Tạp chí Khoa học Trường Đại học Cần Thơ
Số chuyên đề: Khoa học tự nhiên
website: ctujsvn.ctu.edu.vn

DOI:10.22144/ctu.jvn.2022.113

NGHIÊN CỨU CHUYỂN PHA TRONG MÔ HÌNH XYh_4 BẰNG PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG MONTE CARLO

Trương Thị Bạch Yến[2*], Đoàn Thị Thanh Phương[1], Dương Xuân Núi[3], Nguyễn Đức Trung Kiên[1], Nguyễn Trí Tuấn[2] và Đào Xuân Việt[1*]

[1]*Viện Đào tạo Quốc tế về Khoa học Vật liệu (ITIMS), Trường Đại học Bách Khoa Hà Nội*

[2]*Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường Đại học Cần Thơ*

[3]*Khoa Cơ điện và Công trình, Trường Đại học Lâm nghiệp Hà Nội*

[*]*Người chịu trách nhiệm về bài viết: Trương Thị Bạch Yến (email: truongthibachyen@gmail.com); Đào Xuân Việt (email: viet.daoxuan@hust.edu.vn)*

Thông tin chung:
Ngày nhận bài: 18/07/2022
Ngày nhận bài sửa: 26/07/2022
Ngày duyệt đăng: 28/07/2022

Title:
Monte Carlo simulation studies of phase transition phenomenan in the XYh_4 model

Từ khóa:
Bất đẳng hướng, hiện tượng chuyển pha, mô hình XY, mô phỏng Monte Carlo

Keywords:
Anisotropy, Monte Carlo simulation method, phase transition, XY model

ABSTRACT

The two-dimensional (2D) conventional XY model exhibits unusual infinite order Kosterlitz-Thouless (KT) phase transition. However, the real magnetic crystals are subject to anisotropic crystal field interaction besides the exchange interaction. Thus, the more general XY model provides h_4 anisotropic interaction, namely 2D XY with 4-fold anisotropic crystal fields (XYh_4) could be used to describe real materials. This model has been extensively studied using theory (mean field and renormalization) and numerical simulations. However, the issue of the phase transition order of the XYh_4 model being either the second-order Ising phase transition or the KT phase transition is still controversial. To further clarify this issue, Monte Carlo simulation for XYh_4 model was performed by varying the amplitude of the anisotropic term.

TÓM TẮT

Mô hình hai chiều (2D) XY thông thường có xuất hiện chuyển pha bậc vô hạn hay còn gọi là chuyển pha Kosterlitz-Thouless (KT). Tuy nhiên, các vật liệu thực tế thì ngoài tương tác trao đổi còn có thêm vai trò của trường tinh thể. Do vậy, mô hình tổng quát 2D XYh_4 là mô hình XY có thêm trường tinh thể bất đẳng hướng h_4 có triển vọng mô tả các vật liệu. Mô hình XYh_4 đã và đang được nghiên cứu bằng lý thuyết giải tích (lý thuyết trường trung bình hoặc tái chuẩn hóa) và mô phỏng số. Tuy nhiên, chuyển pha của mô hình XYh_4 vẫn còn tranh luận và chưa thống nhất là mô hình XYh_4 có chuyển pha bậc 2 Ising hay chuyển pha KT. Để làm rõ hơn vấn đề này, sự chuyển pha của XYh_4 được khảo sát phụ thuộc vào trường tinh thể bất đẳng hướng h_4 bằng phương pháp mô phỏng Monte Carlo.

1 GIỚI THIỆU

Hiện tượng chuyển pha của vật liệu màng mỏng từ tính luôn được quan tâm nghiên cứu vì có các pha và chuyển pha khác vật liệu khối. Về khía cạnh thực nghiệm, các tác giả đã đo tham số tới hạn β của chuyển pha trong vật liệu màng mỏng từ tính có trường tinh thể bất đẳng hướng và nhận định tham số tới hạn β có nhiều giá trị khác nhau, một số thuộc lớp chuyển pha bậc 2 (Ising), một số thuộc lớp

chuyển pha Kosterlitz-Thouless (KT) và một số có giá trị từ lớp Ising đến lớp KT (Taroni et al., 2008). Về khía cạnh lý thuyết, các nghiên cứu tiên đoán chỉ có một số hữu hạn các giá trị tham số tới hạn β tương ứng với các lớp chuyển pha. Lớp phổ quát Ising có β = 0,125 được tính từ mô hình 2D Ising. Lớp phổ quát XY có β = 0,23 được tính từ mô hình 2D XY. Như vậy, mô hình Ising và XY không phù hợp để mô tả chuyển pha của các vật liệu có 0,125 < β < 0,23. Mô hình XYh_p với vector spin XY và cường độ trường tinh thể h_p có tiềm năng mô tả được các vật liệu hai chiều có trường tinh thể bất đẳng hướng (Bramwell et al., 1997).

Mô hình XYh_p đã được nghiên cứu xây dựng giản đồ pha bằng lý thuyết nhóm tái chuẩn hoá (Jose et al., 1977; Cardy et al., 1982; Reed, 1991) và mô phỏng (Lapilli et al., 2006; Taroni et al., 2008; Tuấn và ctv., 2020). Với $p \leq 4$, mô hình chỉ có một chuyển pha bậc 2 giữa pha mất trật tự ở nhiệt độ cao và pha trật tự ở nhiệt độ thấp. Với $p > 4$, mô hình có hai chuyển pha KT giữa pha mất trật tự ở nhiệt độ cao, pha trật tự ở nhiệt độ thấp và pha giả trật tự ở vùng giữa.

Với $p = 4$, khi cường độ trường tinh thể bằng không ($h_4 = 0$) mô hình XYh_4 trở thành mô hình XY thông thường với một chuyển pha KT giữa pha mất trật tự ở nhiệt độ cao và pha giả trật tự ở nhiệt độ thấp (Kosterlitz et al., 1973; Komura, 2012). Khi cường độ trường tinh thể rất lớn ($h_4 \to \infty$), mô hình XYh_4 trở thành mô hình 4-state clock, có chuyển pha tương đương với mô hình Ising với chuyển pha bậc hai giữa pha mất trật tự ở nhiệt độ cao và pha trật tự ở nhiệt độ thấp (Tobochnik et al., 1979; Tobochnik, 1982). Khi cường độ trường tinh thể hữu hạn, chuyển pha của XYh_4 còn nhiều tranh luận và chưa thống nhất. Taroni và cộng sự khẳng định XYh_4 chỉ có chuyển pha bậc 2 và tham số tới β thay đổi trong một miền ($0{,}125 \leq \beta \leq 0{,}23$) phụ thuộc vào cường độ của trường tinh thể h_4 bằng phương pháp mô phỏng Monte Carlo (Taroni et al., 2008). Tuy nhiên, Rastelli và cộng sự lại đưa ra nhận định khác hẳn, đó là mô hình XYh_4 có xuất hiện chuyển pha KT từ kết quả mô phỏng Monte Carlo (Rastelli et al., 2004b).

Để làm rõ hiện tượng chuyển pha trong mô hình XYh_4, sự chuyển pha của mô hình này được khảo sát phụ thuộc vào cường độ trường tinh thể bất đẳng hướng h_4 bằng phương pháp mô phỏng Monte Carlo (MC) trên mạng hai chiều hình vuông.

2 MÔ HÌNH VÀ MÔ PHỎNG

Mô hình XY trong mạng hai chiều hình vuông với sự xuất hiện của trường tinh thể bất đẳng hướng bốn hướng (XYh_4) với Hamilton được định nghĩa như sau (Jose et al., 1977):

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} cos(\theta_i - \theta_j) - h_4 \sum_i cos(4\theta_i)$$

Trong đó, θ_i là góc giữa vector spin thứ i với trục x, mô tả trạng thái của vector spin thứ i, $J = 1$ là hằng số tương tác trao đổi giữa các spin. Thành phần thứ nhất mô tả tương tác trao đổi của các cặp spin lân cận, i và j chạy qua mọi vị trí trong toàn bộ mạng hình vuông, thành phần thứ hai mô tả tương tác của trường tinh thể bất đẳng hướng bốn hướng với cường độ h_4.

Bảng 1. Các tham số mô phỏng MC

h_4	L	N_T	N_{MC}
1	16	46	10^7
	32	46	10^7
	64	41	10^7
	128	32	10^7
0,5	16	63	10^7
	32	63	10^7
	64	63	10^7
	128	50	10^7
0,1	16	79	10^7
	32	79	10^7
	64	74	10^7
	128	66	10^7
0,05	16	68	10^7
	32	68	10^7
	64	68	10^7
	128	55	10^7

(Ghi chú: L = 16, 32, 64, 128 là kích thước hệ; h_4 là cường độ trường tinh thể bất đẳng hướng; N_T là tổng số điểm nhiệt độ; N_{MC} là tổng số bước MC. Trong đó một nửa số bước N_{MC} đầu để hệ đạt được trạng thái cân bằng và nửa số bước N_{MC} sau để tính toán các đại lượng vật lý thống kê)

MC được tiến hành mô phỏng cho mạng hai chiều hình vuông có kích thước $N = L^2$, với L = 16, 32, 64, 128 và áp dụng điều kiện biên tuần hoàn. Để đưa hệ về trạng thái cân bằng, thuật toán Metropolis và thuật toán Wolff được sử dụng kết hợp. Trong đó, một bước MC được định nghĩa bằng tổ hợp 1 bước Wolff và 1 bước Metropolis (Nui et al., 2018). Điều kiện cân bằng đã được kiểm tra thông qua sự chồng chập của nhiệt dung riêng.

Các đại lượng vật lý thống kê được mô phỏng và tính toán trong nghiên cứu này.

Nhiệt dung riêng:

$$C = \frac{1}{N^2 k_B T^2}\left(\langle E^2\rangle - \langle E\rangle^2\right) = \frac{1}{k_B T^2}\left(\langle e^2\rangle - \langle e\rangle^2\right),$$

trong đó $E = \langle H\rangle$ và $e = E/N$.

Độ từ hóa:

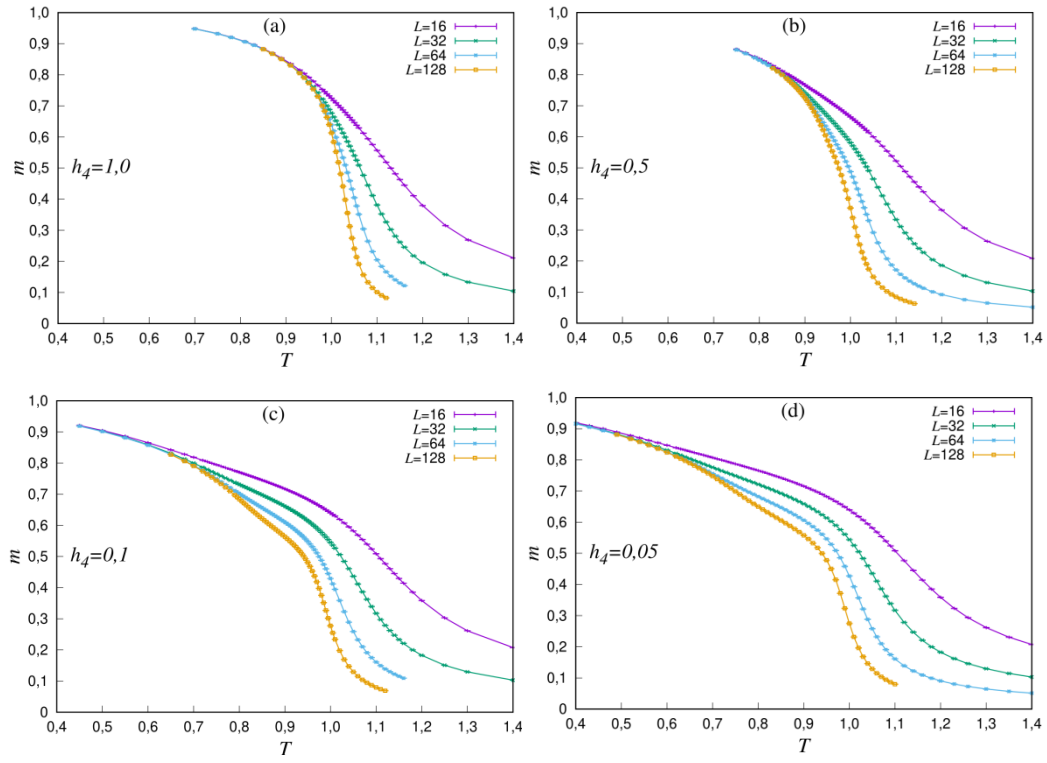
$$m = \frac{1}{N}\left[\left(\sum_i \cos\theta_i\right)^2 + \left(\sum_i \sin\theta_i\right)^2\right]^{1/2}$$

Độ cảm từ:

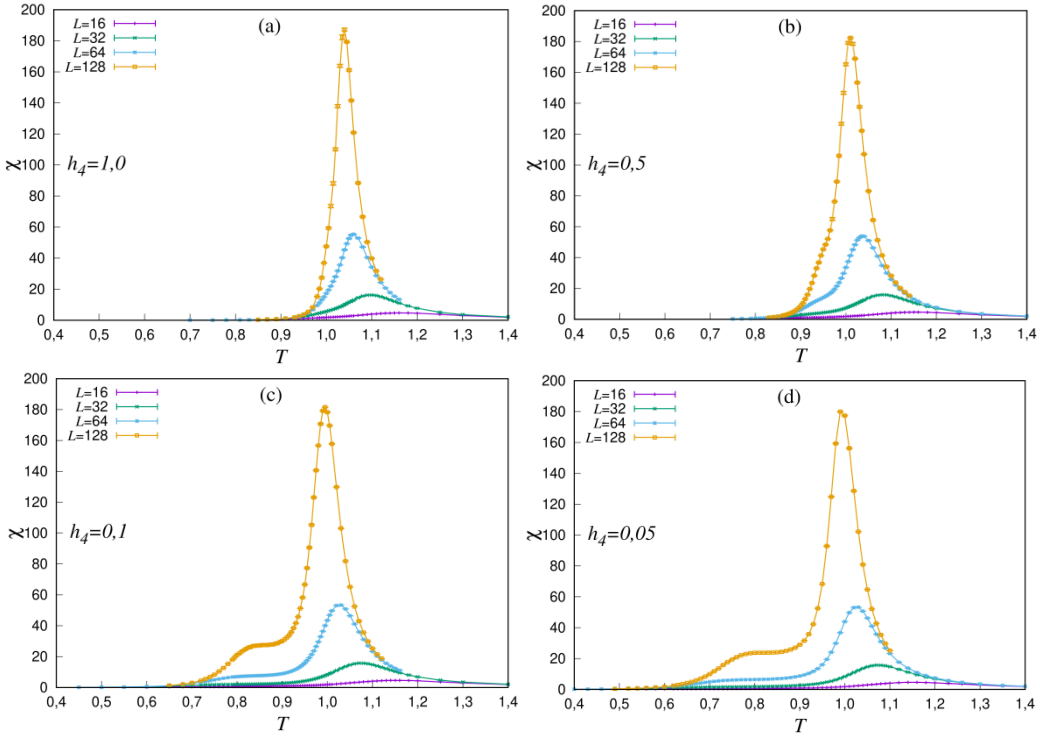
$$\chi = \frac{1}{N k_B T}\left(\langle m^2\rangle - \langle m\rangle^2\right)$$

3 KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

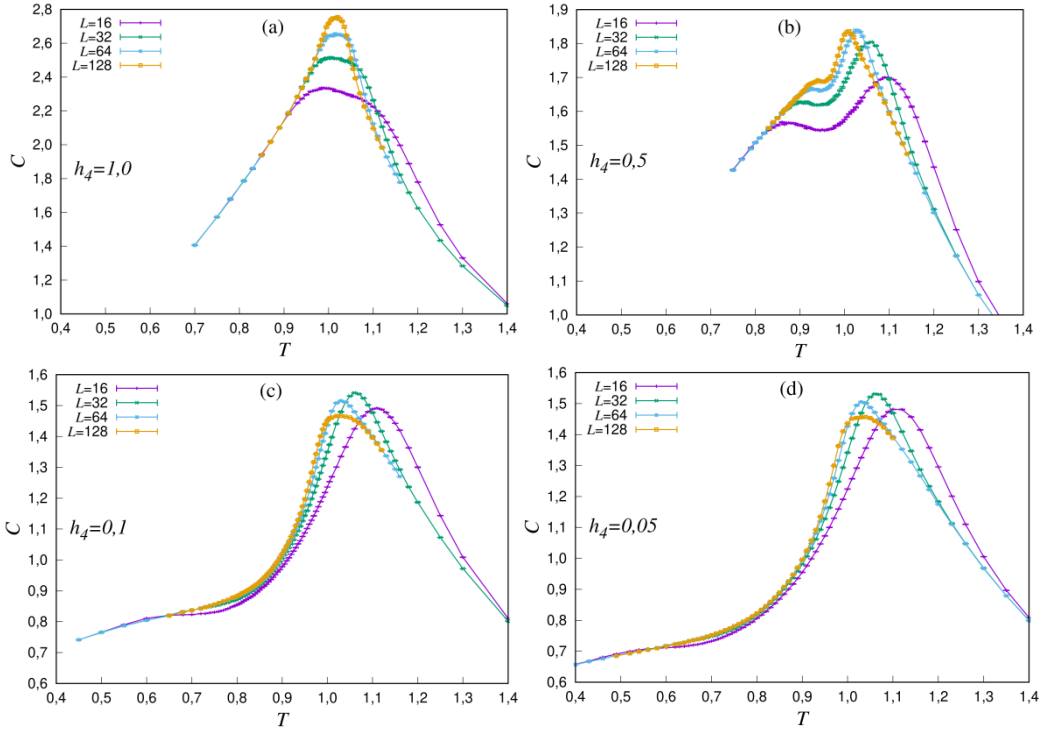
Hình 1 trình bày tham số trật tự (độ từ hóa) phụ thuộc vào nhiệt độ cho các cường độ trường tinh thể khác nhau $h_4 = 1$ (a), $h_4 = 0{,}5$ (b), $h_4 = 0{,}1$ (c), $h_4 = 0{,}05$ (d). Dữ liệu độ từ hóa $h_4 = 1$ phù hợp với dữ liệu của Rastelli (Rastelli et al., 2004a) và $h_4 < 1$ phù hợp với dữ liệu Taroni (Taroni et al., 2008). Với $h_4 = 1$, khi kích thước L tăng thì độ từ hóa không phụ thuộc kích thước ở vùng nhiệt độ thấp ($T < 0{,}9$) và giảm dần về 0 ở vùng nhiệt độ cao ($T > 0{,}9$). Đây là biểu hiện điển hình của chuyển pha bậc 2 từ pha trật tự sang pha mất trật tự, tương tự như độ từ hóa của mô hình 2D Ising. Với $0{,}05 \le h_4 \le 0{,}5$, độ từ hóa xuất hiện ba biểu hiện khác nhau: độ từ hóa không phụ thuộc vào kích thước ở vùng nhiệt độ thấp (pha trật tự), phụ thuộc vào kích thước khác nhau ở vùng nhiệt độ giữa (pha KT) và vùng nhiệt độ cao (pha mất trật tự). Biểu hiện của độ từ hóa giống với độ từ hóa của mô hình XYh_6. Mô hình XYh_6 đã được chứng minh sự tồn tại của 2 chuyển pha KT bằng lý thuyết tái chuẩn hóa và phương pháp mô phỏng MC (Rastelli et al., 2004a). Như vậy, độ từ hóa có biểu hiện chuyển pha bậc 2 cho $h_4 = 1$ và biểu hiện chuyển pha KT cho $h_4 < 1$.



Hình 1. Độ từ hóa *m* phụ thuộc nhiệt độ cho các trường hợp $h_4 = 1$ (a), $h_4 = 0{,}5$ (b), $h_4 = 0{,}1$ (c), $h_4 = 0{,}05$ (d). Đơn vị nhiệt độ *T* là (k_B/J) K



Hình 2. Độ cảm từ phụ thuộc vào nhiệt độ cho các trường hợp h_4 = 1 (a), h_4 = 0,5 (b), h_4 = 0,1 (c), h_4 = 0,05 (d)



Hình 3. Nhiệt dung riêng phụ thuộc nhiệt độ cho các trường hợp h_4 = 1 (a), h_4 = 0,5 (b), h_4 = 0,1 (c) và h_4 = 0,05 (d)

Hình 2 trình bày sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ cảm từ cho các cường độ trường tinh thể khác nhau h_4 = 1 (a), h_4 = 0,5 (b), h_4 = 0,1 (c), h_4 = 0,05 (d). Dữ liệu mô phỏng của độ cảm từ tại h_4 = 0,05, 0,1 phù hợp với dữ liệu của Rastelli và dữ liệu tại h_4 = 0,5 khác với dữ liệu Rastelli (Rastelli et al., 2004b). Với h_4 = 1, độ cảm từ xuất hiện một đỉnh tại T ~ 1, tương tự như độ cảm từ của mô hình 2D Ising. Với h_4 = 0,5, độ cảm từ xuất hiện một đỉnh tại T ~ 1 và một vai tại T ~ 0,95. Với h_4 = 0,1, độ cảm từ có một đỉnh tại T ~ 1 và một đỉnh nhỏ tại T ~ 0,85. Với h_4 = 0,05, độ cảm từ có một đỉnh tại T ~ 1 và một đỉnh nhỏ tại T ~ 0,78. Thêm nữa, khi h_4 giảm thì nhiệt độ vai cũng giảm, trong giới hạn $h_4 \rightarrow 0$ thì nhiệt độ vai có xu hướng tiến về 0, phù hợp với biểu hiện của độ cảm từ của 2D XY. Như vậy, với h_4 nhỏ, độ cảm từ của XYh_4 có biểu hiện giống với độ cảm từ của XYh_6 (Rastelli et al., 2004a). Trường hợp XYh_6 đã được chứng minh sự tồn tại của 2 chuyển pha KT bằng lý thuyết tái chuẩn hóa và mô phỏng MC. Do vậy, sự phụ thuộc kích thước của độ cảm từ chỉ ra XYh_4 có thể tồn tại 2 chuyển pha KT. Ở đây, nhiệt độ chuyển pha từ nhiệt độ của vai và nhiệt độ của đỉnh nhỏ không xác định được.

Hình 3 trình bày sự phụ thuộc vào nhiệt độ của nhiệt dung riêng cho các cường độ trường tinh thể khác nhau h_4 = 1 (a), h_4 = 0,5 (b), h_4 = 0,1 (c), h_4 = 0,05 (d). Với h_4 = 0,05, nhiệt dung riêng xuất hiện một đỉnh không phân kỳ theo kích thước L tại nhiệt độ xung quanh T ~ 1, biểu hiện giống với nhiệt dung riêng của mô hình 2D XY (Komura et al., 2012), đây là dấu hiệu chuyển pha KT. Với h_4 đi từ 0,1 đến 0,5, nhiệt dung riêng xuất hiện một đỉnh tại T ~ 1 và thêm một đỉnh nhỏ không phụ thuộc kích thước. Khi h_4 tăng, đỉnh nhỏ này di chuyển từ T ~ 0,65 đến T ~ 0,95 và có dấu hiệu chồng chập vào đỉnh lớn tại 0,5 < h_4 < 1. Với h_4 =1, đỉnh của nhiệt dung riêng trở nên phân kỳ theo kích thước, giống với nhiệt dung riêng của mô hình 2D Ising, đây là dấu hiệu của chuyển pha bậc 2. Như vậy, h_4 = 1 có dấu hiệu chuyển pha bậc 2, h_4 < 1 có dấu hiệu chuyển pha KT.

4 KẾT LUẬN

Hiện tượng chuyển pha của mô hình XY được tiến hành nghiên cứu trong mạng hai chiều hình vuông với sự xuất hiện của trường tinh thể bất đẳng hướng bốn hướng (XYh_4) bằng phương pháp mô phỏng MC. Các đại lượng độ từ hóa, độ cảm từ và nhiệt dung riêng được tính toán và phân tích. Kết quả mô phỏng chỉ ra rằng khi h_4 = 1 mô hình chỉ có một chuyển pha bậc 2 phù hợp với giới hạn h_4 lớn. Khi h_4 < 1, mô hình có dấu hiệu xuất hiện 2 chuyển pha KT, chuyển pha ở nhiệt độ cao không phụ thuộc vào giá trị h_4, chuyển pha ở nhiệt độ thấp di chuyển về phía 0 dần khi h_4 giảm.

LỜI CẢM TẠ

Công trình nghiên cứu này được hoàn thành với sự hỗ trợ từ đề tài Bộ Giáo dục và Đào tạo với mã số: B2021-BKA-01.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Bramwell, S.T., Holdsworth, P. C. W., & Rothman, J. (1997). Magnetization in Ultrathin Films: Critical Exponent β for the 2D-XY Model with 4-Fold Crystal Fields, Mod. Phys. Lett. B, 11(4), 139-148. https://doi.org/10.1142/S0217984997000190

Cardy, J. L., & Ostlund, S. (1982). Random symmetry-breaking fields and the XY model. Phys. Rev. B, 25(11), 6899. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.25.6899

Jose, J. V., Kirkpatrick, S., Kadanoff, L. P., & Nelson, D. R. (1977). Renormalization, vortices, and symmetry-breaking perturbations in the two-dimensional planar model, Phys. Rev. B, 16(3), 1217-1241. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.16.1217

Komura, Y., & Okabe, Y. (2012). Large-Scale Monte Carlo Simulation of Two-Dimensional Classical XY Model Using Multiple GPUs. J. Phys. Soc. Jpn., 81(11), 113001. https://doi.org/10.1143/JPSJ.81.113001

Kosterlitz, J. M., & Thouless, D. J. (1973). Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. Journal of Physics C: Solid State Physics, 6, 1181. https://doi.org/10.1088/0022-3719/6/7/010

Lapilli, C. M., Pfeifer, P., & Wexler, C. (2006). Universality Away from Critical Points in Two-Dimensional Phase Transitions. Phys. Rev. Lett., 96(14), 140603. https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.96.140603

Nui, D. X., Tuan, L., Kien, N. D. T., Huy, P. T., Dang, T. H., & Viet, D. X. (2018). Correlation length in a generalized two-dimensional XY model. Phys. Rev. B, 98(14), 144421. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.98.144421

Rastelli, E., Regina, S., & Tassi, A. (2004) Monte Carlo simulation of a planar rotator model with symmetry-breaking fields. Phys. Rev. B, 69(17), 174407. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.69.174407

Rastelli, E., Regina, S., & Tassi, A. (2004) Monte Carlo simulation for square planar model with a small fourfold symmetry-breaking field. Phys. Rev. B, 70(17), 174447. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.70.174447

Reed, P. (1991). Critical properties of the two-dimensional planar spin model in the presence of p-fold random anisotropy. Journal of Physics A: Mathematical and General, 24, L1299. https://doi.org/10.1088/0305-4470/24/21/008

Taroni, A., Bramwell, S. T., & Holdsworth, P. C. W. (2008). Universal window for two-dimensional critical exponents. J. Phys.: Condens. Matter 20, 275233. https://doi.org/10.1088/0953-8984/20/27/275233

Tobochnik, J., & Chester, G. V. (1979). Monte Carlo study of the planar spin model. Phys. Rev. B, 20(9), 3761. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.20.3761

Tobochnik. J. (1982). Properties of the q-state clock model for q=4, 5, and 6. Phys. Rev. B, 26(11), 6201. https://doi.org/10.1103/PhysRevB.26.6201

Tuấn, L. M., Núi, D. X., Yến, T. T. B., Kiên, N. D. T., Việt, D. X. (2020). Nghiên cứu ảnh hưởng của trường tinh thể h3 đến sự chuyển pha của mô hình XY hai chiều. Tạp chí Khoa học, Trường Đại học Sư phạm, Đại học Huế, 3(55), 68-76.