

## CHIỀU DÀI TƯƠNG QUAN TRONG MÔ HÌNH 2D XY CHO HỆ VẬT LIỆU TỪ

**Lưu Bích Linh<sup>1</sup>, Phạm Văn Tĩnh<sup>2</sup>, Hoàng Hà<sup>3</sup>, Bùi Thị Toàn Thu<sup>4</sup>,  
Nguyễn Vũ Cẩm Bình<sup>5</sup>, Nguyễn Thị Huyền<sup>6</sup>, Dương Xuân Núi<sup>7</sup>, Trần Nho Thọ<sup>8</sup>,  
Lương Minh Tuấn<sup>9</sup>, Nguyễn Đức Trung Kiên<sup>10</sup>, Đào Xuân Việt<sup>11</sup>**

<sup>1,2,3,4,5,6,7,8</sup>Trường Đại học Lâm nghiệp

<sup>9</sup>Trường Đại học Xây dựng - Hà Nội

<sup>10,11</sup>Trường Đại học Bách khoa - Hà Nội

### TÓM TẮT

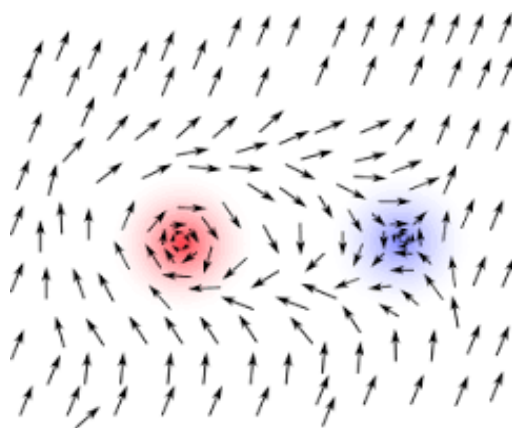
Vấn đề chuyển pha và pha tại nhiệt độ thấp của siêu lỏng He<sup>3</sup>, màng tinh thể lỏng, màng mỏng từ thường được mô tả bởi mô hình hai chiều XY (2D XY). Mô hình 2D XY xuất hiện chuyển pha đặc biệt gọi là chuyển pha Kosterlitz-Thouless (KT) giữa pha giả trật tự và pha mất trật tự. Trong pha giả trật tự có xuất hiện các xoáy spin nguyên dương và xoáy spin nguyên âm với chu kỳ  $2\pi$  liên kết với nhau tạo thành các cặp xoáy khác với pha mất trật tự và pha trật tự. Nghiên cứu các tham số trật tự và cách xác định nhiệt độ chuyển pha KT đã và đang được quan tâm nghiên cứu. Trong nghiên cứu này, chúng tôi khảo sát pha và sự chuyển pha của mô hình 2D XY bằng phương pháp mô phỏng Monte Carlo. Các đại lượng vật lý thống kê cơ bản như là độ từ hóa, nhiệt dung riêng, modul Helicity, tham số Binder, đặc biệt là đại lượng chiều dài tương quan tỷ đối được tính toán. Kết quả mô phỏng chỉ ra có thể xác định nhiệt độ chuyển pha KT từ đại lượng vật lý chiều dài tương quan tỷ đối.

**Từ khóa:** Chuyển pha, mô phỏng Monte Carlo, vật liệu từ.

### I. ĐẶT VẤN ĐỀ

Hiện tượng chuyển pha là một trong những hướng nghiên cứu thú vị và hấp dẫn trong vật lý chất rắn. Vấn đề chuyển pha và pha tại nhiệt độ thấp của siêu lỏng He<sup>3</sup>, màng tinh thể lỏng, màng mỏng từ thường được mô tả bởi mô hình hai chiều XY (2D XY). Như chúng ta biết, theo lý thuyết Mermin-Wagner sự thăng giáng của spin trong mạng hai chiều phá vỡ mọi trật tự tại nhiệt độ  $T > 0$ . Tuy nhiên, còn tồn tại một giả trật tự tại một nhiệt độ hữu hạn  $T_{KT}$ . Bản chất của hiện tượng này đã được tiếp cận bởi Berezinskii (V. L. Berezinski, 1971), sau đó được tổng quát hóa cho mô hình 2D XY bởi

Kosterlitz and Thouless (J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, 1973) và được ghi danh bằng giải Nobel vật lý năm 2016. Tại nhiệt độ  $T > T_{KT}$ , các xoáy spin dương và xoáy spin âm (i.e., xoáy thuận và xoáy ngược, như trong hình 1) không tạo cặp (không liên kết với nhau), khi đó hệ là mất trật tự và vật chất có tính thuận từ. Tại nhiệt độ  $T < T_{KT}$ , các xoáy spin kết cặp với nhau về bậc tự do động học. Vì vậy, tương quan xa giữa các spin giảm dần theo quy luật hàm lũy thừa, khác với tương quan xa giảm dần theo hàm số mũ ở  $T > T_{KT}$  (J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, 1973) (hình 1).



**Hình 1. Cặp xoáy spin liên kết với nhau về bậc tự do động học**

Đầu tiên, các tác giả phát hiện và chứng minh chuyển pha KT bằng lý thuyết (J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, 1973). Tiếp theo, nhóm Petter Minnhagen và cộng sự đã chứng minh pha và giả pha có thể mô tả thông qua đại lượng vật lý Helicity modulus và tính toán nhiệt độ chuyển pha  $T_{KT}$  thông qua đại lượng vật lý này (Petter Minnhagen and Beom Jun Kim, 2003). Một số tác giả khác chỉ ra có thể mô tả chuyển pha này thông qua tham số Binder parameter (D. Loison, 1999; Hasenbusch, 2005). Gần đây, chuyển pha KT tiếp tục được quan tâm nghiên cứu (Urs Gerber, Wolfgang Bietenholz and Fernando G Rejón-Barrera, 2015) và một số tác giả chỉ ra có thể quan sát thấy dấu hiệu chuyển pha KT thông qua đại lượng chiều dài tương quan tỷ đối (M. Hasenbusch, 2009; D. X. Viet and H. Kawamura, 2009). Tuy nhiên, tác giả bài báo và các tác giả khác đã không tính nhiệt độ chuyển pha  $T_{KT}$ . Trong nghiên cứu này, chúng tôi khảo sát lại mô hình 2D XY bằng phương pháp mô phỏng Monte Carlo. Chúng tôi sử dụng thuật toán mới là tổ hợp giữa ba thuật toán Metropolis, thuật toán Wolff và thuật toán Over-relaxation. Kết quả tính toán cho mô hình là các đại lượng vật lý thống kê như: nhiệt dung riêng, độ tự cảm, Modul Helicity. Tuy nhiên, trong nghiên cứu này chúng tôi tập trung tính toán cho đại lượng tỷ số chiều dài tương quan để mô tả pha và tính nhiệt độ

chuyển pha  $T_{KT}$ .

**II. PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU**

**2.1. Mô hình**

Mô hình 2D XY trong mạng hai chiều hình vuông (hình 2), tương tác gần giữa các spin lân cận (1 spin chỉ tương tác với bốn spin xung quanh) được mô tả bởi hàm Hamilton sau (J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, 1973).

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

Trong đó:  $\theta_i$  là góc spin thứ  $i$  với trục  $x$  và có giá trị ngẫu nhiên trong khoảng từ 0 đến  $2\pi$ ,  $J = 1$  là hằng số tương tác trao đổi. Cặp spin lân cận,  $i$  và  $j$  chạy qua mọi vị trí trong toàn bộ mạng hình vuông.

**2.2. Phương pháp**

Để nghiên cứu hiện tượng chuyển pha trong mô hình này, chúng tôi sử dụng phương pháp mô phỏng Monte Carlo. Để tiến hành mô phỏng Monte Carlo cho hệ mạng hai chiều hình vuông với kích thước  $N = L \times L$ , chúng tôi áp dụng điều kiện biên tuần hoàn và sử dụng ba thuật toán kết hợp: thuật toán Metropolis, thuật toán Wolff và thuật toán Over-relaxation để đưa hệ về trạng thái cân bằng (Jakub Imriška, 2009). Điều kiện cân bằng của hệ được kiểm tra thông qua tính toán và so sánh của đại lượng nhiệt dung riêng bằng hai cách trực tiếp và gián tiếp. Các tham số mô phỏng của hệ được trình bày trong bảng 01.

**Bảng 01. Các tham số mô phỏng MC**

L	$N_T$	$N_{MC}$	$T_{min}$	$T_{max}$
16	63	$2 \times 10^6$	0,84	1,20
32	63	$2 \times 10^6$	0,84	1,20
64	63	$2 \times 10^6$	0,84	1,20
128	63	$2 \times 10^6$	0,84	1,20

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

### 2.3. Các đại lượng vật lý

Nhiệt dung riêng được định nghĩa (Jakub

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

Imriška, 2009):

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

Độ tự cảm từ (Jakub Imriška, 2009):

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

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

Tham số Binder (Binder parameter) (D. Loison, 1999):

$$g = 2 - \frac{\langle m^4 \rangle}{\langle m^2 \rangle^2}. \quad (4)$$

Modul Helicity (Helicity modulus) (Yun-Da Hsieh, Ying-Jer Kao and A. W. Sandvik, 2013):

$$Y = \frac{1}{N} \sum_{\langle ij \rangle} [\cos(\theta_i - \theta_j)] - \frac{1}{TN} \left( \sum_{\langle ij \rangle} [\sin(\theta_i - \theta_j)] \right)^2 \quad (5)$$

Chiều dài tương quan tỷ đối  $\xi/L$  (D. X. Viet and H. Kawamura, 2009) (correlation length ratio):

$$\xi_L = \frac{1}{2 \sin(k_m / 2)} \sqrt{\frac{[m(\vec{0})]^2}{[m(\vec{k}_m)]^2} - 1} \quad (6)$$

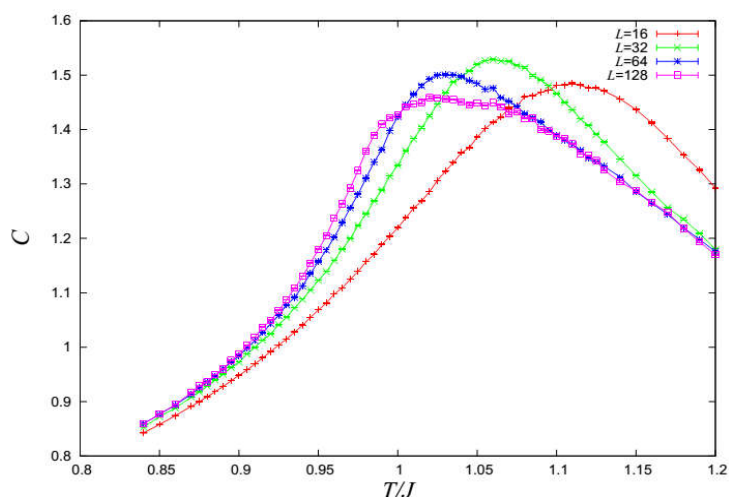
$m(\vec{k})^2 = \sum_{\mu=x,y} \left| \frac{1}{N} \left( \sum_{i=1}^N \cos \theta_i, \sum_{i=1}^N \sin \theta_i \right) \cdot \exp(i\vec{k}\vec{r}) \right|^2$  là khai triển Fourier của độ từ hóa trong không gian véctơ  $\vec{k}$ .

## III. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

### 3.1. Nhiệt dung riêng (Specific heat)

Tính toán sự phụ thuộc của nhiệt dung riêng vào nhiệt độ với các kích thước mạng  $L = 16, 32, 64, 128$  (hình 2). Do hiệu ứng kích thước, đỉnh của nhiệt dung riêng dịch về phía nhiệt độ

thấp khi kích thước tăng. Từ giá trị của các đỉnh này ta tính được nhiệt độ chuyển pha  $T$  trong mô hình, tuy nhiên đại lượng này không cho ta biết được bản chất của chuyển pha tại  $T$  (chuyển pha KT hay bậc 2).

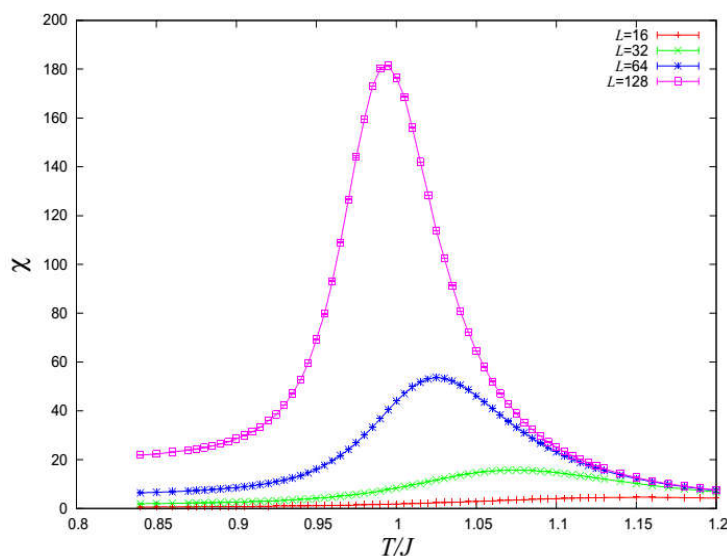


Hình 2. Nhiệt dung riêng của một spin phụ thuộc vào nhiệt độ với các kích thước mạng  $L = 16, 32, 64, 128$

### 3.2. Độ tự cảm từ (Magnetic susceptibility)

Tương tự đại lượng nhiệt dung riêng, độ tự cảm từ phụ thuộc vào nhiệt độ với các kích thước mạng  $L = 16, 32, 64, 128$  xuất hiện các đỉnh, đây là dấu hiệu của sự chuyển pha trong mô hình này (hình 3). Do hiệu ứng kích thước,

đỉnh của độ tự cảm từ dịch về phía nhiệt độ thấp khi kích thước tăng. Từ giá trị của các đỉnh này ta tính được nhiệt độ chuyển pha. Tương tự nhiệt dung riêng, đại lượng này không cho ta biết được đây là chuyển pha loại nào.

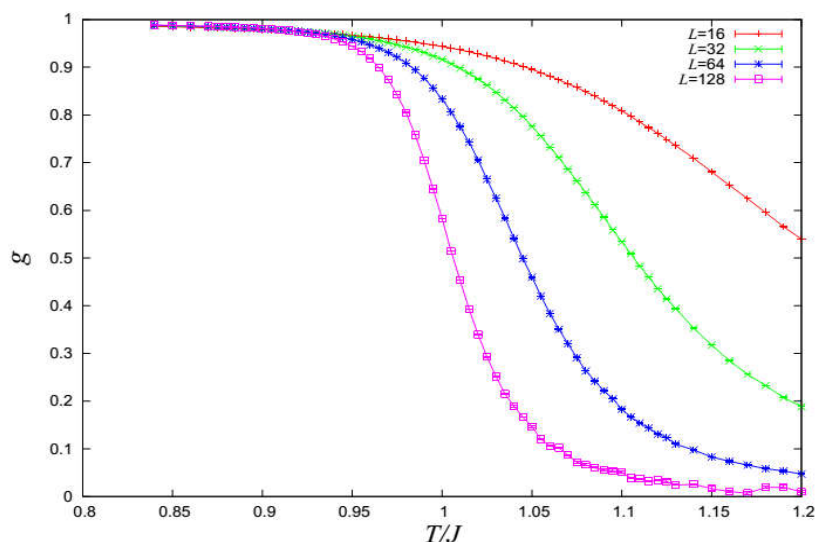


Hình 3. Độ tự cảm từ cho một spin vào nhiệt độ với các kích thước mạng  $L = 16, 32, 64, 128$

### 3.3. Binder parameter

Trong hình 4, đồ thị sự phụ thuộc vào nhiệt độ của đại lượng Binder ( $g$ ) với các kích thước  $L = 16, 32, 64, 128$ . Đại lượng Binder giảm về không khi kích thước tăng ở vùng nhiệt độ cao, đây là dấu hiệu cho thấy sự tồn tại của pha mất

trật tự ở nhiệt độ cao. Ở vùng nhiệt độ thấp, các đường  $g$  với các kích thước khác nhau chập vào nhau ( $g$  không phụ thuộc vào kích thước), đây chính là biểu hiện của pha giả trật tự và chuyển pha trong trường hợp này là chuyển pha KT.

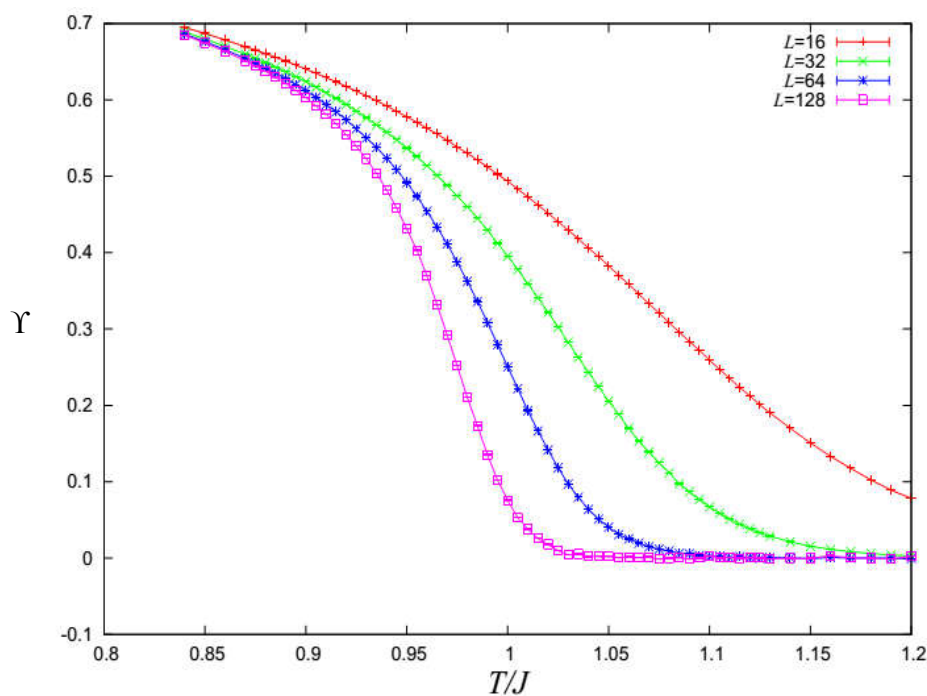


Hình 4. Tham số binder phụ thuộc vào nhiệt độ với các kích thước mạng  $L = 16, 32, 64, 128$

### 3.4. Modul Helicity (Helicity modulus)

Ở vùng nhiệt độ cao, tham số trật tự helicity modulus  $\Upsilon$  giảm về không khi kích thước tăng, đây là dấu hiệu của pha mất trật tự (hình 5). Ở vùng nhiệt độ thấp, các đường  $\Upsilon$  chập vào

nhau ( $\Upsilon$  không phụ thuộc vào kích thước) tại  $T_{KT}$ , đây chính là biểu hiện của pha giả trật tự và chuyển pha trong trường hợp này là chuyển pha KT.



Hình 5. Tham số trật tự helicity phụ thuộc vào nhiệt độ với các kích thước mạng  $L = 16, 32, 64, 128$

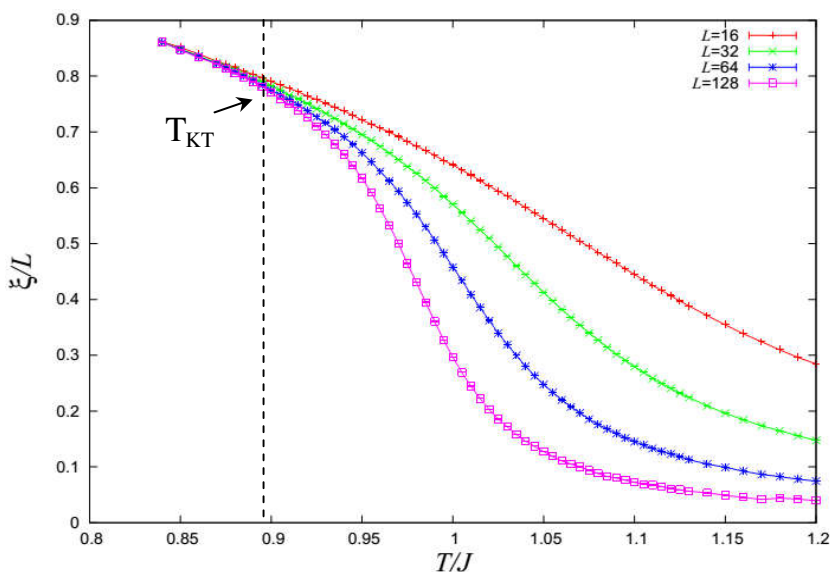
### 3.5. Chiều dài tương quan tỷ đối $\xi/L$ (correlation length ratio)

Hai đại lượng nhiệt dung riêng, và độ từ thẩm từ, không thể xác định chính xác nhiệt độ chuyển pha cũng như chỉ ra các pha trong mô hình. Đại lượng Binder chỉ ra sự tồn tại của hai pha, đại lượng Helicity modulus đã chỉ ra được nhiệt độ chuyển pha cũng như các pha trong mô hình hình XY chuẩn hai chiều cho mạng hình vuông bởi các nhóm trước (D. Loison, 1999). Ở vùng nhiệt độ cao, đại lượng chiều dài tương quan tỷ đối  $\xi/L$  giảm về không khi kích thước tăng, đây là dấu hiệu của pha mất trật tự. Ở vùng nhiệt độ thấp, các đường  $\xi/L$  chập vào nhau ( $\xi/L$  không phụ thuộc vào kích

thước), đây là dấu hiệu của chuyển pha KT và dưới nhiệt độ chuyển pha là pha giả trật tự (hình 6).

Để xác định chính xác nhiệt độ chuyển pha và bản chất của các pha này, chúng tôi lần đầu tiên tiến hành tính đại lượng chiều dài tương quan tỷ đối  $\xi/L$ . Theo lý thuyết tỉ lệ kích thước hữu hạn (Finite Size Scalling - FSS), nhiệt độ chuyển pha  $T_{KT}(\infty)$  được xác định thông qua sự phụ thuộc kích thước  $L$  của  $T_{KT}(L)$  dựa theo công thức 7. Công thức này đã thành công trong việc tính toán nhiệt độ chuyển pha KT thông qua đại lượng chiều dài tương quan tỷ đối với các kích thước khác nhau (D. X. Viet and H. Kawamura, 2009).

$$T_{KT}(L) = T_{KT}(\infty) \left[ 1 + \frac{c^2}{(\ln(bL))^2} \right] \quad (7)$$



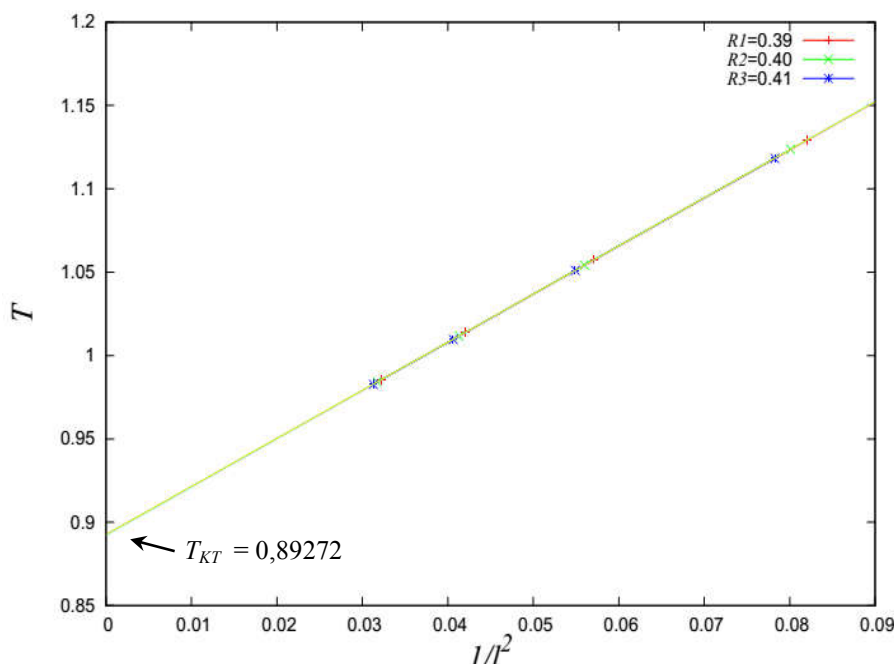
Hình 6. Chiều dài tương quan tỷ đối  $\xi/L$  phụ thuộc vào nhiệt độ với các kích thước mạng  $L = 16, 32, 64, 128$

Từ phương trình (7) để xác định được các nhiệt độ chuyển pha thông qua sự phụ thuộc kích thước của nhiệt độ  $T_{KT}(L)$  thì hằng số  $R$  đã được sử dụng. Trong hình 7, chúng tôi vẽ ra  $T_{KT}(L)$  như một hàm của  $1/l^2$ , với  $l = \ln(bL)$  làm cho phù hợp với tham số  $b$  và  $c$  trong mô hình XY chuẩn trong mạng hai chiều hình

vuông. Sử dụng các giá trị  $R$  là 0,41, 0,40 và 0,39 để xác định nhiệt độ  $T$ . Dữ liệu các đường  $R$  phải chồng chất trên một đường thẳng, điều này có nghĩa tham số  $b$  phụ thuộc  $R$ . Điểm giao cắt của đường dữ liệu với trục nhiệt độ trong hình cho ta xác định được nhiệt độ chuyển pha  $T_{KT} = 0,8927 \pm 0,0001$ . Kết quả

tính toán với đại lượng này phù hợp với kết quả tính toán với các đại lượng khác do các

nhóm trước đã tính toán (D. X. Viet and H. Kawamura, 2009).



Hình 7.  $T_{KT}(L)$  cho các giá trị R khác nhau, phụ thuộc  $1/l^2$ , với  $l = \ln(bL)$  cho các kích thước  $L = 16, 32, 64, 128$ . Nhiệt độ chuyển pha  $T_{KT}$  được xác định bằng công thức 7

#### IV. KẾT LUẬN

Trong nghiên cứu này chúng tôi đã khảo sát lại mô hình 2D XY bằng phương pháp mô phỏng Monte Carlo. Hơn nữa, chúng tôi lần đầu tiên xác định được nhiệt độ chuyển pha từ đại lượng vật lý chiều dài tương quan tỷ đối  $\xi/L$ . Kết quả tính nhiệt độ chuyển pha KT từ chiều dài tương quan tỷ đối phù hợp với kết quả tính toán từ các đại lượng vật lý khác như là nhiệt dung riêng, modul Helicity trong các công bố trước.

#### TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. V. L. Berezinski (1971). Destruction of Long-range Order in One-dimensional and Two-dimensional Systems having a Continuous Symmetry Group I. Classical Systems. *Sov. Phys. JETP* 32, 493.
2. J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless (1973). Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems. *J. Phys. C* 5, L124 (1972); 6, 1181.
3. Yun-Da Hsieh, Ying-Jer Kao and A. W. Sandvik (2013). Finite-size scaling method for the Berezinskii–

Kosterlitz–Thouless transition. *J. Stat. Mech.* P09001.

4. Petter Minnhagen and Beom Jun Kim (2003). Direct evidence of the discontinuous character of the Kosterlitz–Thouless jump. *Phys. Rev. B* 67, 172509.

5. D. Loison (1999). Binder's cumulant for the Kosterlitz–Thouless transition. *J. Of Phys. C: Cond. Matter*, 11 L401.

6. Hasenbusch (2005). The two-dimensional XY model at the transition temperature: a high-precision Monte Carlo study. *J. Phys.* A38, 5869.

7. Urs Gerber, Wolfgang Bietenholz and Fernando G Rejón-Barrera (2015). New insight into the Berezinskii–Kosterlitz–Thouless phase transition. *Journal of Physics: Conference Series* 651 012010.

8. Jakub Imriška (2009), *Phase diagram of a modified XY model*, Bachelor thesis, Bratislava.

9. M. Hasenbusch (2009). The Kosterlitz–Thouless transition in thin films: a Monte Carlo study of three-dimensional lattice models. *J. Stat. Mech.* P02005.

10. D. X. Viet and H. Kawamura (2009). Monte Carlo studies of chiral and spin ordering of the three-dimensional Heisenberg spin glass. *Phys. Rev. Lett.* 102 027202.

## CORRELATION LENGTH IN THE 2D STANDARD XY MODEL OF MAGNETIC MATERIALS

Luu Bich Linh<sup>1</sup>, Pham Van Tinh<sup>2</sup>, Hoang Ha<sup>3</sup>, Bui Thi Toan Thu<sup>4</sup>,  
Nguyen Vu Cam Binh<sup>5</sup>, Nguyen Thi Huyen<sup>6</sup>, Duong Xuan Nui<sup>7</sup>,  
Tran Nho Tho<sup>8</sup>, Luong Minh Tuan<sup>9</sup>, Nguyen Duc Trung Kien<sup>10</sup>, Dao Xuan Viet<sup>11</sup>

<sup>1,2,3,4,5,6,7,8</sup>*Vietnam National University of Forestry*

<sup>9</sup>*National University of Civil Engineering*

<sup>10,11</sup>*Hanoi University of Science and Technology*

### SUMMARY

Two-dimension square lattice standard XY model of magnetic materials, where it shows a peculiar phase transition, the so called Kosterlitz Thouless (KT) transition, which is observed experimentally also in liquid crystals (LCD displays), thin films of liquid helium, films of superconductors, probably including the layered high temperature superconductors. The reason of Kosterlitz-Thouless transition in this model is due to the presence of positive spin vortices, spin anti-vortices with a  $2\pi$  period and the formation of vortex pairs. In this model, we investigated the phase and phase transition by Monte Carlo simulations using a combination algorithm. Physical quantities such as magnetization, specific heat, Helicity modulus, Binder parameter, especially the correlation length ratio are calculated. The simulation results indicated that the phase transition temperature KT can be determined from correlation length ratio.

**Keywords:** Magnetic materials, Monte Carlo simulation, phase transition.

**Ngày nhận bài** : 14/4/2017

**Ngày phản biện** : 23/5/2017

**Ngày quyết định đăng** : 15/7/2017