hợp của liên kết FM và AF.

Các kết quả thực nghiệm độc đáo đã thu hút các nhà khoa học bắt tay vào tìm kiếm mô hình vi mô để giải thích bản chất của hiện tượng xảy ra trong các vật liệu từ. Các hợp chất từ perovskite Mangan từ và tetraboxit RB_4 trong hiệu ứng trường tinh thể lớn có thể được mô tả tốt bởi mô hình Ising. Mô hình Ising [3] là một mô hình toán học đơn giản trong cơ học thống kê cho phép chúng ta hiểu sâu hơn các hiện tượng mất trật tự trong chất rắn. Vì thế, chúng tôi khảo sát mô hình Ising cạnh tranh tương tác FM và AF với mục đích giải thích nguồn gốc của quá trình từ hóa xảy ra trong các loại vật liệu kể trên.

Một lĩnh vực khác cũng thu hút sự chú ý của cộng đồng nghiên cứu là chuyển pha trong các hệ tương quan mạnh. Vào đầu thế kỉ 20, phát minh về hiện tượng siêu dẫn [42] được công bố mở ra rất nhiều ứng dụng trong khoa học vật liệu. Những nỗ lực nghiên cứu tìm kiếm bản chất vật lý pha siêu dẫn ở nhiệt độ cao đã tạo các hướng nghiên cứu mới cho các hệ tương quan mạnh. Mở đầu là phát hiện tính siêu chảy trong nguyên tử He^4 của Kapitza [6] cho thấy vai trò quan trọng của tương tác trong quá trình hình thành các pha lượng tử dị thường. Nguyên tử He^4 được xem xét là một hạt boson. Trong quá trình phát triển khảo sát cho hệ hạt boson, các nhà khoa học đã thu được một kết quả bất ngờ. Đó là tham số trật tự ngoài đường chéo tầm xa (ODLRO²) đặc trưng cho tính siêu chảy (SF) có thể tồn tại đồng thời cùng với tham số trật tự đường chéo tầm xa (DLRO³) đặc trưng cho tính định xứ của các hạt mà về bản chất hai thuộc tính này loại trừ lẫn nhau. Đây chính là đặc điểm của pha siêu tinh thể (SS) [14] được gọi tên bởi Penrose và Onsager vào năm 1956. Công cuộc nghiên cứu tìm kiếm pha siêu tinh thể chỉ thực sự bùng nổ sau khi Andreev – Lifshitz [43]

² Ma trận mật độ hạt $n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}') \rangle$ tiến tới giá trị $n_0 \neq 0$ khi $\mathbf{r} - \mathbf{r}' \rightarrow \infty$ có nghĩa là hệ có trật tự ngoài đường chéo tầm xa ODLRO.

³ Ma trận mật độ hạt $n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}') \rangle$ khi $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ thì $n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n(\mathbf{r}, \mathbf{r}) \equiv n(\mathbf{r})$ và $n(\mathbf{r})$ thỏa mãn điều kiện $n(\mathbf{r} + \mathbf{T}) = n(\mathbf{r})$ có nghĩa hệ có trật tự đường chéo tầm xa DLRO.

và Chester [43] đưa ra quan điểm cho rằng các khuyết tật ở 0 K có thể di chuyển tự do trong hệ thống mà không mất năng lượng, tạo thành ngưng tụ Bose - Einstein - một trạng thái vật chất cũng được đặc trưng bởi tham số trật tự ODLRO và đường như có liên hệ mật thiết với tính SF.

Tuy nhiên, mọi nỗ lực tìm kiếm pha SS trong các tinh thể thực đều thất bại [23] do tạp chất và khó điều khiển các tương tác bên trong. Do đó, một hệ thống không chứa tạp chất và dễ điều khiển các tham số vật lý là nhu cầu thiết yếu. Mạng quang học xuất hiện trong vật lý gần đây mở ra lối thoát trong nghiên cứu thực nghiệm tìm kiếm pha siêu tinh thể. Gần đây, các tín hiệu tích cực của pha siêu tinh thể đồng loạt được xác nhận trong các thí nghiệm mạng quang cho các nguyên tử siêu lạnh [62, 100, 103]. Mặt khác, động lực học của các nguyên tử siêu lạnh trên mạng quang được mô tả đầy đủ bởi mô hình Bose – Hubbard [49, 50]. Hàng loạt kết quả nghiên cứu lý thuyết [57, 76] và mô phỏng cho mô hình Bose – Hubbard [8, 9, 10, 20, 76, 87, 92] đều chỉ ra pha siêu tinh thể được ổn định bởi các tương tác tầm xa như tương tác lân cận gần nhất (NN) và lân cận gần nhì (NNN) cho cả trường hợp hạt boson lõi cứng và boson lõi mềm. Nhưng hầu hết đều là SS gây ra bởi khuyết tật giữa nút ở phía trên mật độ tinh thể. Ở bên dưới mật độ tinh thể, hiện tượng phân tách pha [9] xảy ra, hệ thống chứa hỗn hợp pha SF và pha tinh thể.

Một yếu tố khác đóng vai trò hỗ trợ hình thành pha siêu tinh thể là thế năng ngoài tuần hoàn. Chúng tôi đã khảo sát cho mô hình hạt boson lõi cứng dưới biểu hiện của tương tác giữa các nút NN và thế năng ghim tuần hoàn, pha siêu tinh thể được tìm thấy ở cả hai phía của mật độ tinh thể tương ứng với siêu tinh thể được gây ra bởi khuyết tật lỗ trống và khuyết tật giữa nút. Vậy thế năng ngoài tuần hoàn có thể làm phát sinh pha siêu tinh thể gây ra bởi khuyết tật lỗ trống hay không? Vấn đề thứ hai đáng quan tâm chính là tín hiệu của pha siêu tinh thể trong mô hình Bose – Hubbard dưới tác dụng của thế năng ghim tuần hoàn.

Luận án này sẽ tiến hành khảo sát pha và chuyển pha trong các mô hình mạng hai chiều là: mô hình spin Ising có cạnh tranh tương tác và mô hình Bose – Hubbard chủ yếu bằng phương pháp mô phỏng.

Ở trong luận án này không đề cập đến cấu trúc hoặc mạng nano cụ thể nào cả. Cấu trúc nano được nhắc đến trong luận án tương ứng với trường hợp các màng mỏng hai chiều/ giả hai chiều có độ dày cỡ nano mét hoặc các vật liệu khối trong đó có sự phân tách pha và tồn tại các pha tương ứng kích thước nano mét. Ví dụ trong một số vật liệu dưới nhiệt độ phân tách pha có thể tồn tại các pha kích thước nano mét cạnh tranh với nhau như pha sắt từ, phản sắt từ, trật tự điện tích [28]...

Nội dung nghiên cứu

1. Khảo sát ảnh hưởng của xác suất phân bố, thăng giáng trong tương tác lên đường cong từ hóa và đường cong từ trở trong mô hình Ising cho mạng vuông và mạng Shastry – Sutherland để mô tả các hiện tượng tương đồng trong giản đồ trạng thái giữa mô hình lý thuyết với các kết quả thực nghiệm cũng như góp phần giải thích được nguồn gốc của các bước nhảy từ trong lớp các vật liệu từ đa tinh thể perovskite Mangan và các tetraxit đất hiếm RB_4 .

2. Khảo sát giản đồ pha và các tham số trật tự đặc trưng trong mô hình Bose – Hubbard của các hạt boson dưới tác dụng thế năng ghim tuần hoàn. Từ đó, tìm ra các điều kiện cần thiết để ổn định pha siêu tinh thể trong mô hình.

Phương pháp nghiên cứu

Phương pháp giải tích trường trung bình kết hợp với tính toán số trên lập trình Matlab ứng dụng để khảo sát quá trình từ hóa trong mô hình Ising có cạnh tranh tương tác.

Mô phỏng Monte Carlo với thuật toán Metropolis sử dụng để khảo sát mô hình Ising thăng giáng trong tích phân trao đổi trong mạng Shastry – Sutherland.

Phương pháp Monte Carlo lượng tử với thuật toán Worm được áp dụng để mô phỏng cho hệ hạt boson tương quan mạnh trong mô hình Bose – Hubbard.

Ý nghĩa khoa học của luận án

Các kết quả nghiên cứu đã chỉ ra ảnh hưởng của tương tác và nhiễu loạn lên quá trình chuyển pha và hình thành các pha mới trong các mô hình mạng hoàn toàn phù hợp với các kết quả khảo sát trước đó ở trong các mô hình tương tự. Những

nghiên cứu lý thuyết trong luận án này góp phần mô tả và giải thích quá trình từ hóa trong các vật liệu đa tinh thể perovskite Mangan, tetraboxit đất hiếm, ... cũng như định hướng con đường tìm kiếm thấy pha SS trong các thí nghiệm mạng quang học.

Cấu trúc luận án

Ngoài phần mục lục, mở đầu và kết luận chung, luận án có cấu trúc gồm 4 phần chính như sau:

Chương 1: Trình bày lý thuyết về pha, chuyển pha, lý thuyết Landau trong chuyển pha từ và đặc điểm của một số pha dị thường trong chuyển pha lượng tử.

Chương 2: Đề cập đến tính toán giải tích cho mô hình Ising có cạnh tranh tương tác và kết quả nghiên cứu ảnh hưởng của xác suất và độ thẳng giáng của tích phân trao đổi lên đường cong từ trở cùng với kết quả so sánh đường cong từ hóa và từ trở giữa mô hình lý thuyết với thực nghiệm cho các vật liệu perovskite Mangan.

Chương 3: Giới thiệu về mô hình Ising có cạnh tranh tương tác trong mạng Shastry – Sutherland, phương pháp Monte Carlo cổ điển với thuật toán Metropolis và trình bày các kết quả khảo sát ảnh hưởng của xác suất thẳng giáng, độ thẳng giáng trong đường cong từ hóa.

Chương 4: Mô tả phương pháp Monte Carlo lượng tử với thuật toán Worm và mô hình Bose – Hubbard của các hạt boson trong mạng vuông hai chiều.

CHƯƠNG 1: TỔNG QUAN VỀ PHA VÀ CHUYỂN PHA

1.1. Pha và đặc trưng pha

1.1.1. Định nghĩa pha

Hệ vật lý với các trạng thái khác nhau là một phần thể giới của vật chất mà chúng ta xem xét. Hệ vật lý trong đó các phần của hệ có thể tương tác trao đổi năng lượng với nhau hoặc trao đổi với môi trường xung quanh dưới dạng công hoặc nhiệt lượng được gọi là hệ nhiệt động. Một hệ nhiệt động được mô tả đầy đủ thông qua tập hợp các trạng thái nhiệt động. Trạng thái của hệ nhiệt động được đặc trưng bởi các hàm trạng thái được gọi là các hàm nhiệt động lực học. Đó là hàm của các biến là các thông số đặc trưng. Các hàm nhiệt động lực học thường được sử dụng là nội năng U , năng lượng tự do Helmholtz F , enthalpy H_E , năng lượng Gibbs hay thế nhiệt động G ... Chúng là hàm của các tham số áp suất P , thể tích V và nhiệt độ tuyệt đối T của hệ. Các hàm nhiệt động được biểu diễn theo các thông số áp suất P , thể tích V và nhiệt độ tuyệt đối T của hệ như sau:

$$\text{Năng lượng tự do} \quad F = U - TS_e. \quad (1.1)$$

$$\text{Enthalpy} \quad H_E = U + PV. \quad (1.2)$$

$$\text{Năng lượng tự do Gibbs} \quad G = U - TS_e + PV = F + PV. \quad (1.3)$$

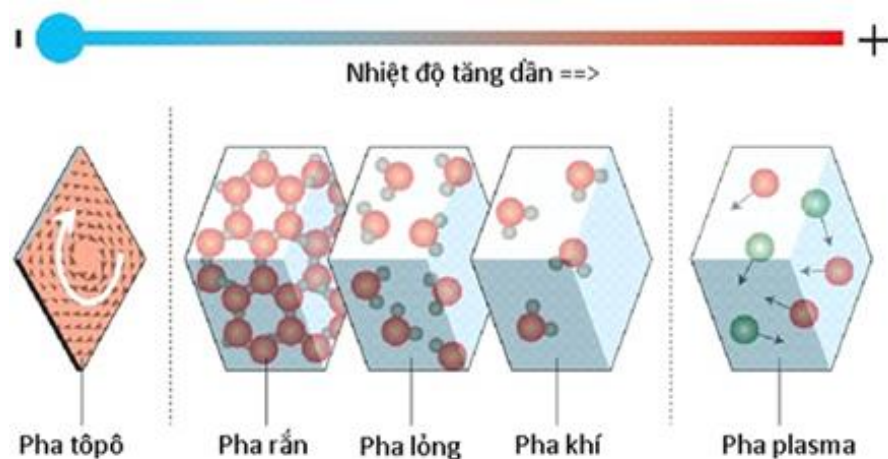
$$\text{Entropy của hệ} \quad S_e = - \left(\frac{\partial G}{\partial T} \right)_P. \quad (1.4)$$

$$\text{Nhiệt dung} \quad C_p = -T \left(\frac{\partial^2 G}{\partial T^2} \right)_P. \quad (1.5)$$

Đối với vật liệu có trật tự từ hoặc trật tự điện, các hàm nhiệt động còn phụ thuộc vào các tham số trật tự (độ phân cực từ, điện ...) và trường ngoài (từ trường, điện trường ...).

Pha của hệ nhiệt động được đặc trưng bởi tính đồng nhất trong đó các tính chất vật lý và thành phần hóa học tại mọi điểm đều như nhau hoặc nếu có biến đổi thì chúng biến đổi liên tục từ điểm này sang điểm khác [1]. Tính đồng nhất của mỗi pha

liên quan đến tính đối xứng nội của hệ nhiệt động trong pha đó. Tính đối xứng được đặc trưng thông qua tham số trật tự.



Hình 1.1: Ví dụ về một số pha của vật chất [45].

Các tham số trật tự đặc trưng cho các pha của hệ nhiệt động có thể là mật độ, chiết suất, độ từ hóa, độ phân cực điện ...

Một số ví dụ về các pha như: “pha rắn, pha lỏng của kim loại và hợp kim, pha sắt từ, thuận từ của các vật liệu từ, pha dẫn điện thường hoặc siêu dẫn của các chất siêu dẫn ...”[2]. Hình 1.1 biểu diễn một số pha khác nhau của vật chất.

1.1.2. Chuyển pha và phân loại chuyển pha

Hiện tượng chuyển pha xảy ra thường xuyên trong tự nhiên và được ứng dụng rộng rãi trong đời sống và sản xuất. Chuyển pha là quá trình biến đổi trạng thái của hệ nhiệt động từ mức độ đối xứng này sang mức độ đối xứng khác hình thành tính chất mới của hệ. Chuyển pha thường xảy ra dưới sự tác động của các tham số điều khiển như các đại lượng vật lý : nhiệt độ, áp suất, trường ngoài ...

Ví dụ một số loại chuyển pha như chuyển pha rắn – lỏng, lỏng – hơi [46] hay chuyển pha sắt từ - thuận từ [2] dưới tác động của nhiệt độ....

Tại điểm chuyển pha, trạng thái của hệ có thể thay đổi một cách liên tục hoặc thay đổi một cách đột ngột nhưng đối xứng tại điểm chuyển pha bao giờ cũng thay đổi dạng nhảy bậc.

Để nghiên cứu về quá trình chuyển pha, chúng ta thường bắt đầu bằng ứng dụng phương pháp nhiệt động lực học. Chúng ta sẽ mô phỏng hệ nhiệt động bằng một hệ lý tưởng tuân theo các nguyên lý nhiệt động lực học như nguyên lý bảo toàn năng lượng, nguyên lý tăng entropy của một hệ cô lập, nguyên lý thứ 3 của nhiệt động học (sự thay đổi entropy của một hệ ngưng tụ bất kỳ trong quá trình đẳng nhiệt thuận nghịch tiến tới 0 khi nhiệt độ tiến tới 0 Kenvin).

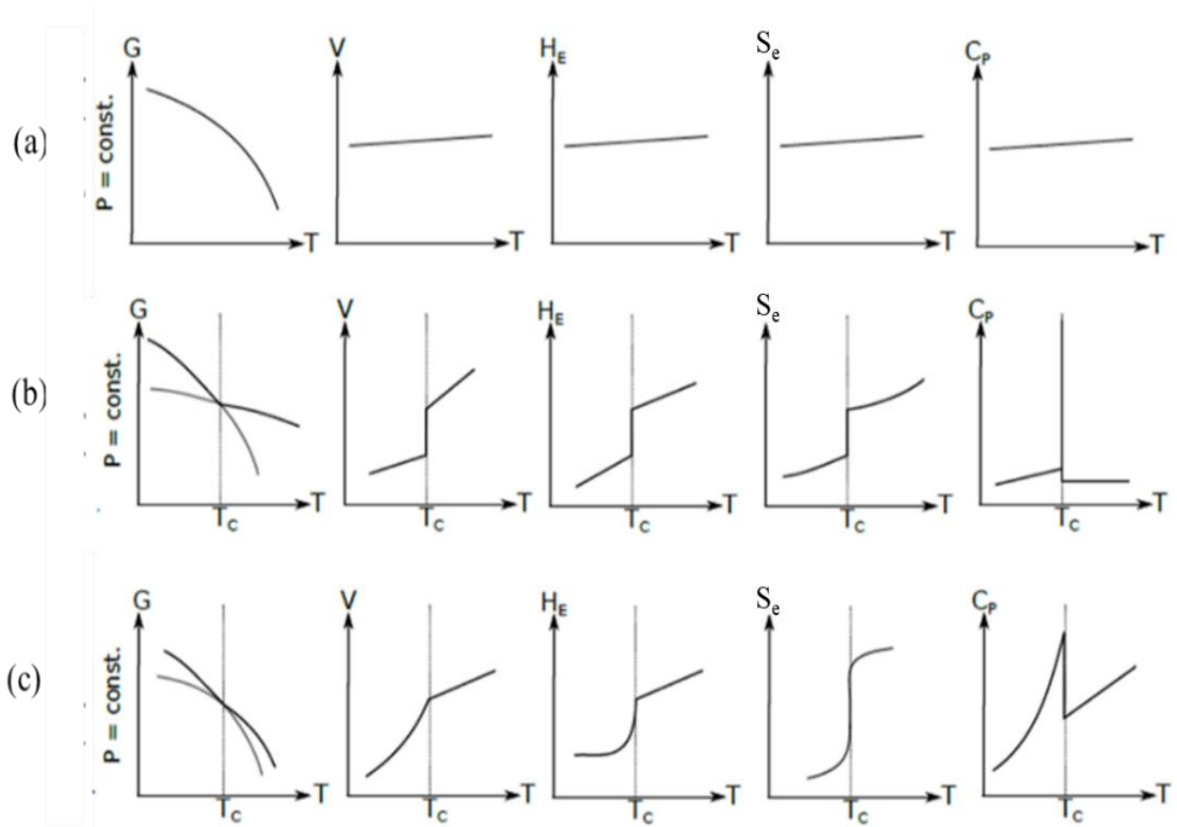
Vào năm 1910, Kamerlingh Onnes ở trung tâm nghiên cứu vật chất nhiệt độ thấp của trường đại học Leiden, Hà Lan đã có khám phá thực nghiệm quan trọng cho thấy đạo hàm bậc hai năng lượng tự do cho hệ Helium lỏng bị gián đoạn [27], từ đó cung cấp dữ liệu trong việc phân loại đầu tiên về quá trình chuyển pha. Tiếp sau đó là tập hợp nghiên cứu về Helium trong suốt những năm 1920 và đánh dấu là phát hiện về chuyển pha dị thường trong Helium lỏng của Keesom vào năm 1932 đã đặt ra câu hỏi có bao nhiêu loại chuyển pha và cách phân loại chuyển pha [35]. Năm 1933, Paul Ehrenfest đã đưa ra lý thuyết phân loại chuyển pha đầu tiên. Quá trình chuyển pha có thể chia thành hai loại là: chuyển pha loại I và chuyển pha loại II.

✓ **Chuyển pha loại I:** Trong chuyển pha loại I, trạng thái của hệ bị biến đổi đột ngột, đạo hàm bậc nhất của hàm thế nhiệt động bị gián đoạn tại điểm chuyển pha. Chuyển pha loại I có sự sắp xếp lại mạng tinh thể ví dụ như thay đổi góc giữa các mặt tinh thể xảy ra trong khoảng nhiệt độ rất hẹp dẫn đến thay đổi đột ngột đối xứng của vật. Ở chuyển pha loại I, hai pha có thể cùng tồn tại ở nhiệt độ chuyển pha ví dụ nước đá và nước ở 0°C hay nước và hơi nước ở 100°C . Trong chuyển pha loại I có gián đoạn về entropy tức là kèm theo ẩn nhiệt. Khi entropy của hệ tăng (thu ẩn nhiệt) thì tính trật tự của hệ giảm và ngược lại.

✓ **Chuyển pha loại II:** là quá trình chuyển pha mà trạng thái của hệ biến đổi liên tục nên tại điểm chuyển pha các pha không tồn tại đồng thời, hàm thế nhiệt động và đạo hàm bậc nhất của các thế nhiệt động cũng như các hàm trạng thái nhiệt động ví dụ như entropy liên tục nhưng đạo hàm bậc hai của thế nhiệt động thì bị gián đoạn

Trong chuyển pha loại II không có ẩn nhiệt và luôn kèm theo sự biến đổi tính trật tự và tính đối xứng của hệ. Do trạng thái biến đổi liên tục nên tại điểm chuyển

pha loại II không phân biệt được các pha ở mức độ vĩ mô như chuyển pha loại I. Khi qua điểm chuyển pha loại II, hệ chỉ dịch chuyển qua điểm mà tính chất của các pha và sự phụ thuộc nhiệt độ của các tính chất đó trở nên khác nhau [2].



Hình 1.2: Sự biến đổi của năng lượng tự do G , enthalpy H_E , entropy S_e , thể tích V và nhiệt dung C_p theo nhiệt độ trong trường hợp (a) không có chuyển pha, (b) chuyển pha loại I và (c) chuyển pha loại II [69].

Sự thay đổi của các tham số nhiệt động trong trường hợp không có chuyển pha, chuyển pha loại I và chuyển pha loại II được minh họa trên hình 1.2.

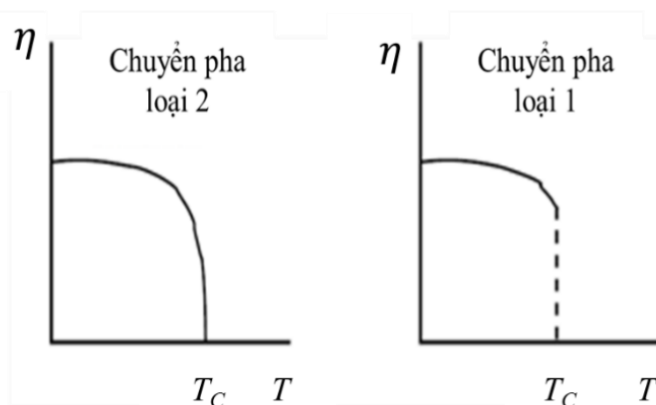
Cũng theo phân loại của Ehrenfest, tồn tại chuyển pha bậc cao gọi là chuyển pha đa tới hạn hay chuyển pha bậc n . Điểm chuyển pha tương ứng gọi là điểm đa tới hạn. Trong chuyển pha đa tới hạn, các hàm thể nhiệt động thay đổi liên tục khi qua điểm chuyển pha, một số đạo hàm bậc hai và bậc cao hơn của thể nhiệt động theo các thông số trạng thái bị triệt tiêu tại điểm chuyển pha. Tại điểm đa tới hạn có n pha giống nhau không phân biệt được.

1.1.3. Tham số trật tự

Vào năm 1937, Landau đã đưa ra khái niệm thay đổi tính đối xứng tại điểm chuyển pha. Trong chuyển pha loại II các đại lượng vật lý vẫn biến đổi liên tục, không có ẩn nhiệt nhưng có sự thay đổi về tính trật tự và tính đối xứng, do đó để mô tả được sự chuyển pha, Landau đã đưa vào khái niệm tham số trật tự (order parameter). Tham số trật tự là đại lượng phản ánh trạng thái của các pha, ký hiệu là η . Ở nhiệt độ thấp hơn nhiệt độ chuyển pha, pha có tính đối xứng thấp (pha trật tự) tham số trật tự có giá trị khác 0 ($\eta \neq 0$). Còn ở nhiệt độ cao hơn nhiệt độ chuyển pha, pha có tính đối xứng cao (pha mất trật tự) tham số trật tự bị triệt tiêu ($\eta = 0$) [1][2].

Tham số trật tự có thể là đại lượng vô hướng, đại lượng vectơ hoặc thậm chí là một tenxơ. Ví dụ tham số trật tự trong các hệ thống từ tính là độ từ hóa (đại lượng vectơ), trong chất lỏng là mật độ pha lỏng trừ mật độ pha khí (đại lượng vô hướng)... [35].

Tham số trật tự η thay đổi từ giá trị $\eta = 0$ (trạng thái mất trật tự tuyệt đối) đến $\eta = 1$ (trạng thái trật tự tuyệt đối). Khi giảm nhiệt độ thấp hơn nhiệt độ chuyển pha, hệ thống bắt đầu thay đổi từ trạng thái hỗn độn sang trạng thái trật tự một phần. Tiếp tục giảm nhiệt độ xuống thấp hơn nữa, chúng ta có thể đạt được trạng thái trật tự tuyệt đối. Trong chuyển pha loại I, tham số trật tự thay đổi nhảy bậc theo nhiệt độ và biến đổi từ từ trong chuyển pha loại II [2] (xem hình 1.3).



Hình 1.3: Sự phụ thuộc của tham số trật tự vào nhiệt độ trong chuyển pha loại I và chuyển pha loại II [44].

Tuy nhiên có một vài hệ thống, trật tự pha bị ẩn đi và không thể xác định được bản chất của tham số trật tự. Khi đó chúng ta có thể định nghĩa hàm tương quan của tham số trật tự. Khác với quá trình chuyển pha, các hàm tương quan phân kì theo quy luật hàm số mũ đối với độ dài tương quan ξ và thời gian đặc trưng τ .

Khi khảo sát các đại lượng nhiệt động, hàm thế nhiệt động là hàm của áp suất P , nhiệt độ tuyệt đối T , lực suy rộng \mathcal{F} và cả biến tham số trật tự η . Áp suất P và nhiệt độ T có giá trị cho trước tùy ý, còn giá trị thực tế của tham số trật tự η phải xác định từ điều kiện cân bằng nhiệt động hay điều kiện cực tiểu năng lượng [2].

1.1.4. Hiện tượng tới hạn

Hiện tượng tới hạn là hiện tượng liên hệ với những biểu hiện đặc biệt của vật chất khi ở gần hoặc ở tại điểm chuyển pha liên tục (còn được gọi là điểm tới hạn). Trong nhiệt động lực học, điểm tới hạn là điểm cuối của đường cong cân bằng pha.

Điểm tới hạn lần đầu tiên được khám phá vào khoảng hơn 100 năm trước nhưng việc nghiên cứu những biểu hiện ở gần điểm tới hạn chỉ mới xuất hiện gần đây. Trong mỗi trường hợp, tính chất của điểm tới hạn xuất hiện do hệ thống tồn tại những bậc tự do nhất định có những dao động lớn bất thường trên thang bước sóng dài. Những dao động lớn là nguyên nhân phá vỡ các định luật vĩ mô thông thường của các hệ vật chất ngưng tụ và đó là một thách thức lớn để tìm ra các định luật mới mô tả hệ thống ở điểm tới hạn. Thách thức xảy ra đối với các nhà vật lý lý thuyết vì các dao động lớn không thể xử lý được bằng lý thuyết tính toán cũ và đối với các nhà vật lý thực nghiệm khi thực hiện các phép đo ở gần điểm tới hạn để kiểm tra các lý thuyết hiện có hoặc khám phá trực tiếp ra các định luật tới hạn.

Nghiên cứu về hiện tượng tới hạn đã đạt được rất nhiều thành công, những hiểu biết mà chúng ta có được thật sự hữu ích áp dụng nghiên cứu cho những hệ thống khác gồm có lý thuyết trường lượng tử cho các hạt cơ bản, giải thích hiện tượng trong chuỗi polyme [72]... Nghiên cứu thực nghiệm về các hiện tượng tới hạn cũng có những tác động tích cực cả trong lẫn ngoài lĩnh vực vật lý vật chất ngưng tụ.

Trong giản đồ pha 2 chiều, có thể có những trường hợp đường chuyển pha loại II gặp đường chuyển pha loại I tại điểm được gọi là điểm ba tới hạn (tricritical point).

Có những trường hợp nhiều đường chuyển pha gặp nhau tại một điểm thì điểm đó được gọi là điểm đa tới hạn (multicritical point). Trong giản đồ pha 3 chiều, có thể tồn tại các đường tới hạn (Critical line).

Khi nghiên cứu chuyển pha loại II, chúng ta thường khảo sát sự biến thiên của các đại lượng vật lý khi nhiệt độ T tiến gần đến nhiệt độ chuyển pha T_C hoặc dạng phụ thuộc của các đại lượng vào tỷ số không thứ nguyên

$$\theta = \frac{|T - T_C|}{T_C}. \quad (1.6)$$

Gần điểm tới hạn, đại lượng vật lý A có dạng:

$$A \propto \theta^a, \quad (1.7)$$

các chỉ số a là các chỉ số tới hạn, bộ các chỉ số tới hạn thường mang tính chất phổ quát và giữa chúng có các hệ thức xác định.

1.2. Chuyển pha từ

1.2.1. Lý thuyết Landau cho chuyển pha từ

Theo lý thuyết Landau, năng lượng tự do Helmholtz của hệ khai triển theo chuỗi Taylor của tham số trật tự mômen từ M của hệ. Ở tại nhiệt độ chuyển pha T_C tham số trật tự M có giá trị nhỏ nên chỉ khảo sát năng lượng khai triển ở số hạng thứ hai, cộng thêm sự đóng góp của hiệu ứng Zeeman (năng lượng thế năng trong trường nội phân tử), năng lượng tự do có dạng:

$$F = F_0 + F_M. \quad (1.8)$$

Trong đó F_0 là phần năng lượng không phụ thuộc vào tham số trật tự và trường ngoài còn F_M là phần năng lượng tự do phụ thuộc tham số trật tự và trường ngoài được biểu diễn như sau [70]:

$$F_M = \frac{1}{2} A(T) M^2 + \frac{1}{4} B(T) M^4 - \mu_0 M H, \quad (1.9)$$

trong đó các hệ số khai triển $A(T)$ và $B(T)$ là các hàm giải tích của nhiệt độ T , H là từ trường ngoài, μ_0 độ từ thẩm chân không. Cực tiểu hóa năng lượng tự do trong công thức (1.9) ta có:

$$\frac{\partial F_M}{\partial M} = A(T)M + B(T)M^3 - \mu_0 H = 0. \quad (1.10)$$

Từ phương trình (1.10) ta thu được:

$$M^2 = -\frac{A(T)}{B(T)} + \frac{\mu_0 H}{B(T)M}. \quad (1.11)$$

Hệ số A và B được xác định thông qua từng mô hình vi mô cụ thể.

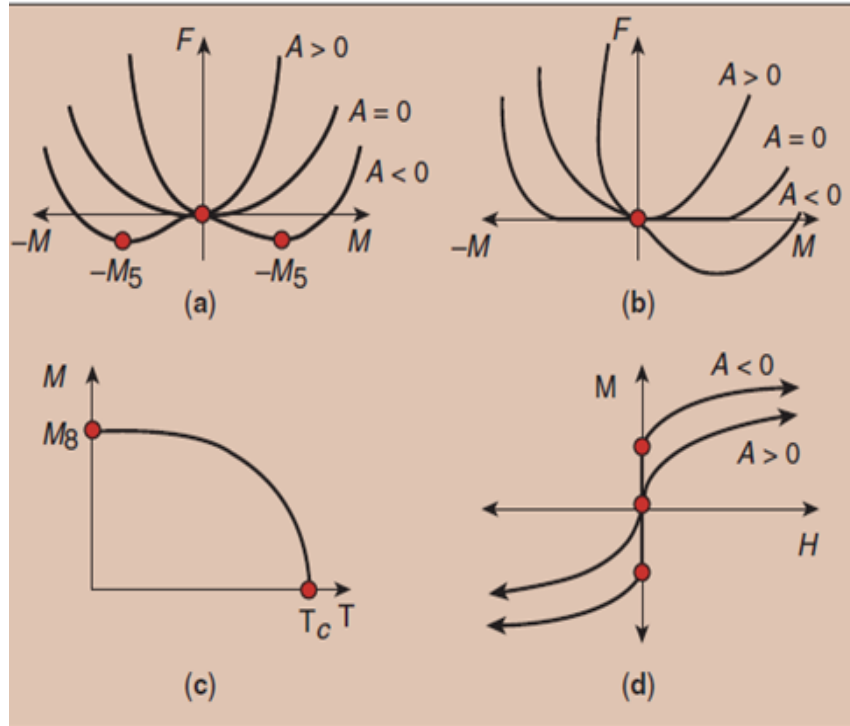
Áp dụng lý thuyết chuyển pha loại II Landau cho *mô hình sắt từ vùng Stoner* [37]. Mômen từ của hệ sắt từ linh động được biểu diễn như sau:

$$M(H, T)^2 = M(0, 0)^2 \left(1 - \frac{T^2}{T_C^2} + \frac{2\chi_0 H}{M(H, T)} \right). \quad (1.12)$$

So sánh các phương trình (1.11) và (1.12) ta có giá trị của hệ số A và B :

$$B = \frac{\mu_0}{2\chi_0 M(0, 0)^2}; A = \frac{\mu_0 \left[\left(\frac{T}{T_C} \right)^2 - 1 \right]}{2\chi_0}, \quad (1.13)$$

hệ số B không phụ thuộc nhiệt độ còn hệ số $A \approx a(T - T_C)$ với a là hằng số dương. Hệ số $A > 0$ khi $T > T_C$ và $A < 0$ khi $T < T_C$. Trong phương trình (1.13) $M(0, 0)$ là mômen từ tự phát ở 0 K khi không có từ trường ngoài ($H = 0$), χ_0 là độ cảm từ ở $T = 0$ K. Hình 1.4 chỉ ra sự phụ thuộc của năng lượng tự do vào mômen từ và mômen từ phụ thuộc vào nhiệt độ vào từ trường ngoài.



Hình 1.4: (a) Sự phụ thuộc của hàm năng lượng tự do Helmholtz vào giá trị mômen từ khi không có trường ngoài, (b) Sự phụ thuộc của năng lượng tự do vào mômen từ khi có trường ngoài, (c) Đường từ nhiệt (M, T) trong trường ngoài $H = 0$, (d) Đường từ hóa (M, H) tương ứng với nhiệt độ xác định ở trên và dưới nhiệt độ Curie T_C [70].

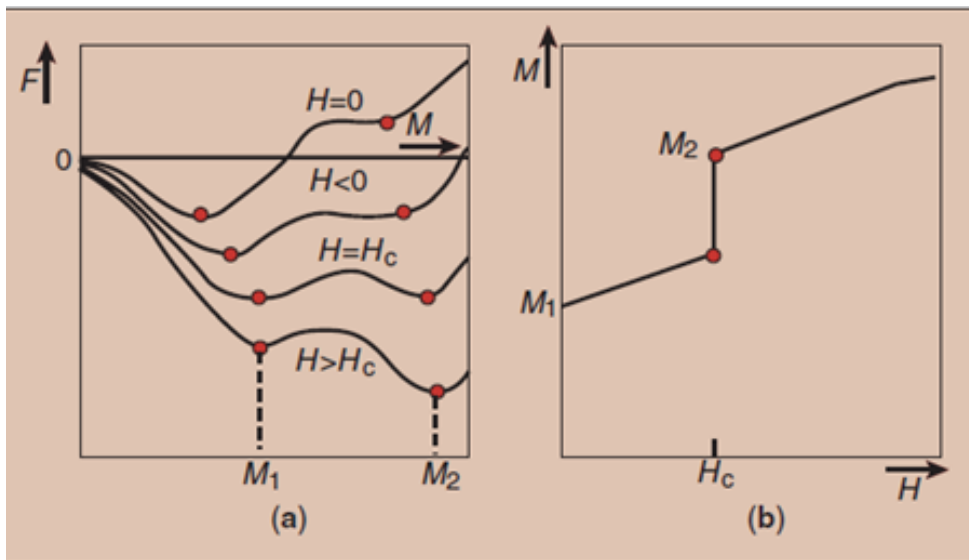
Theo lý thuyết Landau, trạng thái thuận từ Pauli tồn tại khi từ độ $M = 0$ và hệ số $A(T) > 0$. Khi $A(T) < 0$ xuất hiện độ từ hóa tự phát ổn định ở $H = 0$. Mômen từ tự phát được xác định bởi:

$$M^2 = -\frac{A(T)}{B}. \quad (1.14)$$

Trong trường hợp khi có trường ngoài đặt vào và giá trị $A(T) < 0$, mômen từ tự phát được xác định theo phương trình (1.11). Từ phương trình (1.12) ta thấy đồ thị $M^2(H, T)$ là hàm tuyến tính theo $\frac{H}{M(H, T)}$, do đó có thể vẽ các đường đẳng nhiệt khác nhau của M^2 theo $\frac{H}{M}$ để xác định được hệ số $A(T)$ và $B(T)$. Vì $A(T_C) = 0$ nên $A(T)$ sẽ biến mất tại nhiệt độ chuyển pha Curie T_C . Nhiệt độ chuyển pha Curie được xác định

với đường đẳng nhiệt có 0 là điểm chặn. Đồ thị đường đẳng nhiệt M^2 nghịch đảo theo $\frac{H}{M}$ được gọi là đồ thị Arrott và đó là một phương pháp để xác định nhiệt độ trật tự sắt từ bằng phép đo từ hóa.

Mở rộng khai triển phương trình năng lượng tự do Landau ở bậc cao hơn, tồn tại giá trị năng lượng tự do cực tiểu $M > 0$ có thể phát sinh ra trạng thái meta từ (trạng thái từ giả bên). Nếu $A(T) < 0$ thì trạng thái thuận từ Pauli có thể biến đổi thành trạng thái sắt từ có giá trị M nhỏ. Tuy nhiên nếu $B(T) < 0$, có thể thêm cực tiểu trong năng lượng tự do Hemholtz ở giá trị trường ngoài $H \neq 0$ và giá trị cực tiểu này có thể nhỏ hơn so với giá trị tại M_1 . Trong trường hợp này, hệ thống lựa chọn cực tiểu thứ hai với giá trị M_2 khi có từ trường ngoài và xuất hiện đường cong meta từ bậc 1.



Hình 1.5: Đường cong từ hóa cho chuyển pha meta từ trong trường ngoài. Khi $H < H_c$ mômen từ có giá trị là M_1 và $H > H_c$ mômen từ có giá trị M_2 ; Đường chuyển pha loại 1 từ M_1 tới M_2 [70].

Hình 1.5 minh họa chuyển pha meta từ cảm ứng bởi trường ngoài, khi $H = H_c$ (H_c là từ trường tới hạn), hai điểm cực tiểu của năng lượng tự do tại M_1 và M_2 bằng nhau.

1.2.2. Số mũ tới hạn trong chuyển pha từ

Mục tiêu của phương pháp nhiệt động lực học giải quyết bài toán chuyển pha từ là xác định các chỉ số tới hạn liên quan đến quá trình chuyển pha. Điều này liên quan đến việc mô tả quy luật phụ thuộc nhiệt độ theo hàm mũ của các đại lượng nhiệt động lực học ở gần quá trình chuyển pha trật tự. Giá trị nhiệt độ gần điểm chuyển pha được định nghĩa theo phương trình (1.6) và $\theta \rightarrow 0$ khi $T \rightarrow T_C$.

Khi từ trường ngoài bằng 0, tại $T > T_C$ thì nhiệt dung C và độ cảm từ χ_T tỷ lệ theo quy luật

$$C \sim \theta^{-\alpha}; \chi_T \sim \theta^{-\gamma}. \quad (1.15)$$

Khi $T < T_C$, nhiệt dung C , độ từ hóa M và độ cảm từ χ_T tuân theo quy luật tỷ lệ

$$C \sim (-\theta)^{-\alpha'}; \chi_T \sim (-\theta)^{-\gamma'}; M \sim (-\theta)^{\beta'}. \quad (1.16)$$

Ở nhiệt độ T_C , đường đẳng nhiệt tới hạn mô tả sự phụ thuộc mômen từ M theo từ trường H như sau:

$$H \sim |M|^\delta. \quad (1.17)$$

Theo lý thuyết Landau có thể tìm thấy số mũ tới hạn β' và δ như sau:

Hệ số $A(T) = a(T - T_C)$ dương khi nhiệt độ $T > T_C$ và âm khi $T < T_C$. Năng lượng tự do có dạng:

$$F_M = \frac{1}{2} a(T - T_C) M^2 + \frac{1}{4} B M^4 - \mu_0 M H. \quad (1.18)$$

Cực tiểu năng lượng tự do theo tham số trật tự được xác định từ điều kiện

$$\frac{\partial F_M}{\partial M} = a(T - T_C) M + B M^3 - \mu_0 H = 0. \quad (1.19)$$

Khi không có từ trường ngoài ($H = 0$) ta được

$$M = \left(\frac{a(T_c - T)}{B} \right)^{1/2}. \quad (1.20)$$

Theo (1.16) ta suy ra được $\beta' = \frac{1}{2}$.

Khi $H \neq 0$ và ở nhiệt độ chuyển pha $T = T_C$ thì $M^3 = \frac{\mu_0 H}{B}$; từ (1.17) ta có $\delta = 3$.

Như vậy, lý thuyết Landau hay lý thuyết trường trung bình cho thấy chỉ số tới hạn có giá trị $\beta' = \frac{1}{2}$ và $\delta = 3$.

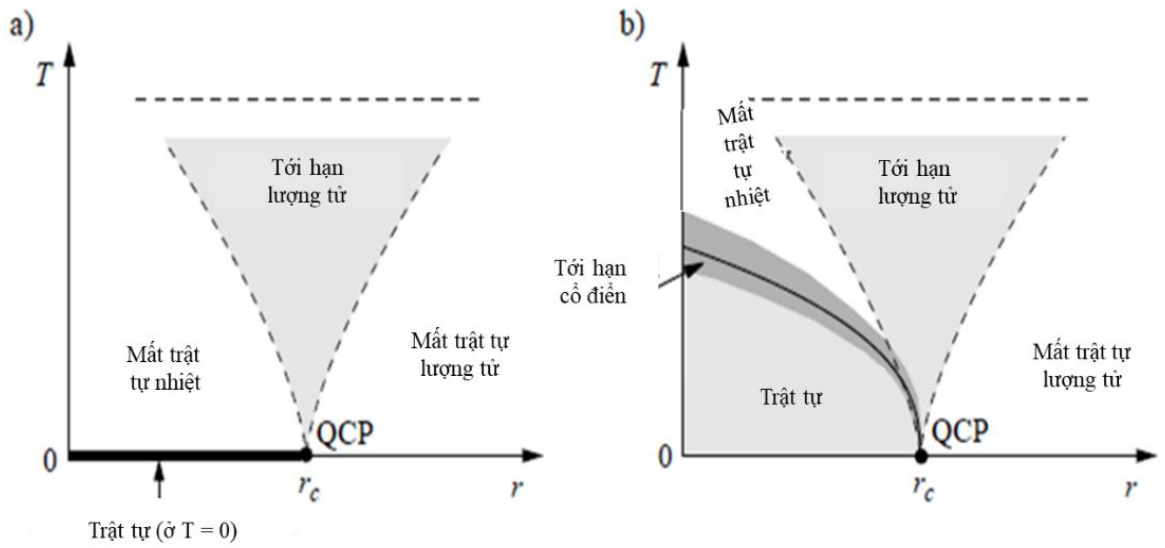
1.3. Chuyển pha lượng tử

1.3.1. Cơ chế lượng tử và vùng tới hạn

Chuyển pha lượng tử là quá trình chuyển pha xảy ra khi thay đổi các tham số như áp suất, từ trường hoặc thành phần hóa học ... ở không độ tuyệt đối $T = 0$ K [68]. Trên thực tế không thể giảm nhiệt độ xuống không độ tuyệt đối do đó chuyển pha lượng tử là một khái niệm khá trừu tượng về mặt lý thuyết. Tuy nhiên, nó là chìa khóa để giải thích một loạt các kết quả thực nghiệm.

Một câu hỏi được đặt ra là cơ chế lượng tử đóng vai trò quan trọng như thế nào trong quá trình chuyển pha liên tục? Thực tế là khi thay đổi các tham số thì nhiệt độ tới hạn T_C cũng thay đổi. Khi nhiệt độ $T_C > 0$, quá trình chuyển pha được thúc đẩy bởi dao động nhiệt và khi độ dài tương quan phân kì thì đó chính là ngưỡng mà tại đó xuất hiện các biểu hiện cổ điển. Tuy nhiên khi $T_C = 0$, dao động nhiệt bị triệt tiêu lúc này các dao động lượng tử là nguyên nhân phá hủy tính trật tự của hệ thống. Đặc biệt quan trọng là các dao động lượng tử không chỉ chi phối tính chất của vật liệu trong vùng lân cận điểm tới hạn lượng tử ở không độ tuyệt đối mà còn ở vùng giá trị nhiệt độ thấp khác không. Các trật tự vĩ mô bị phá hủy bởi các dao động lượng tử tuân theo đúng nguyên lý bất định Heisenberg và điểm tới hạn T_C trong quá trình chuyển pha lượng tử liên tục được gọi là điểm tới hạn lượng tử.

Để hiểu rõ hơn về tính chất của chuyển pha lượng tử, ta cùng xem xét bức tranh pha tổng quát liên hệ giữa nhiệt độ và tham số điều khiển r (tham số r có thể là từ trường ngoài, áp suất hoặc thành phần hóa học...).



Hình 1.6: Bức tranh pha xung quanh điểm chuyển pha lượng tử (QPC) tại $T = 0$ K và tham số điều khiển $r = r_c$ của hệ thống có pha trật tự cơ bản ở (a) không độ tuyệt đối và (b) nhiệt độ hữu hạn [4].

Đối với một số hệ nhiệt động nhất định, trật tự tầm xa không xuất hiện ở giá trị nhiệt độ hữu hạn nhưng hệ thống hình thành trạng thái trật tự cơ bản tại $T = 0$ K (hình 1.6a). Bức tranh pha tồn tại ba vùng đặc trưng phụ thuộc vào loại dao động của tham số trật tự là dao động lượng tử hay dao động nhiệt. Các pha được phân chia bởi các đường biên pha. Trong vùng mất trật tự nhiệt độ, dao động nhiệt đóng vai trò phá hủy các tương tác tầm xa còn trong vùng mất trật tự lượng tử, tính chất vật lý bị chi phối bởi các dao động lượng tử. Hệ thống ở trạng thái mất trật tự lượng tử cơ bản xảy ra khi $r > r_c$. Vùng ở giữa là vùng lượng tử tới hạn [65, 89] mà ở đó cả hai loại dao động đều đóng vai trò quan trọng. Vùng lượng tử tới hạn bắt đầu từ vị trí tham số $r = r_c$ ở giá trị nhiệt độ cao. Biên pha được xác định thông qua điều kiện giữa năng lượng nhiệt $k_B T$ và năng lượng dao động lượng tử $\hbar \omega_c \propto |r - r_c|^{\nu_\infty}$ với ν_∞ là số mũ tới hạn nhiệt độ. Tính chất vật lý của hệ thống trong vùng lượng tử tới hạn bị điều khiển bởi kích thích nhiệt độ của trạng thái cơ bản lượng tử tới hạn và điều này gây ra các tính chất nhiệt độ hữu hạn bất thường như định luật năng lượng bất quy tắc hoặc biểu hiện chất lỏng không Fermi... Đặc trưng phổ quát chỉ quan sát thấy trong

vùng của điểm tới hạn lượng tử khi độ dài tương quan lớn hơn rất nhiều so với chiều dài vi mô đặc trưng.

Khi trật tự xuất hiện ở giá trị nhiệt độ hữu hạn (hình 1.6b), trong hệ xảy ra quá trình chuyển pha ở vùng nhiệt độ thấp. Điểm tới hạn lượng tử là điểm cuối của đường chuyển pha nhiệt độ hữu hạn. Các dao động cổ điển chiếm ưu thế trong vùng lân cận biên pha nhiệt độ hữu hạn và thu hẹp hơn khi nhiệt độ giảm, thậm chí không quan sát được trong thực nghiệm ở vùng nhiệt độ thấp. Tại điểm tới hạn lượng tử $r = r_c$, nhiệt độ $T = 0$ K và entropy S_e của hệ thống bằng 0 còn các đạo hàm của nó bị suy biến. Khi $r > r_c$, các dao động lượng tử phá hủy pha mất trật tự tương ứng với trật tự tương tác tầm xa. Các biểu hiện dị thường được quan sát thấy trong vùng lượng tử tới hạn, tính chất của các đại lượng tĩnh cũng bị ảnh hưởng bởi số mũ tới hạn nhiệt động ν của quá trình chuyển pha lượng tử. Đường biên nhiệt độ tỷ lệ với giá trị $|r - r_c|$.

1.3.2. Một số pha lượng tử dị thường

1.3.2.1. Pha siêu chảy (Pha SF)

Tính SF là đặc tính duy trì dòng chảy liên tục, không ma sát của một chất lỏng và được quan sát thấy trên các nguyên tử của Helium lỏng. Các nghiên cứu bắt đầu từ năm 1908 khi H. Kamerlingh Onnes hóa lỏng thành công He ở dưới nhiệt độ chuyển pha lỏng khí 4,2 K [58]. Sau đó vào năm 1927, M. Wolfke và W.H. Keesom nhận thấy một quá trình chuyển pha khác ở nhiệt độ thấp khoảng 2,17 K. Khảo sát đường nhiệt dung riêng theo nhiệt độ xuất hiện một cực đại dạng λ do đó điểm chuyển pha được gọi là điểm λ . Như vậy, tồn tại hai pha He lỏng khác nhau là “Helium I” và “Helium II”. Năm 1938, khi làm thí nghiệm đo độ nhớt của Helium II, Kapitza đã phát hiện được hiện tượng chảy không ma sát của pha He lỏng này [6] và ông đã gọi đó là hiện tượng “siêu chảy” và trực giác sâu sắc về một mối liên hệ với tính siêu dẫn. Cũng trong năm 1938, F. London đưa ra đề xuất liên hệ giữa tính SF với ngưng tụ Bose-Einstein ngay sau khi phát hiện He⁴ trải qua quá trình ngưng tụ Bose – Einstein [6].

Để giải thích cho tính chất SF của Helium II, Tisza và Landau [6] đã đề xuất mô hình hai giọt lỏng: giả thiết pha Heli II gồm hai thành phần “chất lỏng thường” và “chất siêu chảy (SF)”. SF chứa thành phần ngưng tụ có mật độ hạt ρ_s , còn chất lỏng thường chứa các kích thích cơ bản như phonon có mật độ hạt ρ_n trong đó các hạt trong thành phần “chất lỏng thường” và “chất siêu chảy SF” chuyển động với vận tốc khác nhau. Mật độ hạt của dòng chảy là:

$$\rho(\mathbf{r}) = \rho_s(\mathbf{r}) + \rho_n(\mathbf{r}), \quad (1.21)$$

Với \mathbf{r} là véc tơ vị trí của hạt trong không gian.

Mật độ hạt trung bình của “chất lỏng thường” và “chất siêu chảy SF” trong hệ thống là $\bar{\rho}_s$ và $\bar{\rho}_n$. Trong hệ thống bất biến tịnh tiến thì $\rho_s(\mathbf{r}) = \bar{\rho}_s$ và $\rho_n(\mathbf{r}) = \bar{\rho}_n$.

Biểu hiện SF xuất hiện thông qua quá trình chuyển pha ở nhiệt độ T_C . Trong hệ thống bất biến tịnh tiến, mật độ SF sẽ có giá trị khác không, tăng nhanh khi $T \rightarrow 0$ và đạt giá trị cực đại $\bar{\rho}_s \cong \bar{\rho}$ tại $T = 0$ K.

Trong đó $\bar{\rho} = N/V$ là mật độ hạt trung bình của hệ thống N hạt chứa trong thể tích V . Mặt khác, hiện tượng SF liên quan với sự ngưng tụ Bose-Einstein. Trong trường hợp xảy ra ngưng tụ Bose-Einstein, hệ thống sẽ biểu hiện trật tự tầm xa ngoài đường chéo ODLRO. Tính chất SF được xác định thông qua ma trận mật độ đơn hạt $n(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$ biểu diễn qua toán tử sinh hủy hạt $\psi^\dagger(\mathbf{r})$ và $\psi(\mathbf{r})$:

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = \langle \psi^\dagger(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}') \rangle, \quad (1.22)$$

với \mathbf{r} và \mathbf{r}' là các véc tơ vị trí của hạt trong không gian.

Xét hệ thống đồng nhất có N hạt chứa trong thể tích V thỏa mãn giới hạn nhiệt động lực học $N, V \rightarrow \infty$ và mật độ hạt trung bình $\bar{\rho} = N/V = const$. Giả thiết hệ thống bất biến tịnh tiến và ma trận mật độ chỉ phụ thuộc vào giá trị tuyệt đối phân tách hai điểm trong không gian:

$$n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = n(|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|) = n(s). \quad (1.23)$$

Ngưng tụ Bose-Einstein diễn ra trong toàn bộ không gian động lượng, do đó biểu diễn lại ma trận mật độ đơn hạt theo phân bố động lượng (khai triển Fourier theo động lượng với $\tilde{n}(\mathbf{p})$ là ảnh Fourier của $n(s)$):

$$n_s = \frac{1}{V} \int e^{\frac{-i\mathbf{p}\mathbf{s}}{\hbar}} \tilde{n}(\mathbf{p}) d^3p. \quad (1.24)$$

Ở vùng nhiệt độ trên nhiệt độ ngưng tụ, hệ thống có phân bố động lượng tron mịn thì ta có ma trận mật độ đơn hạt giảm về 0 trên khoảng cách lớn so với độ dài bước sóng deBroglie của kích thích cơ bản

$$\lim_{s \rightarrow \infty} n(s) = 0. \quad (1.25)$$

Phân bố động lượng của ngưng tụ Bose-Einstein biểu hiện đặc biệt ở động lượng $\mathbf{p} = \mathbf{0}$

$$\tilde{n}(\mathbf{p}) = N_0 \delta(\mathbf{p}) + \tilde{n}'(\mathbf{p}), \quad (1.26)$$

trong đó $N_0 \delta(\mathbf{p})$ là thành phần ngưng tụ, $\tilde{n}'(\mathbf{p})$ là thành phần không ngưng tụ.

Thành phần ngưng tụ ở trạng thái mômen động lượng $\mathbf{p} = \mathbf{0}$ được xác định:

$$\bar{\rho}_s = \frac{1}{V^2} \int n(\mathbf{r}, \mathbf{r}') d^3r d^3r'. \quad (1.27)$$

Ma trận mật độ có giá trị hữu hạn bằng mật độ hạt ngưng tụ khi khoảng cách $s \rightarrow \infty$

$$\lim_{s \rightarrow \infty} n(s) = \bar{\rho}_s = n_0 = \frac{N_0}{V} \quad (1.28)$$

Ma trận mật độ đơn hạt trong trường hợp ngưng tụ Bose-Einstein có giá trị hữu hạn xác định bởi thành phần ngưng tụ có nghĩa là hệ thống biểu hiện trật tự tầm xa ngoài đường chéo ODLRO. Theo Penrose và Onsager, biểu hiện ngưng tụ Bose-Einstein xuất hiện tương ứng với sự tồn tại của trật tự tầm xa ngoài đường chéo ODLRO [14].

1.3.2.2. Pha siêu tinh thể (Pha SS)

SS là một trạng thái lượng tử kì lạ của vật chất trong đó các phần tử vừa có cấu trúc tinh thể đồng thời biểu hiện tính chất chảy không ma sát (tính SF) [14, 56]. Đây là hai đặc tính loại trừ lẫn nhau khiến cho SS trở thành trạng thái lượng tử hấp dẫn đối các nhà nghiên cứu lý thuyết cũng như thực nghiệm. Rất nhiều những nghiên

cứu chứng minh sự tồn tại của pha SS được thực hiện từ những năm 50 của thế kỉ trước cho đến tận ngày nay, bắt đầu với công trình của Penrose và Onsager năm 1956 (có thể xem chi tiết trong tài liệu tham khảo [14]), tiếp đến là Thouless, Andreev, Lifshitz và Chester [43, 56].

Về mặt khái niệm, pha SS tồn tại hai loại trật tự khác nhau: trật tự đường chéo tầm xa DLRO được mô tả thông qua hệ số cấu trúc tĩnh $S(\mathbf{Q})$ đặc trưng cho cấu trúc tinh thể và trật tự tầm xa ngoài đường chéo ODLRO đặc trưng cho tính chất SF.

Trong cấu trúc tinh thể các nguyên tử (phân tử) được sắp xếp một cách trật tự, mỗi nguyên tử (phân tử) chiếm giữ một vị trí nút mạng trong không gian.

Trong mô hình liên tục, mật độ địa phương $\rho(\mathbf{r})$ khác với mật độ chất rắn trung bình $\bar{\rho}$ là $\delta\rho(\mathbf{r})$

$$\delta\rho(\mathbf{r}) = \rho(\mathbf{r}) - \bar{\rho}. \quad (1.29)$$

Khi $\delta\rho(\mathbf{r}) \neq 0$ bất biến tịnh tiến của chất rắn bị phá vỡ. Trật tự của hệ thống bây giờ được biểu diễn thông qua điều kiện bất biến tịnh tiến của thăng giáng mật độ: $\delta\rho(\mathbf{r}) = \delta\rho(\mathbf{r} + \mathbf{T})$ với \mathbf{T} là vectơ mạng tinh thể. Tiến hành biến đổi Fourier cho $\delta\rho(\mathbf{r})$ ta thu được mật độ định xứ trong không gian vectơ sóng \mathbf{Q}

$$\tilde{\rho}(\mathbf{Q}) = \frac{1}{V} \int e^{-i\mathbf{Q}\cdot\mathbf{r}} \delta\rho(\mathbf{r}) d^3r, \quad (1.30)$$

với $\tilde{\rho}(\mathbf{Q})$ là ảnh Fourier của $\rho(\mathbf{r})$.

Hệ số cấu trúc tĩnh được xác định qua ảnh Fourier của mật độ hạt $S(\mathbf{Q}) = |\tilde{\rho}(\mathbf{Q})|^2$ mô tả đỉnh tương ứng với vectơ sóng \mathbf{Q} trong không gian mạng đảo (mạng đảo với vectơ mạng đảo \mathbf{G} được xác định theo điều kiện $\mathbf{G}\cdot\mathbf{T} = 2\pi n$).

Trong thực nghiệm, đỉnh của hệ số cấu trúc là cực đại của cường độ ánh sáng tán xạ ra khỏi mẫu tinh thể ở các góc xác định.

CHƯƠNG 2: QUÁ TRÌNH TỪ HÓA LOẠI I TRONG PEROVSKITE MANGAN

Nghiên cứu các hệ thống tương quan mạnh là một đề tài thực sự hấp dẫn trong ngành vật lý vật chất ngưng tụ. Một số các tính chất phức tạp của hệ nhiều hạt có thể được giải thích, dự đoán nhờ những mô hình đơn giản về hình thức nhưng chứa đựng nội dung vật lý sâu sắc. Ví dụ mô hình spin Heisenberg có thể giải thích được tính chất từ của nhiều vật liệu từ tính mạnh, mô hình các hạt boson, fermion tương tác với nhau có thể giải thích được nhiều tính chất của chất rắn. Sự hình thành các tính chất vật lý, các trật tự pha khác nhau hay quá trình chuyển pha xảy ra trong hệ thống đều là hệ quả của các tương tác giữa các hạt cấu thành hệ thống, của cấu trúc mạng và trường ngoài... Trong các yếu tố tác động lên tính chất thì cấu trúc, liên kết giữa các hạt của hệ thống đóng vai trò quan trọng hàng đầu. Tùy thuộc vào loại vật liệu khảo sát mà chúng ta có thể sử dụng các mô hình với các cấu trúc liên kết khác nhau.

Khi nghiên cứu tính chất từ của vật liệu, thông thường ta chỉ xem xét các nguyên tử có từ tính và có thể mô tả tương tác của chúng thông qua các mô hình spin trong đó mạng hình học được xác định bởi sự sắp xếp của các nguyên tử từ, có thể bỏ qua các yếu tố hình học của phần còn lại. Mạng mô hình không cần thiết phải bảo toàn mạng hình học thực của tất cả các nguyên tử. Mạng hình học thực của các loại vật liệu có thể thu nhỏ lại thành một số mạng mô hình phổ biến như mạng vuông, mạng tam giác, mạng Kagome ... Vì thế, nghiên cứu đầy đủ về mô hình mạng với tất cả các cường độ tương tác khả dĩ là một vấn đề quan trọng trong nghiên cứu tính chất của các vật liệu. Các nghiên cứu trong phần đầu của luận án đều tập trung vào khảo sát hiện tượng vật lý liên quan đến quá trình hình thành pha và chuyển pha trong các mô hình mạng là mô hình spin Ising hai chiều cho mạng vuông (chương 2), mạng Shastry – Sutherland (chương 3).

Nội dung của chương 2 tập trung vào khảo sát quá trình chuyển pha loại I xảy ra trong các vật liệu perovskite Mangan pha tạp. Quá trình chuyển pha loại I [16] dưới tác dụng của trường ngoài (còn được gọi là quá trình từ hóa loại I) là hiện tượng hệ từ tính chuyển đột ngột từ một trạng thái từ này sang trạng thái từ khác đặc trưng

bằng sự nhảy bậc trong đường cong từ hóa tại một hay nhiều trường tới hạn. Ví dụ quá trình từ hóa loại I được biết đến như quá trình chuyển pha xảy ra dưới tác động của từ trường ở nhiệt độ thấp trong tinh thể phản sắt từ.

Perovskite Mangan pha tạp là loại vật liệu dưới nhiệt độ phân tách pha có thể tồn tại các pha kích thước nano mét cạnh tranh với nhau như pha sắt từ, pha phản sắt từ, pha trật tự điện tích ...[28]. Một trong số những vật liệu perovskite Mangan nhận được nhiều sự quan tâm, chú ý của các nhà khoa học đó là tổ hợp vật liệu perovskite $\text{Pr}_{1-x}\text{Ca}_x\text{MnO}_3$. Ở khoảng nồng độ của Ca là $0.3 \leq x \leq 0.75$, trong vật liệu hình thành pha trật tự điện tích cách điện khi không có trường ngoài. Biểu hiện này hoàn toàn khác biệt với biểu hiện sắt từ kim loại của các tổ hợp vật liệu Mangan khác.

Nghiên cứu thực nghiệm của các vật liệu perovskite Mangan pha tạp $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{1-x}\text{M}_x\text{O}_3$ ($\text{M} = \text{Co}, \text{Ga} \dots$) cho thấy quá trình từ hóa loại I có đường cong từ hóa biến đổi không liên tục gây ra các bước nhảy tương ứng trong đường từ trở [32, 66, 104]. Các nghiên cứu lý thuyết đều chỉ ra rằng tính chất từ của các perovskite Mangan pha tạp xuất phát từ tương tác giữa các ion Mangan với hai loại hóa trị là Mn^{+3} và Mn^{+4} . Perovskite Mangan pha tạp là vật liệu phân tách pha chứa các kiểu nhóm liên kết khác nhau, nổi bật là cạnh tranh giữa tương tác phản sắt từ (AF) (tương tác siêu trao đổi giữa các ion Mangan cùng hóa trị) và tương tác sắt từ (FM) (trao đổi kép giữa các ion Mangan khác hóa trị thông qua nguyên tử Ôxi). Phân bố ngẫu nhiên của các ion Mn^{+3} và Mn^{+4} trên các vị trí mạng tinh thể từ có liên hệ mật thiết với tương tác ngẫu nhiên của các spin trong mạng tinh thể. Xác suất mỗi loại tương tác phụ thuộc vào tỷ lệ nồng độ ion Mangan Mn^{+3} , Mn^{+4} .

Mô hình mô tả đầy đủ các loại tương tác bên trong vật liệu perovskite Mangan pha tạp rất phức tạp không thể giải chính xác, do đó mọi nỗ lực tìm kiếm một mô hình đơn giản để hiểu được cơ chế xảy ra trong các loại vật liệu này là cần thiết. Trong trường tinh thể, orbital chưa lấp đầy lớp $3d$ của ion Mangan bị phân tách thành hai trạng thái là trạng thái t_{2g} và trạng thái e_g . Các electron trong vùng e_g có thể nhảy tự do sang các vùng trống của các ion từ khác hóa trị bên cạnh trong khi các electron ở mức t_{2g} định xứ tại nút mạng. Vì vậy spin của các electron t_{2g} trong ion Mangan được

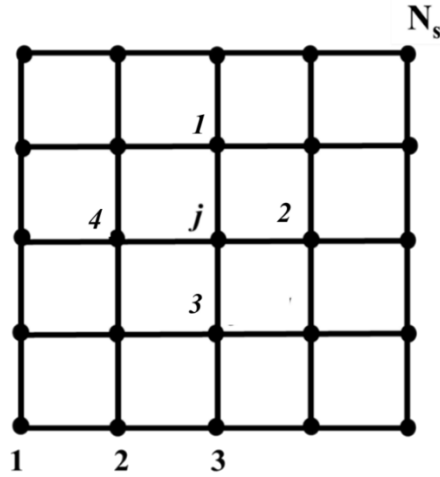
coi như các spin định xứ với $S_{t_{2g}} = 3/2$ theo quy tắc Hund. Giá trị spin thực 3/2 đủ lớn để có thể xem xét xấp xỉ spin cổ điển. Hơn nữa, xét trường hợp tương tác trao đổi Hund J_H giữa các electron t_{2g} với điện tử linh động e_g rất mạnh so với động năng nhảy t của electron e_g giữa hai iôn Mangan lân cận gần nhất ($J_H \gg t$) đã làm giảm đi rất nhiều sự phức tạp của mô hình orbital gốc. Trong giới hạn này, spin của các electron e_g song song với hướng của spin định xứ và xoay theo hướng của từ trường ngoài đặt vào vật liệu biểu hiện trạng thái sắt từ kim loại (tính sắt từ kim loại chỉ thể hiện khi có từ trường ngoài, lúc này các spin sắp xếp theo hướng song song với trục z). Như vậy, trật tự từ được quyết định chủ yếu bởi tương tác lân cận gần nhất giữa các spin định xứ với spin hiệu dụng trung bình trên một nút mạng là $(S_{t_{2g}} + 1/2)$. Trong trường ngoài hướng theo trục z , hai trạng thái spin hiệu dụng với hình chiếu trên trục z là $\pm (S_{t_{2g}} + 1/2)$ là khả dĩ khi quan sát hiệu ứng từ trở lớn.

Do đó, chúng tôi đề xuất khảo sát tính chất từ của mô hình Ising có cạnh tranh tương tác FM - AF của các spin định xứ và chỉ tính tới tương tác giữa các lân cận gần nhất với hy vọng từ mô hình đơn giản này có thể mô tả và giải thích tính chất từ trong các loại vật liệu perovskite Mangan.

2.1. Mô hình Ising với tương tác sắt từ (FM) - phản sắt từ (AF) cạnh tranh

Mô hình Ising là một mô hình toán học biểu diễn cho các chất sắt từ trong vật lý thống kê được phát minh bởi nhà vật lý học Wilhelm Lenz vào năm 1920 [40, 96]. Đến 1925, Ernst Ising giải quyết bài toán cho mô hình một chiều và đưa ra kết quả quá trình chuyển pha không tồn tại trong mô hình này [40, 96]. Mô hình Ising cho mạng vuông hai chiều phức tạp hơn rất nhiều và được giải chính xác bởi Lars Onsager (1944) bằng phương pháp ma trận chuyển [40].

Xét mô hình mạng spin vuông gồm N_s nút mạng, mỗi nút bị chiếm giữ bởi một spin $S = 1/2$ cố định có trạng thái hướng lên (spin up) hoặc hướng xuống (spin down) còn số lân cận từ gần thứ nhất là 4.



Hình 2.1: Mô hình mạng Ising spin 2 chiều với tương tác giữa 4 lân cận gần nhất (ký hiệu 1, 2, 3, 4 xung quanh nút J).

Hamiltonian của mô hình hệ Ising (xem hình 2.1) spin $S = 1/2$ với hình chiếu theo phương z là $S_i^z = \sigma_i/2$ (trong đó $\sigma_i = \pm 1$) có dạng:

$$\mathcal{H} = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq k} J_{ik} \sigma_i \sigma_k - \bar{h} \sum_i \sigma_i. \quad (2.1)$$

Ở đây: σ_i, σ_k là spin ở nút thứ i và k . J_{ik} là tích phân trao đổi giữa hai spin ở hai nút mạng đó và giá trị của nó tuân theo quy luật xác suất

$$P(J_{ik}) = p \delta[J_{ik} - J_{FM}] + (1-p) \delta[J_{ik} - J_{AF}], \quad (2.2)$$

\bar{h} là từ trường ngoài đặt vào (trong đơn vị năng lượng).

Ở đây: $J_{FM} = J(1 + \Delta)$; $J_{AF} = J(1 - \Delta)$ lần lượt là giá trị trung bình của cường độ tương tác FM và AF với xác suất thăng giáng là p và $(1-p)$.

J là giá trị trung bình của tích phân trao đổi và được chọn bằng 1.

$\Delta > 1$ là độ thăng giáng của tích phân trao đổi (không có thứ nguyên).

2.2. Giải tích trường trung bình cho mô hình Ising có cạnh tranh tương tác

Mô hình Ising có cạnh tranh tương tác giữa FM và AF đã được khảo sát trong các nghiên cứu trước đây [3]. Trong phần này, xuất phát từ kết quả giải tích đã tính toán mômen từ tỷ đối, luận án này tiếp tục áp dụng để phát triển tính cho đại lượng từ trở.

Trong hệ spin $S = 1/2$ mômen từ trung bình theo phân bố ngẫu nhiên trên mỗi nút mạng ở nhiệt độ T bất kì được tính theo biểu thức

$$M(T) = \mu_B \langle \langle \sigma_i \rangle \rangle_r, \quad (2.3)$$

trong đó dấu $\langle \dots \rangle$ biểu thị trung bình thống kê nhiệt động

$$\langle \dots \rangle = \frac{\text{Tr} \left(e^{-\beta H} \dots \right)}{\text{Tr} \left(e^{-\beta H} \right)}, \quad (2.4)$$

ở đây β là nghịch đảo nhiệt độ, $\beta^{-1} = k_B T$. Dấu $\langle \dots \rangle_r$ biểu thị trung bình theo cấu hình spin ngẫu nhiên.

Mô men từ tỷ đối trung bình trên một nút mạng là giá trị của biến spin σ_i sau khi lấy trung bình nhiệt động và trung bình ngẫu nhiên

$$m = \frac{M(T)}{M(0)} = \langle \langle \sigma_i \rangle \rangle_r, \quad (2.5)$$

ở đây $M(0)$ là mômen từ bão hòa trên mỗi nút mạng.

Theo hệ thức Callen [17], giá trị trung bình nhiệt động của mômen từ tỷ đối được tính bởi công thức:

$$\langle \sigma_i \rangle = \frac{\text{Tr} \left(e^{-\beta \mathcal{H}} \tanh \beta E_i \right)}{\text{Tr} e^{-\beta \mathcal{H}}} = \langle \tanh \beta E_i \rangle, \quad (2.6)$$

$$\text{trong đó: } E_i = -\sum_k J_{ik} \sigma_k + \bar{h}. \quad (2.7)$$

Từ (2.6) ta xác định được phương trình mômen từ tỷ đối trung bình trên mỗi nút mạng

$$m = \langle \langle \sigma_i \rangle \rangle_r = \langle \langle \tanh \beta E_i \rangle \rangle_r. \quad (2.8)$$

Theo biến đổi Fourier với hàm Delta Dirac cho một hàm $f(x)$ bất kì ta có:

$$f(x) = \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(x - \varphi) f(\varphi) d\varphi, \quad (2.9)$$

ở đây, hàm Delta có dạng :

$$\delta(x - \varphi) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp[it(x - \varphi)] dt. \quad (2.10)$$

Áp dụng biến đổi tích phân theo công thức (2.10) và (2.11) cho hàm tanh bên vế phải của phương trình (2.5) ta được :

$$\begin{aligned} \langle\langle \sigma_i \rangle\rangle_r &= \langle\langle \tanh(\beta E_i) \rangle\rangle_r = \left\langle\left\langle \int_{-\infty}^{+\infty} \delta(\beta E_i - \varphi) \tanh \varphi d\varphi \right\rangle\right\rangle_r \\ &= \left\langle\left\langle \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(-i\beta E_i t) dt \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\varphi t) \tanh \varphi d\varphi \right\rangle\right\rangle_r. \end{aligned} \quad (2.11)$$

(Theo tính chất của hàm Delta Dirac : $\delta(x - \varphi) = \delta(\varphi - x)$)

Đặt tích phân :

$$\begin{aligned} I &= \int_{-\infty}^{+\infty} \exp(i\varphi t) \tanh \varphi d\varphi \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} \cos(\varphi t) \tanh \varphi d\varphi + \int_{-\infty}^{+\infty} i \sin(\varphi t) \tanh \varphi d\varphi. \end{aligned} \quad (2.12)$$

$$\text{Đặt} \quad I' = \int_{-\infty}^{+\infty} \cos(\varphi t) \tanh \varphi d\varphi, \quad (2.13)$$

$$I'' = \int_{-\infty}^{+\infty} i \sin(\varphi t) \tanh \varphi d\varphi. \quad (2.14)$$

Để thấy biểu thức dưới dấu tích phân của I' là hàm lẻ của biến φ nên tích phân trên một khoảng chẵn $I' = 0$. Hàm dưới dấu tích phân của I'' là hàm chẵn theo biến φ . Áp dụng kết quả tích phân trong [33] ta có :

$$I'' = \frac{\pi i}{\sinh \frac{\pi t}{2}}. \quad (2.15)$$

Như vậy

$$I = I'' = \frac{\pi i}{\sinh \frac{\pi t}{2}}. \quad (2.16)$$

Thay (2.16) vào (2.11) ta được :

$$\begin{aligned}
\langle\langle\sigma_i\rangle\rangle_r &= \left\langle\left\langle\frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{+\infty}\exp(-i\beta E_i t)dt\frac{\pi i}{\sinh\frac{\pi t}{2}}\right\rangle\right\rangle_r \\
&= \left\langle\left\langle\frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{i\cos(\beta E_i t)}{\sinh\frac{\pi t}{2}}dt + \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin(\beta E_i t)}{\sinh\frac{\pi t}{2}}dt\right\rangle\right\rangle_r. \tag{2.17}
\end{aligned}$$

Tích phân: $I_1 = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{i\cos(\beta E_i t)}{\sinh\frac{\pi t}{2}}dt = 0$ do biểu thức dưới dấu tích phân là hàm lẻ của biến t .

Tích phân $I_2 = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{+\infty}\frac{\sin(\beta E_i t)}{\sinh\frac{\pi t}{2}}dt$ có biểu thức dưới dấu tích phân là hàm chẵn của biến t do đó:

$$I_2 = \int_0^{+\infty}\frac{\sin(\beta E_i t)}{\sinh\frac{\pi t}{2}}dt. \tag{2.18}$$

Thay (2.18) vào (2.17) ta được:

$$\langle\langle\sigma_i\rangle\rangle_r = \left\langle\left\langle\int_0^{+\infty}\frac{\sin(\beta E_i t)}{\sinh\frac{\pi t}{2}}dt\right\rangle\right\rangle_r = \left\langle\left\langle\int_0^{+\infty}\frac{dt}{\sinh\frac{\pi t}{2}}\text{Im}(\exp(i\beta E_i t))\right\rangle\right\rangle_r. \tag{2.19}$$

Kết hợp (2.7) và (2.19) ta có :

$$\begin{aligned}
\langle\langle\sigma_i\rangle\rangle_r &= \left\langle\left\langle\int_0^{+\infty}\frac{dt}{\sinh\frac{\pi t}{2}}\text{Im}\left\{\exp(i\beta t\bar{h})\exp(i\beta t\sum_k J_{ik}\sigma_k)\right\}\right\rangle\right\rangle_r \\
&= \int_0^{+\infty}\frac{dt}{\sinh\frac{\pi t}{2}}\text{Im}\left\{\exp(i\beta t\bar{h})\left\langle\left\langle\exp(i\beta t\sum_k J_{ik}\sigma_k)\right\rangle\right\rangle_r\right\}. \tag{2.20}
\end{aligned}$$

Khai triển hàm mũ chứa spin trong (2.20) ta có :

$$\exp(i\beta t \sum_k J_{ik} \sigma_k) = \prod_{k=1}^z \exp(i\beta t J_{ik} \sigma_k) = \prod_{k=1}^z [\cos(\beta J_{ik} t) + i\sigma_k \sin(\beta J_{ik} t)] \quad (2.21)$$

Như vậy :

$$\begin{aligned} \left\langle \left\langle \exp(i\beta t \sum_k J_{ik} \sigma_k) \right\rangle \right\rangle_r &= \left\langle \left\langle \prod_{k=1}^z [\cos(\beta J_{ik} t) + i\sigma_k \sin(\beta J_{ik} t)] \right\rangle \right\rangle_r \\ &= \left\langle \left\langle \prod_{k=1}^z (a + ib\sigma_k) \right\rangle \right\rangle_r \\ &= a^z + a^{z-1} ib \sum_{k_1} \left\langle \left\langle \sigma_{k_1} \right\rangle \right\rangle_r + \dots + (ib)^z \left\langle \left\langle \sigma_{k_1} \dots \sigma_{k_z} \right\rangle \right\rangle_r \end{aligned} \quad (2.22)$$

Với các hệ số a và b được xác định là

$$\begin{aligned} a &= p \cos[\beta J(1+\Delta)t] + (1-p) \cos[\beta J(1-\Delta)t], \\ b &= p \sin[\beta J(1+\Delta)t] + (1-p) \sin[\beta J(1-\Delta)t]. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Thay (2.22) vào (2.19) ta được

$$\left\langle \left\langle \sigma_i \right\rangle \right\rangle = \int_0^{+\infty} \frac{dt}{\sinh \frac{\pi t}{2}} \operatorname{Im} \left\{ \exp(i\beta t \bar{h}) \left[a^z + a^{z-1} ib \left\langle \left\langle \sigma_{k_1} \right\rangle \right\rangle_r + \dots + (ib)^z \left\langle \left\langle \sigma_{k_1} \dots \sigma_{k_z} \right\rangle \right\rangle_r \right] \right\}. \quad (2.24)$$

Trong gần đúng trường hiệu dụng chỉ tính tới tương quan spin giữa các lân cận NN ta có

$$\left\langle \left\langle \sigma_{k_1} \dots \sigma_{k_n} \right\rangle \right\rangle_r \approx m^n. \quad (2.25)$$

Thay (2.25) vào (2.24) thu được

$$\left\langle \left\langle \sigma_i \right\rangle \right\rangle_r \approx \int_0^{+\infty} \frac{dt}{\sinh \frac{\pi t}{2}} \operatorname{Im} \left\{ (a + ibm)^z \exp(i\beta t \bar{h}) \right\}, \quad (2.26)$$

đặt $h = \frac{\bar{h}}{J}$; $\tau = \frac{k_B T}{J}$ (Để đơn giản J được chọn bằng 1).

Sử dụng nhị thức Newton:

$$(a + ibm)^z = \sum_{n=0}^z C_z^n a^{z-n} (ibm)^n, \quad (2.27)$$

ta đưa công thức (2.26) về dạng

$$m \approx \text{Im} \left\{ \int_0^{+\infty} \frac{\exp(iht / \tau) dt}{\sinh \frac{\pi t}{2}} \left\{ \sum_{n=0}^z C_z^n a^{z-n} (ibm)^n \right\} \right\}. \quad (2.28)$$

Như vậy, mômen từ trung bình trên mỗi nút mạng là nghiệm của phương trình đại số phụ thuộc vào các biến là: xác suất p , độ thẳng giáng của tích phân trao đổi Δ , nhiệt độ τ , từ trường ngoài h và số lân cận gần nhất z

$$m = \sum_{n=0}^z C_z^n A_n(\tau, p, \Delta, z, h) m^n, \quad (2.29)$$

C_z^n là hệ số nhị thức, và hệ số A_n được xác định

$$A_n = \int_0^{\infty} \frac{a^{z-n}(t) b^n(t)}{\sinh\left(\frac{\pi t}{2}\right)} \sin\left(\frac{ht}{\tau} + \frac{n\pi}{2}\right) dt. \quad (2.30)$$

Phương trình (2.30) không phụ thuộc vào cấu trúc hình học cụ thể của mạng spin mà chỉ phụ thuộc vào z số spin NN có phân bố ngẫu nhiên.

Giải phương trình (2.28) và (2.29) bằng phương pháp tính toán số dựa trên lập trình Matlab ta thu được giá trị của mômen từ tỷ đối trên mỗi nút mạng.

Bên cạnh khảo sát quá trình từ hóa của các vật liệu perovskite Mangan, các nghiên cứu thực nghiệm cũng tiến hành đo điện trở suất và nhận thấy rằng điện trở suất có xu hướng giảm mạnh trong từ trường ngoài ở nhiệt độ thấp. Tương tác trao đổi kép giữa các ion Mangan lân cận gần nhất và hiệu ứng xuyên ngầm phân cực spin được biết đến là cơ chế tác động đến hiệu ứng từ trở trong các perovskite Mangan kích thước nano.

Theo lý thuyết từ trở khổng lồ xuyên ngầm, trong các cấu trúc nano hệ số từ trở MR trong trường ngoài có thể được đánh giá theo tỷ số điện trở suất khi có và không có trường ngoài theo công thức [7]:

$$MR = \frac{\rho_h(\tau, h)}{\rho_0(\tau)} = \frac{G_0(\tau)}{G_h(\tau, h)} = \frac{1}{1 + P^2 m^2}, \quad (2.31)$$

ở đây P là độ phân cực electron dẫn, m là mômen từ tỷ đối của spin định xứ, $\rho_h(\tau, h)$ và $\rho_0(\tau)$ là điện trở suất khi có và không có từ trường ngoài h ở nhiệt độ τ ;

còn $G_h(\tau, h) = \rho_h^{-1}(\tau, h)$ là độ dẫn khi có trường ngoài h ở nhiệt độ τ , $G_0(\tau) = \rho_0^{-1}(\tau)$ là độ dẫn khi không có trường ngoài.

Theo lý thuyết hiện tượng truyền kiểu đạn đạo của Landauer và áp dụng của Inoue và Maekawa [48] cho các hệ hạt nano, từ trở tỷ đối tỷ lệ với bình phương mômen từ tỷ đối $m^2 = \langle \sigma \rangle^2$ và được xem như là một hệ số điều chỉnh theo như tài liệu tham khảo [84]. Do đó ta có thể áp dụng kết quả tính mômen từ tỷ đối m cho mô hình Ising có cạnh tranh tương tác để mô tả sự phụ thuộc của hệ số từ trở vào trạng thái từ của hệ. Trong công thức (2.31) độ phân cực điện từ P cũng được xem xét đơn giản là một tham số lý thuyết theo lập luận trong tài liệu tham khảo [48] và được các tác giả tính toán gần đúng trong tài liệu tham khảo [84]. Trong các perovskite pha tạp, khi tương tác Hund giữa spin định xứ t_{2g} và spin dẫn e_g lớn hơn rất nhiều so với tích phân nhảy giữa các nút lân cận của điện tử e_g ($J_H \gg t$), các tác giả [7] đã tính toán độ phân cực điện từ P bằng phương pháp hàm Green hai thời điểm cho các hệ perovskite Mangan pha tạp trong điều kiện ghép cặp mạnh giữa điện tử xuyên hàm và các spin định xứ:

$$P = \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{n_\uparrow + n_\downarrow} = \tanh \left[\frac{J_H}{J\tau} \left(S_{t_{2g}} + \frac{1}{2} \right) \right], \quad (2.32)$$

ở đây n_\uparrow và n_\downarrow là số điện tử e_g linh động có hình chiếu spin hướng lên và hướng xuống, $\tau = \frac{k_B T}{J}$ còn $S_{t_{2g}} = 3/2$ là spin của các điện tử $3d$ trên mức định xứ t_{2g} .

Như vậy, từ trở tỷ đối của perovskite từ tính tỷ lệ nghịch với độ lớn của bình phương mômen từ tỷ đối trên mỗi nút mạng. Do đó biểu hiện của đường cong từ trở cũng phụ thuộc vào các tham số là xác suất thăng giáng p , độ thăng giáng trong tương tác Δ , từ trường ngoài h ...

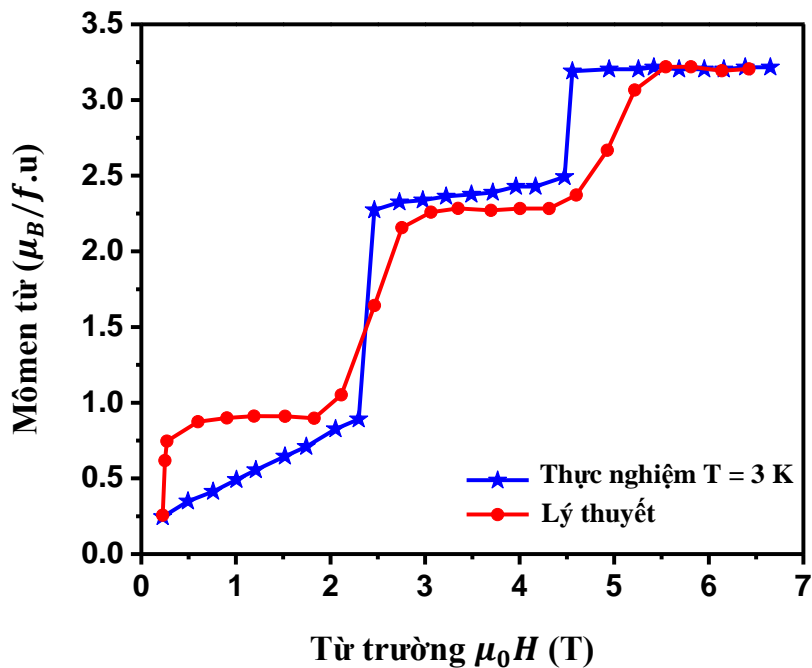
2.3. Chuyển pha từ trong mô hình Ising cạnh tranh tương tác

Trong phần này, chúng tôi thực hiện khảo sát các tính chất từ của mô hình Ising có cạnh tranh tương tác giữa các đám spin FM và AF bằng phương pháp giải tích kết hợp với tính toán số. Tính toán và khảo sát số cho thấy trong hệ spin Ising xảy ra quá trình chuyển pha từ tương ứng với các bước nhảy trong đường cong từ hóa [3] và từ trở. Số lượng và dạng bước nhảy trong mô hình khảo sát ở đây có sự tương

đồng với các bước nhảy từ đo được trong thực nghiệm của vật liệu perovskite Mangan đa tinh thể. Do đó, việc so sánh các kết quả lý thuyết với kết quả thực nghiệm về đường cong từ trở cũng được thực hiện để đánh giá hiệu quả của lý thuyết.

2.3.1. Ứng dụng mô hình Ising khảo sát đường từ hóa trong vật liệu $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.95}\text{Co}_{0.05}\text{O}_3$

Trong nghiên cứu trước đây [3] về mô hình Ising có cạnh tranh tương tác giữa các đám spin FM và AF đã chỉ ra ở nhiệt độ thấp và độ thẳng giăng của tích phân trao đổi $\Delta > 1$, đường cong từ hóa có nhảy bậc tại một số điểm tới hạn của từ trường ngoài h_c . Trong mạng tinh thể có số NN từ $z = 4$, đường từ hóa có hai bước nhảy tương tự với biểu hiện quan sát được trong thực nghiệm của vật liệu perovskite $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.95}\text{Co}_{0.05}\text{O}_3$ (được đo trong môi trường chân không có độ từ thẩm $\mu_0 = 1$) [66]. Kết quả so sánh các đường cong từ hóa lý thuyết và thực nghiệm cho vật liệu $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.95}\text{Co}_{0.05}\text{O}_3$ [66] được biểu diễn như trên hình 2.2.



Hình 2.2: Đồ thị so sánh kết quả lý thuyết và thực nghiệm [66] cho đường cong từ hóa, các tham số của đường lý thuyết là $z = 4$, $p = 0.41$, $\Delta = 1.04$.

Bảng 2.1: So sánh giá trị mômen từ và từ trường tới hạn giữa lý thuyết và thực nghiệm cho mẫu $Pr_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{0.95}Co_{0.05}O_3$ [66]

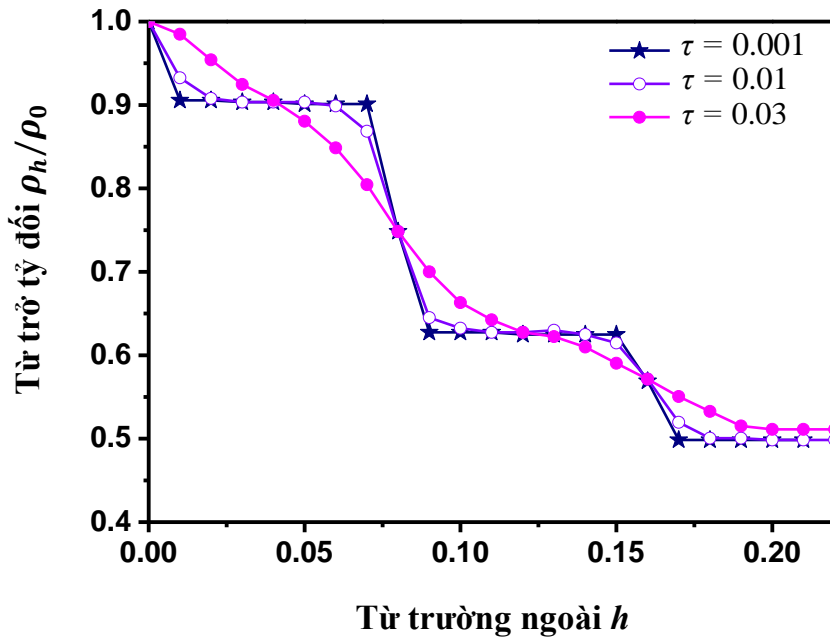
Mômen từ ($\mu_B/f.u$)		μ_0H_C (T)	
<i>Lý thuyết</i>	<i>Thực nghiệm</i>	<i>Lý thuyết</i>	<i>Thực nghiệm</i>
1.1200	1.3740	2.1765	2.3200
0.7000	0.8802	4.6640	4.5114

Theo mô hình lý thuyết của chúng tôi, đường cong từ hóa có hai bước nhảy khá tương ứng với bước nhảy từ đo được trong vật liệu $Pr_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{0.95}Co_{0.05}O_3$ [66]. Ở đây, biểu hiện mômen từ tăng một cách đột ngột ở giá trị từ trường ngoài xác định được biết đến tương ứng với quá trình chuyển pha loại I (hay quá trình từ hóa loại I) xảy ra trong hệ thống. Bản chất vật lý của hiện tượng có thể được hiểu như sau: ban đầu hệ thống chứa các đám spin tương tác FM và AF. Khi đặt trong từ trường ngoài, đám spin AF dần dần quay theo hướng của từ trường, đám spin FM được mở rộng ra và tại các giá trị tới hạn, các đám AF bị đảo hướng đột ngột. Lúc này, chúng sẽ quay theo hướng song song với từ trường ngoài, gây ra bước nhảy từ ở $H_{C1} \approx 2.1765$ (T) và $H_{C2} \approx 4.6640$ (T). Như vậy, có thể thấy rằng về mặt định tính, mô hình lý thuyết của chúng tôi mô tả khá tốt quá trình xảy ra trong thực nghiệm cho vật liệu $Pr_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{0.95}Co_{0.05}O_3$ [66].

2.3.2. Sự phụ thuộc của từ trở vào từ trường ngoài

2.3.2.1. Đường từ trở ở các nhiệt độ khác nhau

Hình 2.3 biểu diễn sự phụ thuộc của từ trở tỷ đối phụ thuộc vào từ trường ngoài ở các nhiệt độ khác nhau. Các đại lượng biểu diễn trong hình không có thứ nguyên.



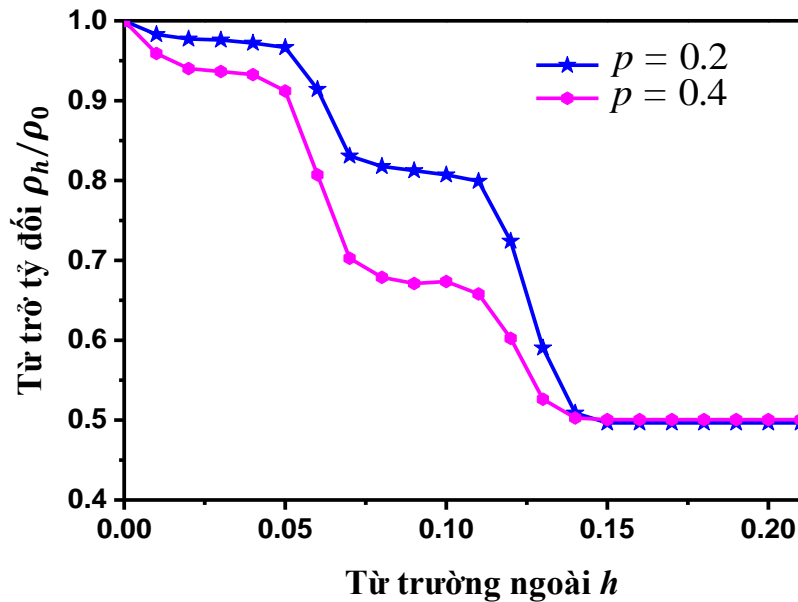
Hình 2.3: Đồ thị sự phụ thuộc của từ trở tỷ đối ρ_h/ρ_0 vào từ trường ngoài h ở các nhiệt độ τ khác nhau với $z = 4$, $p = 0.41$, $\Delta = 1.04$, $S_{12g} = 3/2$, $J_H/J = 3$.

Hình 2.3 cho thấy, với các tham số được chọn giống với các tham số trong khảo sát ở hình 2.2, ở nhiệt độ thấp $\tau = 0.01$ và $\tau = 0.001$, đường từ trở xuất hiện hai bước nhảy tương ứng với chính hai bước nhảy trong đường cong từ hóa như ở hình 2.2. Khi chưa có từ trường ngoài, từ trở hệ thống có giá trị cực đại tương ứng với giá trị cực tiểu của mômen từ theo công thức (2.37). Khi từ trường ngoài được đặt vào và tăng dần, từ trở giữ ổn định trong một khoảng giới hạn của từ trường, cho đến khi từ trường đạt tới hạn thứ nhất $h_{c1} \approx 0.7$, từ trở giảm đột ngột sinh ra bước nhảy thứ 1. Hệ thống xảy ra quá trình chuyển pha lần thứ nhất. Quá trình tương tự xảy ra khi từ trường tiếp tục tăng lên đến giá trị tới hạn thứ hai $h_{c2} \approx 0.15$, từ trở một lần nữa giảm đột ngột sinh ra bước nhảy thứ hai. Hệ thống trải qua chuyển pha lần thứ hai. Biểu hiện của các bước nhảy được thể hiện ở trong hình 2.3.

Ở giá trị $\tau = 0.03$, năng lượng nhiệt đủ lớn chiếm ưu thế so với năng lượng liên kết giữa các spin, khi cường độ từ trường tăng cường các spin dễ dàng quay theo hướng của từ trường ngoài so với ở nhiệt độ thấp. Do đó, bước nhảy từ bị biến mất, thay vào đó từ trở giảm tuyến tính theo từ trường ngoài.

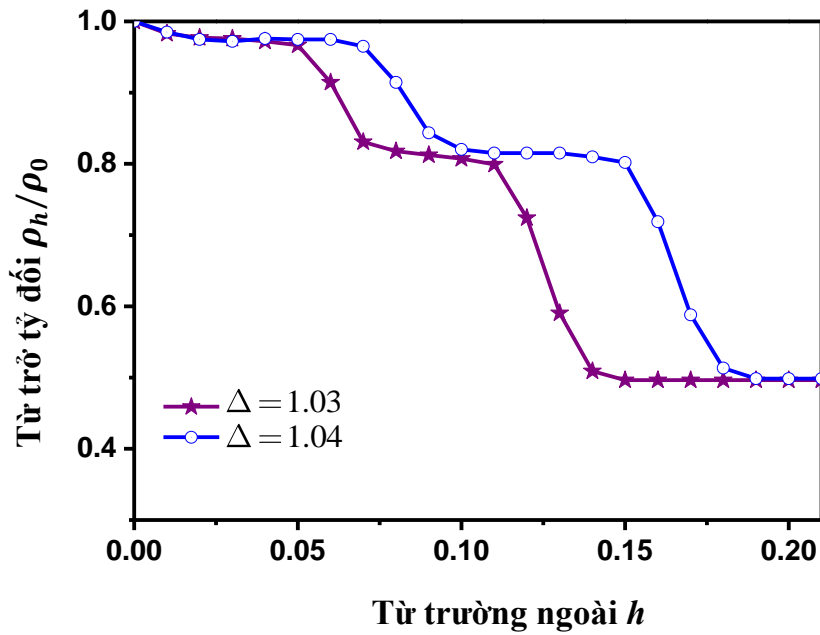
2.3.2.2. Đường từ trở ở nhiệt độ thấp khi xác suất của tương tác và thăng giáng của tích phân trao đổi thay đổi

Phần trên khảo sát ảnh hưởng của nhiệt độ lên đường cong từ trở đã chỉ rõ trong điều kiện nhiệt độ thấp, đường từ trở biểu hiện các bước nhảy ở các giá trị tới hạn của từ trường ngoài h_c . Dưới đây, chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của giá trị xác suất p và độ thăng giáng Δ lên các bước nhảy từ ở nhiệt độ thấp. Các đại lượng biểu diễn trong các hình vẽ ở mục này đều không có thứ nguyên.



Hình 2.4: Đồ thị phụ thuộc của từ trở tỷ đối vào từ trường ngoài cho hai giá trị phân bố xác suất khác nhau $p = 0.2$ và $p = 0.4$ với $z = 4$, $\Delta = 1.03$, $\tau = 0.01$, $S_{t_{2g}} = 3/2$, $J_H/J = 3$.

Quan sát hình 2.4 có thể thấy bước nhảy từ xảy ra ở các giá trị từ trở thấp hơn khi xác suất phân bố p đặc trưng cho các đám FM tăng lên. Bên cạnh đó, các bước nhảy với độ lớn khác nhau được sinh ra ở cùng từ trường tới hạn là $h_{c1} \approx 0.05$ và $h_{c2} \approx 0.11$ trong cả hai trường hợp của giá trị xác suất phân bố p . Như vậy, xác suất phân bố đặc trưng cho các đám FM và AF ảnh hưởng chủ yếu lên độ lớn của từ trở hệ thống mà ít gây ảnh hưởng đến vị trí của các bước nhảy từ tương ứng.

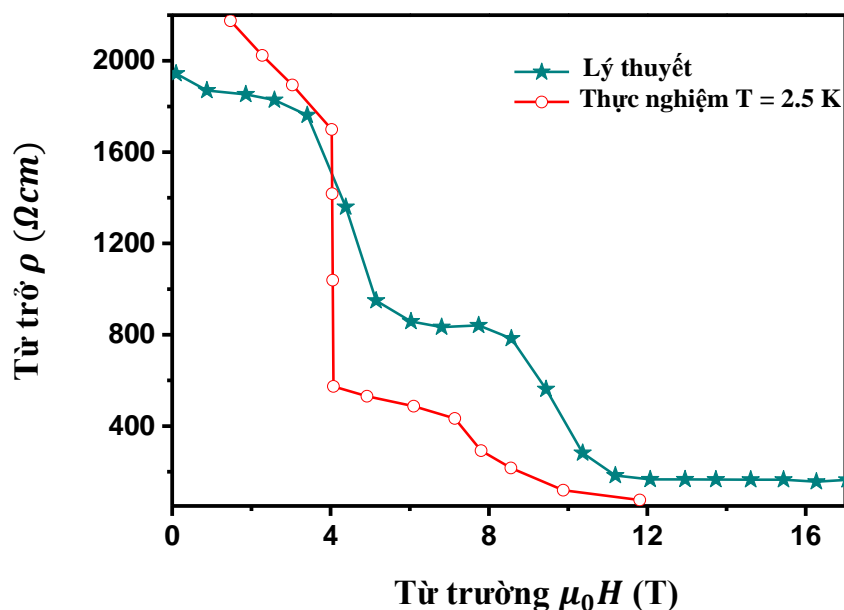


Hình 2.5: Đồ thị từ trở tỷ đối phụ thuộc vào thặng giá Δ khác nhau với $z = 4$, $p = 0.2$, $\tau = 0.01$, $S_{t_{2g}} = 3/2$, $J_H/J = 3$.

Hình 2.5 khảo sát ảnh hưởng của giá trị thặng giá Δ lên các bước nhảy từ. Ta thấy thặng giá Δ của tích phân trao đổi làm thay đổi vị trí các bước nhảy từ. Thặng giá Δ lớn đồng nghĩa liên kết giữa các spin tương tác AF được tăng cường khi đó để các đám spin AF quay theo hướng của từ trường thì cần phải tốn nhiều năng lượng hơn. Vì vậy, các bước nhảy xảy ra dịch về phía từ trường tới hạn lớn.

2.3.2.3. So sánh đường từ trở lý thuyết và thực nghiệm

Nhận thấy sự tương đồng trong số lượng và dạng bước nhảy của đường từ trở giữa lý thuyết khảo sát mô hình Ising có cạnh tranh tương tác FM – AF và thực nghiệm đo cho mẫu vật liệu từ đa tinh thể perovskite Mangan $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.97}\text{Ga}_{0.03}\text{O}_3$ [104], do đó chúng tôi tiến hành so sánh đường từ trở lý thuyết và thực nghiệm thể hiện trong hình 2.6 và bảng số liệu 2.2.



Hình 2.6: Đồ thị so sánh đường từ trở theo lý thuyết và thực nghiệm cho mẫu $Pr_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{0.97}Ga_{0.03}O_3$ [104]. Đường cong lý thuyết được vẽ ở các tham số $z = 4$, $\Delta = 1.03$, $\tau = 0.001$, $p = 0.35$, $S_{t_{2g}} = 3/2$, $J_H/J = 3$.

Bảng 2.2: So sánh giá trị từ trở và từ trường tới hạn giữa lý thuyết và thực nghiệm cho mẫu $Pr_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{0.97}Ga_{0.03}O_3$ [104].

ρ (Ωcm)		$\mu_0 H_c$ (T)	
Lý thuyết	Thực nghiệm	Lý thuyết	Thực nghiệm
1716.1	1688.58	3.9269	3.9633
525.48	386.18	8.0775	7.1041

Quan sát đồ thị trong hình 2.6 cùng bảng số liệu 2.2 cho thấy lý thuyết của chúng tôi có sự phù hợp tương đối tốt với thực nghiệm đo cho mẫu $Pr_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{0.97}Ga_{0.03}O_3$ [104] trong các giá trị tới hạn của từ trường H_c và từ trở. Bước nhảy từ thứ nhất giữa lý thuyết và thực nghiệm có giá trị gần bằng nhau

trong khi bước nhảy thứ hai có sự sai khác. Nguyên nhân ở đây có thể là do lý thuyết mô hình hóa tính trong điều kiện lý tưởng trong khi kết quả thực nghiệm bị ảnh hưởng bởi nhiều yếu tố khác nhau như tính chất, thành phần mẫu và điều kiện thí nghiệm ... Đây là lý thuyết hiện tượng luận tuy có mặt hạn chế nhưng có thể áp dụng tham khảo để dự đoán quá trình từ hóa cho các perovskite Mangan thành phần tương tự $R_{0.5}A_{0.5}Mn_{1-x}T_xO_3$ với R là kim loại đất hiếm, A là Ca, Sr, Ba ... và T là kim loại chuyển tiếp.

Mặc dù mô hình Ising có cạnh tranh tương tác của các spin định xứ không thể mô tả được đầy đủ các tương tác bên trong của các hợp chất perovskite Mangan pha tạp tuy nhiên về mặt hiện tượng luận các kết quả của mô hình góp phần hiểu biết cơ chế cạnh tranh giữa pha FM và AF. Số bước nhảy từ phụ thuộc vào số tương tác từ lân cận gần nhất, với $z = 4$ có hai bước nhảy và $z = 6$ tồn tại ba bước nhảy. Xác suất phân bố p trong mô hình đặc trưng cho tương tác FM, còn $(1 - p)$ cho tương tác AF. Xác suất này liên quan đến tỷ lệ nồng độ ion Mn^{+3} và Mn^{+4} . Tham số thăng giáng Δ tương ứng với nồng độ pha tạp của nguyên tố Co/Ga. Trong tính toán chúng tôi lấy giá trị của tham số p với xác suất cạnh tranh tương tác FM, AF gần bằng nhau tương ứng trong 4 spin lân cận gần nhất có hai cái đảo ngược lại trong từ trường tương ứng với 2 bước nhảy trong quá trình từ hóa loại 1. Trước đó trong tài liệu tham khảo [3], chúng tôi đã khảo sát ảnh hưởng của từng tham số đến số lượng, vị trí, độ lớn của các bước nhảy từ. Đối với mỗi vật liệu perovskite Mangan pha tạp khác nhau đặc điểm của các bước nhảy cũng khác nhau cùng với mô hình phức tạp không thể giải được chính xác. Do đó, mục đích bài toán của chúng tôi chỉ muốn nhấn mạnh vào vai trò của cơ chế cạnh tranh tương tác hình thành nên các bước nhảy và thực hiện so sánh về dạng tương đồng với kết quả thực nghiệm cho một số loại perovskite điển hình.

Kết luận chương 2

Mô hình Ising có cạnh tranh tương tác đã được khảo sát bằng phương pháp giải tích kết hợp tính toán số và thu được các kết quả là:

Đã phát hiện thấy hai bước nhảy trong đường cong từ trở của mạng hai chiều với số lân cận từ $z = 4$ ở nhiệt độ thấp. Các bước nhảy này tương ứng với các bước nhảy từ sinh ra trong đường cong từ hóa khi có thăng giáng. Xác suất phân bố cạnh tranh tương tác và độ lớn của giá trị thăng giáng ảnh hưởng đến độ cao và vị trí của các bước nhảy từ trở.

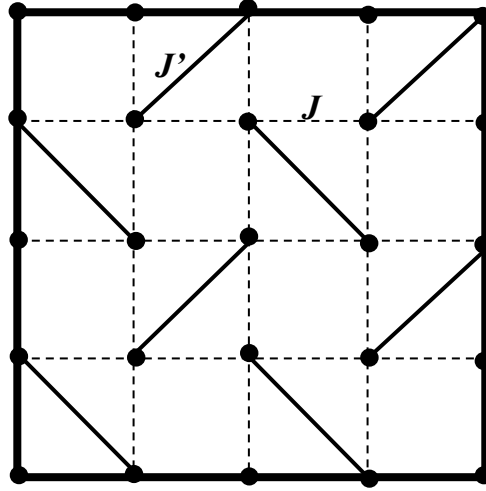
So sánh các đường cong từ hóa và từ trở lý thuyết với các đường cong thực nghiệm đo được cho mẫu vật liệu từ Mangan $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.95}\text{Co}_{0.05}\text{O}_3$ [66] (so sánh đường từ hóa) và $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.97}\text{Ga}_{0.03}\text{O}_3$ [104] (so sánh đường từ trở) cho thấy vị trí các bước nhảy khá phù hợp với nhau. Mô hình lý thuyết của chúng tôi mô tả tốt tính chất điện từ của hệ $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.95}\text{Co}_{0.05}\text{O}_3$ và $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.97}\text{Ga}_{0.03}\text{O}_3$, từ đó có thể hy vọng sử dụng được để giải thích các hiện tượng xảy ra trong nhóm các vật liệu tương tự.

Một phần kết quả khảo sát của chương 2 được công bố trong công trình [1].

CHƯƠNG 3: BƯỚC NHẢY TỪ PHÂN SỐ TRONG MÔ HÌNH ISING CHO MẠNG SHASTRY – SUTHERLAND

3.1. Mạng Shastry – Sutherland

Tính chất vấp (trắc trở) spin là một trong những hiện tượng thú vị trong vật lý vật chất ngưng tụ. Nguồn gốc của tính chất này xuất phát từ các cạnh tranh tương tác ví dụ như sự sắp xếp của tương tác FM và AF trong các vật liệu từ hoặc phát sinh từ cấu trúc hình học mạng tinh thể. Năm 1981, Shastry – Sutherland đưa ra đề xuất mô hình mạng hai chiều mô tả tương tác giữa các vị trí NN và NNN [34, 85].



Hình 3.1: Mạng Shastry – Sutherland với NN J và NNN J' .

Mô hình Shastry – Sutherland là mô hình mạng vuông hai chiều có spin $S = 1/2$ được sắp xếp trên mỗi nút mạng với J là tương tác giữa các vị trí NN và J' là tương tác giữa các vị trí NNN (xem hình 3.1) được biểu diễn trong Hamiltonian có dạng:

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle i,k \rangle} \sigma_i^z \sigma_k^z + J' \sum_{\langle\langle i,k \rangle\rangle} \sigma_i^z \sigma_k^z. \quad (3.1)$$

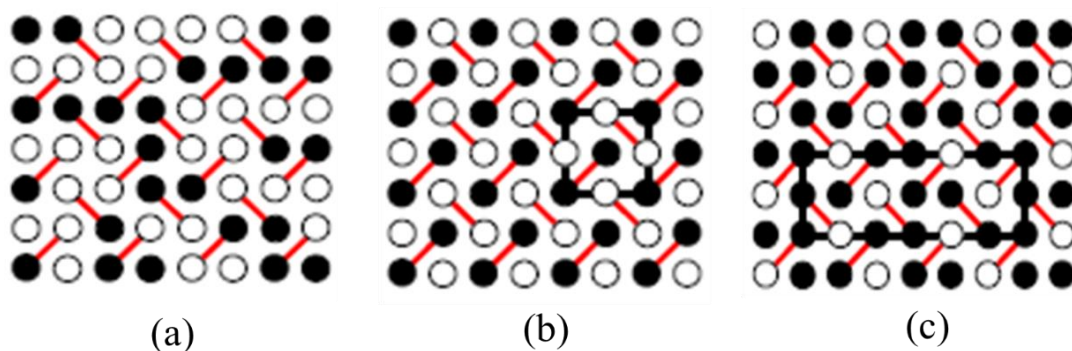
Trong giới hạn $J' = 0$, mô hình tương đương với mô hình Ising mạng vuông spin $S = 1/2$. Trạng thái cơ bản là trạng thái Neel với trật tự từ tầm xa. Còn khi $J = 0$, Hamiltonian của mô hình bao gồm các dimer tách biệt trên liên kết J' , trạng thái dimer

đơn (singlet dimer) là trạng thái cơ bản của mô hình và được biểu diễn là tích trực tiếp của các mức đơn (singlet) trên mỗi liên kết J' .

Mạng spin Shastry – Sutherland là mô hình mạng được sử dụng để nghiên cứu tính chất từ với giản đồ pha phong phú. Trong nghiên cứu thực nghiệm cho vật liệu $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ [97] và tetraboxit đất hiếm RB_4 ($\text{R} = \text{Tb}, \text{Dy}, \text{Ho}, \text{Tm} \dots$) [34, 94, 105, 106] thú vị là người ta nhận thấy các vật liệu này gồm có các lớp liên kết yếu của các ion từ tính Cu^{2+} và R^{3+} nằm ở các vị trí tương ứng với mạng hình học Shastry – Sutherland. Đặc biệt, khi khảo sát tính chất từ của các vật liệu này, đường cong từ hóa xuất hiện chuỗi các bước nhảy ở các giá trị phân số của mômen từ tỷ đối ví dụ như chuỗi bước nhảy từ $1/2, 1/3, 1/4$ và $1/8$ trong vật liệu $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ [52, 53, 61], và các bước nhảy $1/2, 1/3, 1/7, 1/11, 2/9, 4/9, 7/9 \dots$ biểu hiện trong vật liệu RB_4 [94, 106] khi có từ trường ngoài đặt vào. Những kết quả này đã thu hút được sự chú ý đặc biệt của các nhà khoa học. Nguyên nhân cơ chế hình thành của các bước nhảy từ phân số trở thành thách thức đối với các nhà vật lý học.

Thực nghiệm khảo sát cho các tetraboxit đất hiếm đã chỉ ra sự tồn tại của bước nhảy từ chính tại giá trị phân số $1/3$ của mômen từ tỷ đối [15, 67]. Trong từ trường lớn, bước nhảy $1/2$ xuất hiện thay thế bước nhảy chính $1/3$ (trong vật liệu TmB_4 [94] và ErB_4 [71]). Đặc biệt, khi hiệu ứng trường tinh thể đủ lớn, tương tác của các spin trong các loại vật liệu này được xem là các spin Ising $S = 1/2$ tương tác AF [15, 47, 71]. Vì thế, nghiên cứu trong giới hạn mô hình spin Ising AF là bước đầu hướng tới các hiểu biết đầy đủ về quá trình từ hóa của loại vật liệu này.

Năm 2012, Dublennykh đã đưa ra lời giải chính xác của mô hình Ising cho mạng Shastry – Sutherland [24] và chỉ ra rằng tồn tại duy nhất bước nhảy $1/3$ trong mô hình mạng Shastry – Sutherland với tương tác NN và NNN (còn được gọi là mô hình tiêu chuẩn). Giản đồ pha của mô hình Ising hai chiều mạng Shastry – Sutherland tiêu chuẩn thể hiện bốn trạng thái cơ bản. Các trạng thái cơ bản đó là pha Neel, pha Ising – dimer, pha $1/3$ và pha FM lần lượt tương ứng với các giá trị mômen từ tỷ đối $0, 0, 1/3$ và 1 (xem hình 3.2).



Hình 3.2: Phác họa một số cấu trúc trạng thái cơ bản của mô hình Ising trên mạng Shastry - Sutherland: (a) pha Ising – dimer có hai spin sắp xếp đối song song trên đường chéo Shastry - Sutherland, (b) pha Neel được tạo ra từ tập hợp cấu hình $\uparrow\downarrow$ (c) pha 1/3 hình thành từ tập hợp cấu hình 2 spin hướng lên và 1 spin hướng xuống trong mỗi tam giác con có chứa đường chéo Shastry – Sutherland còn được gọi là cấu hình UUD. Chấm tròn tô đậm biểu diễn spin hướng lên, chấm tròn trắng biểu diễn spin hướng xuống.

Khi thêm vào tương tác lân cận thứ ba, bước nhảy chính 1/3 biến mất và làm phát sinh các pha mới trong đó có pha tương ứng với bước nhảy 1/2 như quan sát được ở TmB_4 và ErB_4 [24, 25]. Như vậy, cơ bản sự hình thành của bước nhảy 1/3 và 1/2 đã được giải thích bằng lời giải chính xác mô hình Ising trên mạng Shastry – Sutherland. Tuy nhiên sự tồn tại của các bước nhảy từ phân số khác vẫn còn là ẩn số.

Quan điểm của Dublennykh cho rằng các bước nhảy từ phân số biến đổi trong khoảng từ 0 đến 1 của mômen từ tỷ đối tương ứng với cấu trúc hỗn hợp của các trạng thái cơ bản sinh ra ở các biên pha [24]. Tuy nhiên, vẫn chưa có cái nhìn rõ ràng về cơ chế sâu bên trong của quá trình đó.

Một yếu tố khác cũng hỗ trợ sự hình thành các bước nhảy từ phân số là trường trao đổi ngẫu nhiên [55, 64, 83]. Một số công trình trước đó mô phỏng Monte Carlo với thuật toán Wang – Landau đã chỉ ra sự xuất hiện của các bước nhảy từ phân số dưới tác dụng của trường trao đổi ngẫu nhiên trong điều kiện nhiệt độ thấp [64, 81,

82]. Các tác giả đã lập luận rằng mô hình này xảy ra quá trình không cân bằng nên bước nhảy từ chính 1/3 bị phân tách thành các bước nhảy nhỏ khác.

Như vậy, câu hỏi đặt ra là kết hợp hiệu ứng mất trật tự và quá trình không cân bằng trong mô hình Ising cổ điển cho mạng Shastry – Sutherland sẽ có ảnh hưởng như thế nào đến sự hình thành các bước nhảy từ phân số. Để trả lời câu hỏi này, luận án sẽ khảo sát mô hình Ising cho mạng Shastry – Sutherland dưới tác dụng của trường ngoài với biến điều kiện trong tương tác trao đổi giữa các spin NN và NNN.

3.2. Mô hình Ising mất trật tự cho mạng Shastry – Sutherland

Để phù hợp với biểu diễn trong công trình mà chúng tôi đã công bố cũng như dễ dàng so sánh với các kết quả khảo sát tương tự ở trong các công trình khác, Hamiltonian của mô hình Ising cho mạng Shastry – Sutherland 2 chiều với các spin nằm dọc theo trục z trong từ trường ngoài không đổi \bar{h} được viết lại dưới dạng như sau:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,k \rangle} J_{ik} \sigma_i^z \sigma_k^z + \sum_{\langle\langle i,k \rangle\rangle} J'_{ik} \sigma_i^z \sigma_k^z - \bar{h} \sum_{k=1}^N \sigma_k^z. \quad (3.2)$$

Trong đó:

Số hạng thứ nhất trong Hamiltonian (3.2) mô tả tương tác giữa các vị trí lân cận NN với cường độ J_{ik} ; $\langle i,k \rangle$ có nghĩa là lấy tổng theo các NN với tích phân trao đổi J_{ik} (được lấy dấu ngược lại so với chương 2):

$J_{ik} < 0$ các spin sắp xếp song song có lợi về năng lượng, tương tác là FM.

$J_{ik} > 0$ các spin sắp xếp đối song song có lợi về năng lượng, tương tác là AF.

Tương tự, số hạng thứ hai trong (3.2) mô tả tương tác giữa các lân cận NNN trên nửa đường chéo với cường độ J'_{ik} , chỉ số $\langle\langle i,k \rangle\rangle$ có nghĩa lấy tổng theo các vị trí NNN và $J'_{ik} < 0$ tương tác giữa các spin là FM còn $J'_{ik} > 0$ tương tác là AF.

Số hạng cuối cùng trong (3.2) mô tả tác dụng của từ trường ngoài đặt vào hướng theo trục z.

Các tích phân trao đổi J_{ik} và J'_{ik} được coi là các biến ngẫu nhiên lấy theo quy luật phân bố xác suất như sau:

$$\begin{aligned} P(J_{ik}) &= p\delta(J_{ik} - J_1) + (1-p)\delta(J_{ik} - J_2), \\ P(J'_{ik}) &= p'\delta(J'_{ik} - J'_1) + (1-p')\delta(J'_{ik} - J'_2), \end{aligned} \quad (3.3)$$

ở đây:

$$J_1 = J(I + \Delta); J_2 = J(I - \Delta) \text{ và } J'_1 = J'(I + \Delta); J'_2 = J'(I - \Delta), \quad (3.4)$$

với $J; J'$ và $\Delta; \Delta'$ là các giá trị trung bình tương ứng với độ thăng giáng của tích phân trao đổi.

Để đơn giản trong quá trình tính toán khảo sát quá trình từ hóa của mô hình Ising AF cho mạng Shastry – Sutherland, chúng tôi lựa chọn giá trị $p = p'$ và $\Delta = \Delta'$.

Để giải phương trình tìm giá trị riêng cho Hamiltonian (3.2), phương pháp mô phỏng Monte Carlo với thuật toán Metropolis được áp dụng để mô tả quá trình lật spin trong mạng Shastry – Sutherland với điều kiện biên tuần hoàn.

3.3. Phương pháp mô phỏng Monte Carlo (MC)

3.3.1. Thuật toán Metropolis

Monte Carlo là phương pháp số lấy mẫu ngẫu nhiên trong một tập hợp thống kê ứng dụng rất nhiều trong các lĩnh vực khoa học. Trong các hệ vật lý và hóa học kích thước lớn, xác suất phức tạp thì thuật toán Metropolis [38] cho phép lấy mẫu theo một phân bố bất kỳ cho trước trở nên hiệu quả. Để làm được điều này chúng ta sẽ tiến hành theo quá trình Markov với trạng thái mới x' được sinh ra từ trạng thái ban đầu x đặc trưng bởi xác suất dịch chuyển $P(x \rightarrow x')$. Xác suất dịch chuyển $P(x \rightarrow x')$ là ma trận ngẫu nhiên thỏa mãn: $P(x \rightarrow x') \geq 0$ và $\sum_{x'} P(x \rightarrow x') = 1$.

Chuỗi Markov là tập hợp của các quá trình Markov với các bước nhảy tự do thông qua không gian pha từ $x \rightarrow x' \rightarrow x'' \rightarrow \dots$ trong đó xác suất lựa chọn trạng thái sau chỉ phụ thuộc vào trạng thái ngay trước đó. Quá trình Markov sẽ tiến dần đến phân bố cân bằng $\pi(x)$. Phân bố xác suất dịch chuyển từ trạng thái x sang trạng thái x' tiến về cân bằng khi thỏa mãn hai điều kiện:

Điều kiện thứ nhất: tính ergodic phải được thỏa mãn có nghĩa là trạng thái bất kì x' được sinh ra từ trạng thái x nào đó trong không gian cấu hình sau một số bước nhảy hữu hạn của quá trình Markov.

Điều kiện thứ hai: phân bố cân bằng $\pi(x)$ tồn tại và được xây dựng dựa trên cân bằng chi tiết với yêu cầu dịch chuyển từ trạng thái x sang trạng thái x' có thể xảy ra theo chiều đảo ngược

$$p_x P(x \rightarrow x') = p_{x'} P(x' \rightarrow x). \quad (3.5)$$

Trong đó p_x và $p_{x'}$ lần lượt là xác suất tìm thấy hệ ở trạng thái x và x' . Biến đổi từ phương trình (3.5) ta được:

$$\frac{P(x \rightarrow x')}{P(x' \rightarrow x)} = \frac{p_{x'}}{p_x}. \quad (3.6)$$

Biến đổi xác suất chuyển đổi thành hai thành phần

$$P(x \rightarrow x') = g(x \rightarrow x') A(x \rightarrow x'). \quad (3.7)$$

Ở đây, $g(x \rightarrow x')$ là xác suất lựa chọn để trạng thái x' được sinh ra từ trạng thái x và $A(x \rightarrow x')$ là xác suất chấp nhận. Phương trình (3.7) có dạng:

$$\frac{P(x \rightarrow x')}{P(x' \rightarrow x)} = \frac{g(x \rightarrow x') A(x \rightarrow x')}{g(x' \rightarrow x) A(x' \rightarrow x)}. \quad (3.8)$$

Chọn xác suất chấp nhận chuyển đổi như sau để thỏa mãn điều kiện cân bằng chi tiết

$$A(x \rightarrow x') = \min \left(1, \frac{p_{x'} g(x' \rightarrow x)}{p_x g(x \rightarrow x')} \right). \quad (3.9)$$

Phương trình (3.9) có ý nghĩa là nếu $A(x \rightarrow x') > 1$ trạng thái x biến đổi sang x' còn $A(x \rightarrow x') < 1$ thì dịch chuyển bị loại bỏ, hệ thống giữ nguyên trạng thái x .

Các bước thuật toán được thực hiện như sau:

Bước 1: Chọn ngẫu nhiên trạng thái ban đầu x của hệ thống.

Bước 2: Chọn ngẫu nhiên trạng thái x' tương ứng với phân bố $g(x \rightarrow x')$. Phân bố $g(x \rightarrow x')$ được lựa chọn tùy trường hợp cụ thể.

Bước 3: Chấp nhận dịch chuyển $x \rightarrow x'$ dựa vào điều kiện (3.9).

Bước 4: Lặp lại từ bước 2 cho đến khi N giá trị của x được tạo ra.

3.3.2. Áp dụng cho mô hình Ising

Hamiltonian của mô hình Ising truyền thống:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,k \rangle} J_{ik} S_i^z S_k^z - h \sum_{i=1}^N S_i^z. \quad (3.10)$$

Thuật toán Metropolis được áp dụng cho mô hình Ising và mô tả quá trình lật spin. Xét trong mô hình Ising hai chiều với N spin trong hệ thống. Với N spin khác nhau tương ứng với N trạng thái x' được sinh ra từ trạng thái x . Do đó có N xác suất lựa chọn $g(x \rightarrow x')$ khác 0. Trong thuật toán Metropolis, xác suất lựa chọn $g(x \rightarrow x')$

cho mỗi trạng thái có thể x' được chọn bằng nhau. Như vậy: $g(x \rightarrow x') = \frac{1}{N}$.

Điều kiện cân bằng chi tiết theo phân bố Boltzmann có dạng:

$$\frac{P(x \rightarrow x')}{P(x' \rightarrow x)} = \frac{g(x \rightarrow x')A(x \rightarrow x')}{g(x' \rightarrow x)A(x' \rightarrow x)} = \frac{A(x \rightarrow x')}{A(x' \rightarrow x)} = e^{-\beta(E_x - E_{x'})} = e^{-\beta\Delta E}. \quad (3.11)$$

Với $\beta = \frac{1}{k_B T}$ là nghịch đảo nhiệt độ, E_x và $E_{x'}$ lần lượt là năng lượng ở cấu

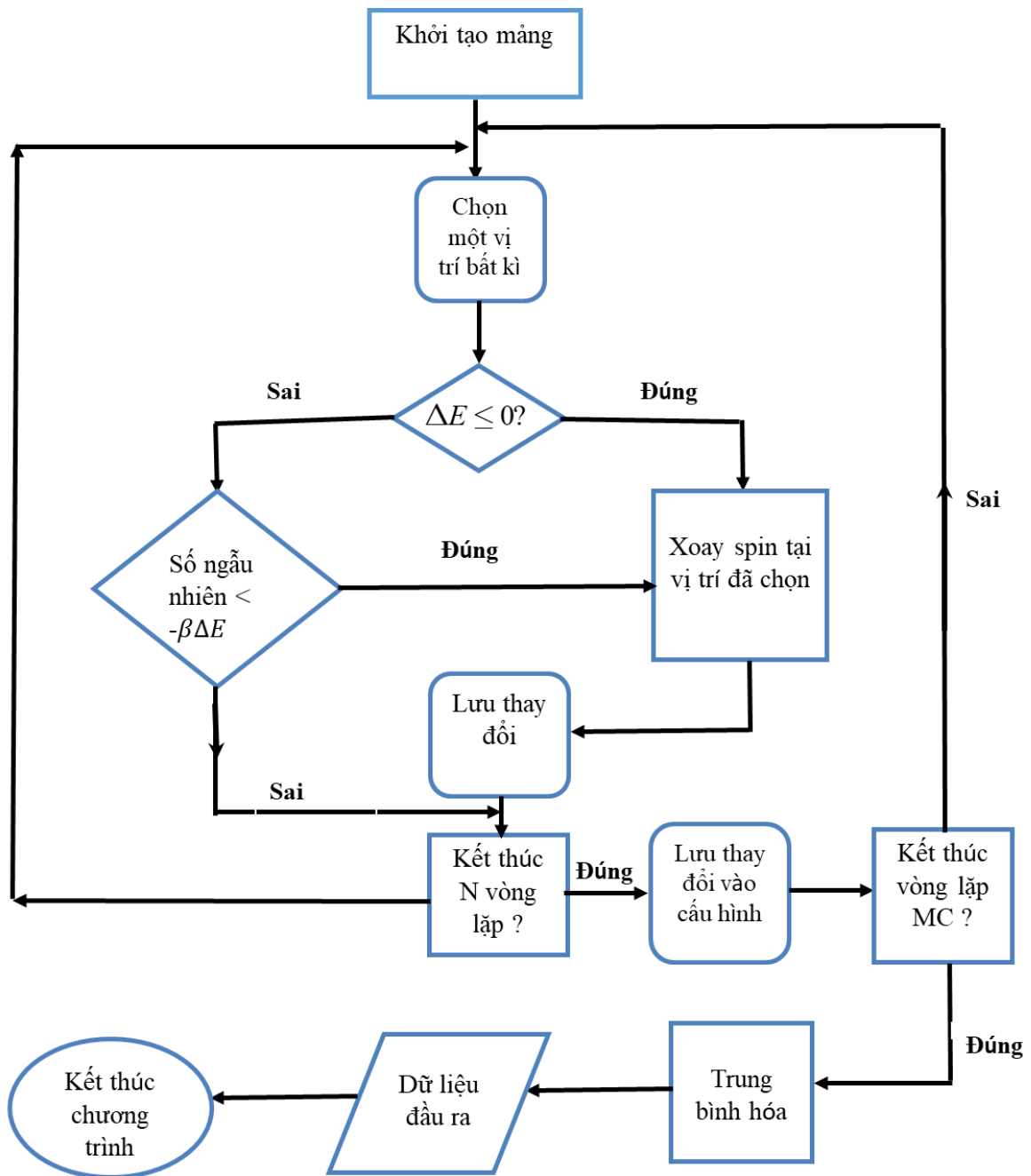
hình x và x' .

Bây giờ chúng ta sẽ lựa chọn tỷ lệ chấp nhận $A(x \rightarrow x')$ thỏa mãn phương trình cân bằng (3.9):

$$A(x \rightarrow x') = \begin{cases} e^{-\beta\Delta E} & \text{khi } \Delta E > 0. \\ 1 & \text{khi } \Delta E < 0. \end{cases} \quad (3.12)$$

Khi năng lượng của trạng thái mới thấp hơn hoặc bằng trạng thái cũ, dịch chuyển từ trạng thái x sang x' được chấp nhận với tỷ lệ bằng 1. Nếu năng lượng cao hơn, trạng thái mới được chấp nhận theo xác suất $e^{-\beta\Delta E}$.

Sơ đồ thuật toán được mô tả như trong hình 3.3 bên dưới:



Hình 3.3: Sơ đồ thuật toán Metropolis cho mô hình Ising.

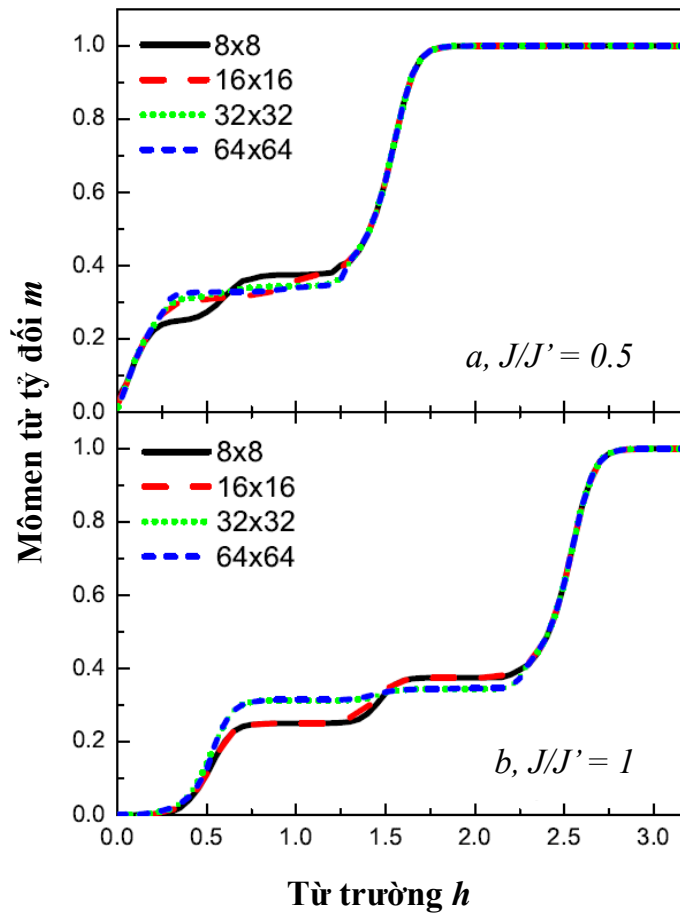
3.4. Chuyển pha trong mô hình Ising cho mạng Shastry – Sutherland

Trong phần này, chúng tôi sử dụng thuật toán Metropolis được viết trên ngôn ngữ lập trình C++ để khảo sát mô hình Ising cho mạng Shastry - Sutherland với hiệu ứng mất trật tự trong tương tác của NN và NNN theo quy luật phân bố xác suất trong công thức (3.2). Các đại lượng khảo sát trong phần này đều không có thứ nguyên, từ

trường được đo trong đơn vị J' để thấy rõ vai trò của tương tác giữa các spin NNN (có nghĩa là $h = \frac{\bar{h}}{J'}$ còn nhiệt độ $\tau = \frac{k_B T}{J'}$).

3.4.1. Kiểm tra hiệu ứng kích thước hữu hạn

Trong mô phỏng Monte Carlo, hiệu ứng kích thước hữu hạn có thể ảnh hưởng đến các kết quả tính toán. Do đó, chúng tôi tiến hành khảo sát đường cong từ hóa cho mô hình Ising trên mạng Shastry – Sutherland tiêu chuẩn ở các kích thước mạng khác nhau như trong hình 3.4.



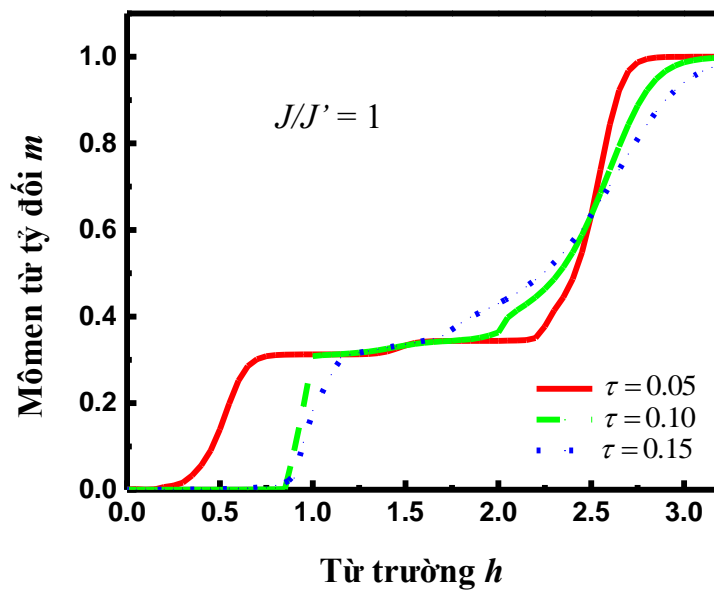
Hình 3.4: Đồ thị phụ thuộc của mômen từ tỷ đối m vào từ trường ở các kích thước mạng khác nhau với tỷ số (a) $J/J' = 0.5$ và (b) $J/J' = 1$ ở $\tau = 0.01$ trong mạng Shastry – Sutherland không có nhiễu loạn.

Tính toán giải tích chính xác trước đó [24] và một số kết quả mô phỏng [47, 82] cho mô hình mạng Shastry – Sutherland tiêu chuẩn cùng đồng thuận chỉ ra rằng

đường cong từ hóa chỉ tồn tại duy nhất một bước nhảy chính ở giá trị $m = 1/3$ của mômen từ tỷ đối. Trong hình 3.4 cho thấy rõ ràng, ở kích thước mạng nhỏ $N_s = L \times L = 8 \times 8 = 64$ vị trí và $16 \times 16 = 256$ vị trí, bước nhảy từ chính $m = 1/3$ bị phân tách thành hai bước nhảy khác nhau. Tuy nhiên khi tăng kích thước mạng lớn hơn $L \times L = 32 \times 32$ và 64×64 với cả hai trường hợp tỷ lệ tương tác J/J' trong hình 3.4 (a) và 3.4 (b) đều chỉ hình thành bước nhảy chính 1/3, so sánh kết quả này với các kết quả khảo sát trước đó [24, 47, 82] là hoàn toàn phù hợp. Như vậy, hiệu ứng kích thước hữu hạn làm ảnh hưởng đến độ chính xác của các kết quả tính toán. Nhận thấy kết quả bắt đầu hội tụ ở mạng kích thước 32×32 , chúng tôi lựa chọn thực hiện tất cả các mô phỏng ở kích thước mạng $L \times L = 32 \times 32$.

3.4.2. Ảnh hưởng của nhiệt độ lên đường cong từ hóa

Chúng tôi tiếp tục khảo sát ảnh hưởng của nhiệt độ lên đường cong từ hóa trong mô hình Ising cho mạng Shastry – Sutherland tiêu chuẩn như trong hình 3.5.



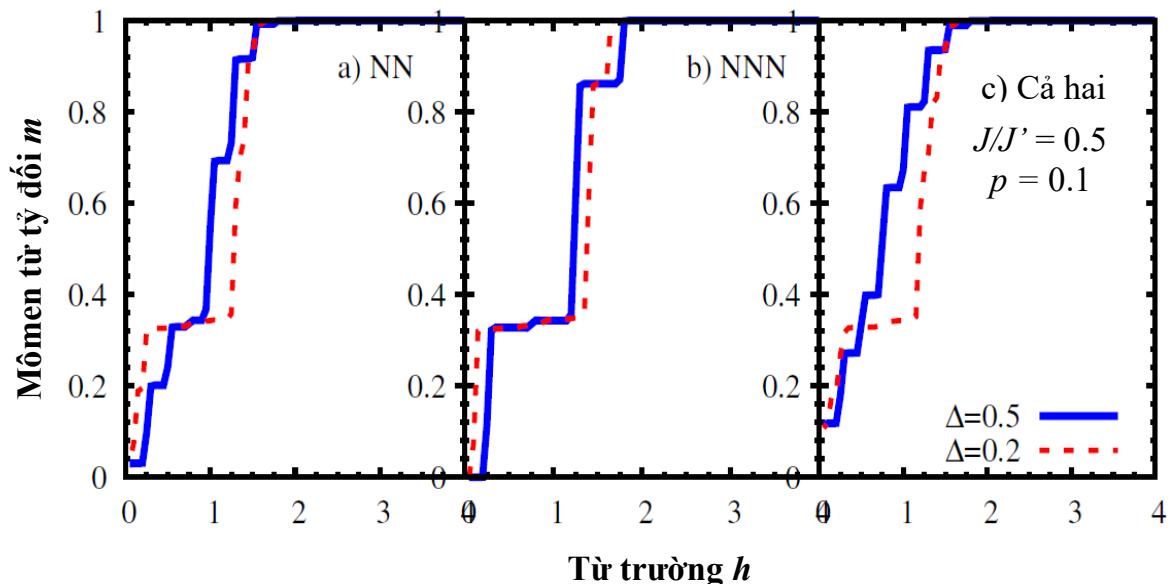
Hình 3.5: Đồ thị phụ thuộc của mômen từ tỷ đối m vào từ trường ở các nhiệt độ khác nhau với tỷ số $J/J' = 1$ trong mạng Shastry – Sutherland không có nhiễu loạn.

Ở nhiệt độ thấp $\tau = 0.05$, bước nhảy từ chính $m = 1/3$ ổn định trong vùng từ trường rộng. Khi tăng nhiệt độ lên $\tau = 0.1$ và 0.15 , bước nhảy thu hẹp dần và bị biến mất. Điều này là do tác động của năng lượng nhiệt lớn cạnh tranh với hiệu ứng của

từ trường ngoài. Khi năng lượng nhiệt vượt trội so với từ trường ngoài, bước nhảy sẽ bị triệt tiêu. Như vậy, biểu hiện từ với các bước nhảy trong mô hình Ising cho mạng Shastry – Sutherland chỉ xảy ra ở điều kiện nhiệt độ thấp, kết quả này của chúng tôi hoàn toàn phù hợp với kết quả khảo sát thực nghiệm trước đó cho vật liệu TmB_4 (thể hiện trong hình 1 (b) trong tài liệu tham khảo [94]) cũng như nghiên cứu lý thuyết (hình 3(b) trong tài liệu tham khảo [82]). Các kết quả khảo sát bước nhảy từ dưới đây đều được chúng tôi thực hiện ở giá trị nhiệt độ $\tau = 0.01$.

3.4.3. Ảnh hưởng của thăng giáng và cường độ tương tác lên đường cong từ hóa

Hình 3.6 và 3.7 chỉ ra tác động của độ mất trật tự lên sự hình thành của các bước nhảy từ khi thăng giáng Δ được chèn vào trong tương tác NN, NNN và trong cả hai loại tương tác ở xác suất $p = p' = 0.1$, nhiệt độ $\tau = 0.01$.

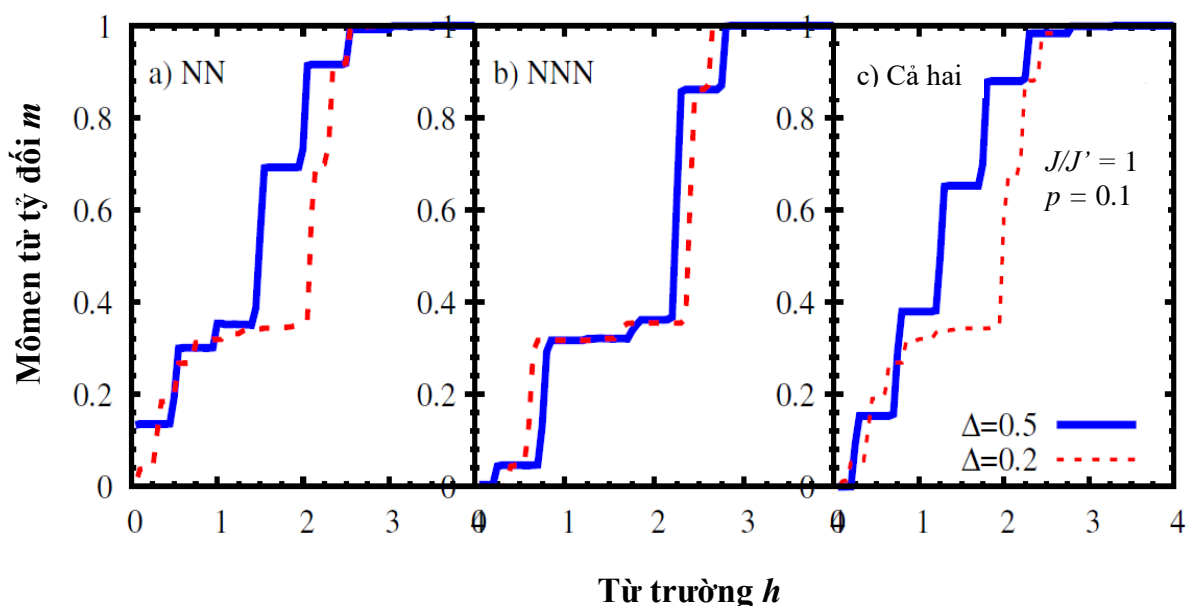


Hình 3.6: Đồ thị mômen từ tỷ đối m phụ thuộc vào trường ngoài với $J/J' = 0.5$ ở $\tau = 0.01$, $p = 0.1$ khi độ thăng giáng khác nhau được thêm vào trong các tương tác (a) NN, (b) NNN và (c) cả hai tương tác.

Trong trường hợp cường độ tương tác $J/J' = 0.5$, thăng giáng Δ nhỏ ($\Delta = 0.2$) được thêm vào trong tương tác NN, NNN và cả hai loại, đường cong từ chỉ biểu hiện duy nhất bước nhảy chính $m = 1/3$. Như vậy, nhiễu loạn nhỏ không làm ảnh hưởng đến bước nhảy trên đường cong từ hóa.

Tuy nhiên, khi tăng $\Delta = 0.5$, đường cong từ hóa thể hiện sự khác biệt rõ rệt trong các trường hợp ở hình 3.6a, b và c. Nhiễu loạn gây ảnh hưởng ít nhất lên các bước nhảy từ ở trong tương tác NNN. Rõ ràng, thêm thăng giáng vào tương tác NNN, bước nhảy từ $m = 1/3$ vẫn giữ ổn định và xuất hiện thêm một bước nhảy từ ở phía trên bước nhảy chính (quan sát hình 3.6b). Ngược lại, tác động vào trong tương tác NN (hình 3.6a) làm cho bước nhảy chính $1/3$ bị mất ổn định và sinh ra các bước nhảy nhỏ khác. Điều này là do số tương tác giữa các vị trí NN (4 vị trí NN) nhiều hơn so với tương tác NNN (1 vị trí NNN) trong một ô mạng đơn vị, do đó dao động nhỏ trong tương tác NN sẽ gây ảnh hưởng lớn đến cấu hình spin trong khi ở trường hợp tương tác NNN quá trình lật spin khó xảy ra hơn.

Thăng giáng ở trong cả hai vị trí NN và NNN có kết quả tương tự như trong trường hợp NN. Tuy nhiên, tình huống này sinh ra nhiều bước nhảy nhỏ hơn và đặc biệt bước nhảy chính $m = 1/3$ bị biến mất hoàn toàn khi thăng giáng Δ lớn ($\Delta = 0.5$).



Hình 3.7: Đồ thị mômen từ tỷ đối m phụ thuộc vào trường ngoài với $J/J' = 1$ ở $\tau = 0.01$, $p = 0.1$ khi độ thăng giáng khác nhau được thêm vào trong các tương tác (a) NN, (b) NNN và (c) cả hai tương tác.

Hình 3.7 mô tả tác động của độ mất trật tự trong các vị trí tương tác như hình 3.6 khi cường độ J/J' tăng ($J/J' = 1$). Cường độ tương tác tăng lên, số lượng bước

nhảy cũng tăng lên. Khác với kết quả trước trong hình 3.6, thêm thăng giáng vào trong tương tác NNN, bước nhảy chính $1/3$ xuất hiện duy trì trong vùng từ trường rộng hơn rất nhiều từ $h \approx 0.75$ đến $h \approx 2.5$ và một số bước nhảy nhỏ được sinh ra ở cả phía trên và dưới của bước nhảy chính (xem hình 3.7b).

Nhiều loạn có mặt trong tương tác giữa các vị trí NN làm cho bước nhảy từ chính $m = 1/3$ dần mất ổn định ngay cả trong trường hợp thăng giáng Δ nhỏ ($\Delta = 0.2$) tương tự như biểu hiện quan sát được trong hình 3.6a. Tăng độ thăng giáng Δ lên bằng 0.5, bước nhảy chính $1/3$ bị thu hẹp lại trong khoảng từ trường ngoài còn các bước nhảy nhỏ khác trở nên ổn định và mở rộng hơn. Các biểu hiện tương tự cũng được quan sát thấy trong hình 3.7c khi độ mất trật tự được thêm vào trong cả hai loại tương tác NN và NNN.

Như vậy: dựa trên tác động của thăng giáng lên đường từ hóa trong các trường hợp tương tác với tỷ lệ J/J' khác nhau, chúng tôi nhận thấy rằng bước nhảy từ chính $m = 1/3$ được duy trì ổn định khi tương tác NN chiếm ưu thế. Khi cường độ tương tác NN tăng lên, các bước nhảy từ nhỏ khác cũng được ổn định.

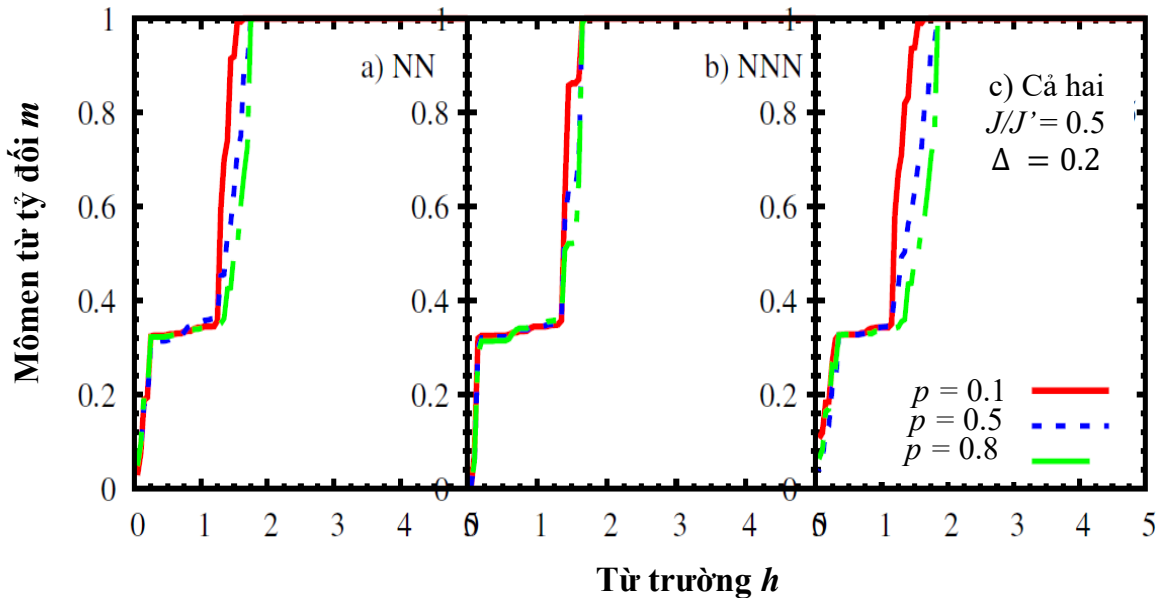
Ở đây, chúng tôi lựa chọn khảo sát cho trường hợp phân bố xác suất $p = p' = 0.1$ với mục đích lấy giá trị thấp trong các tương tác trao đổi $J_2 = J(1 - \Delta)$ trong NN và $J'_2 = J'(1 - \Delta)$ trong NNN. Tỷ lệ J/J' giảm trong tương tác NN và tăng trong tương tác NNN. Dublenych [24] đã giải chính xác bài toán mô hình mạng Shastry – Sutherland dưới tác dụng của trường ngoài và đưa ra giản đồ pha bao gồm cấu trúc hỗn hợp giữa pha Neel và pha cấu hình UUD ở bước nhảy chính $1/3$, ở đó cấu hình spin sinh ra bước nhảy từ phân số $1/n$ khi $J/J' < 0.5$. Chèn thêm thăng giáng lớn ($\Delta=0.5$) tương ứng với tỷ lệ tương tác J/J' giảm vì vậy các bước nhảy nhỏ ở giá trị $m = 1/5$ và $1/8$ xuất hiện như trong hình 3.6a và 3.7a có thể là trạng thái cơ bản của hệ thống với cấu trúc hỗn hợp. Tương tự như vậy, các bước nhảy ở phía trên bước nhảy chính có thể là trạng thái với cấu trúc lai giữa cấu hình UUD của bước nhảy $1/3$ với các pha sắt từ. Những biểu hiện này xác nhận dự đoán về các pha mất trật tự tồn tại với mômen từ tỷ đối biến đổi từ 0 đến 1 như được đề xuất trước đó bởi Dublenych [24].

Như vậy, khi độ mất trật tự tham gia lần lượt vào trong tương tác NN, NNN và cả hai loại tương tác không chỉ làm cho bước nhảy chính $1/3$ bị mất ổn định mà còn phát sinh các bước nhảy nhỏ khác trong đường từ hóa. Cường độ tương tác J/J' tăng lên góp phần làm cho các bước nhảy nhỏ ổn định hơn trong hệ thống.

3.4.4. Ảnh hưởng của phân bố xác suất lên đường cong từ hóa

Trong phần này, chúng tôi khảo sát tác động của phân bố xác suất p lên các bước nhảy từ trong trường hợp thẳng giáng $\Delta = 0.2$ và $\Delta = 0.5$ đối với cả hai trường hợp cường độ tương tác $J/J' = 0.5$ và $J/J' = 1$.

3.4.4.1. Cường độ tương tác giữa các lân cận gần nhất nhỏ $J/J' = 0.5$



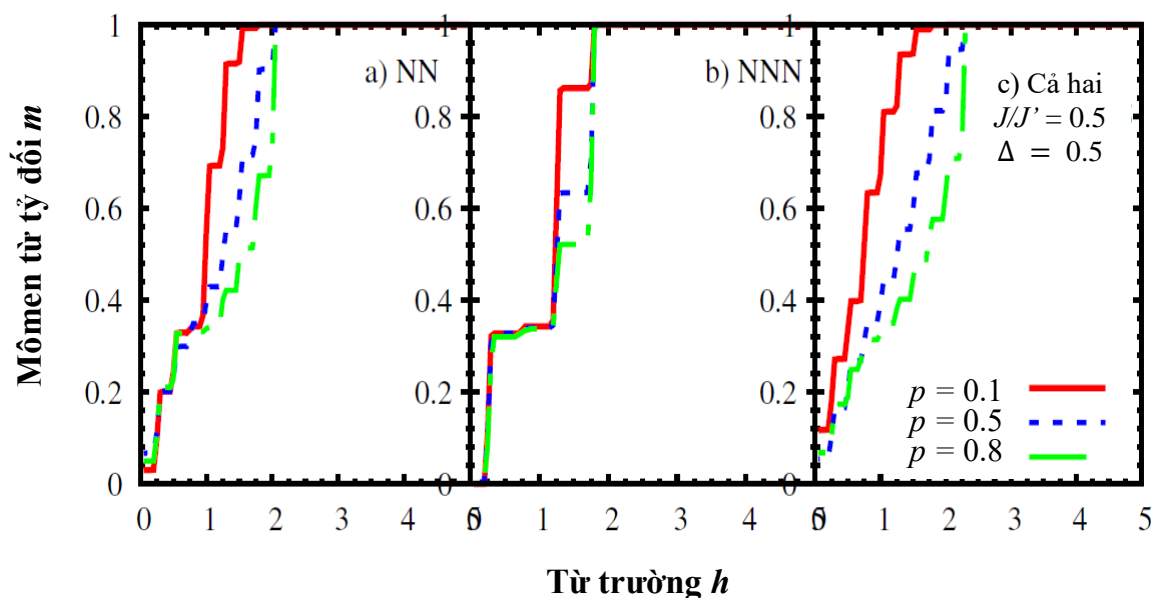
Hình 3.8: Đồ thị mômen từ tỷ đối m phụ thuộc vào trường ngoài ở các giá trị xác suất phân bố khác nhau với $J/J' = 0.5$, $\tau = 0.01$, $\Delta = 0.2$ khi độ mất trật tự được thêm vào trong tương tác NN, NNN và cả hai loại tương tác.

Hình 3.8 biểu diễn đường cong từ hóa ở các phân bố xác suất khác nhau trong trường hợp thẳng giáng Δ nhỏ ($\Delta = 0.2$), cường độ tương tác $J/J' = 0.5$. Với các tham số được chọn, cường độ tương tác trao đổi giữa các vị trí NNN vượt trội so với tương tác giữa các vị trí NN, thêm độ mất trật tự nhỏ vào bên trong tương tác NN không gây ảnh hưởng đến bước nhảy từ chính $m = 1/3$ cũng không làm phát sinh các bước

nhảy từ khác với tất cả các giá trị xác suất phân bố (hình 3.8a). Tuy nhiên, khi tăng cường độ tương tác giữa các vị trí NNN, hệ thống sinh ra bước nhảy nhỏ ở phía trên bước nhảy từ chính. Biểu hiện này phù hợp với kết quả khảo sát trong phần 3.4.3, như vậy tăng cường độ tương tác NNN sẽ gây ra bước nhảy nhỏ về phía giá trị mômen từ tỷ đối lớn.

Ban đầu, khi không có thăng giáng ở trường ngoài thấp, hệ thống chỉ có trạng thái UUD tương ứng với bước nhảy từ chính 1/3. Tăng giá trị từ trường ngoài, hệ thống được điều chỉnh từ pha UUD ở bước nhảy 1/3 sang pha FM. Như vậy, thăng giáng nhỏ tác động vào trong tương tác giữa các vị trí NN, NNN và trường hợp cả hai loại tương tác thì xác suất phân bố không gây ảnh hưởng đến tính chất từ của hệ thống.

Khi độ mất trật tự tăng lên $\Delta = 0.5$, xác suất phân bố các tương tác sẽ ảnh hưởng như thế nào đến biểu hiện từ của mô hình mạng Shastry – Sutherland? Hình 3.9 khảo sát đường cong từ hóa phụ thuộc vào các xác suất phân bố khác nhau khi thăng giáng được thêm vào trong các loại tương tác.

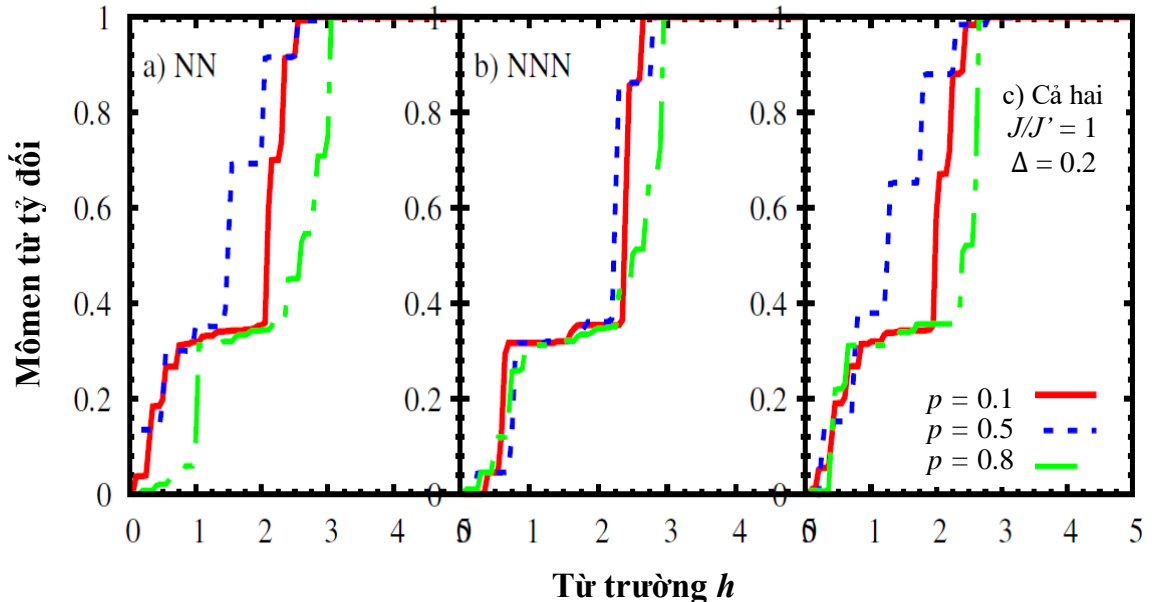


Hình 3.9: Đồ thị mômen từ tỷ đối m phụ thuộc vào trường ngoài ở các giá trị với $J/J' = 0.5$, $\tau = 0.01$, $\Delta = 0.5$ khi độ mất trật tự được thêm vào trong tương tác NN, NNN và cả hai loại.

Ở giá trị thăng giáng lớn $\Delta = 0.5$, khi thêm độ mất trật tự vào trong tương tác NNN, với các xác suất phân bố khác nhau, bước nhảy từ nhỏ đều xuất hiện ở cùng giá trị từ trường tới hạn. Tuy nhiên, khi xác suất phân bố càng lớn, bước nhảy từ nhỏ sinh ra càng gần với bước nhảy từ chính $1/3$. Ngược lại trong trường hợp thăng giáng tác động vào trong tương tác NN, xác suất lớn làm cho các bước nhảy từ càng ngày càng mất ổn định. Dấu hiệu tương tự cũng được quan sát thấy trong trường hợp thăng giáng lớn tác động vào trong cả hai loại tương tác NN và NNN. Như vậy, khi độ mất trật tự đủ lớn được thêm vào trong hệ thống, xác suất phân bố của các tương tác mới có ảnh hưởng lên các bước nhảy từ.

3.4.4.2. Cường độ tương tác giữa các lân cận gần nhất lớn $J/J' = 1$

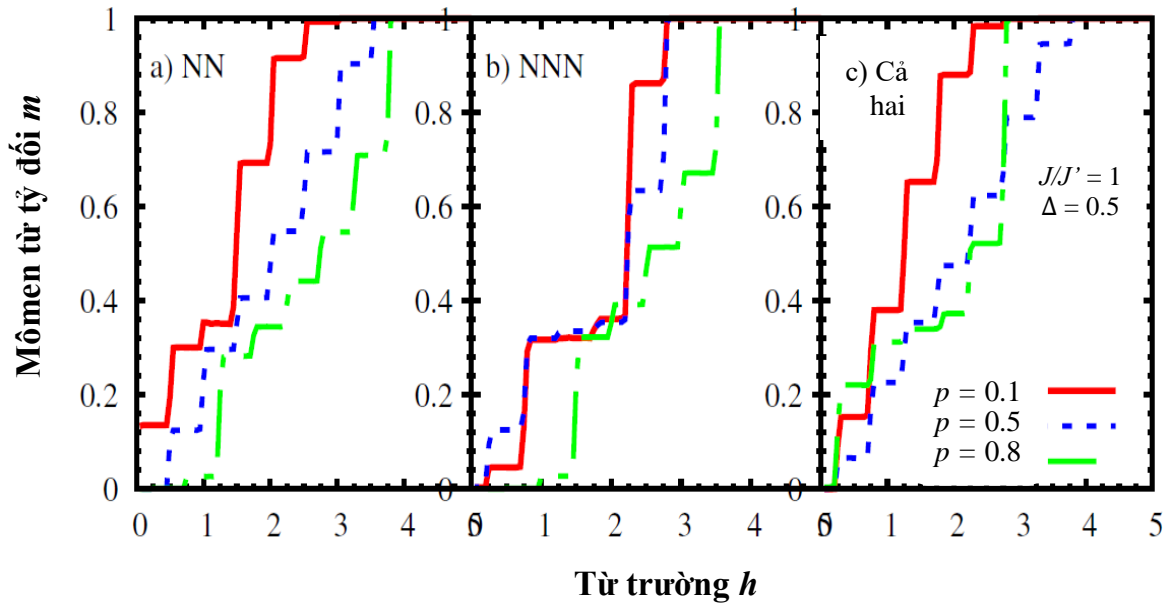
Phân tiếp theo chúng tôi tiến hành khảo sát ảnh hưởng của các xác suất phân bố lên các bước nhảy từ trong hệ thống khi tỷ lệ cường độ tương tác tăng cường $J/J' = 1$. Bắt đầu từ trường hợp thăng giáng nhỏ $\Delta = 0.2$ được thêm vào lần lượt ở các vị trí tương tác NN, NNN và cả hai loại vị trí biểu diễn trong hình 3.10 bên dưới.



Hình 3.10: Đồ thị mômen từ tỷ đối m phụ thuộc vào trường ngoài ở các giá trị xác suất phân bố khác nhau với $J/J' = 1$, $\tau = 0.01$, $\Delta = 0.2$ khi độ mất trật tự được thêm vào trong tương tác NN, NNN và cả hai loại tương tác.

Ngược lại với phần trước, biểu hiện từ trong trường hợp cường độ tương tác $J/J' = 1$ hoàn toàn khác biệt so với trường hợp $J/J' = 0.5$ ở cùng giá trị thăng giáng Δ nhỏ ($\Delta = 0.2$). Ban đầu khi không có từ trường, không có thăng giáng, hệ thống ở trạng thái Neel. Tác động từ trường và thăng giáng, hệ thống bắt đầu chuyển từ trạng thái Neel sang trạng thái UUD ở bước nhảy $1/3$ và các trạng thái sắt từ. Khi cường độ tương tác NN được tăng cường đến tỷ lệ $J/J' = 1$, tác động thăng giáng vào trong NNN ở các mật độ xác suất phân bố khác nhau hầu như không làm ảnh hưởng nhiều đến trạng thái của hệ thống. Bước nhảy chính $1/3$ vẫn được duy trì ổn định kèm theo bước nhảy từ nhỏ. Tuy nhiên, thăng giáng Δ nhỏ tác động vào trong tương tác giữa các vị trí NN nhưng giá trị xác suất phân bố khác nhau sinh ra các biểu hiện từ hoàn toàn khác nhau. Xác suất phân bố p nhỏ ($p = 0.1$) tác động vào trong tương tác giữa các vị trí NN sinh ra số bước nhảy nhỏ nhiều hơn so với trường hợp xác suất thăng giáng lớn ($p = 0.8$). Các bước nhảy nhỏ này chỉ tồn tại trong vùng hẹp của từ trường. Còn ở giá trị xác suất phân bố của các tương tác cạnh tranh cân bằng $p = 0.5$, bước nhảy từ chính $m = 1/3$ biến mất, thay vào đó là các bước nhảy từ khác ổn định trong khoảng từ trường rộng hơn so với hai trường hợp xác suất $p = 0.1$ và $p = 0.8$. Tính chất này cũng được tìm thấy trong trường hợp tác động thăng giáng vào trong cả hai loại tương tác NN và NNN.

Cuối cùng, chúng tôi tiến hành khảo sát cho trường hợp tỷ lệ cường độ tương tác J/J' và thăng giáng Δ tăng cường. Hình 3.11 chỉ ra sự ảnh hưởng của các giá trị xác suất phân bố khác nhau lên đường cong từ hóa của hệ thống.

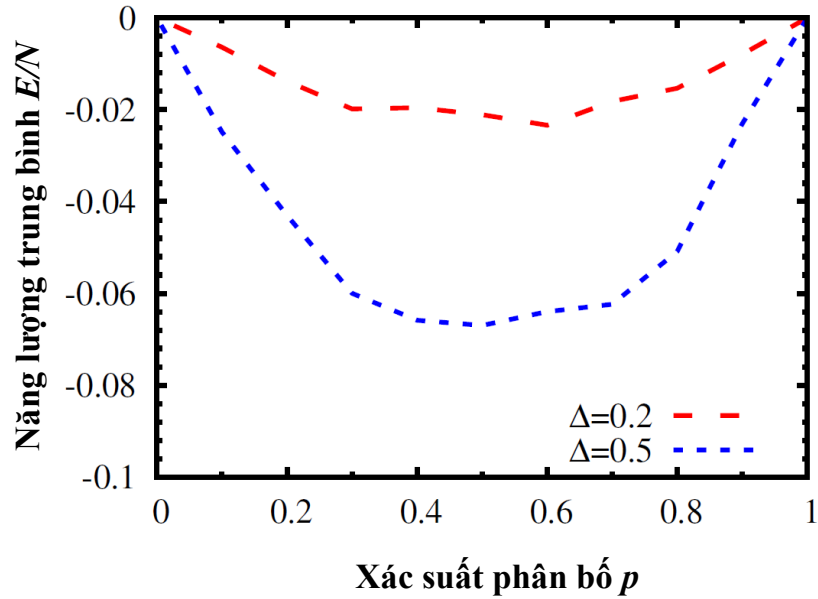


Hình 3.11: Đồ thị mômen từ tỷ đối m phụ thuộc vào trường ngoài ở các giá trị xác suất phân bố khác nhau với $J/J' = 1$, $\tau = 0.01$, $\Delta = 0.5$ khi độ mất trật tự được thêm vào trong tương tác NN, NNN và cả hai loại tương tác.

Hình 3.11 cho thấy khi cường độ tương tác NN cùng với thăng giáng lớn được thêm vào trong cả 3 trường hợp a, b, c làm cho các bước nhảy từ ổn định hơn so với các trường hợp khi $\Delta = 0.2$ với mọi giá trị xác suất khảo sát. Giá trị xác suất phân bố khác nhau tác động đến số lượng và vị trí của các bước nhảy được sinh ra trong từ trường. Ở giá trị xác suất lớn $p = 0.8$, các bước nhảy có xu hướng xảy ra ở phía từ trường lớn.

3.4.5. Khảo sát năng lượng của hệ thống

Để kiểm tra sự ổn định của trạng thái cơ bản trong mô hình Shastry – Sutherland mất trật tự, chúng tôi khảo sát sự phụ thuộc của năng lượng trung bình (trong thang năng lượng $J' = 1$) tính trên một spin vào xác suất p khi không có trường ngoài và biểu diễn kết quả trên hình 3.12.



Hình 3.12: Đồ thị năng lượng trung bình tính trên một spin (trong đơn vị $J'=1$) phụ thuộc vào xác suất p với $J/J' = 0.5$, $\tau = 0.01$, $h = 0$ khi thăng giáng được thêm vào cả trong tương tác ở cả vị trí NN và NNN.

Xác suất phân bố $p = 0$ và 1 tương ứng hệ thống nằm trong trạng thái không có nhiễu loạn. Từ hình 3.12 có thể thấy, ở mọi giá trị xác suất năng lượng trung bình của hệ thống nằm ở trạng thái cân bằng thấp hơn so với trường hợp không có thăng giáng. Năng lượng trung bình bên trong hệ thống giảm đi khi thăng giáng bên trong hệ thống tăng lên từ $\Delta = 0.2$ tới $\Delta = 0.5$. Như vậy, độ mất trật tự có thể ổn định trạng thái cơ bản của mô hình Ising cho mạng Shastry – Sutherland tiêu chuẩn.

Với mong muốn giải thích được nguồn gốc các bước nhảy từ hóa phân số, áp dụng mô hình Ising cổ điển trên mạng Shastry – Sutherland, chúng tôi chỉ ra rằng dưới sự hỗ trợ của tương tác NN là J và NNN là J' , bước nhảy từ chính $1/3$ được hình thành và ổn định phù hợp với quan sát thực nghiệm cho vật liệu $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ [52, 61] và RB_4 [105, 106] cũng như các khảo sát lý thuyết trước đó [18, 47]. Đặc biệt, các nghiên cứu trong trường hợp mô hình Ising gốc với tương tác J và J' đồng nhất chỉ ra sự tồn tại ba trạng thái cơ bản dưới sự xuất hiện của trường ngoài là pha AF có giá trị mômen từ tỷ đối $m = 0$, pha FM với mômen từ tỷ đối $m = 1/3$ và trạng thái sắt từ bão hòa $m = 1$. Đường cong từ của mô hình gốc chỉ có một bước nhảy duy nhất tương

ứng với quá trình chuyển pha xảy ra tại giá trị $m = 1/3$. Tuy nhiên, thực nghiệm đo cho vật liệu TmB_4 [94] và ErB_4 [71] bước nhảy $1/3$ hoàn toàn bị biến mất hoặc bị thay thế bởi các bước nhảy nhỏ khác trong TbB_4 [106] hay HoB_4 [15], điều này có nghĩa là mô hình mạng Shastry – Sutherland dị hướng thông thường không đủ để giải thích các tính chất từ xảy ra trong các hợp chất tetraboxide đất hiếm RB_4 . Như vậy, để có thể mô tả được sự xuất hiện của các bước nhảy khác, một mô hình Ising mở rộng là cần thiết. Biến đổi các tham số trong mô hình Ising cho mạng Shastry – Sutherland cụ thể là thay đổi cường độ tương tác J và J' với xác suất thẳng giáng p cùng độ thẳng giáng Δ , chúng tôi đã tìm thấy sự phụ thuộc của số bước nhảy cũng như giá trị của các bước nhảy vào các tham số trên (ví dụ có thể thấy bước nhảy $1/2$ được thành ở giá trị xác suất thẳng giáng $p = 0.8$ và cường độ thẳng giáng $\Delta = 0.5$ như trong hình 3.9 và 3.11). Có thể thấy rằng, cạnh tranh trong tương tác giữa các vị trí NN và NNN là nguồn gốc cơ bản hình thành nên các bước nhảy từ phân số. Sự hình thành của chuỗi các bước nhảy từ trong mô hình Ising thẳng giáng trong mạng Shastry – Sutherland là kết quả có giá trị để từ đó có thể định hướng xây dựng được mô hình lý thuyết vì mô phù hợp mô tả và giải thích được sự hình thành của đầy đủ bước nhảy từ ở trong quan sát thực nghiệm cho các vật liệu tetraboxid đất hiếm RB_4 .

Kết luận chương 3

Sử dụng phương pháp MC với thuật toán Metropolis để khảo sát cho mô hình Ising có cạnh tranh tương tác trên mạng Shastry – Sutherland, các kết quả chúng tôi thu được trong chương này là:

Đã chỉ ra ảnh hưởng của xác suất thắng giáng p , độ lớn của thắng giáng tương tác Δ và tỷ số giữa các tương tác NN/NNN lên đáng điều của quá trình từ hóa loại 1 tương ứng với các bước nhảy trong đường cong từ hóa.

Thắng giáng Δ nhỏ ($\Delta = 0.2$) được thêm vào trong các vị trí tương tác ở cả hai trường hợp tỷ lệ J/J' bằng 0.5 và 1 đều không làm ảnh hưởng đến bước nhảy từ chính $m = 1/3$ tương đương với cấu hình spin UUD. Bước nhảy từ chính 1/3 vẫn giữ ổn định khi thắng giáng Δ lớn ($\Delta = 0.5$) được thêm vào trong các vị trí NNN. Tuy nhiên, thắng giáng lớn tác động vào trong NN và trường hợp cả hai loại tương tác làm cho bước nhảy từ chính 1/3 bị mất ổn định và phát sinh nhiều bước nhảy từ nhỏ khác. Các bước nhảy từ nhỏ ngày càng ổn định hơn khi tỷ lệ tương tác J/J' tăng.

Khi khảo sát tác động của xác suất phân bố lên đường cong từ hóa, tương tự như trong mô hình Ising, các bước nhảy từ có xu hướng xảy ra ở phía từ trường tới hạn lớn khi xác suất phân bố tăng.

Kiểm tra sự phụ thuộc của năng lượng trung bình vào xác suất phân bố, chúng tôi nhận thấy năng lượng trung bình của hệ thống nhiễu loạn luôn nằm ở mức thấp hơn khi không có nhiễu loạn. Điều này chứng tỏ rằng, hệ thống có thắng giáng vẫn nằm ở trạng thái cơ bản ổn định.

Hầu hết các kết quả của chương 3 được công bố trong công trình [3].

CHƯƠNG 4: CHUYỂN PHA TRONG MÔ HÌNH HẠT BOSON BOSE – HUBBARD DƯỚI TÁC DỤNG CỦA THỂ NĂNG GHIM TUẦN HOÀN

Trong chương 2 và chương 3, biểu hiện chuyển pha từ thứ vị của một số vật liệu ví dụ như các perovskite Mangan pha tạp hay các tetrabooxit đất hiếm được khảo sát dựa trên mô hình Ising có cạnh tranh tương tác. Mặc dù bài toán mô hình không thể mô tả được mọi yếu tố bên trong của các vật liệu phức tạp đó nhưng cung cấp được cái nhìn cơ bản về nguồn gốc cơ chế hình thành tính chất vật lý của hệ. Dưới tác dụng của trường ngoài kết hợp với sự cạnh tranh của các cường độ tương tác đã làm cho trật tự của hệ thống bị phá vỡ ở nhiệt độ thấp. Đặc biệt, khi nhiệt độ giảm xuống không độ tuyệt đối, cạnh tranh giữa các tương tác lượng tử càng nổi bật, đóng vai trò quyết định trong sự hình thành các pha lượng tử và thúc đẩy quá trình chuyển pha lượng tử xảy ra. Trong chương 4 này, luận án tập trung vào nghiên cứu sự hình thành của các pha lượng tử dị thường và quá trình chuyển pha xung quanh các pha lượng tử dưới tác dụng của trường ngoài tuần hoàn làm phá vỡ đối xứng của hệ. Đối tượng được khảo sát ở đây là mô hình Bose – Hubbard cho các hạt boson và có thể ánh xạ sang các mô hình spin tương ứng.

4.1. Mô hình Bose – Hubbard

4.1.1. Đặc tính vật lý của mô hình

Mô hình Bose-Hubbard là mô hình mô tả thành công cho hệ thống hạt boson trong các vật liệu tương quan mạnh. Mô hình này được Gersch và Knollman giới thiệu lần đầu tiên vào năm 1963 [59]. Đến năm 1989, Fisher và các cộng sự tiến hành các nghiên cứu lý thuyết chi tiết hơn [30]. Bức tranh pha của mô hình ở 0 Kelvin chứa hai pha là pha SF và điện môi Mott (MI) , bị phân tách bởi chuyển pha lượng tử. Hamiltonian của mô hình có dạng:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + H.c.) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i, \quad (4.1)$$

trong đó: t là tham số nhảy của hạt boson giữa các lân cận gần nhất,

\hat{a}_i^\dagger và \hat{a}_i lần lượt là toán tử sinh hủy hạt boson ở vị trí thứ i ,

$\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ là toán tử số hạt boson ở vị trí thứ i .

U chỉ cường độ tương tác của các hạt boson trên cùng một nút mạng.

$U > 0$ ứng với tương tác đẩy còn $U < 0$ ứng với tương tác hút.

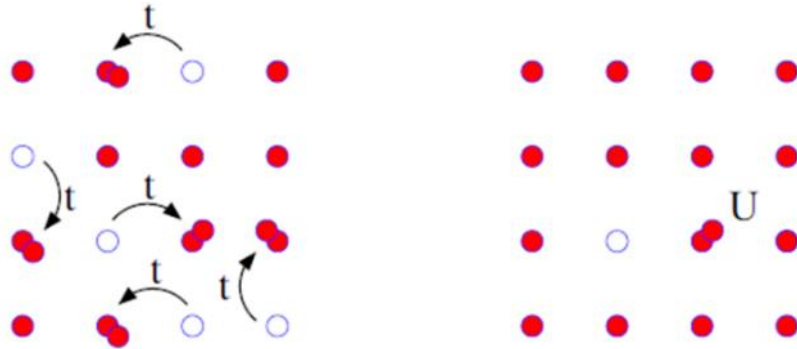
μ là thế hóa học.

Kí hiệu $\langle i, j \rangle$ có nghĩa là lấy tổng trên các vị trí NN.

Hình (4.1) là minh họa cho các số hạng của phương trình (4.1).

Trong Hamiltonian (4.1) trường hợp tương tác giữa các hạt trên cùng một nút mạng $U \rightarrow \infty$ là tương đương với mô hình boson lõi cứng (chỉ cho phép duy nhất một boson trên mỗi nút mạng). Mật độ hạt trung bình trên một nút mạng được tính bởi công thức $\rho = \frac{N}{N_s}$ (với N là số hạt boson trong hệ thống, N_s là số nút mạng) sẽ biến đổi trong khoảng $[0, 1]$.

Khi cường độ tương tác U có giá trị hữu hạn khác 0, Hamiltonian (4.1) tương ứng với mô hình hạt boson lõi mềm với nhiều hơn một boson nằm trên cùng một nút mạng. Trường hợp này mật độ hạt ρ của hệ thống luôn lớn hơn 1.



Hình 4.1: Minh họa ý nghĩa của số hạng động năng t và thế năng tương tác U của Hamiltonian mô hình Hubbard.

Các toán tử sinh hủy hạt boson tuân theo các quy tắc giao hoán:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij}, \quad [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_i^\dagger] = [\hat{a}_i, \hat{a}_i] = 0 \quad \text{với } \forall i, j. \quad (4.2)$$

Toán tử sinh hủy hạt boson tác động lên hàm cơ sở riêng của toán tử số hạt ở vị trí thứ i như sau:

$$\begin{aligned}\hat{a}_i^\dagger |\hat{n}_i\rangle &= \sqrt{n_i + 1} |n_i + 1\rangle, \\ \hat{a}_i |\hat{n}_i\rangle &= \sqrt{n_i} |n_i - 1\rangle.\end{aligned}\tag{4.3}$$

Số hạng đầu của Hamiltonian (4.1) là số hạng động năng mô tả quá trình nhảy của các hạt boson giữa các vị trí NN trong hệ thống. Khi một hạt hủy ở vị trí j thì sẽ có một hạt được sinh ra ở vị trí i . Số hạng thứ hai là thế năng tương tác giữa các hạt, đóng vai trò định xứ các hạt ở mỗi nút mạng. Số hạng cuối cùng của Hamiltonian có ý nghĩa điều khiển số hạt của hệ thống.

Hamiltonian Bose-Hubbard (4.1) có hai vùng giá trị tham số với tính chất khác biệt:

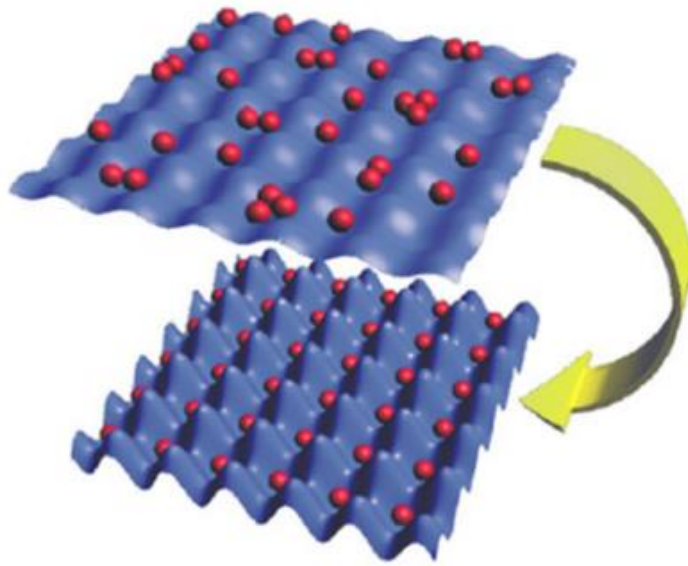
- ✓ Khi $U \gg t$, các hạt bị định xứ trong không gian, hệ thống tương quan mạnh ở trong trạng thái MI với hệ số lấp đầy tương ứng với số nguyên hạt n trên mỗi nút mạng. Hàm sóng của hệ thống ở trạng thái MI cơ bản là tích của các trạng thái Fock địa phương trên mỗi nút mạng:

$$|\Phi_{Mott}\rangle_{t=0} = \prod_i^L (\hat{a}_i^\dagger)^n |0\rangle\tag{4.4}$$

Với L là kích thước mạng và $|0\rangle$ là trạng thái chân không.

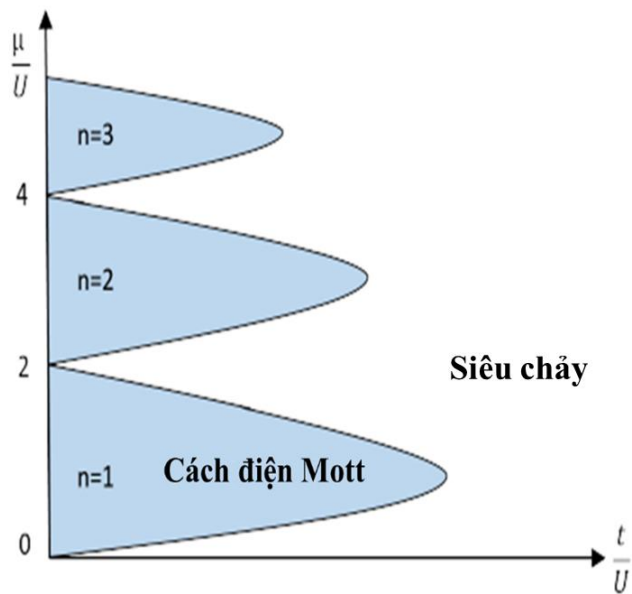
- ✓ Khi $t \gg U$, trạng thái cơ bản của Hamiltonian được mô tả bởi hàm sóng đơn hạt của N hạt boson trải rộng trên toàn mạng kích thước L . Trong trường hợp này các hạt không bị định xứ, hệ thống nằm trong trạng thái SF.

$$|\Phi_{SF}\rangle_{U=0} = \left(\sum_i^L \hat{a}_i^\dagger \right)^N |0\rangle\tag{4.5}$$



Hình 4.2: Hình ảnh biểu diễn pha SF (hình trên) và pha điện môi Mott (hình dưới) của các hạt boson trên mạng quang học [41].

Bức tranh pha cơ bản của mô hình biểu hiện chuyển pha lượng tử giữa pha SF và MI (xem hình 4.2) được khai thác rất nhiều bằng phương pháp giải tích (xem chi tiết giải tích trong tài liệu tham khảo [5, 88]) cũng như phương pháp số [91].



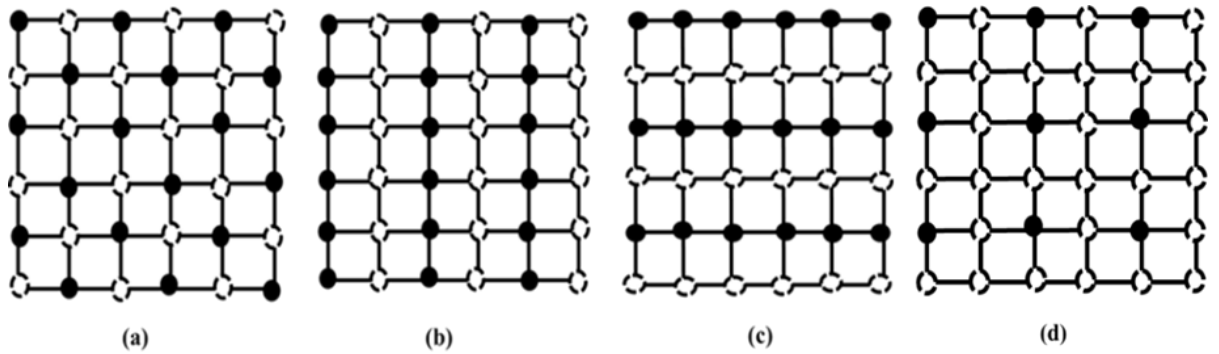
Hình 4.3: Bức tranh pha cơ bản của mô hình Bose-Hubbard [39].

Ở giá trị t/U nhỏ, động năng của hạt nhỏ so với thế năng tương tác nên hệ thống nằm trong pha MI. Khi đạt đến một giá trị tới hạn nhất định của tỷ lệ $(t/U)_c$, năng lượng động năng tăng lên vượt qua thế năng tương tác, hệ thống trải qua chuyển pha lượng tử từ trạng thái MI sang trạng thái SF (xem hình 4.3). Quá trình chuyển pha đi kèm với sự thay đổi rõ rệt trong phổ kích thích của hệ thống, ở trạng thái SF, phổ kích thích không có khe năng lượng [88]. Khi tăng (hoặc giảm) thế hóa học tại giá trị t/U cố định trong pha MI, tương ứng với sự thêm các hạt (hoặc loại bỏ hạt sinh ra lỗ trống), các hạt (lỗ trống) được thêm vào di chuyển tự do trong hệ thống. Xét về mặt năng lượng động năng cân bằng với thế năng tương tác. Các hạt (lỗ trống) lập tức ngưng tụ Bose – Einstein hình thành pha SF [88].

4.1.2. Mô hình Bose-Hubbard mở rộng

Pha SS là một pha lượng tử dị thường chứa đồng thời hai tham số trật tự là DLRO tương ứng với cấu trúc tinh thể và ODLRO tương ứng tính chất SF. Các nghiên cứu về pha SS thực sự bùng nổ sau khi Andreev – Lifshitz [43] và Chester [43] đưa ra đề xuất dao động tại 0 K trong các tinh thể lượng tử cho phép tồn tại pha SS. Các khuyết tật trong hệ thống là khuyết tật lỗ trống hoặc khuyết tật giữa nút có thể di chuyển tự do và ngưng tụ Bose – Einstein ở nhiệt độ thấp mà không phá hủy cấu trúc tinh thể, đó chính là pha SS. Phát hiện này đã trở thành hướng đi mới cho các nghiên cứu lý thuyết, thực nghiệm cũng như mô phỏng trong công cuộc tìm kiếm pha SS.

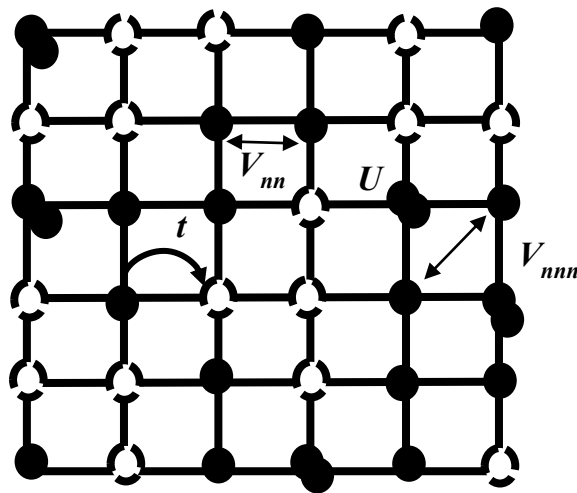
Hamiltonian (4.1) biểu hiện tính chất động lực học của các hạt boson với bức tranh pha cơ bản thể hiện hai trạng thái là pha SF và pha MI, đặc biệt không có pha tinh thể trong mô hình này. Với mong muốn tìm kiếm pha SS ở cấu trúc tinh thể cũng như lân cận vùng cấu trúc tinh thể theo như một số đề xuất trước đó [43], các số hạng khác được thêm vào để tăng cường khả năng định xứ của các hạt boson để có thể hình thành cấu trúc tinh thể. Sự định xứ của các hạt boson có thể được phát sinh từ tương tác giữa chúng hoặc sinh ra dưới tác dụng của thế năng bên ngoài ghim các hạt ở các vị trí xác định. Hình 4.4. minh họa một số cấu trúc tinh thể hình thành trong hệ thống khi tương tác lân cận gần nhì được thêm vào.



Hình 4.4: Phác họa cấu hình cấu trúc tinh thể (a) dạng ô bàn cờ, (b) và (c) dạng sọc và (d) dạng sao.

Trong trường hợp chỉ có tương tác giữa các vị trí NN, để chống lại quá trình phân tách pha và hỗ trợ hình thành pha SS thì cường độ tương tác giữa các hạt trên cùng một vị trí U được xác nhận là yếu tố cần thiết (trường hợp này tương ứng với mô hình hạt boson lõi mềm) [76, 92]. Hàng loạt các kết quả giải tích cũng như mô phỏng xác nhận sự tồn tại của pha SS trong các mô hình mạng hai chiều [9, 10, 11, 75, 76, 92], mạng ba chiều [63, 74] cho thấy các cường độ tương tác giữa các hạt đóng một vai trò rất quan trọng trong quá trình hình thành pha SS.

Ngoài yếu tố tương tác thì thế năng ngoài tuần hoàn cũng được chứng minh là chìa khóa quan trọng góp phần làm định xứ các hạt boson vào trong các cấu trúc tinh thể, xuất hiện pha SS [21, 22].



Hình 4.5: Mô hình mạng boson tương tác lõi mềm.

Hamiltonian mở rộng cho các hạt boson khi có thêm tương tác tầm xa NN và NNN dưới tác dụng của trường ngoài có dạng:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + H.c.) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + V_{nn} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j + V_{nnn} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j - \sum_i (\mu + \mu_i) \hat{n}_i. \quad (4.6)$$

Ở đây, tham số nhảy của hạt giữa các nút mạng t được chọn bằng 1, μ là thế hóa học trung bình còn μ_i là thế năng ghim hạt trên mỗi nút mạng. μ_i có giá trị lần lượt là 0 và ε ở trên các vị trí nút mạng xác định, V_{nn} là tương tác giữa các vị trí NN, V_{nnn} là tương tác giữa các vị trí NNN. Hình 4.5 minh họa cho các số hạng của Hamiltonian (4.6).

4.2. Phương pháp Monte Carlo lượng tử (QMC)

Đối với hệ hạt boson tương quan mạnh, cạnh tranh tương tác và các thăng giáng lượng tử đóng vai trò quan trọng trong quá trình hình thành các pha lượng tử dị thường. Do đó, phương pháp QMC là phương pháp tối ưu cho phép mô phỏng được các thăng giáng lượng tử cho các hệ có kích thước lớn.

Công thức tích phân đường Feynman [29] trong cơ học lượng tử thống kê đóng vai trò chính trong việc phát triển các phương pháp mô phỏng QMC. Vào khoảng cuối những năm thập niên 70 đầu 80 của thế kỷ trước, một số các phương pháp MC áp dụng cho các mô hình lượng tử như mô hình spin và các mô hình mạng ở nhiệt độ hữu hạn phát triển mạnh dựa trên khai triển Trotter [102] của toán tử $e^{-\mathcal{H}/T}$ với T là nhiệt độ tuyệt đối còn \mathcal{H} là Hamiltonian của mô hình. Đặc biệt vào năm 1976, Suzuki [98] nhận ra hàm phân bố của hệ thống d chiều spin 1/2 lượng tử có thể ánh xạ lên mô hình Ising cổ điển $(d + 1)$ chiều với các tương tác đặc biệt cho phép mô phỏng các mô hình mạng lượng tử bất kì. Các spin lượng tử được ánh xạ lên các “đường thế giới” (world line) cổ điển, thuật toán Metropolis [38] được sử dụng để cập nhật các cấu hình.

4.2.1. Tích phân đường

Theo lý thuyết thống kê cổ điển, trung bình nhiệt động của một đại lượng A bất kì có thể ước lượng được trong mô phỏng MC cổ điển có dạng:

$$\langle A \rangle_{classical} = \frac{\sum_x A_x e^{-\beta E_x}}{\sum_x e^{-\beta E_x}}. \quad (4.7)$$

Trong mô phỏng QMC, trung bình cổ điển được thay thế bởi trung bình thống kê lượng tử:

$$\langle A \rangle = \frac{Tr \{ A e^{-\beta \mathcal{H}} \}}{Tr \{ e^{-\beta \mathcal{H}} \}}. \quad (4.8)$$

Công thức tích phân đường được bắt đầu từ việc phân tích nghịch đảo nhiệt độ thành các khoảng vô cùng bé $\beta = M \Delta \tau$ với M là số “lát thời gian” ($M \rightarrow \infty$) và $\Delta \tau$ là bước thời gian. Hàm tổng thống kê Z được biểu diễn lại dưới dạng:

$$\begin{aligned} Z &= Tr \{ e^{-\beta \mathcal{H}} \} = Tr \left\{ \prod_{i=1}^M e^{-\Delta \tau \mathcal{H}} \right\}, \\ Z &= \sum_{i_1, \dots, i_M} \langle i_1 | e^{-\Delta \tau \mathcal{H}} | i_2 \rangle \langle i_2 | e^{-\Delta \tau \mathcal{H}} | i_3 \rangle \dots \langle i_M | e^{-\Delta \tau \mathcal{H}} | i_1 \rangle, \end{aligned} \quad (4.9)$$

trong đó $|i_k\rangle$ là tập hợp các trạng thái cơ sở trực giao.

Yếu tố ma trận $e^{-\beta \mathcal{H}}$ rất khó để ước lượng, do đó chúng ta có thể sử dụng xấp xỉ để ước lượng yếu tố ma trận $e^{-\Delta \tau \mathcal{H}}$ khi $\Delta \tau$ rất nhỏ và M rất lớn. Khi đó chúng ta có thể tính phân bố của các đường thời gian tuần hoàn khác nhau $i_1 \rightarrow i_2 \rightarrow \dots \rightarrow i_M \rightarrow i_1$ mà hệ thống có thể tiến triển trong cơ sở đã chọn. Trong QMC, các đường là mẫu quan trọng theo phân bố trong công thức (4.9). Có thể coi công thức (4.9) là ánh xạ của hệ d chiều lượng tử sang hệ $(d+1)$ chiều cổ điển tương đương với chiều mới là thời gian ảo β . Sự tiến triển của một phần tử trong thời gian ảo xác định đường đi của nó còn được gọi là “đường thế giới” (world line).

Sử dụng khai triển Taylor cho số mũ của hàm phân bố :

$$e^{-\Delta \tau \mathcal{H}} = (1 - \Delta \tau \mathcal{H}) + O(\Delta \tau^2). \quad (4.10)$$

Từ công thức (4.9), hàm tổng thống kê (4.4) được viết lại như sau:

$$Z = \sum_{i_1, \dots, i_M} \langle i_1 | 1 - \Delta \tau \mathcal{H} | i_2 \rangle \langle i_2 | 1 - \Delta \tau \mathcal{H} | i_3 \rangle \dots \langle i_M | 1 - \Delta \tau \mathcal{H} | i_1 \rangle + O(\Delta \tau^2). \quad (4.11)$$

Tổng thống kê biểu diễn theo công thức (4.11) được gọi là biểu diễn tích phân đường. Chú ý rằng hiệu quả của thuật toán MC phụ thuộc vào cách lấy mẫu hàm phân bố. Các thuật toán khác nhau sử dụng các cách tiếp cận khác nhau để lấy mẫu hàm phân bố.

4.2.2. Thuật toán Worm cho mạng boson

4.2.2.1. Biểu diễn tích phân đường cho mạng boson

Hamiltonian Bose – Hubbard mở rộng (4.6) cho mạng kích thước L được tách thành hai số hạng động năng K và thế năng tương tác V :

$$\mathcal{H} = K + V, \quad (4.12)$$

với:

$$K = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + H.c.), \quad (4.13)$$

$$V = \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + V_{nn} \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j + V_{mm} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j - \sum_i (\mu + \mu_i) \hat{n}_i. \quad (4.14)$$

Biểu diễn K, V trong cơ sở Fock của số vị trí với số hạt chiếm giữ n_i :

$$|\alpha\rangle = |\{n_i\}\rangle$$

$$K|\alpha\rangle = \sum_{\varphi \neq \alpha} K_{\varphi\alpha} |\varphi\rangle; K_{\alpha\alpha} = 0; V|\alpha\rangle = V_\alpha |\alpha\rangle. \quad (4.15)$$

Hàm tổng thống kê Z cho hệ thống có dạng:

$$Z = \sum_{\{\alpha_i\}} \langle \alpha_L | e^{-\mathcal{H}d\tau} | \alpha_{L-1} \rangle \dots \langle \alpha_1 | e^{-\mathcal{H}d\tau} | \alpha_0 \rangle. \quad (4.16)$$

Theo điều kiện biên tuần hoàn $\alpha_0 = \alpha_L$. Sử dụng xấp xỉ trong giới hạn $d\tau$ vô cùng nhỏ:

$$e^{-\mathcal{H}d\tau} = 1 - \mathcal{H}d\tau + O(d\tau^2) = 1 - Kd\tau - Vd\tau + O(d\tau^2). \quad (4.17)$$

Trọng số cấu hình chéo và không chéo theo cơ sở số hạt được đánh giá như sau:

$$\begin{aligned} W_d &= \langle \alpha | e^{-\mathcal{H}d\tau} | \alpha \rangle \approx e^{-V_\alpha d\tau}, \\ W_o &= \langle \alpha | e^{-\mathcal{H}d\tau} | \varphi \neq \alpha \rangle \approx -K_{\alpha\varphi} d\tau. \end{aligned} \quad (4.18)$$

Khi đó, trọng số cấu hình của hệ thống có trạng thái α_i biến đổi thành α_{i+1} là

$$W_\nu = \exp \left\{ - \int_0^\beta V_\alpha(\tau) d\tau \right\} \prod_{i=1}^L (-K_{\alpha_i \alpha_{i+1}} d\tau), \quad (4.19)$$

với L là kích thước của hệ thống.

Hàm tổng thống kê biểu diễn trong trọng số cấu hình ν có dạng:

$$Z = \sum_{L=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_{\tau_{L-1}}^\beta d\tau_L \sum_\nu W_\nu, \quad (4.20)$$

$$Z = \sum_{L=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_{\tau_{L-1}}^\beta d\tau_L \sum_{\{\alpha_i\}; \alpha_L = \alpha_0} \exp \left\{ - \sum_{i=1}^L \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} V_\alpha(\tau) d\tau \right\} \prod_{i=1}^L (-K_{\alpha_i \alpha_{i+1}}).$$

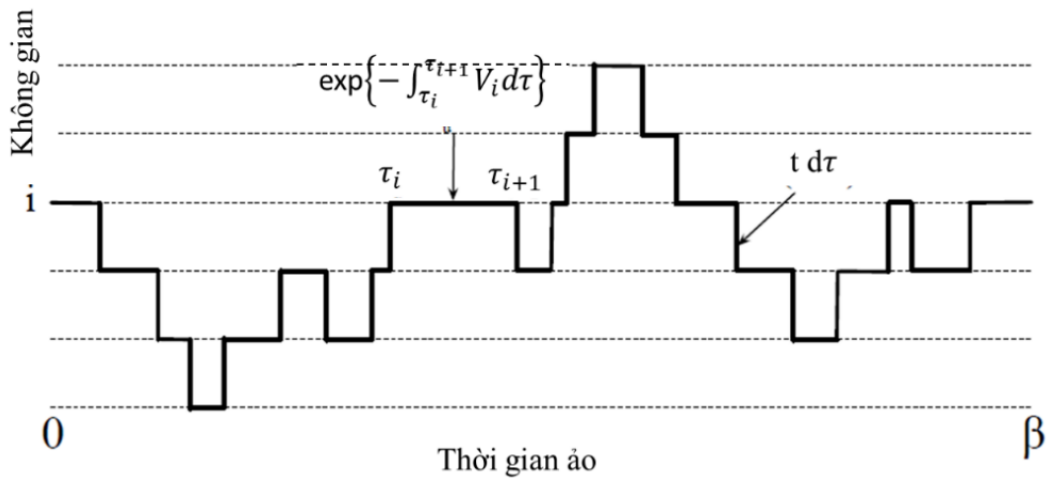
Công thức (4.20) được lấy tổng trên tất cả các vết trong không gian cấu hình và $\tau_0 = \tau_L$ trong thời gian ảo. Hàm tổng thống kê trong thuật toán Worm [79, 80] biểu diễn lại trên toàn bộ đường cấu hình đóng $i_{CP}(\tau)$ cho Hamiltonian (4.12) đơn giản như sau:

$$Z = \sum_{L=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_{\tau_{L-1}}^{\tau_L} d\tau_L \sum_{i_{CP}(\tau)} W_L[i_{CP}(\tau)], \quad (4.21)$$

$$Z = \sum_{L=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_{\tau_{L-1}}^{\tau_L} d\tau_L \sum_{i_{CP}(\tau)} t^L \exp \left\{ - \sum_{i=1}^L \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} V(\tau) d\tau \right\}.$$

Trọng số cấu hình của hệ thống được biểu diễn theo chuỗi biểu đồ của K_s là số lần nhảy giữa hai vị trí NN cũng chính là đoạn uốn gập (“kink”) (xem minh họa 4.6) trong biểu diễn tích phân đường cho mô hình mạng, x_i là thời gian ảo tại các lần chuyển đổi vị trí, ξ_K là vị trí trong không gian cho tất cả các đoạn uốn gập (“kink”) và y là các tham số của Hamiltonian:

$$W_L[i_{CP}(\tau)] = t^L \exp \left\{ - \sum_{i=1}^L \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} V(\tau) d\tau \right\} \equiv W(K_s, \xi_K; x_1, \dots, x_K; y). \quad (4.22)$$



Hình 4.6: Đường nét liền mô tả sự phát triển trong không thời gian cấu hình của một hạt trong mạng 1 chiều với 6 nút. Các đoạn uốn gập (“kink”) thẳng đứng tương ứng với quá trình hạt nhảy từ một vị trí sang vị trí NN, đường liền nằm ngang mô tả thời gian hạt ở tại một vị trí trong mạng. Đường nét đứt thể hiện không gian cấu hình không bị hạt chiếm giữ trong quá trình phát triển.

Hệ thống có số hạt bảo toàn, quỹ đạo của hệ nhiều hạt có thể phân tích thành tập hợp quỹ đạo đóng của các đơn hạt theo hướng thời gian còn được biết đến là đường thế giới (“world line”). Các đường thế giới có thể uốn vài lần trong thời gian ảo trước khi đóng. Trong hệ thống có biên tuần hoàn trong không gian, các quỹ đạo có thể uốn theo hướng không gian. Các đường thế giới khác không và số vòng cuốn [19] trong không gian được biết đến hình thành chu kỳ trao đổi và số vòng cuốn có liên hệ trực tiếp với tính SF [78, 95].

4.2.2.2. Lấy mẫu Worm

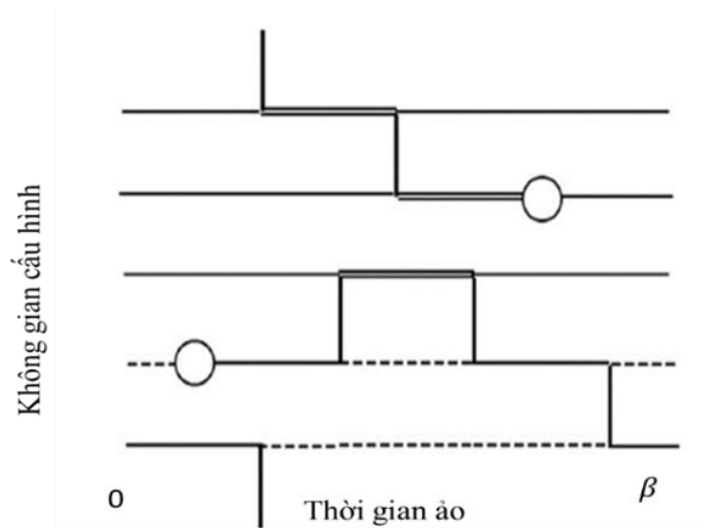
Không gian cấu hình của hàm tổng thống kê Z chỉ chứa các đường đóng. Thuật toán Worm lấy mẫu gián tiếp bằng cách thực hiện các dịch chuyển địa phương trong không gian cấu hình mở rộng của cấu hình mở đường thế giới trong biểu diễn hàm Green (hàm G) (xem hình 4.7). Điều này được thực hiện bằng cách thêm toán tử đầu Worm \widehat{W}_i^+ và Worm đuôi \widehat{W}_i^- vào trong Hamiltonian (4.12) ta được:

$$\mathcal{H}_{worm} = \mathcal{H} - \alpha \sum_i (\widehat{W}_i^+ + \widehat{W}_i^-). \quad (4.23)$$

Hàm tổng thống kê biểu diễn theo hàm Green là:

$$Z_e = \text{Tr}[\mathcal{T} (\hat{a}_i(\tau_0) \hat{a}_j^\dagger(\tau) + H.c.) e^{-\beta \mathcal{H}}], \quad (4.24)$$

trong đó: \mathcal{T} biểu thị toán tử trật tự thời gian, toán tử trong biểu diễn Heisenberg $(\hat{a}_i(\tau_0) \hat{a}_j^\dagger(\tau) + H.c.)$ được gọi là toán tử Worm [77].



Hình 4.7: Hình ảnh minh họa cấu hình trong trong biểu diễn hàm Green với 5 nút mạng. Đường thẳng đứng mô tả các đoạn uốn gập (“kink”) tương ứng quá trình nhảy của một hạt sang vị trí NN, nét liền đơn nằm ngang biểu thị vị trí bị chiếm giữ một lần, nét liền đôi nằm ngang biểu thị vị trí có hai chiếm giữ, nét đứt thể hiện vị trí không có chiếm giữ. Hai vòng tròn đánh dấu sự gián đoạn trong đường thế giới tương ứng với toán tử Worm.

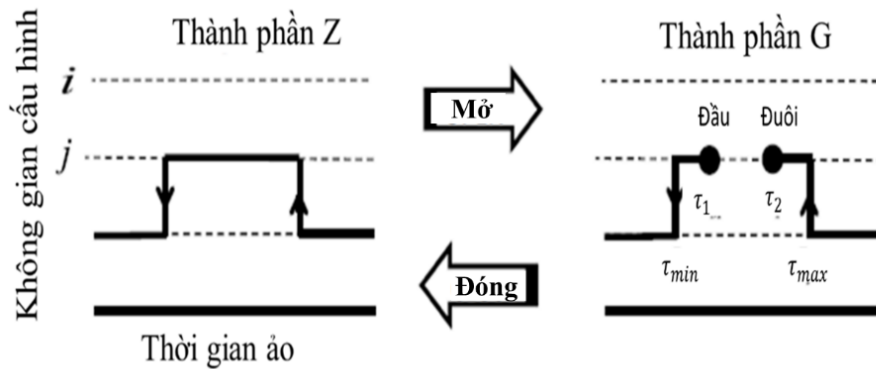
Thuật toán MC lấy mẫu trên tất cả khai triển thứ L , thời gian tương tác τ_i , trên tất cả vị trí và thời gian Worm và tập hợp cơ sở $|\alpha_i\rangle$. Trong thuật toán Worm, điều này đạt được bằng cách dịch chuyển toán tử Worm trong không gian cấu hình. Cập nhật trong thuật toán Worm như sau:

- Chèn cặp toán tử Worm \hat{W}_i^+ và \hat{W}_i^- vào để tạo ra một Worm. Worm có thể sinh hoặc hủy tùy thuộc vào trọng số W được lựa chọn.
- Để đơn giản, di chuyển đầu Worm, giữ cố định đuôi Worm. Đầu Worm di chuyển tự do trong không gian cấu hình sử dụng cập nhật Metropolis địa

phương hoặc bình nhiệt (heat bath). Đầu Worm có thể uốn quanh mạng theo cả hai hướng thời gian và không gian, điều này dẫn đến số vòng cuốn khác không. Sau một vài cập nhật, khi đầu Worm gặp đuôi Worm, cập nhật được hoàn thành.

Một thuận lợi của thuật toán Worm là cung cấp khả năng tính toán cho quá trình phát triển của đơn hạt trong thời gian ảo qua hàm Green $G(\tau_M - \tau_I, i_M - i_I) = \langle \hat{a}_{i_M}^\dagger(\tau_M) \hat{a}_{i_I}(\tau_I) \rangle$. Thuật toán Worm áp dụng cho hệ thống mạng boson có các kiểu cập nhật như sau: sinh/hủy Worm, dịch chuyển Worm thời gian, dịch chuyển Worm không gian.

- Sinh/hủy Worm: Cặp cập nhật này là quá trình ngược nhau chuyển giữa không gian cấu hình từ hàm Z sang hàm G (xem hình minh họa 4.8). Do cập nhật sinh biến đổi từ hàm Z sang hàm G nên cập nhật này được đề xuất bắt đầu từ hàm Z . Chọn ngẫu nhiên một đường thẳng liền trong không gian cấu hình, đặt một đầu Worm vào thời gian ảo $\tau_M = \tau_{\min} + r \times (\tau_{\max} - \tau_{\min})$ và đuôi Worm vào thời gian ảo $\tau_I = \tau_{\min} + r \times (\tau_{\max} - \tau_{\min})$ với r là số ngẫu nhiên được tạo bằng cách sử dụng phân bố ngẫu nhiên đồng nhất ($\tau_1 < \tau_2$).



Hình 4.8: Hình ảnh minh họa cập nhật sinh/hủy Worm.

Cập nhật hủy Worm chuyển không gian cấu hình từ hàm G sang hàm Z do đó cập nhật được đề xuất trong hàm G . Cập nhật được chấp nhận với xác suất p_a . Cân bằng chi tiết cho quá trình sinh Worm và hủy Worm như sau:

$$C_v \frac{1}{N_i} W_v (\tau_{\max} - \tau_{\min})^2 P_c^{(a)} = C_v p_a \omega_G W_v P_a^{(a)}, \quad (4.25)$$

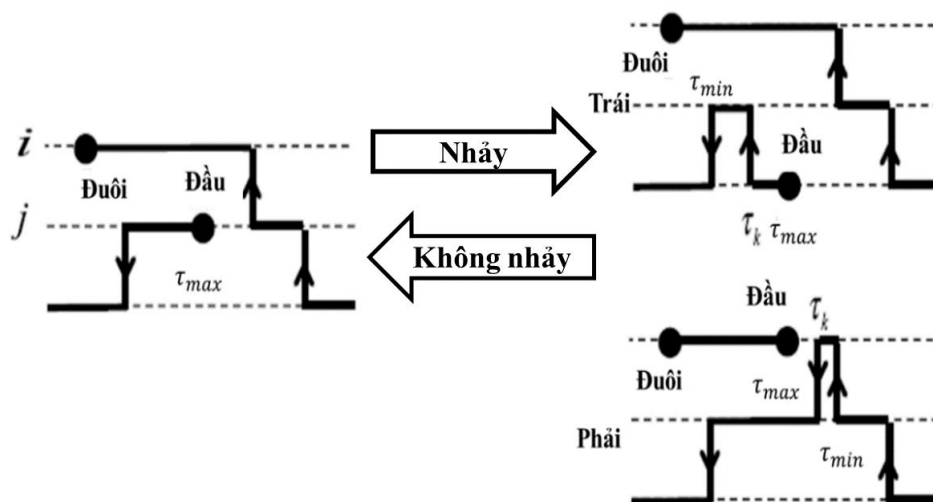
trong đó $P_c^{(a)}$, $P_a^{(a)}$ lần lượt là xác suất chấp nhận sinh và hủy Worm $\omega_G \sim \left\langle \frac{1}{N_i} \right\rangle$ là tham số tự do, N_i là tổng số đường nét liên trong không gian cấu hình trước khi cập nhật, W_v là hàm trọng số.

- Dịch chuyển thời gian: Trong không gian G , thuật toán đề xuất di chuyển đầu Worm dọc theo trục thời gian $\tau \rightarrow \tau'$ trong biên xác định bởi số chiếm giữ trên một vị trí xác định (xem hình 4.9).



Hình 4.9: Hình ảnh minh họa cập nhật dịch chuyển thời gian.

- Dịch chuyển không gian: Cập nhật này khác với các biến đổi liên tục của các đường vì nó liên quan đến chuyển động của đầu Worm trong không gian. Không thay đổi vị trí thời gian của đầu Worm, đặt đầu Worm sang vị trí lân cận và kết nối đường thể giới của hai vị trí liên quan đến cập nhật bằng cách giữ nguyên phần còn lại của đường. Điều này yêu cầu thêm hoặc loại bỏ đoạn uốn gập (“kink”) ngay trước hoặc sau đầu Worm. Khi đoạn uốn gập (“kink”) được chèn vào bên trái đầu Worm, chuyển đổi có thể được hiểu như là quá trình vẽ đường thể giới. Khi đoạn uốn gập (“kink”) được chèn bên phải đầu Worm, chúng ta kết nối lại những đường đã có và lấy mẫu sau cùng tất cả cấu trúc liên kết cho phép của đường dẫn (xem hình 4.10).



Hình 4.10: Hình ảnh minh họa cập nhật dịch chuyển không gian.

Để nâng cao hiệu quả của thuật toán, Lode Pollet [77] đã tối ưu hóa thuật toán bằng cách kết hợp giữa thuật toán vòng lặp có hướng [90, 99] và tối ưu hóa địa phương MC [77] vào trong thuật toán Worm được gọi là thuật toán LOWA. Trong khi thuật toán Worm hướng lan truyền Worm tiến và lùi theo thời gian có xác suất giống nhau thì thuật toán LOWA hướng lan truyền được duy trì cho đến khi gặp một tương tác làm cho Worm thay đổi hướng lan truyền. Tổng quát thuật toán LOWA được thực hiện như sau:

Bước 1: Chúng ta lựa chọn một vị trí và thời gian tùy ý trong cấu hình Z là (i_0, τ_0) . Tìm tất cả các vị trí có chiếm giữ ở thời điểm τ_0 , tính năng lượng đường chéo tương ứng. Chọn một hướng với xác suất cân bằng. Giả sử chọn theo hướng bên phải.

Bước 2: Chèn cặp Worm vào ở (i_0, τ_0) . Nếu số chiếm giữ ở vị trí này khác 0 ví dụ như $n = 1$, chúng ta sẽ chèn cặp Worm hoặc trở về bước 1 với xác suất cân bằng. Nếu chiếm giữ ở (i_0, τ_0) bằng 0, Worm được chèn vào với xác suất 50%. 50% xác suất Worm không được chèn vào. Ngay sau khi cặp Worm được tạo ra, chúng ta chuyển từ hàm Z sang hàm G và truyền Worm trong không gian G .

Bước 3: Khi đầu Worm dịch chuyển sang phải, định nghĩa e là năng lượng lệch trái của đầu Worm, rút ra độ lệch số mũ $p = -\ln(u)$ với u là số ngẫu nhiên đồng nhất trong khoảng $0 < u \leq 1$. Ước lượng độ lệch thời gian ảo là $\Delta\tau = p/e$ và thời gian mới của đầu Worm: $\tau' = \tau_0 + \Delta\tau$.

Bước 4: Ngay sau khi đầu Worm chạm đuôi Worm trong suốt chiều truyền, loại bỏ cặp Worm với xác suất 1. Cập nhật kết thúc cho cấu hình đường chéo mới. Nói cách khác chúng ta chuyển quỹ đạo hở từ hàm G mở sang tất cả quỹ đạo đóng kín trong hàm Z .

Bước 5: Trong trường hợp nếu thời gian Worm mới lớn hơn thời gian cho tương tác tiếp theo, thời gian Worm mới được chỉ định bằng thời gian của đoạn uốn gập (“kink”) tiếp theo. Worm có thể bị bật ngược trở lại, vượt qua, hủy hoặc biến đổi đoạn uốn gập (“kink”) theo phương trình cân bằng chi tiết.

Bước 6: Nếu không gặp đoạn uốn gập (“kink”) nào trong khoảng thay đổi thời gian ảo, chúng ta chèn đoạn uốn gập (“kink”) vào hoặc Worm bị bật ngược trở lại.

Bước 7: Trở lại bước 3.

Khi Worm di động chạm đến Worm cố định, chúng ta đo các đại lượng đường chéo quan sát được như năng lượng, số vòng cuộn, mật độ ... Số vòng cuộn là số lần đầu Worm uốn quanh hệ thống trước khi gặp đuôi Worm và mật độ SF được ước lượng theo số vòng cuộn [19]:

$$\rho_s = \frac{\langle W^2 \rangle L^{2-d}}{\beta d}, \quad (4.26)$$

trong đó W là tổng số vòng cuộn, L là kích thước mạng, d là số chiều không gian và β là nghịch đảo nhiệt độ.

Hệ số cấu trúc tĩnh $S(\mathbf{Q})$ ở vectơ sóng \mathbf{Q} được tính theo công thức:

$$S(\mathbf{Q}) = \frac{1}{N^2} \left\langle \left| \sum_{i=1}^N \hat{n}_i e^{-i\mathbf{Q}r_i} \right|^2 \right\rangle. \quad (4.27)$$

Trường hợp vectơ sóng $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ tương ứng pha tinh thể dạng ô bàn cờ còn $\mathbf{Q} = (\pi, 0) = (0, \pi)$ sẽ tương ứng với pha tinh thể dạng sọc. Xác định các tham số trật tự

$\rho_s = \frac{N_0}{N_s}$ và $S(\mathbf{Q})$, chúng ta có thể nhận biết được các pha trong hệ thống: Pha tinh thể có $S(\mathbf{Q}) \neq 0, \rho_s = 0$, pha SF có $S(\mathbf{Q}) = 0, \rho_s \neq 0$ trong khi pha SS thì $S(\mathbf{Q}) \neq 0, \rho_s \neq 0$.

Các kết quả khảo sát dưới đây sử dụng thuật toán Worm [79, 80] và tối ưu hóa theo thuật toán LOWA của Lode Pollet [77] viết trên ngôn ngữ lập trình C++.

4.3. Biểu hiện pha SS dưới tác dụng của thế năng ghim tuần hoàn cho mạng vuông

Trong mô hình Bose – Hubbard tiêu chuẩn với số hạng động năng t và thế năng tương tác U , hệ thống chỉ tồn tại hai pha cơ bản là SF và MI [76]. Khi tương tác tầm xa là tương tác giữa các vị trí NN và NNN được thêm vào làm tăng cường sự định xứ của các hạt sinh ra cấu trúc tinh thể bên trong hệ thống [8, 9, 10, 63, 76, 92]. Các kịch bản SS hình thành ở lân cận vùng cấu trúc tinh thể [43] hay tại cấu trúc tinh thể [8] được đề xuất và được xác nhận ở trong hàng loạt các kết quả giải tích cũng như mô phỏng. Chúng tôi cũng hy vọng tìm thấy biểu hiện của pha SS tương tự như các hoạt cảnh đó.

Phương pháp mô phỏng QMC để khảo sát quá trình chuyển pha của các pha dị thường xảy ra trong hệ boson tương quan mạnh được áp dụng. Do hiệu ứng lượng tử đóng vai trò quan trọng trong quá trình hình thành các pha, do đó để loại bỏ ảnh hưởng của năng lượng nhiệt $k_B T$ lên hệ thống, chúng tôi thực hiện các tính toán trong điều kiện nhiệt độ thấp để làm nổi bật vai trò của các tương tác tác động lên quá trình hình thành pha. Trong QMC, đại lượng nghịch đảo nhiệt độ, $\beta = \frac{1}{k_B T}$ có vai trò tương đương như thời gian ảo trong hình thức tích phân đường Feynman . Hệ thống nằm trong trạng thái cơ bản tương ứng với nghịch đảo nhiệt độ $\beta t \approx L$ khi L đủ lớn.

Mô hình được khảo sát bằng phương pháp QMC với thuật toán Worm. Để loại bỏ hiệu ứng kích thước hữu hạn, chúng tôi đã tính toán cho các mạng kích thước khác nhau và thấy các kết quả bắt đầu hội tụ tốt ở kích thước mạng $L = 24$. Do đó, các mô phỏng của chúng tôi được thực hiện cho số nút mạng $N_s = L \times L$

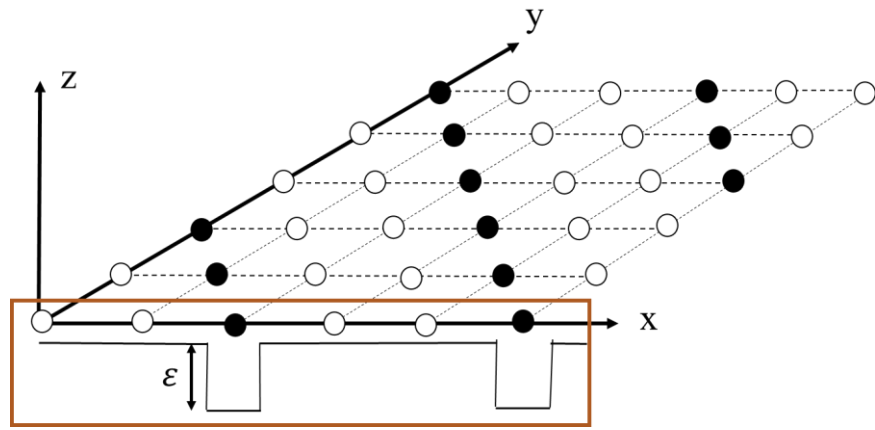
$= 24 \times 24 = 576$ nút. Điều kiện biên tuần hoàn được áp dụng và tham số bước nhảy t được chọn bằng 1.

4.3.1. Mô hình hạt boson lõi cứng

4.3.1.1. Hamiltonian của mô hình

Hamiltonian của mô hình với cường độ tương tác V_m và biểu hiện của thế năng ngoài tuần hoàn μ_i :

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + \hat{a}_j^\dagger \hat{a}_i) + V_m \sum_{\langle ij \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j - \sum_i (\mu + \mu_i) \hat{n}_i. \quad (4.28)$$



Hình 4.11: Cấu trúc thế năng ghim tuần hoàn trong mạng vuông hai chiều trong đó chấm tròn tô đậm biểu diễn các vị trí bị ghim, chấm tròn trắng biểu diễn các vị trí không bị ghim.

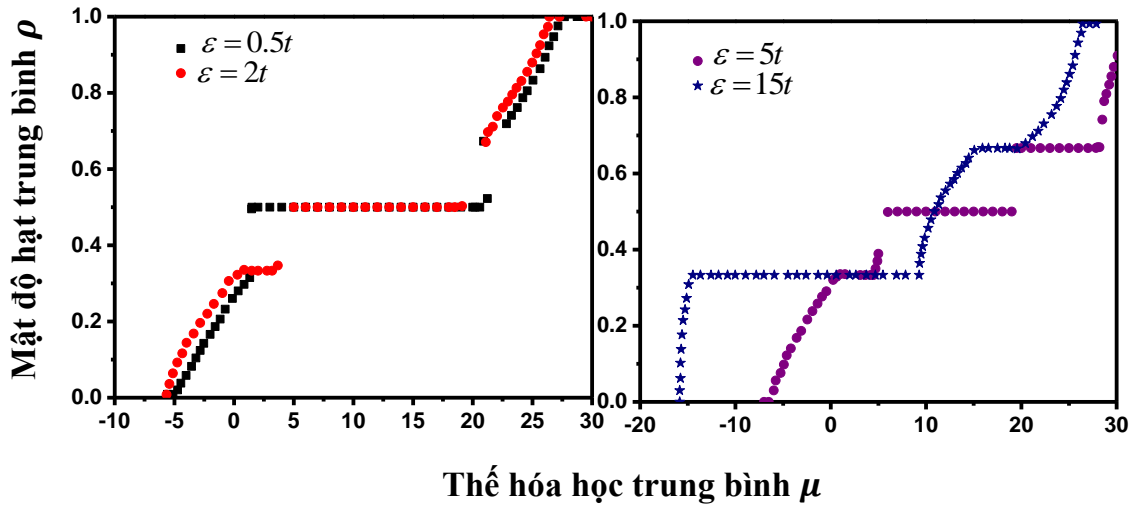
Trong mô hình này, chúng tôi lựa chọn ghim các hạt ở các vị trí xác định như hình 4.11 tương ứng với giá trị mật độ hạt trung bình $\rho = 1/3$ với hy vọng trường ngoài thích hợp có thể làm phát sinh các pha tinh thể tương tự trật tự sóng mật độ điện tích (CDW) khác với pha tinh thể ô bàn cờ sinh ra ở mật độ hạt trung bình $\rho = 1/2$ dưới tác dụng của cường độ tương tác V_m .

4.3.1.2. Khảo sát đường cong (ρ, μ)

Để xác định quá trình chuyển pha, chúng tôi kiểm tra sự phụ thuộc của mật độ hạt trung bình trên một nút mạng ρ vào thế hóa học trung bình μ . Đường cong (ρ, μ)

biểu diễn đại lượng hệ số nén $\kappa = \frac{\partial \rho}{\partial \mu}$. Giá trị của hệ số nén κ thay đổi cũng có nghĩa

là hệ thống xảy ra quá trình chuyển pha. Hình 4.12 thể hiện sự thay đổi của mật độ hạt vào thế hóa học địa phương theo các giá trị thế năng ghim tuần hoàn khác nhau.



Hình 4.12: Đồ thị phụ thuộc của mật độ hạt trung bình trên một nút mạng ρ vào thế hóa học trung bình μ trong các giá trị thế năng ghim tuần hoàn ε khác nhau với $V_m = 6t$.

Quan sát trong hình 4.12 có thể thấy đường cong (ρ, μ) có các đoạn nằm ngang (hay các cao nguyên) lần lượt xuất hiện ở các giá trị mật độ hạt trung bình tương ứng $\rho = 1/3, 1/2$ và $2/3$. Trên các cao nguyên hệ số nén $\kappa = 0$ đặc trưng cho các pha tinh thể. Ở các mật độ còn lại, hệ thống nằm trong pha SF. Như vậy, trong mô hình này xảy ra quá trình chuyển pha từ pha SF sang pha tinh thể.

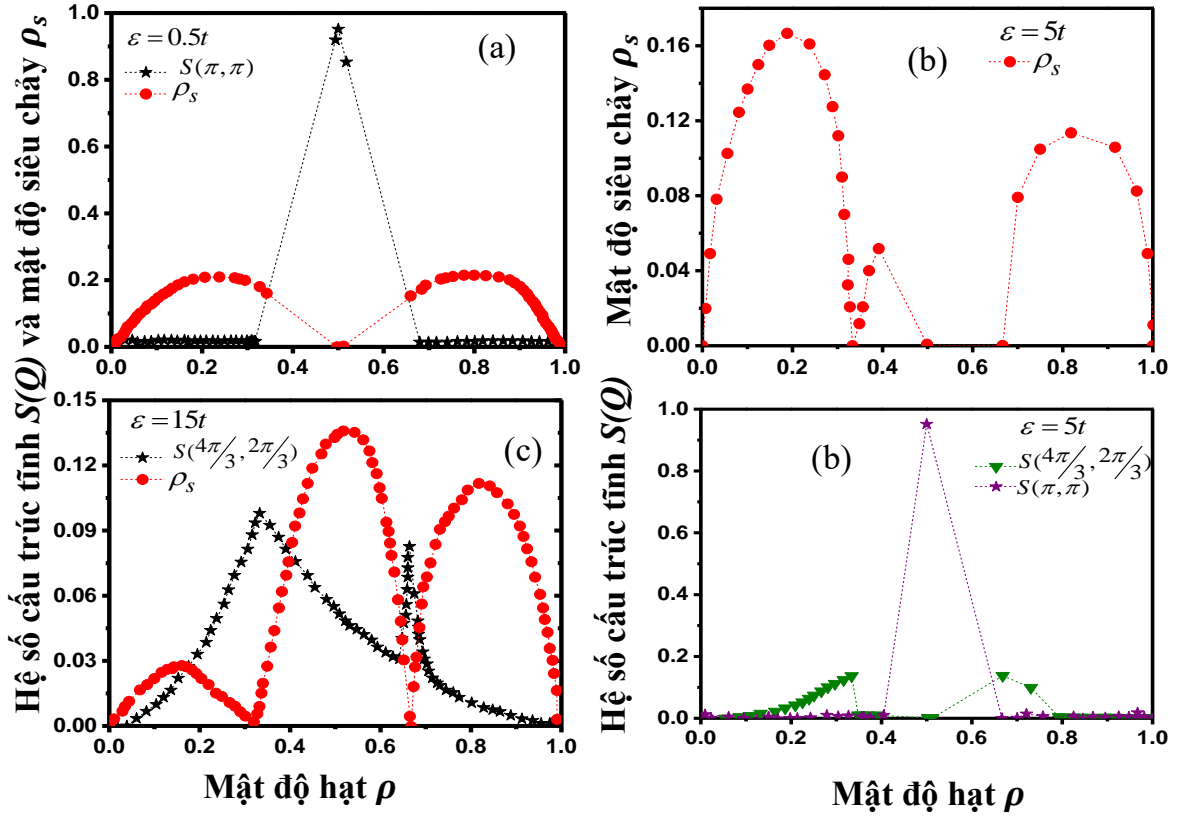
Cụ thể với $\varepsilon = 0.5t$, trường hợp này cường độ thế năng ghim quá nhỏ các hạt không bị định xứ vào trong cấu trúc tinh thể tương ứng với mật độ hạt bị ghim $\rho = 1/3$, thay vào đó cường độ tương tác giữa các vị trí NN là V_m có tác dụng sinh ra pha tinh thể ô bàn cờ ở mật độ hạt trung bình $\rho = 1/2$ trong hệ thống tương tự với biểu hiện của mô hình Bose – Hubbard khi không có trường ngoài [9, 10]. Bước nhảy trong đường cong (ρ, μ) ở $\varepsilon = 0.5t$ chứng tỏ hệ thống xảy ra quá trình phân tách pha. Pha SS không tồn tại trong trường hợp này.

Tiếp tục tăng cường độ thế năng ghim tuần hoàn lên $\varepsilon = 2t$ và $\varepsilon = 5t$, bên cạnh pha tinh thể ô bàn cờ ở mật độ hạt trung bình $\rho = 1/2$, hệ thống hình thành thêm các pha tinh thể tương ứng với các cao nguyên ở mật độ hạt trung bình $\rho = 1/3$ và $2/3$. Ở mật độ dưới mật độ hạt trung bình $\rho = 1/3$, đường cong (ρ, μ) biến đổi liên tục như vậy có khả năng pha SS tồn tại ổn định ngay bên dưới pha tinh thể ở mật độ trung bình $\rho = 1/3$ tương ứng với SS gây ra bởi khuyết tật lỗ trống.

Đặc biệt khi thế năng ghim tuần hoàn ε vượt trội so với cường độ tương tác V_m ($\varepsilon = 15t$), pha tinh thể ở mật độ trung bình $\rho = 1/2$ biến mất, đường cong (ρ, μ) biến đổi liên tục ở vùng mật độ trên và dưới mật độ tinh thể $\rho = 1/3$ và $2/3$. Biểu hiện này cho thấy pha SS có thể được hỗ trợ ổn định ở lân cận xung quanh pha tinh thể (tương tự với trật tự CDW). Ở mật độ trên mật độ tinh thể, pha SS gây ra bởi khuyết tật giữa nút.

4.3.1.3. Khảo sát các tham số trật tự

Các tham số trật tự là hệ số cấu trúc tĩnh $S(\mathbf{Q})$ và mật độ SF ρ_s được xác định trong hình 4.13 để kiểm tra sự tồn tại của pha SS. Pha tinh thể ở mật độ trung bình $\rho = 1/2$ được đặc trưng bởi hệ số cấu trúc tĩnh ở vectơ sóng là (π, π) trong khi pha tinh thể ở mật độ $\rho = 1/3$ và $2/3$ được đặc trưng bởi vectơ sóng $(4\pi/3, 2\pi/3)$.



Hình 4.13: Đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của hệ số cấu trúc tĩnh $S(Q)$ và mật độ siêu chảy ρ_s vào mật độ hạt trung bình ρ ở các giá trị thế năng ghim tuần hoàn: (a) $\varepsilon = 0.5t$, (b) $\varepsilon = 5t$ và (c) $\varepsilon = 15t$ với $V_m = 6t$.

Trường hợp ε nhỏ (hình 4.13a), ở tại mật độ trung bình $\rho = 1/2$, hệ số cấu trúc tĩnh $S(\pi, \pi)$ (tương ứng là pha tinh thể ô bần cò) có giá trị cực đại trong khi mật độ SF $\rho_s = 0$. Ở các giá trị mật độ còn lại $S(\pi, \pi) = 0$ còn $\rho_s \neq 0$ tương đương với pha SF. Kết quả này hoàn toàn phù hợp với khảo sát trong đường cong (ρ, μ) .

Ở giá trị $\varepsilon = 5t$ (hình 4.13b), tại các mật độ trung bình $\rho = 1/2, 1/3$ và $2/3$ lần lượt có $S(\pi, \pi) \neq 0, S(4\pi/3, 2\pi/3) \neq 0$ còn $\rho_s = 0$. Ở vùng mật độ hạt trung bình $\rho < 1/3$, cả hai tham số $S(4\pi/3, 2\pi/3)$ và ρ_s đều khác 0, đây chính là đặc trưng của pha SS.

Pha SS được quan sát thấy rõ hơn với $\varepsilon = 15t$. Cụ thể, ở mật độ trung bình $\rho = 1/3$ và $2/3$ chỉ có pha tinh thể tồn tại với $S(4\pi/3, 2\pi/3) \neq 0, \rho_s = 0$. Hoạt cảnh SS

tồn tại ở tại mật độ tinh thể như đề xuất trước đó của một số tác giả không xuất hiện trong mô hình này [60, 76]. Ở các vùng mật độ còn lại, $S(4\pi/3, 2\pi/3) \neq 0$ và $\rho_s \neq 0$, theo định nghĩa nghiêm ngặt ta có thể kết luận được rằng pha SS tồn tại ở mọi nơi bên ngoài vùng mật độ tinh thể. Tuy nhiên, pha SS chỉ thực sự có ý nghĩa trong vùng lân cận cấu trúc tinh thể. Ở xa các mật độ tinh thể, bản chất hệ thống được đặc trưng bởi pha lỏng với biên độ mật độ hình thành dưới tác dụng của thế năng ghim tuần hoàn [21].

4.3.2. Mô hình hạt boson lõi mềm

Tiếp tục phát triển ý tưởng trên, chúng tôi thực hiện khảo sát cho mô hình Bose – Hubbard của các hạt boson lõi mềm dưới tác dụng của thế năng ghim tuần hoàn. Nghiên cứu lý thuyết trước đó [26, 30] đã phác họa giản đồ pha thể hiện chuyển pha giữa trạng thái SF sang MI tương ứng ở các mật độ với số hạt trung bình trên mỗi nút mạng khác nhau bằng 1, 2, 3 ... Trong luận án này chúng tôi thực hiện khảo sát giản đồ pha và các pha xuất hiện trong mô hình của các hạt boson lõi mềm trong trường hợp đơn giản có trung bình tối đa hai hạt trên cùng một vị trí (nghĩa là có thể có nhiều hơn hai hạt trên cùng một nút mạng tuy nhiên chỉ cho phép hệ thống có số hạt tối đa gấp đôi số nút mạng $N_{max} = 2N_s$).

Khảo sát bài toán hai hạt lượng tử tương tác tầm ngắn hữu hạn bị bẫy trong hố thế tuần hoàn [12, 13, 54, 86] đã góp phần quan trọng trong nghiên cứu và hiểu biết các tính chất vật lý xảy ra trong hệ thống tương quan mạnh. Lời giải của mô hình hai hạt boson tương tác hữu hạn trở thành một cột mốc quan trọng truyền cảm hứng cho các nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm về các đặc tính của các nguyên tử siêu lạnh trong mạng quang học. Trong đó, nghiên cứu mô phỏng cho mô hình hạt boson lõi mềm [20] đã chỉ ra bức tranh giản đồ pha rõ ràng với biểu hiện thú vị xảy ra xung quanh vùng chuyển pha lượng tử trong trường hợp mật độ tương ứng hai hạt lượng tử trên cùng một vị trí. Hệ thống tồn tại chuyển pha giữa trạng thái SF và pha tinh thể. Pha SS được tìm thấy hình thành ở giữa vùng pha SF và pha tinh thể dưới tác dụng của tương tác đẩy của các khuyết tật trong hệ thống trong vùng

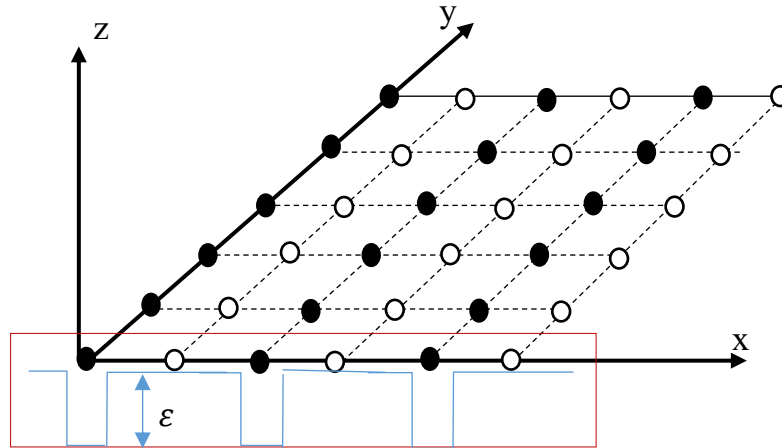
mật độ trung bình lớn hơn $3/2$. Vì thế, bước đầu chúng tôi khảo sát các đặc tính độ dao của mô hình hạt boson tương tác lõi mềm dưới tác dụng của thế năng ghim tuần hoàn trong vùng xung quanh mật độ hạt trong khoảng $0 \leq \rho \leq 2$ với số hạt tối đa gấp đôi số nút mạng.

4.3.2.1. Hamiltonian của mô hình

Hamiltonian của mô hình được biểu diễn như sau:

$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + H.c.) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \sum_i (\mu + \mu_i) \hat{n}_i. \quad (4.29)$$

Khi không có trường ngoài, mô hình không biểu hiện pha tinh thể, do đó chúng tôi lựa chọn thế năng tuần hoàn ở các vị trí xác định tương ứng ở mật độ $\rho = 1/2$ nhằm hỗ trợ hình thành pha tinh thể ở giá trị mật độ này.

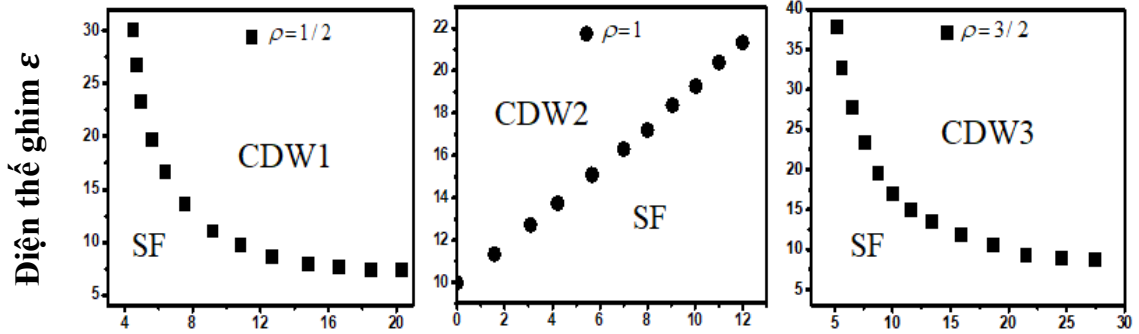


Hình 4.14: Cấu trúc thế năng ghim tuần hoàn trong mạng vuông hai chiều trong đó chấm tròn tô đậm biểu diễn các vị trí bị ghim, chấm tròn trắng biểu diễn các vị trí không bị ghim.

4.3.2.2. Khảo sát giản đồ pha

Thế năng ngoài tuần hoàn đóng vai trò đẩy các hạt boson vào trong các vị trí xác định tương tự như các vị trí hấp thụ trên chất nền, ở đó các hạt bị khóa vào trong cấu trúc tinh thể. Hệ thống hình thành ba kiểu trật tự rắn giống với trật tự sóng mật độ điện tích CDW tương ứng ở các mật độ hạt trung bình $\rho = 1/2, 1$ và

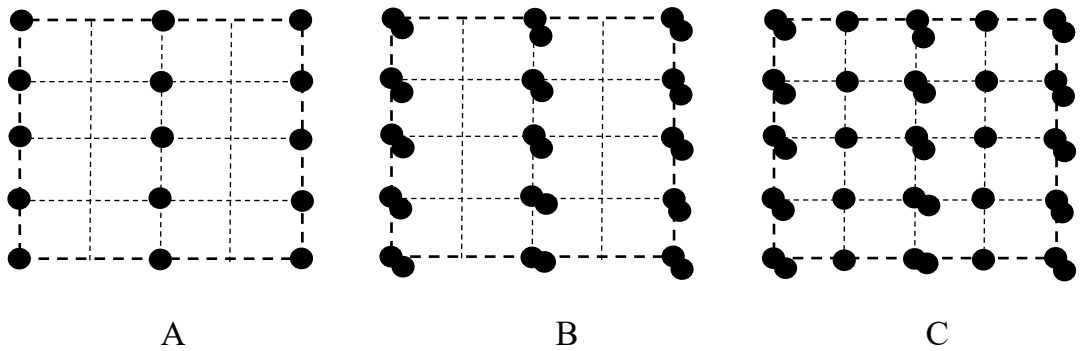
$3/2$ với hệ số cấu trúc tinh đặc trưng là $S(\pi, 0)$. Đầu tiên, chúng tôi tiến hành thảo luận giản đồ pha của mô hình hai chiều của các hạt boson lõi mềm dưới tác dụng của thế năng ghim tuần hoàn.



Tương tác trên cùng một nút mạng U

Hình 4.15: Đồ thị hàm (U, ε) biểu diễn đường biên pha giữa trạng thái cơ bản là SF và CDW ở các mật độ hạt khác nhau $\rho = 1/2, 1$ và $3/2$.

Hình 4.15 biểu diễn đường biên giữa pha SF và trật tự CDW ở các mật độ hạt tương ứng $1/2, 1$ và $3/2$ phụ thuộc vào cường độ tương tác giữa các hạt trên một nút U và thế năng ghim tuần hoàn ε . Các cấu hình CDW hình thành ở các mật độ tương ứng được biểu diễn như trong hình 4.16.



Hình 4.16: Phác họa cấu hình các hạt boson trong trật tự CDW ở mật độ hạt lần lượt là $\rho = 1/2$ (A), 1 (B) và $3/2$ (C).

Bức tranh pha hình 4.15 cho thấy đường biên pha ở mật độ hạt trung bình $\rho = 1/2$ và $3/2$ có đặc điểm giống nhau. Giá trị thế năng ghim tới hạn ε_c giảm đơn điệu

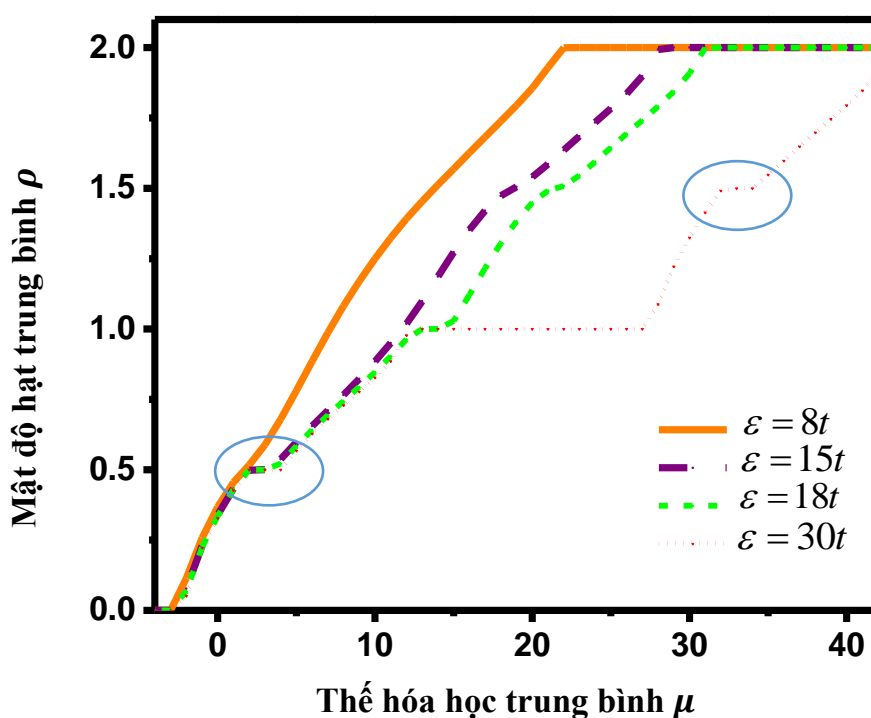
khi cường độ tương tác U giữa các hạt trên cùng một vị trí tăng lên. Biểu hiện này hoàn toàn phù hợp giữa các số hạng cạnh tranh tương tác biểu diễn trong Hamiltonian (4.29). Trong đó, năng lượng của tương tác đẩy hai hạt trên cùng một nút U và năng lượng định xứ hạt boson sinh ra từ thế năng ghim tuần hoàn có tác động ngược nhau lên hệ thống. Hơn nữa, các hạt boson có xu hướng nhảy sang có vị trí NN để thu được động năng cực tiểu. Ở mật độ hạt trung bình $\rho = 1/2$ có số hạt boson ít hơn so với số nút mạng, khi thế năng ghim ε nhỏ và cường độ tương tác trên một nút U lớn, các hạt boson sẽ tránh cấu hình hai hạt trên cùng một nút mạng. Ở giá trị cường độ tương tác U nhỏ, hai boson dễ dàng ở trên cùng một vị trí do đó cần phải có năng lượng thế năng ghim khá lớn để các boson sắp xếp vào trong cấu hình CDW1. Sự hình thành của trật tự CDW1 ở trong hình 4.16A hoàn toàn phù hợp để hệ thống đạt được năng lượng cực tiểu với động năng và thế năng tương tác giảm khi mỗi boson nằm trên một vị trí nút mạng có thế năng ghim biểu hiện. Hoạt cảnh tương tự cũng xảy ra cho trường hợp mật độ hạt trung bình $\rho = 3/2$. Số hạt boson nhiều hơn so với số vị trí nút mạng, do đó các hạt boson không thể tránh khỏi cấu hình hai hạt nằm trên cùng một nút như trong hình 4.16C. Do đó, hai boson sẽ có xu hướng cùng nằm trên vị trí bẫy bởi thế năng ghim để có lợi nhất về mặt năng lượng. Tuy nhiên, cấu hình CDW3 hình thành ở các giá trị thế năng ghim ε lớn hơn so với trường hợp hình thành CDW1.

Ngược lại, đường biên pha ở mật độ hạt trung bình $\rho = 1$ có biểu hiện khác biệt so với hai trường hợp trước. Giá trị tới hạn của thế năng ghim tỷ lệ tuyến tính với năng lượng tương tác đẩy Coulomb trên cùng một vị trí được biểu diễn trong hình 4.15. Ở mật độ $\rho = 1$ có số hạt boson bằng với số nút mạng cho nên cơ chế cực tiểu hóa năng lượng ở trạng thái cơ bản thông qua cạnh tranh tương tác trở nên rất phức tạp. Trong trường hợp này, hệ thống có thể hình thành ba kiểu pha khác nhau là pha SF, pha CDW2 và pha MI. Pha MI có cấu hình mỗi hạt chiếm giữ trên một vị trí và xảy ra khi cường độ tương tác U rất lớn và thế năng ghim ε đủ nhỏ. Khi đó, các boson tốn ít năng lượng để có thể nằm ở các vị trí không bị ghim. Mục đích của chúng tôi là tìm kiếm khả năng pha SS tồn tại ở tại hoặc lân cận vùng tinh thể, do đó chúng tôi không đi sâu khảo sát các vấn đề liên quan đến pha MI ở đây. Thay vì thế, chúng tôi

chỉ thực hiện khảo sát trong vùng thế năng tương tác U kết hợp với thế năng ghim ε thích hợp để sinh ra cấu hình CDW2 như trong hình 4.16B. Biểu hiện tuyến tính của đường biên pha giữa pha SF và CDW2 chỉ ra rằng thế năng ghim ε và tương tác đẩy U buộc phải cạnh tranh cân bằng trong quá trình hình thành các pha ở nửa lấp đầy. Bối cảnh này hoàn toàn khác biệt với trường hợp mật độ hạt $\rho = 1/2$ và $3/2$ trong đó trật tự pha được quyết định bởi cường độ tương tác U hoặc thế năng ghim ε .

4.3.2.3. Khảo sát đường cong (ρ, μ)

Hình (4.17) khảo sát sự phụ thuộc của mật độ hạt ρ vào thế hóa học trung bình μ ở các giá trị thế năng ghim ε khác nhau với cường độ tương tác $U = 8t$.



Hình 4.17: Đồ thị mật độ hạt ρ phụ thuộc vào thế hóa học μ cho các giá trị thế năng ghim khác nhau với cường độ tương tác $U = 8t$.

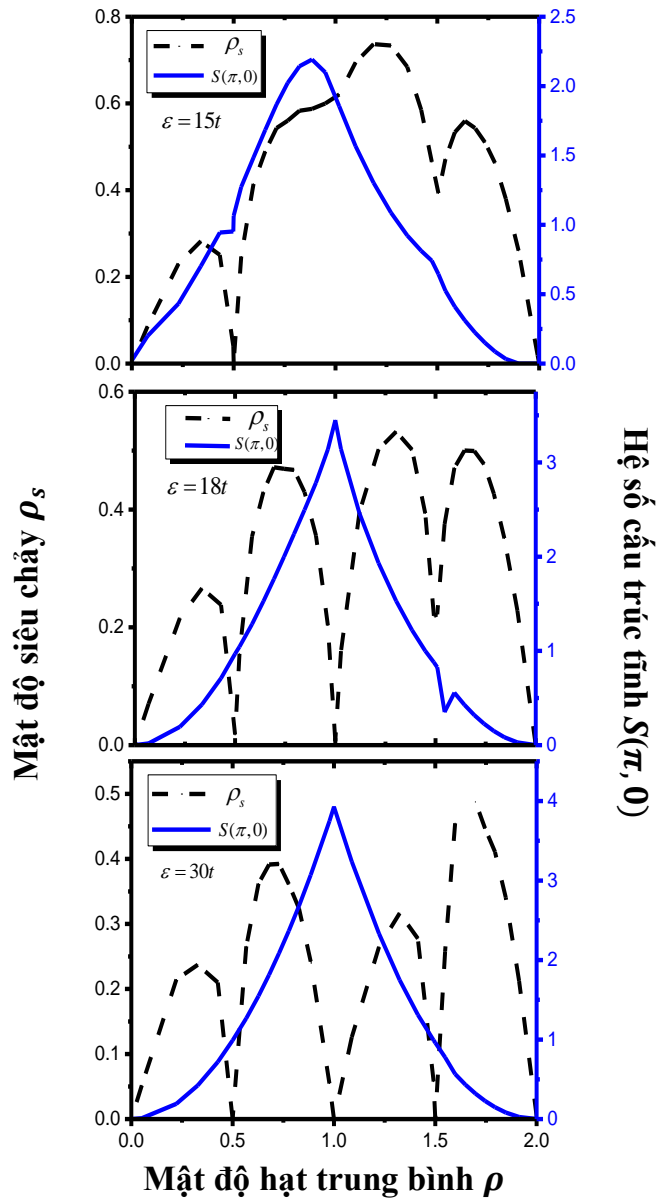
Rõ ràng từ hình 4.17 có thể thấy khi cường độ thế năng ghim đủ lớn, các cao nguyên lần lượt xuất hiện ở các giá trị mật độ hạt tương ứng $\rho = 1/2$, 1 và $3/2$. Ở giá trị tương tác U hữu hạn, khi tăng thế năng ghim tăng từ $18t$ lên đến $30t$, vùng cao nguyên tại mật độ hạt $\rho = 1$ mở rộng và xuất hiện cao nguyên tại $\rho = 3/2$. Các cao

nguyên này tương ứng với các trật tự tinh thể. Như vậy hệ thống xảy ra quá trình chuyển pha từ SF tới trật tự CDW.

Các kết quả khảo sát trước đó cho mô hình hạt boson lõi mềm trong mạng vuông hai chiều với tương tác giữa các hạt trên cùng một nút mạng U và tương tác giữa các vị trí NN là V_{nn} [87, 92] đã chỉ ra rằng pha SS ổn định ở mật độ phía trên mật độ tinh thể nửa lấp đầy $\rho = 1/2$. Còn ở phía dưới mật độ tinh thể, hệ thống xảy ra phân tách pha do hiệu ứng vách dômên được đặc trưng bởi biểu hiện không liên tục trong đường cong (ρ, μ) . Trong trường hợp này, mật độ hạt biến đổi liên tục theo thể hóa học ở cả hai phía của mật độ tinh thể. Do đó, có thể có pha SS tồn tại ở cả hai phía của mật độ tinh thể giống với mô hình hạt boson lõi cứng dưới tác dụng của thế năng ghim tuần hoàn.

4.3.2.4. Khảo sát các tham số trật tự

Tương tự như phần trước, để xác định được các pha bên trong hệ thống, chúng tôi mô tả các tham số trật tự là mật độ SF ρ_s và $S(\pi, 0)$ biến đổi theo mật độ hạt ρ ở các giá trị thế năng ghim tương ứng $\varepsilon = 15t, 18t$ và $30t$ theo hình 4.18.

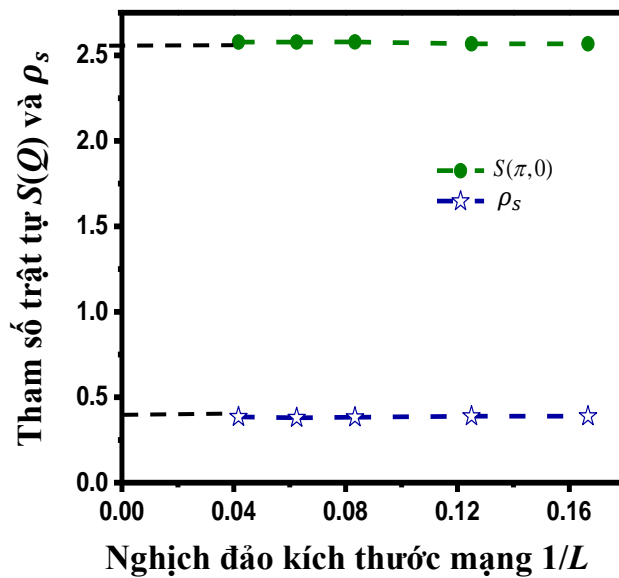


Hình 4.18: Đồ thị phụ thuộc của mật độ siêu chảy ρ_s và hệ số cấu trúc tĩnh $S(\pi, 0)$ vào mật độ hạt ở các giá trị thế năng ghim khác nhau khi $U = 8t$.

Lần lượt ở các mật độ $\rho = 1/2, 1$ và $3/2$, giá trị ρ_s bằng 0 trong khi hệ số cấu trúc tĩnh $S(\pi, 0)$ khác không. Như vậy, hệ thống nằm trong trạng thái CDW tương ứng với các cao nguyên hình thành ở trong đường cong (ρ, μ) ở các mật độ này. Một lần nữa khẳng định mô hình này không hình thành pha SS ở tại các mật độ tinh thể. Ở các vùng còn lại của mật độ khác mật độ tương ứng $\rho = 1/2, 1$ và $3/2$, cả hai tham

số trật tự là ρ_s và $S(\pi, 0)$ đều khác không. Chú ý rằng pha SS chỉ thực sự có ý nghĩa trong vùng lân cận cấu trúc tinh thể. Giữa quá trình chuyển pha từ trạng thái SF sang trạng thái CDW, khả năng pha SS xuất hiện ở giữa hai pha và gần với vùng tinh thể. Hệ thống có thể xảy ra chuỗi hai quá trình chuyển pha liên tiếp tương ứng: quá trình thứ nhất là từ pha SF sang SS và quá trình thứ hai là từ pha SS sang pha tinh thể ở các mật độ hạt dưới mật độ tinh thể. Một chuỗi chuyển pha tương tự cũng xảy ra ở phía trên các mật độ tinh thể. Tuy nhiên, quá trình này có khác biệt đó là bắt đầu từ trật tự CDW sang SS rồi cuối cùng trở về trạng thái SF. Như đã phân tích ở trên, từ biểu hiện đường cong (ρ, μ) biến đổi liên tục có thể khẳng định hệ thống không bị phân tách pha. Pha SS hình thành hoàn toàn ổn định ở cả hai phía của mật độ tinh thể.

Để khẳng định sự ổn định của các tham số trật tự trong giới hạn nhiệt độ lực học, chúng tôi đã mô phỏng cho hệ ở các kích thước mạng khác nhau với giá trị thể hóa $\mu = 10$ trong đơn vị năng lượng t tương ứng với mật độ hạt $\rho \approx 0.83$. Ở các giá trị này, cả hai tham số đều tồn tại và khác không khi kích thước mạng được ngoại suy ra đến vô cùng. Hình vẽ 4.19 thể hiện tính chất này.



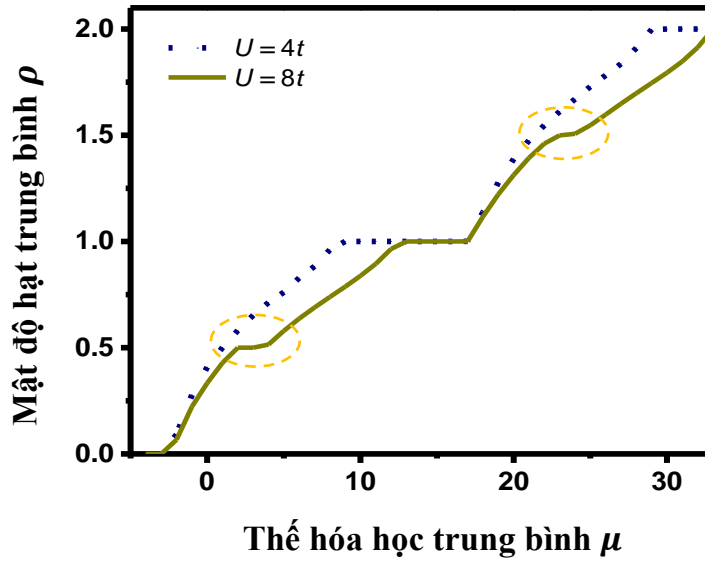
Hình 4.19: Đồ thị tham số trật tự là mật độ SF ρ_s và hệ số cấu trúc tinh $S(\pi, 0)$ phụ thuộc vào nghịch đảo kích thước mạng ở mật độ hạt $\rho \approx 0.83$. Đường nét đứt biểu diễn ngoại suy đến kích thước mạng lớn vô cùng.

Như vậy, tín hiệu của pha SS được xác nhận ở trong hệ thống của chúng tôi. Tuy nhiên, cơ chế hình thành pha SS hiện nay vẫn còn gây ra nhiều tranh cãi. Hầu hết các khảo sát cho mô hình mạng đều nghiêng về đề xuất của Andreev – Liftshitz và Chester trong đó khuyết tật đóng vai trò quan trọng trong sự hình thành SS. Mô hình của chúng tôi dường như cũng phù hợp với hoạt cảnh này. Tín hiệu của pha SS xuất hiện ở xung quanh vùng cấu trúc tinh thể. Như vậy, xuất phát từ cấu trúc tinh thể, khi loại bỏ hoặc thêm hạt vào trong mật độ tinh thể tương ứng có thể sinh ra các khuyết tật là lỗ trống và giữa nút mà không làm ảnh hưởng đến cấu trúc tinh thể. Trong điều kiện thích hợp về năng lượng, các khuyết tật có thể di chuyển tự do trong mạng và hình thành ngưng tụ Bose – Einstein trên nền cấu trúc tinh thể. Đó chính là trạng thái SS mong đợi. Ở phía dưới mật độ tinh thể tương ứng là pha SS gây ra bởi lỗ trống còn ở phía trên là pha SS được sinh ra từ khuyết tật giữa nút.

Một điều đặc biệt ở đây là chỉ với tương tác tầm ngắn U và thế năng ghim ε , mô hình của chúng tôi hỗ trợ sự ổn định của pha SS gây ra bởi lỗ trống. Trong khi hầu hết các kết quả khảo sát cho mô hình mạng đều chủ yếu thấy tín hiệu của pha SS gây ra bởi giữa nút ở phía trên mật độ tinh thể. Còn đối với mạng vuông cho cả hai loại hạt boson là boson lõi cứng và boson lõi mềm, khi chỉ có tương tác giữa các vị trí NN thì hệ thống xảy ra phân tách pha và không có SS gây ra bởi lỗ trống ở bên dưới mật độ tinh thể. Chỉ khi thêm vào tương tác tầm xa hơn là tương tác giữa các vị trí NNN và chiếm ưu thế so với tương tác NN thì SS – gây ra bởi lỗ trống mới có khả năng ổn định.

4.3.2.5. Khảo sát ảnh hưởng của cường độ tương tác U

Để kiểm tra tác động của cường độ tương tác giữa các hạt trên cùng một nút U lên quá trình hình thành pha, chúng tôi khảo sát sự phụ thuộc của mật độ hạt ρ theo thế hóa học trung bình μ cho các giá trị tương tác U khác nhau.



Hình 4.20: Đồ thị mật độ hạt ρ phụ thuộc vào thế hóa học trung bình μ với thế năng ghim $\varepsilon = 20t$ ở hai giá trị tương tác $U = 4t$ và $U = 8t$.

Rõ ràng, ở giá trị U nhỏ ($U = 4t$), chỉ có cao nguyên ở mật độ $\rho = 1$ xuất hiện tương ứng với trạng thái CDW2. Tăng cường độ tương tác $U = 8t$, các cao nguyên ở mật độ hạt $\rho = 1/2$ và $3/2$ được thêm vào đồng thời vùng cao nguyên tương ứng CDW2 bị thu hẹp lại so với trường hợp tương tác U nhỏ. Những biểu hiện này hoàn toàn phù hợp với bức tranh giản đồ pha 4.15.

Trong khảo sát đối với mô hình hạt boson lõi cứng, các kết quả khảo sát trước đó cả về lý thuyết [30, 75, 76] và mô phỏng [9, 11, 22] đều chỉ ra rằng chỉ có tương tác giữa các vị trí lân cận gần nhất là V_{nm} hệ thống xuất hiện pha tinh thể ô bàn cờ ở mật độ hạt $1/2$, xảy ra chuyển pha giữa trạng thái siêu chảy và pha tinh thể, không có tín hiệu pha siêu tinh thể tồn tại do hệ thống xảy ra hiện tượng phân tách pha. Để hỗ trợ ổn định sự hình thành pha siêu tinh thể và loại bỏ sự phân tách pha, các nhà khoa học tiếp tục nghiên cứu mở rộng cho mô hình Bose – Hubbard và thấy rằng khi tăng cường độ tương tác giữa các vị trí lân cận gần nhì là V_{nm} [9, 10] thì hệ thống xuất hiện pha tinh thể dạng sọc và pha siêu tinh thể SS tồn tại ổn định. Các kết quả trước đó đều thể hiện pha siêu tinh thể xuất hiện ở mật độ lân cận phía trên vùng pha tinh thể còn được biết đến là siêu tinh thể gây ra bởi khuyết tật giữa nút.

Còn đối với mô hình hạt boson lõi mềm, mô hình gốc gồm số hạng động năng t và thế năng tương tác giữa các hạt trên cùng một nút U , chỉ xảy ra chuyển pha từ trạng thái siêu chảy sang trạng thái điện môi Mott [30, 76]. Khi có biểu hiện của tương tác tầm xa là V_m , bức tranh pha biểu hiện thêm hai pha là pha tinh thể và pha siêu tinh thể. Như vậy có thể thấy tương tác đóng vai trò quyết định trong việc hình thành pha tinh thể và pha siêu tinh thể.

Các kết quả trong chương này tập trung vào khảo sát một yếu tố khác cũng góp phần định xứ các hạt là trường ngoài. Đối với mô hình hạt boson lõi cứng, khi thêm trường ngoài tuần hoàn ghim các hạt ở các vị trí xác định tương đương với mật độ hạt bằng $1/3$, lúc này Hamiltonian chỉ có động năng t , thế năng tương tác giữa các hạt ở vị trí lân cận gần nhất V_m và trường ngoài ε , hai pha tinh thể ở mật độ $1/3$ và $2/3$ được hình thành khi trường ngoài lớn hơn rất nhiều so với cường độ tương tác V_m và xuất hiện tín hiệu pha siêu tinh thể ở vùng mật độ lân cận phía trên và dưới vùng mật độ pha tinh thể tương ứng được hỗ trợ bởi khuyết tật giữa nút và khuyết tật lỗ trống theo quan điểm lập luận trước đó của Andreev – Liftshitz – Chester [43].

Tương tự khi khảo sát cho mô hình boson lõi mềm, thế năng ghim tuần hoàn cũng hỗ trợ hình thành pha tinh thể ở các mật độ hạt $1/2$, 1 và $3/2$. Đường cong khảo sát sự phụ thuộc mật độ hạt vào thế hóa biểu hiện liên tục chứng tỏ sự tồn tại của pha siêu tinh thể là pha trung gian kẹp giữa pha siêu chảy và pha tinh thể. Như vậy, chỉ với tương tác tầm ngắn kết hợp với tác dụng của thế năng bên ngoài, hai tham số trật tự đặc trưng cho tính chất siêu chảy và trật tự rắn tồn tại đồng thời ở trong mô hình này.

Trong thực nghiệm, các nghiên cứu tìm kiếm tín hiệu của pha siêu tinh thể trên các tinh thể thực như tinh thể He gặp nhiều bế tắc thì thí nghiệm với các nguyên tử ngưng tụ Bose – Einstein trong mạng quang học đã mở ra lối thoát cho công cuộc tìm kiếm này. Mạng quang học được biết đến là ứng cử viên tốt nhất hiện nay để quan sát thấy tín hiệu của trạng thái SS. Mạng quang học không chứa các tạp chất và chúng ta có thể dễ dàng điều khiển các tham số như cường độ tương tác.

Những năm gần đây, sự bùng nổ các tín hiệu của pha SS sọc rắn xuất hiện ở các thí nghiệm của nguyên tử siêu lạnh trong mạng quang học như trong hệ thống liên kết spin – quỹ đạo của nguyên tử Na^{23} [62] hay hệ thống tương tác dipole – dipole của nguyên tử Dy^{162} [100] và Dy^{164} [103] đã thu hút sự chú ý của các nhà nghiên cứu trở lại.

Chúng tôi nghiên cứu mô hình Bose – Hubbard là một mô hình hoàn hảo mô tả các tính chất động lực học của nguyên tử siêu lạnh trên mạng quang học. Mạng quang học [36] là phiên bản mở rộng của mạng tinh thể thực cho phép tìm hiểu kĩ hơn các tính chất cơ bản của vật chất với kích thước lớn hơn hàng nghìn lần so với mẫu tinh thể thực. Cấu trúc tinh thể được hình thành từ sự giao thoa của các chùm tia sáng laze. Các nguyên tử siêu lạnh bị giam giữ trong mạng quang học đóng vai trò của các hạt electron trong chất rắn thông thường. Các tham số vật lý của mạng quang học và mô hình Bose – Hubbard hoàn toàn tương ứng với nhau [26]. Thí nghiệm tương tác của các nguyên tử ngưng tụ Bose – Einstein với các mode quang học biểu hiện các hiện tượng đa dạng nên ngày càng được phát triển nghiên cứu rộng rãi trong thực tế. Để tạo ra được khí lượng tử Bose – Einstein thí nghiệm phải thực hiện trong buồng chân không siêu cao ở áp suất thích hợp khoảng 10^{-11} mBar [51]. Khi đặt khí ngưng tụ Bose – Einstein vào một mạng quang học, chuyển pha lượng tử từ trạng thái SF sang trạng thái MI được quan sát thấy ngay cả khi khoảng cách trung bình giữa các hạt lớn hơn rất nhiều so với chiều dài tán xạ. Trong thực nghiệm nghiên cứu khí lượng tử trên mạng quang học, số lượng nguyên tử trên mỗi vị trí mạng tinh thể là một yếu tố quan trọng trong việc xác định tính chất của hệ thống. Các thảo luận về phương pháp để tạo ra mạng tinh thể có số nguyên tử mong muốn trên mỗi vị trí trong mạng quang học được đề xuất bằng cách sử dụng trường ngoài thích hợp để liên kết số trạng thái nội nguyên tử lúc đầu với trạng thái nội khác bị bẫy trong mạng quang học thứ hai. Khi tương tác trên cùng một vị trí phụ thuộc vào trạng thái hoặc phụ thuộc vào mạng đủ lớn, tần số điều chỉnh của trường liên kết sẽ chuyển chọn lọc sang mạng quang học thứ hai số nguyên tử mà chúng ta mong muốn thông qua quá trình chuyển đổi photon

tương ứng. Sau quá trình chuyển đổi, mạng quang học thứ hai có số hạt chiếm giữ trên cùng một nút mạng theo yêu cầu. Chi tiết của quá trình này được trình bày rõ ràng trong tài liệu tham khảo [73]. Để điều khiển tương tác giữa các hạt trên cùng một nút mạng ở mô hình Bose – Hubbard có thể được hình thành trong mạng quang học thông qua cộng hưởng Feshbach và thế năng ghim tuần hoàn được tạo ra bằng cách đặt chồng thêm các chùm lase ở phía trên mạng nền.

Kết luận chương 4

Phương pháp mô phỏng QMC với thuật toán Worm đã được sử dụng để khảo sát mô hình Bose – Hubbard cho các hạt boson trong mạng vuông hai chiều và thu được các kết quả như sau:

Trong mô hình hạt boson lõi cứng, khi $\varepsilon \ll V_{nn}$, hệ thống chỉ biểu hiện pha tinh thể ô bàn cờ $\rho = 1/2$ tương tự như mô hình đồng nhất không có trường ngoài. Dưới tác dụng của thế năng ghim ε đủ lớn, hai pha tinh thể $\rho = 1/3$ và $2/3$ lần lượt xuất hiện và đặc biệt khi $\varepsilon \gg V_{nn}$, pha tinh thể ô bàn cờ ở $\rho = 1/2$ bị biến mất hoàn toàn. Ở lân cận vùng mật độ tinh thể $\rho = 1/3$ và $2/3$, pha siêu tinh thể được hỗ trợ hình thành ổn định ở mật độ ngay trên và phía dưới mật độ tinh thể.

Đối với hạt boson lõi mềm, hiệu ứng định xứ gây ra bởi thế năng ghim làm phát sinh ba kiểu trật tự sóng mật độ điện tích CDW tương ứng ở các mật độ $\rho = 1/2$, 1 và $3/2$. Giảm dần pha thể hiện đường biên giữa pha siêu chảy và sóng mật độ điện tích ở các mật độ tương ứng cũng được phác họa. Hệ thống xảy ra chuyển pha giữa trạng thái siêu chảy SF và sóng mật độ điện tích CDW biểu hiện thông qua sự thay đổi độ dốc trong đường cong mật độ hạt phụ thuộc vào thế hóa học.

Khi khảo sát các tham số trật tự, khả năng pha siêu tinh thể SS được tồn tại ở cả hai vùng mật độ phía trên và dưới của mật độ tinh thể tương ứng với trạng thái siêu tinh thể gây ra bởi khuyết tật giữa nút và khuyết tật giữa nút phù hợp với đề xuất của Andreev – Liftshitz và Chester.

Các kết quả của chương 4 liên quan đến hạt boson lõi cứng một phần được công bố trong công trình [2].

KẾT LUẬN

Luận án đã khảo sát pha, chuyển pha trong các mô hình mạng spin tương tác trao đổi mất trật tự, mạng boson hai chiều bằng phương pháp giải tích và mô phỏng. Các kết quả chính mà luận án thu được là:

1. Đã giải thích quá trình từ hóa loại I và bước nhảy của đường cong từ trở trong các vật liệu perovskite $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.95}\text{Co}_{0.05}\text{O}_3$ [66] và $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.97}\text{Ga}_{0.03}\text{O}_3$ [104] sử dụng mô hình Ising mất trật tự có tích phân trao đổi sắt từ hoặc phản sắt từ thẳng giáng với xác suất và độ lớn khác nhau. Bản chất của hiện tượng là sự định hướng lại đột ngột các đám spin tương tác phản sắt từ AF, sự mở rộng các đám spin tương tác sắt từ FM trong trường ngoài ở nhiệt độ xác định.

2. Sử dụng mô hình Ising mất trật tự có tích phân trao đổi thẳng giáng cho mạng Shastry – Sutherland và chỉ ra vai trò của cường độ tương tác giữa các vị trí lân cận gần nhất NN tác động lên sự hình thành và ổn định của bước nhảy từ chính ở giá trị mômen từ tỷ đối $m = 1/3$.

Đã chỉ ra được các điều kiện và yếu tố ảnh hưởng đến quá trình phát sinh các bước nhảy từ phân số. Đó là khi cường độ tương tác $J/J' = 1$ với xác suất p và thẳng giáng Δ lớn chuỗi các bước nhảy từ phân số ngày càng ổn định hơn.

Tìm thấy chuỗi bước nhảy ở các giá trị phân số của mômen từ tỷ đối phát sinh từ các nhiễu loạn có liên hệ mật thiết với bức tranh pha cơ bản của mô hình Shastry – Sutherland tiêu chuẩn. Thẳng giáng của tương tác trao đổi tại các vị trí NN, NNN cho phép các cấu hình mất trật tự khác nhau tồn tại như trong lời giải chính xác mô hình Shastry – Sutherland.

Lý thuyết này góp phần làm sáng tỏ cơ chế hình thành các bước nhảy nhỏ trong vật liệu tetraxit đất hiếm RB_4 .

3. Tìm thấy ba pha tinh thể xuất hiện ở các mật độ hạt trung bình $\rho = 1/3, 1/2$ và $2/3$ trong mô hình hạt boson lõi cứng dưới tác dụng của cường độ tương tác lân cận gần nhất NN và thế năng ghim tuần hoàn và ở các mật độ tương ứng $\rho = 1/2, 1, 3/2$ trong mô hình boson lõi mềm khi thế năng ghim và cường độ tương tác trên cùng

một vị trí đủ lớn. Khảo sát đường cong mật độ hạt trung bình trên một nút mạng phụ thuộc vào thể hóa học trung bình (ρ, μ) và các tham số trật tự cho thấy quá trình chuyển pha từ trạng thái siêu chảy SF sang trạng thái sóng mật độ điện tích CDW xảy ra trong mô hình.

Khác với các kết quả trước kia (pha siêu tinh thể được gây ra bởi khuyết tật lỗ trống ở bên dưới mật độ tinh thể chỉ được hình thành khi có mặt tương tác tầm xa là tương tác lân cận gần nhì NNN), luận án đã chỉ ra khả năng pha siêu tinh thể SS được hình thành bởi khuyết tật lỗ trống dưới tác dụng thế năng ghim tuần hoàn. Trong các mô hình này, pha siêu tinh thể có thể xuất hiện ở cũng mật độ lân cận phía trên và dưới mật độ tinh thể.

DANH MỤC CÁC CÔNG TRÌNH LIÊN QUAN ĐẾN LUẬN ÁN

Các bài báo liên quan đến luận án đã công bố:

- [1] Bach Huong Giang, Nguyen Thi Kim Oanh, Nguyen Van Chinh, Bach Thanh Cong (2015) “First order magnetization process in Polycrystalline Perovskite Manganite”, *Mater. Trans.* **56**, p. 1320.
- [2] Oanh Nguyen, Long Dang (2017) “A supersolid phase of hardcore boson in square optical superlattice”, *Eur. Phys. J. B* **90**, p. 71.
- [3] Oanh K. T. Nguyen, Phong H. Nguyen, Long D. Dang, Cong T. Bach and Giang H. Bach (2020) “Fluctuation inducing fractional magnetization behavior on the Shastry-Sutherland lattice”, *Physica B* **583**, 412012.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Tiếng Việt

- [1] Vũ Đình Cự (2001), “*Lý thuyết chuyển pha loại hai và hiện tượng tới hạn*”, NXB Bưu điện.
- [2] Nguyễn Hữu Đức (2003), “*Vật lý chuyển pha*”, NXB Đại học quốc gia Hà Nội.
- [3] Nguyễn Thị Kim Oanh (2014), “*Mô hình Ising và ứng dụng cho các chất sắt từ*”, Luận văn thạc sĩ vật lý, Đại học Khoa học Tự nhiên, Đại học Quốc gia Hà Nội.

Tiếng Anh

- [4] Akos Rapp (2008), “*Quantum Phase Transitions in Correlated Systems*”, Doctoral thesis, Department of Theoretical Physics, Budapest University of Technology and Economics, Hungary.
- [5] Amico L. and Penna V. (1998), “Dynamical Mean Field Theory of the Bose-Hubbard Model”, *Phys. Rev. Lett.* **80**, p. 2189.
- [6] Andreas Schmitt (2014), “Introduction to superfluidity Field - theoretical approach and applications”, *Lect. Notes Phys.* **888**, p.1. <https://arxiv.org/pdf/1404.1284.pdf>
- [7] B. T. Cong, P. H. Thao and N. T. Cuong (2009), “Tunnelling magnetoresistance in nanometer granular perovskite system”, *J. Phys.: Conf. Ser.* **187**, 012007.
- [8] Batrouni G. G., Hebert F., Scalettar R. T. (2006), “Supersolid Phases in the One-Dimensional Extended Soft-Core Bosonic Hubbard Model”, *Phys. Rev. Lett.* **97**, 087209.
- [9] Batrouni G. G., Scalettar R. T. (2000), “Phase Separation in Supersolids”, *Phys. Rev. Lett.* **84**, p. 1599.
- [10] Batrouni G. G., Scalettar R. T., Schmid G., Troyer M. and Dorneich A. (2001), “Quantum phase transitions in the two-dimensional hardcore boson model”, *Phys. Rev. B* **65**, 014513.

- [11] Batrouni G. G., Scalettar R. T., Zimanyi G. T. and Kampf. A. P. (1995), “Supersolids in the BoseHubbard Hamiltonian”, *Phys. Rev. Lett.* **74** (13), p. 2527.
- [12] Blume D. (2012), “Few-body physics with ultracold atomic and molecular systems in traps”, *Rep. Prog. Phys.* **75**, 046401.
- [13] Blume D. and Greene C. H. (2002), “Fermi pseudopotential approximation: Two particles under external confinement”, *Phys. Rev. A* **65**, 436131.
- [14] Boninsegni M. and Prokof'ev N. (2012), “Supersolids: what and where are they?”, *Rev. Mod. Phys.* **84**, p. 759.
- [15] Brunt D., Balakrishnan G., Mayoh A. A., Lees M. R., Gorbunov D., Qureshi N., Petrenko O. A. (2018), “ Magnetisation process in the rare earth tetraborides, NdB₄ and HoB₄”, *Sci. Rep.* **8**, p. 232.
- [16] Buschow K. H. J., Wohlfarth E. P. (1990), “*A handbook on the properties of magnetically ordered substances*”, *Ferromagnetic materials* **5**, North-Holland printer.
- [17] Callen H. B. (1963), “Green Function Theory of Ferromagnetism”, *Phys. Rev.* **130**, p. 890.
- [18] Čenčariková H. and Farkašovský P. (2015), “Fractional magnetization plateaus in the extended Ising model on the Shastry–Sutherland lattice: Application to rare-earth metal tetraborides”, *Phys. Status Solidi B* **252**, p. 333.
- [19] Ceperley D. M. (1995), “Path integrals in the theory of condensed helium”, *Rev. Mod. Phys.* **67**, p. 279.
- [20] Cinti F., Macr T., Lechner W., Pupillo G. and Poh T. (2014), “Defect-induced supersolidity with soft-core bosons”, *Nat. Commun.* **5**, p. 3235.
- [21] Dang L. and Boninsegni M. (2010), “Phases of lattice hard core bosons in a periodic superlattice”, *Phys. Rev. B* **81**, 224502.
- [22] Dang L., Boninsegni M. and Pollet L. (2008), “Vacancy supersolid of hard-core bosons on the square lattice”, *Phys. Rev. B* **78**, 132512.

- [23] David Voss (2012). " Supersolid Discoverer's New Experiments Show No Supersolid", *Physics* **5**, 111.
- [24] Dublennykh Y. I. (2012), " Ground States of the Ising Model on the Shastry-Sutherland Lattice and the Origin of the Fractional Magnetization Plateaus in Rare-Earth-Metal Tetraborides", *Phys. Rev. Lett.* **109**, 167202.
- [25] Dublennykh Y. I. (2013), "Ground states of an Ising model on an extended Shastry-Sutherland lattice and the 1/2-magnetization plateau in some rare-earth-metal tetraborides", *Phys. Rev. E* **88**, 022111.
- [26] Dutta O., Gajda M., Hauke P., Lewenstein M., Lühmann D. S., Malomed B. A., Sowiński T. and Zakrzewski J. (2015), "Non-standard Hubbard models in optical lattices", *Rep. Prog. Phys.* **78**, 066001.
- [27] Egor B. V., Prokof'ev N. V. (2015), "*Superfluid states of matter*", CRC Press, Boca Raton, United State of America.
- [28] Elbio Dagotto (2002), "*Nanoscale Phase Separation and Colossal Magnetoresistance*", Springer 2003rd edition.
- [29] Feynman R. P. (1953), "Atomic Theory of Liquid Helium Near Absolute Zero", *Phys. Rev.* **91**, p. 1291.
- [30] Fisher M. P. A., Weichman P. B., Grinstein G. and Fisher D. S. (1989), "Boson localization and the superfluid-insulator transition", *Phys. Rev. B* **40**, p. 546.
- [31] Friedman J. R., Sarachik M. P., Tejada J. and Ziolo R. (1996), "Macroscopic Measurement of Resonant Magnetization Tunneling in High-Spin Molecules", *Phys. Rev. Lett.* **76**, p. 3830.
- [32] Frontera C., Beran P., Bellido N., Hernandez-Velasco J. and Garcia-Munoz J. L. (2008), "Effects of d^0 substitution on phase competition in $\text{Pr}_{0.50}\text{Ca}_{0.50}\text{Mn}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_3$ ", *J. Appl. Phys.* **103**, 07F719.
- [33] Gradshteyn I. S. and Ryzhik I. M. (2007), "*Table of Integrals, Series and Products*" 7 Ed. Elsevier.
- [34] Grechnev A. (2013), "Exact ground state of the Shastry-Sutherland lattice with classical Heisenberg spins", *Phys. Rev. B* **87**, 144419.

- [35] Gregg Jaeger (1998), “The Ehrenfest Classification of Phase Transitions: Introduction and Evolution”, *Arch. Hist. Exact Sci.* **53**, p. 51.
- [36] Greiner M. and Fölling S. (2008), “Optical lattice”, *Nature* **453**, p. 736.
- [37] Gignoux D. (1995), “*Magnetic properties of metallic systems. Electronic and magnetic properties of metals and ceramics*”, In *Materials Science and Technology: A Comprehensive Treatment Vol III*, (K. H. J. Buschow ed.). VCH, Weinheim.
- [38] Harvey Gould, Jan Tobochnik, and Wolfgang Christian “*An Introduction to Computer Simulation Methods Third Edition (revised)*”, The Open Source Physics.
- [39] http://mafija.fmf.unilj.si/seminar/files/2017_2018/Pavesic_Luka_Simulating_the_Bose_Hubbard_model_in_optical_lattices.pdf
- [40] http://www.icmp.lviv.ua/ising/books/ising_lectures_in_lviv.pdf
- [41] <https://arxiv.org/abs/1410.1567>.
- [42] https://en.wikipedia.org/wiki/High-temperature_superconductivity
- [43] https://guava.physics.uiuc.edu/~nigel/courses/569/Essays_Fall2011/Files/clay.pdf
- [44] https://ps.uci.edu/cyu/p115A/LectureNotes/Lecture19/html_version/lecture19.html.
- [45] <https://www.nobelprize.org/uploads/2018/06/popular-physicsprize2016.pdf>
- [46] <https://www.tcm.phy.cam.ac.uk/~bds10/phase/introduction.pdf>
- [47] Huang W. C., Huo L., Tian G., Qian H. R., Gao X. S., Qin M. H. and Liu J. – M. (2012), “Multi-step magnetization of the Ising model on a Shastry–Sutherland lattice: a Monte Carlo simulation”, *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 386003.
- [48] Inoue J. and Maekawa S. (1996), “Theory of tunneling magnetoresistance in granular magnetic films”, *Phys. Rev. B* **53**, R11927.
- [49] Jaksch D. and Zoller P. (2005), “The cold atom Hubbard toolbox”, *Ann. Phys.* **315**, p. 52.

- [50] Jaksch D., Bruder C., Cirac J. I., Gardiner C. W. and Zoller P. (1998), “Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices”, *Phys. Rev. Lett.* **81**, p. 3108.
- [51] Julian Léonard (2017), “*A Supersolid of Matter and Light*”, Doctoral thesis of Sciences, ETH Zurich.
- [52] Kageyama H., Yoshimura K., Stern R., Mushnikov N. V., Onizuka K., Kato M., Kosuge K., Slichter C. P., Goto T. and Ueda Y. (1999), “ Exact Dimer Ground State and Quantized Magnetization Plateaus in the Two-Dimensional Spin System $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ ”, *Phys. Rev. Lett.* **82**, p. 3168.
- [53] Kodama K., Takigawa M., Horvatic M., Berthier C., Kageyama H., Ueda Y., Miyahara S., Becca F. and Mila F. (2002), “ Magnetic Superstructure in the Two-Dimensional Quantum Antiferromagnet $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ ”, *Science* **298**, p. 395.
- [54] Kościk P. and Sowiński T. (2018), “Exactly solvable model of two trapped quantum particles interacting via finite-range softcore interactions”, *Sci. Rep.* **8**, p. 48.
- [55] Kudasov Y. B., Korshunov A. S., Pavlov V. N., Maslov D. A. (2008), “ Dynamics of magnetization in frustrated spin-chain system $\text{Ca}_3\text{Co}_2\text{O}_6$ ”, *Phys. Rev. B* **78**, 132407.
- [56] Kuklov A. B., Prokof'ev N. V., Svistunov B. V. (2011), “How Solid is Supersolid?”, *Physics* **4**, p. 109.
- [57] Kunimi M. and Kato Y. (2012), “Mean-field and stability analyses of two-dimensional flowing soft-core bosons modeling a supersolid”, *Phys. Rev. B* **86**, 060510.
- [58] Khalatnikov I. (1989), “*An Introduction to the Theory of Superfluidity*”, Addison-Wesley, New York.
- [59] Khokon I. (2018), “*Quantum Phase Transitions in Optical Lattices*” Technical Report in Researchgate. [Doi: 10.13140/RG.2.2.21024.12806](https://doi.org/10.13140/RG.2.2.21024.12806)
- [60] Leggett A. J. (1970), “Can a Solid Be "Superfluid"?", *Phys. Rev. Lett.* **25**, p. 1543.

- [61] Levy F., Sheikin I., Berthier C., Horvatic M., Takigawa M., Kageyama H., Waki T. and Ueda Y. (2008), “Field dependence of the quantum ground state in the Shastry-Sutherland system $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ ”, *Europhys. Lett.* **81**, 67004.
- [62] Li J. R., Lee J., Huang W., Burchesky S., Shteynas B., Top F. Ç., Jamison A. O., Ketterle W. (2017), “A Stripe Phase with Supersolid Properties in Spin-Orbit-Coupled Bose-Einstein Condensates”, *Nature* **543**, p. 91.
- [63] Lin F., Maier T. A. and Scarola V. W. (2017), “Disordered Supersolids in the Extended Bose-Hubbard Model”, *Sci. Rep.* **7**, 12752.
- [64] Lin W. S., Yang T. H., Wang Y., Qin M. H., Liu J. – M., Ren Z. (2014), “Magnetization plateaus of the frustrated Ising Shastry–Sutherland system: Wang–Landau simulation “, *Phys. Lett. A* **378**, p. 2565.
- [65] Lincoln Carr (2010),” *Understanding Quantum Phase Transitions*”, CRC Press, United States of America.
- [66] Mahendiran R., Maignan A., Hebert S., Martin C., Hervieu M., Raveau B., Mitchell J. F. and Schiffer P. (2002), “Ultrasharp Magnetization Steps in Perovskite Manganites”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 286602.
- [67] Mařař S., Siemensmeyer K., Wheeler E., Wulf E., Beyer R., Hermannsdörfer T., Ignatchik O., Uhlarz M., Flachbart K., Gabáni S., Priputen P., Efdokimova A., Shitsevalova N. (2010), “Magnetism of Rare Earth Tetraborides”, *J. Phys.: Conf. Ser.* **200**, 032041.
- [68] Matthias Vojta (2003), “Quantum phase transition”, *Rep. Prog. Phys.* **66**, p. 12.
- [69] Maximilian Fries (2017), “*Phase transitions of borides and phosphides for application in magnetic energy conversion*”, Doctoral thesis, Department of Materials and Geosciences, Darmstadt Technical University, Germany.
- [70] McHenry M. E. and Laughlin D. E. (2002), “Theory of magnetic phase transition”, *Characterization of Materials* **1**, p. 528.

- [71] Michimura S., Shigekawa A., Iga F., Sera M., Takabatake T., Ohoyama, Okabe Y. (2006), “Magnetic frustrations in the Shastry–Sutherland system ErB₄”, *Physica B* **378-380**, p. 596.
- [72] National Research Council (1986), “*Condensed - Matter Physics.*” Washington DC, The National Academies Press.
- [73] Nikolopoulos G. M. and Petrosyan D. (2010), “Atom number filter in an optical lattice”, *J. Phys. B: At. Mol. Opt. Phys.* **43**, 131001.
- [74] Ohgoe T., Suzuki T. and Kawashima N. (2012), “Commensurate Supersolid of Three-Dimensional Lattice Bosons”, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 185302.
- [75] Otterlo A. V. and Wagenblast K. H. (1994), “Coexistence of Diagonal and Off-Diagonal LongRange Order: A Monte Carlo Study”, *Phys. Rev. Lett.* **72** , p. 3598.
- [76] Otterlo A. V., Wagenblast K. H., Baltin R., Bruder C., Fazio R. and Schön G. (1995), “Quantum phase transitions of interacting bosons and the supersolid phase”, *Phys. Rev. B* **52**, 16176.
- [77] Pollet L., Houcke K. V. and Rombouts S. M. A. (2007), “Engineering Local optimality in Quantum Monte Carlo algorithms”, *J. Comput. Phys.* **225**, p. 2249.
- [78] Pollock E. L. and Ceperley D. M. (1987), “Path-integral computation of superfluid densities”, *Phys. Rev. B* **36**, p. 8343.
- [79] Prokof’ev N. V., Svistunov B. V., Tupitsyn I. S. (1998), ““Worm” algorithm in quantum Monte Carlo simulations”, *Phys. Lett. A* **238**, p. 253.
- [80] Prokof’ev N. V., Svistunov B. V., Tupitsyn I. S. (1998), “Exact, complete, and universal continuous-time worldline Monte Carlo approach to the statistics of discrete quantum systems”, *J. Exp. Theor. Phys.* **87**, p. 310.
- [81] Qin M. H., Wang K. F., Liu J. M. (2009), “Two-step magnetization in a spin-chain system on the triangular lattice: Wang-Landau simulation”, *Phys. Rev. B* **79**, 172405.

- [82] Qin M. H., Zhang G. Q., Wang K. F., Gao X. S., Liu J. M. (2011), “Magnetic behaviors of classical spin model on the Shastry –Sutherland lattice: Monte Carlo simulation”, *J. Appl. Phys.* **109**, 07E103.
- [83] Ramirez A. P., Shastry B. S., Hayashi A., Krajewski J. J., Huse D. A., and Cava R. J. (2002), “ Multiple Field-Induced Phase Transitions in the Geometrically Frustrated Dipolar Magnet: $\text{Gd}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ ”, *Phys. Rev. Lett.* **89**, 067202.
- [84] Raychaudhuri P., Sheshadri K., Taneja P., Bandyopadhyay S., Ayyub P., Nigam A. K., Pinto R., Chaudhary S. and Roy S. B. (1999), “Spin – polarized tunneling in the half metallic ferromagnets $\text{La}_{0.7-x}\text{Ho}_x\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ ($x = 0$ and $x = 0.15$): Experiments and theory”, *Phys. Rev. B* **59**, 13919.
- [85] Regeciová L. and Farkašovský P. (2019), “Magnetic phase diagram of the Ising model with the long-range RKKY interaction”, *Eur. Phys. J. B* **92**, p. 184.
- [86] Rontani M. (2012), “Tunneling theory of two interacting atoms in a trap”, *Phys. Rev. Lett.* **108**, 115302.
- [87] Saccani S., Moroni S. and Boninsegni M. (2011), “ Phase diagram of soft-core bosons in two dimensions”, *Phys. Rev. B* **83**, 092506.
- [88] Sachdev S. (2011), “*Quantum Phase Transitions*”, Cambridge University Press.
- [89] Sachdev S. and Keimer B. (2011), “Quantum criticality”, *Physics Today* **64**, p. 29.
- [90] Sandvik A. W. (1999), “Stochastic series expansion method with operator-loop update”, *Phys. Rev. B* **59**, R14157.
- [91] Scalettar R. T., Batrouni G. G., Kampf A. P. and Zimanyi G. T. (1994), “Simultaneous Diagonal and Off-Diagonal Order in the Bose-Hubbard Hamiltonian”, *Phys. Rev. B* **51**, p. 8467.

- [92] Sengupta P., Pryadko L. P., Alet F., Troyer M. and Schmid G. (2005), “Supersolids versus Phase Separation in Two-Dimensional Lattice Bosons”, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 207202.
- [93] Shapira Y. And Bindilatti V. (2002), “Magnetization-step studies of antiferromagnetic clusters and single ions: Exchange, anisotropy, and statistics”, *J. Appl. Phys.* **92**, p. 4155.
- [94] Siemensmeyer K., Wulf E. , Mikeska H. J., Flachbart K., Gabáni S., Mat’áš S., Priputen P., Efdokimova A. and Shitsevalova N. (2008), “ Fractional Magnetization Plateaus and Magnetic Order in the Shastry-Sutherland Magnet TmB_4 ”, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 177201.
- [95] Sindzingre P., Klein M. L., Ceperley D.M. (1989), “Path-integral Monte Carlo study of low-temperature 4He clusters”, *Phys. Rev. Lett.* **63**, p. 1601.
- [96] Sivasankaran S., Nayak P. K. and Günay E. (2020), “*Solid State Physics Metastable, Spintronics Materials and Mechanics of Deformable Bodies - Recent Progress*”, IntechOpen, London, United Kingdom.
- [97] Smith R. W. and Keszler D. A. (1991), “Synthesis, structure, and properties of the orthoborate $SrCu_2(BO_3)_2$ ”, *J. Solid State Chem.* **93**, p. 430.
- [98] Suzuki M. (1976), “Relationship between d-Dimensional Quantal Spin Systems and (d+1)-Dimensional Ising Systems: Equivalence, Critical Exponents and Systematic Approximants of the Partition Function and Spin Correlations”, *Prog. Theor. Exp. Phys.* **56**, p. 1454.
- [99] Syljuasen O. F. and Sandvik A. W. (2002), “Quantum Monte Carlo with directed loops”, *Phys. Rev. E* **66**, 046701.
- [100] Tanzi L., Lucioni E., Fam F., Catani J., Fioretti A., Gabbanini C., Bisset R. N., Santos L. and Modugno G. (2019), “Observation of a Dipolar Quantum Gas With Metastable Supersolid Properties”, *Phys. Rev. Lett.* **122**, 130405.
- [101] Tsui Y. K., Burns C. A., Snyder J. and Schiffer P. (1999), “Magnetic Field Induced Transitions from Spin Glass to Liquid to Long Range Order in a 3D Geometrically Frustrated Magnet”, *Phys. Rev. Lett.* **82**, p. 3532.

- [102] Trotter H. F. (1959), “On the Product of Semi-Groups of Operators”, *Proc. Am. Math. Soc.* **10**, p. 545.
- [103] Wenzel M., Böttcher F., Langen T., Ferrier-Barbut I. and Pfau T. (2017), “Striped states in a many-body system of tilted dipoles”, *Phys.Rev. A* **96**, 053630.
- [104] Wu Y. Y., Li H. N., Xia Z. C., Huang Y., Ouyang Z. W., Li L., Xiao L. X., Peng L. P., Huang J. W. and Zuo H. K. (2011), “Magnetic field-induced metamagnetic transitions of $\text{Pr}_{0.5}\text{Ca}_{0.5}\text{Mn}_{0.97}\text{Ga}_{0.03}\text{O}_3$ ”, *J. Appl. Phys.* **110**, 013907.
- [105] Ye L., Suzuki T. and Checkelsky J. G. (2017), “Electronic transport on the Shastry-Sutherland lattice in Ising-type rare-earth tetraborides”, *Phys. Rev. B* **95**, 174405.
- [106] Yoshii S., Yamamoto T., Hagiwara M., Michimura S., Shigekawa A., Iga F., Takabatake T. and Kindo K. (2008), “Multistep Magnetization Plateaus in the Shastry-Sutherland System TbB_4 ”, *Phys. Rev. Lett.* **101**, 087202.
- [107] Zhitomirsky M. E., Honecker A. and Petrenko O. A. (2000), “Field Induced Ordering in Highly Frustrated Antiferromagnets”, *Phys. Rev. Lett.* **85**, p. 3269.