

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

NGUYỄN THỊ KIM OANH

**NGHIÊN CỨU ĐẶC TÍNH PHA VÀ CHUYỂN PHA
TRONG MẠNG QUANG HỌC CẤU TRÚC NANO**

**Chuyên ngành: Vật liệu và linh kiện Nano
Mã số: Chuyên ngành thí điểm**

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 - 2020

Công trình được hoàn thành tại: Trường Đại học Công nghệ -
Đại học Quốc gia Hà Nội

Người hướng dẫn khoa học:

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

Phản biện 1:

Phản biện 2:

Phản biện 3:

Luận án sẽ được bảo vệ trước Hội đồng chấm luận án tiến sĩ, họp
tại Trường Đại học Công nghệ, Đại học Quốc gia Hà Nội vào hồi
...giờ...ngày ... tháng ...năm...

Có thể tìm thấy luận án tại:

- Thư viện Quốc gia Việt Nam
- Trung tâm Thông tin – Thư viện, Đại học Quốc gia Hà Nội

MỞ ĐẦU

Nghiên cứu mô hình mạng spin luôn nhận được những quan tâm đặc biệt trong lý thuyết chất rắn hiện đại. Đối với hệ từ tính tương tác mạnh, các mô hình spin có ý nghĩa quan trọng trong hiểu biết và dự đoán các tính chất vật lý của các họ vật liệu từ tính.

Lớp các vật liệu từ nhận được sự chú ý đặc biệt gần đây là các hợp chất có chứa các đám nguyên tử từ tính khác nhau tương tác với nhau, các nam châm từ hình học frustration¹... 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 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, cạnh tranh giữa hai đám tương tác FM và AF đã gây ra các bước nhảy từ.

Hiện tượng thú vị này cũng xảy ra trong các vật liệu từ có cấu trúc hình học frustration như $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ và tetrabooxit đất hiếm RB_4 . 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. Người ta đã quan sát thấy chuỗi bước nhảy xảy ra ở các giá trị phân số của mômen từ tỉ đối. Các kết quả này đã kích thích nỗ lực nghiên cứu của các nhà khoa học về mạng hình học frustration Shastry – Sutherland. Trong hệ thống frustration, không thể xây dựng được trạng thái cơ bản với hàm năng lượng cực tiểu và cấu trúc hình học frustration được biết đến là loại hình

¹ Tương tác từ frustration là tính chất trong đó spin không thể sắp xếp định hướng khi tương tác với các spin lân cận để hệ đạt được năng lượng cực tiểu.

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 tetraxoit RB_4 có hiệu ứng trường tinh thể lớn có thể được mô tả tốt bởi mô hình Ising. 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 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 lỏng trong nguyên tử He^4 của Kapitza 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 như 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 lỏng (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 rắn được gọi tên bởi Penrose và Onsager vào năm 1956. Công cuộc nghiên cứu tìm kiếm pha siêu rắn chỉ thực sự bùng nổ sau khi Andreev – Lifshitz và Chester đưa ra quan điểm cho rằng

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.

các khuyết tật có thể di chuyển tự do trong hệ thống và 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.

Mọi nỗ lực tìm kiếm pha SS trong các tinh thể thực đều thất bại do tạp chất và khó điều khiển các tương tác bên trong. Do đó, một hệ thống sạch, 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 rắn. Gần đây, các tín hiệu tích cực của pha siêu rắn đồng loạt được xác nhận trong các thí nghiệm mạng quang cho các nguyên tử siêu lạnh. Mặt khác, động lực học của các nguyên tử siêu lạnh trên mạng quang được mô tả đầy đủ bởi mô hình Bose – Hubbard. Hàng loạt kết quả nghiên cứu lý thuyết và mô phỏng cho mô hình Bose – Hubbard đều chỉ ra pha siêu rắn được ổn định bởi các tương tác tầm xa như tương tác lân cận gần nhất (NN) và lân cận gần thứ hai (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 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 rắn là điện thế 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 điện thế ghim tuần hoàn, pha siêu rắn được tìm thấy ở cả hai phía của mật độ tinh thể tương ứng với siêu rắn được gây ra bởi khuyết tật lỗ trống và khuyết tật giữa nút. Câu hỏi được đặt ra là điện thế ngoài tuần hoàn có thể làm phát sinh pha siêu rắn gây ra bởi khuyết tật lỗ trống trong mô hình chỉ có tương tác tầm ngắn hay không? Do đó, vấn đề thứ hai mà chúng tôi quan tâm chính là tín hiệu của pha siêu rắn trong mô hình Bose – Hubbard của hạt boson khi có điện thế ghim.

Trong luận án này chúng tôi 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.

Nội dung nghiên cứu

1. Khảo sát ảnh hưởng của xác suất phân bố, thăng giáng trong tương tác lên quá trình từ hóa trong mô hình Ising cho mạng vuông và mạng Shastry – Sutherland

2. Khảo sát giản đồ pha và các tham số trật tự đặc trưng trong mô hình Bose – Hubbard của các hạt boson lõi cứng và lõi mềm dưới tác dụng điện thế ghim tuần hoàn.

Phương pháp nghiên cứu

Phương pháp giải tích trường trung bình kết hợp với tính toán số trên lập trình Matlab khảo sát cho mô hình Ising có cạnh tranh tương tác.

Mô phỏng Monte Carlo cổ điển với thuật toán Metropolis sử dụng để khảo sát mô hình Ising với 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:

Nghiên cứu đã thu được các kết quả mới sau:

- Đã giải thích quá trình từ hóa loại I (có các bước nhảy từ trong đường cong từ hóa) của một số perovskite Mangan dựa trên mô hình Ising có tích phân trao đổi thăng giáng.
- Chỉ ra ảnh hưởng của thăng giáng của tương tác và xác suất thăng giáng lên quá trình hình thành các bước nhảy phân số từ trong mô hình Ising trên mạng Shastry – Sutherland.
- Chỉ ra khả năng tồn tại của pha siêu rắn ở lân cận mật độ pha tinh thể trong mô hình hạt boson lõi cứng và lõi mềm trong mạng vuông.

Cấu trúc luận án

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

Pha là trạng thái 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.

Quá trình chuyển pha có thể chia thành hai loại là: chuyển pha loại I và chuyển pha loại II. Trong chuyển pha loại I, trạng thái bị biến đổi đột ngột, đạo hàm bậc nhất của hàm thế nhiệt động bị gián đoạn tại điểm chuyển pha. Chuyển pha loại II hàm thế nhiệt động và đạo hàm bậc nhất của các thế nhiệt động liên tục nhưng đạo hàm bậc hai của thế nhiệt động thì bị gián đoạn.

Tham số trật tự là đại lượng phản ánh trạng thái của các pha, ký hiệu là m . Tham số trật tự m thay đổi từ giá trị $m = 0$ (trạng thái mất trật tự tuyệt đối) đến $m = 1$ (trạng thái trật tự tuyệt đối).

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.

1.2. Chuyển pha từ

Áp dụng lý thuyết Landau cho chuyển pha từ hay lý thuyết trường trung bình có thể xác định được các chỉ số tới hạn có giá trị $\beta = 1/2$ và $\delta = 3$.

1.3. Chuyển pha lượng tử

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.

Một số pha lượng tử dị thường:

Pha siêu lỏng (SF): là đặc tính duy trì dòng chảy liên tục, không ma sát của một chất. 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.

Pha siêu rắn (SS): là một trạng thái lượng tử kì lạ của vật chất trong đó các phần tử vừa sắp xếp theo cấu trúc tinh thể đồng thời biểu hiện tính chất chảy không ma sát. Như vậy, pha SS cùng tồn tại hai loại trật tự khác nhau: trật tự đường chéo tầm xa DLRO được mô tả thông qua hệ số cấu trúc tinh $S(\mathbf{k})$ đặc trưng cho cấu trúc tinh thể và trật tự tầm xa ngoài đường chéo ODLRO đặc trưng cho tính chất SF.

Chương 2: Quá trình từ hóa loại I trong perovskite Mangan

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

Hamiltonian cho trong hệ spin $S = 1/2$ có hình chiếu theo phương z là $S_i^z = \sigma_i/2$ (trong đó $\sigma_i = \pm 1$):

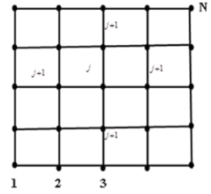
$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i \neq k} J_{ik} \sigma_i \sigma_k - \mu_B h_e \sum_i \sigma_i \quad (2.1)$$

Trong đó: σ_i, σ_k : spin ở vị trí nút thứ i và k.

J_{ik} : tích phân trao đổi giữa hai nút mạng i và k; h_e :

từ trường ngoài đặt vào trong đơn vị năng lượng J.

$J_{ik} > 0$ tương tác là FM; $J_{ik} < 0$ tương tác là AF.



Hình 2.1 Mô hình Ising

Cạnh tranh tương tác giữa các đám spin FM và AF theo quy luật phân bố xác suất:

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

$J_{FM} = J(1 + \Delta)$; $J_{AF} = J(1 - \Delta)$ là giá trị trung bình của cường độ tương tác FM và AF; J là giá trị trung bình của tích phân trao đổi và được chọn bằng 1; Δ 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 men từ tỉ đối trung bình trên một nút mạng:

$$m = \langle \langle \sigma_i \rangle \rangle_r \quad (2.3)$$

Áp dụng hệ thức Callen, giá trị trung bình nhiệt động của mômen từ tỉ đối được tính bởi công thức:

$$\langle \sigma_i \rangle = \langle \tanh \beta E_i \rangle \quad (2.4)$$

Trong đó: $E_i = \sum_k J_{ik} \sigma_k + g \mu h_e$; Đặt $h = \frac{\mu h_e}{J}$; $\alpha = \tau^{-1} = J\beta$.

Tính trung bình theo phân bố ngẫu nhiên của tương tác (ký hiệu là $\langle \dots \rangle_T$) ta xác định được mômen từ trung bình trên mỗi nút mạng:

$$m = \sum_{n=0}^z C_z^n A_n(\alpha, p, \Delta, z, h) m^n \quad (2.5)$$

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

$$A_n = \int_0^\pi \frac{a^{z-n}(t)b^n(t)}{\sinh\left(\frac{\pi t}{2}\right)} \sin\left(\alpha ht + \frac{n\pi}{2}\right) dt \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} a &= p \cos[\beta J(1+\Delta)t] + (1-p) \cos[\beta J(1-\Delta)t] \\ b &= p \sin[\beta J(1+\Delta)t] + (1-p) \sin[\beta J(1-\Delta)t] \end{aligned} \quad (2.7)$$

Theo lý thuyết từ trở không lồ xuyên ngầm, từ trở tỉ đối trong trường ngoài được đánh giá theo công thức:

$$MR = \frac{\rho(\tau, h)}{\rho_0(\tau)} = \frac{1}{1 + P^2 m^2} \quad (2.8)$$

P là độ phân cực electron dẫn, $\rho(\tau, h)$ là điện trở suất khi có trường ngoài h ở nhiệt độ τ , $\rho_0(\tau)$ là điện trở suất khi không có trường ngoài. Phân cực electron bão hòa được tính bởi công thức:

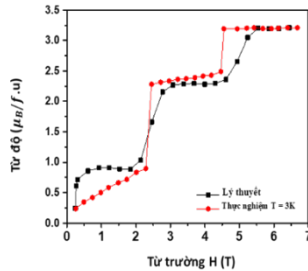
$$P = \frac{n_\uparrow - n_\downarrow}{n_\uparrow + n_\downarrow} = \tanh \left[\frac{J_H}{J\tau} \left(S_{t2g} + \frac{1}{2} \right) \right] \quad (2.9)$$

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

2.3.1. Ứng dụng mô hình Ising

khảo sát đường cong từ hóa trong vật liệu $Pr_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{0.95}Co_{0.05}O_3$

Hình 2.2: Đồ thị so sánh kết quả lý thuyết và thực nghiệm 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 $Pr_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{0.95}Co_{0.05}O_3$

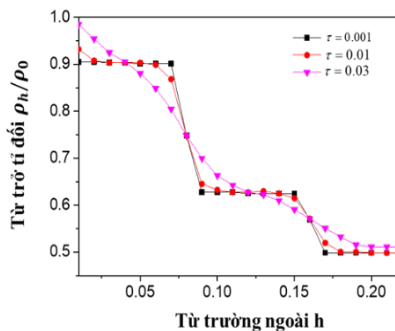
Đại lượng	Lý thuyết		Thực nghiệm	
$m(\mu_B)$	1.1200	0.7000	1.3740	0.8802
$H_C(T)$	2.1765	4.6640	2.3200	4.5114

Hình 2.2. và bảng 2.1 thể hiện đường cong từ hóa theo lý thuyết có hai bước nhảy khá tương ứng với bước nhảy từ đo được trong vật liệu $Pr_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{0.95}Co_{0.05}O_3$. Biểu hiện mômen từ tăng một cách đột ngột ở giá trị từ trường ngoài xác định (các bước nhảy từ) tương ứng với quá trình chuyển từ hóa I.

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

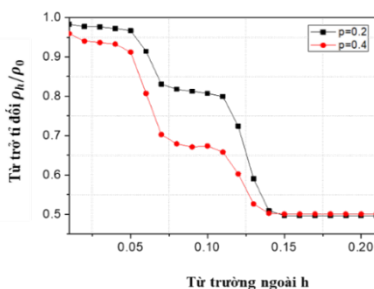
➤ Đường từ trở ở các nhiệt độ khác nhau

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. Tăng nhiệt độ lên $\tau = 0.03$, bước nhảy từ bị biến mất, từ trở giảm tuyến tính theo từ trường ngoài như biểu diễn trong hình (2.3).

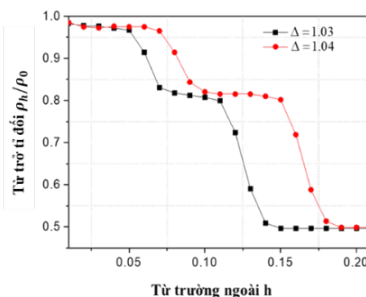


Hình 2.3: Đồ thị sự phụ thuộc của từ trở tỉ đối ρ_h/ρ_0 vào từ trường ngoài h ở các nhiệt độ τ khác nhau với $z = 4$, $p = 0.41$, $\Delta = 1.04$, $S_{L2B} = 3/2$, $J_H/J = 3$.

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



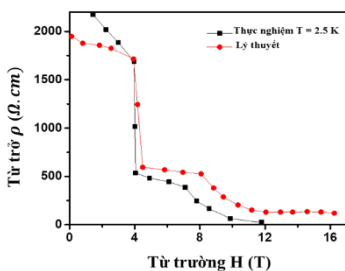
Hình 2.4: Đồ thị phụ thuộc của từ trở tỉ đối vào từ trường ngoài cho hai giá trị phân bố xác suất khác nhau $p = 0.2$ và $p = 0.4$ với $z = 4, \Delta = 1.03, \tau = 0.01, S_{t_{2g}} = 3/2, J_H/J = 3$.



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

Từ hình 2.4 có thể thấy xác suất phân bố tác động lên độ lớn của từ trở hệ thống. Còn thăng giáng Δ tác động làm thay đổi vị trí của các bước nhảy từ như biểu diễn trong hình 2.5.

- So sánh đường từ trở lý thuyết và thực nghiệm



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

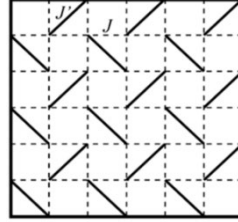
Bảng 2.2: So sánh giá trị từ trở và từ trường tới hạn giữa lý thuyết và thực nghiệm cho mẫu $Pr_{0.5}Ca_{0.5}Mn_{0.97}Ga_{0.03}O_3$.

ρ (Ωcm)		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

Chương 3: Bước nhảy phân số từ trong mô hình Ising trên mạng Shastry - Sutherland

3.1. Mạng Shastry – Sutherland

Mạng Shastry – Sutherland là mô hình mạng hai chiều mô tả tương tác giữa các vị trí lân cận gần nhất và lân cận gần thứ hai như trong hình 3.1.



Hình 3.1: Mạng Shastry – Sutherland với NNJ và NNNJ'.

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

Hamiltonian:

$$H = \sum_{\langle i, k \rangle} J_{ik} S_i^z S_k^z + \sum_{\langle\langle i, k \rangle\rangle} J'_{ik} S_i^z S_k^z - h \sum_{k=1}^N S_k^z \quad (3.1)$$

J_{ik} : tương tác giữa các vị trí lân cận gần nhất NN, J'_{ik} tương tác giữa các vị trí lân cận gần thứ hai NNN.

Tích phân trao đổi J_{ik} và J'_{ik} được lấy theo quy luật xác suất p và p' xác định:

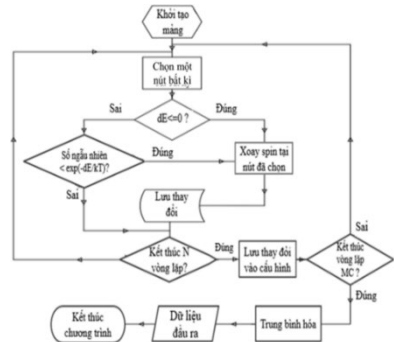
$$\begin{aligned} P(J_{ik}) &= p\delta(J_{ik} - J_1) + (1-p)\delta(J_{ik} - J_2) \\ P(J'_{ik}) &= p'\delta(J'_{ik} - J'_1) + (1-p')\delta(J'_{ik} - J'_2) \end{aligned} \quad (3.2)$$

Với:

$$J_1 = J(1 + \Delta); J_2 = J(1 - \Delta) \text{ và } J'_1 = J'(1 + \Delta'); J'_2 = J'(1 - \Delta') \quad (3.3)$$

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

3.3. Phương pháp mô phỏng Monte Carlo.



Hình 3.2: Sơ đồ thuật toán Metropolis

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

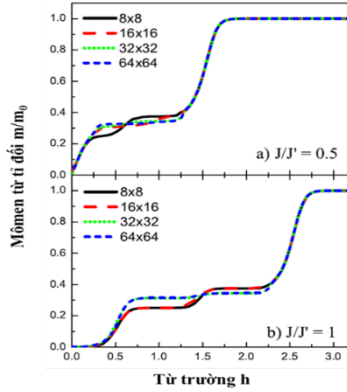
3.4.1. Kiểm tra hiệu ứng kích thước hữu hạn

Hình 3.3 cho thấy ở kích thước mạng nhỏ $L = 8$ và 16 , bước nhảy từ chính $1/3$ bị phân tách thành hai bước nhảy khác nhau. Tăng kích thước mạng $L = 32$ và 64 hệ thống chỉ tồn tại bước nhảy chính $1/3$ phù hợp với các kết quả khảo sát trước đó. Vì vậy, các kết quả dưới đây được tính cho $L = 32$.

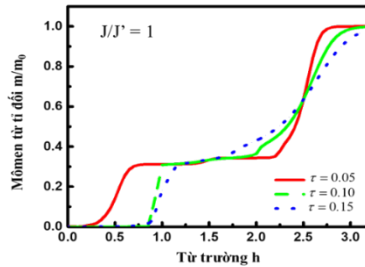
3.4.2. Ảnh hưởng của nhiệt độ lên đường cong từ hóa (Hình 3.4)

Ở nhiệt độ thấp $\tau = 0.05$, bước nhảy chính $1/3$ ổn định trong vùng từ trường rộng. Nhiệt độ tăng lên 0.1 và 0.15 , bước nhảy thu hẹp dần và dần biến mất. Do đó các kết quả khảo sát được chọn thực hiện ở nhiệt độ thấp $\tau = 0.01$.

3.4.3. Ảnh hưởng của thăng giáng lên đường cong từ hóa



Hình 3.3: Đồ thị phụ thuộc của mômen từ tỉ đối m/m_0 vào từ trường ở các kích thước mạng khác nhau với tỉ số (a) $J/J' = 0.5$ và (b) $J/J' = 1$ ở $\tau = 0.01$ trong mạng Shastry – Sutherland không có nhiễu loạn



Hình 3.4: Đồ thị phụ thuộc của mômen từ tỉ đối m/m_0 vào từ trường ở các nhiệt độ khác nhau với tỉ số $J/J' = 1$ trong mạng Shastry – Sutherland không có nhiễu loạn

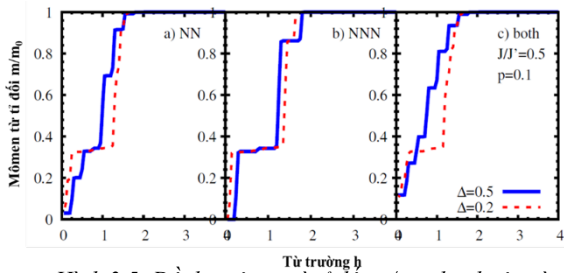
➤ *Cường độ tương tác $J/J' = 0.5$*

Khi 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 1/3. Khi thăng giáng lớn $\Delta = 0.5$ tác động vào trong tương tác lân cận gần thứ hai NNN bước nhảy

từ 1/3 vẫn giữ ổn định và xuất hiện thêm một bước nhảy ở phía trên bước nhảy chính. Ngược lại, tác động vào trong tương tác NN và cả hai loại tương tác, bước nhảy 1/3 mất ổn định và cũng phát sinh các bước nhảy nhỏ khác (Hình 3.5).

➤ *Cường độ tương tác $J/J' = 1$*

Cường độ tương tác tăng lên, số lượng bước nhảy cũng tăng lên. Thêm thăng giáng vào trong tương tác NNN, bước nhảy chính 1/3 xuất hiện duy trì trong vùng từ trường rộng hơn. Nhiễu loạn trong tương tác giữa các vị trí NN và cả hai loại tương tác làm cho bước nhảy từ chính 1/3 dần mất ổn định ngay cả khi thăng giáng Δ nhỏ.



Hình 3.5: Đồ thị mômen từ tỉ đối m/m_0 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.

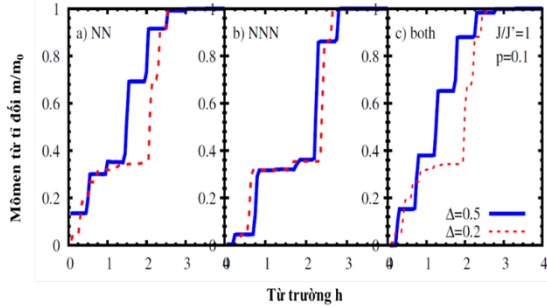
Tăng $\Delta = 0.5$, các bước nhảy nhỏ ổn định và mở rộng hơn (Hình 3.6). Như vậy:

Bước nhảy từ chính $m/m_0 = 1/3$ được duy trì ổn định khi tương tác NN chiếm ưu thế và cường độ tương tác NN tăng lên, các bước nhảy từ nhỏ khác cũng được ổn định.

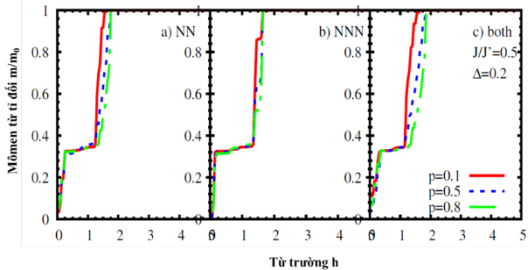
3.4.4. Ảnh hưởng của phân bố xác suất lên đường cong từ hóa

➤ Tỷ lệ cường độ tương tác nhỏ $J/J' = 0.5$

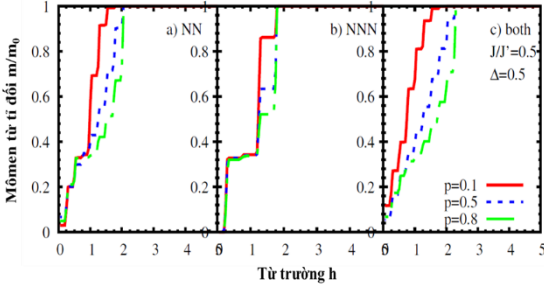
Hình 3.7 biểu diễn đường cong từ hóa ở các phân bố xác suất khác nhau trong trường hợp thăng giáng nhỏ ($\Delta = 0.2$). Khi cường độ tương tác trao đổi giữa các vị trí NNN vượt trội so với tương tác giữa các vị trí NN, nhiễu loạn nhỏ trong tương tác NN không gây ảnh hưởng đến bước nhảy từ 1/3 cũng không làm phát sinh các bước nhảy từ khác ở tất cả các giá trị xác suất phân bố. Tuy nhiên, khi



Hình 3.6: Đồ thị mômen từ tỉ đối m/m_0 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: Đồ thị mômen từ tỉ đối m/m_0 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: Đồ thị mômen từ tỉ đối m/m_0 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.

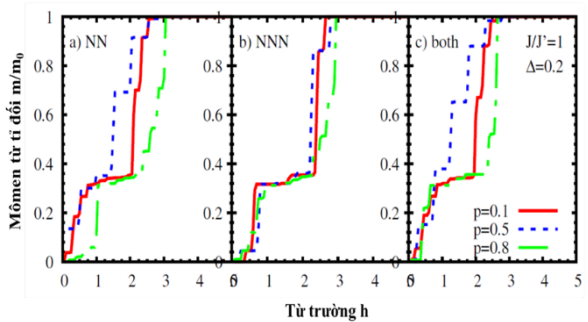
thêm độ mất trật tự vào tương tác NNN, bước nhảy từ nhỏ xuất hiện ở các xác suất phân bố khác nhau. Tuy nhiên, khi xác suất phân bố càng lớn, bước nhảy từ nhỏ sinh ra càng gần với bước nhảy từ chính 1/3. Ngược lại thăng giáng tác động vào trong tương tác NN, các bước nhảy từ càng ngày càng mất ổn định ở xác suất lớn. Dấu hiệu tương tự cũng được quan sát thấy trong thăng giáng tác động vào trong cả hai loại tương tác NN và NNN.

➤ *Tỉ lệ cường độ tương tác lớn*
 $J/J' = 1$

Biểu hiện từ trong trường hợp cường độ tương tác $J/J' = 1$ trong

thăng giáng tác động vào tương tác giữa các vị trí NNN, hệ thống sinh ra bước nhảy nhỏ phía trên bước nhảy từ chính. Như vậy, khi thăng giáng nhỏ không gây ảnh hưởng đến tính chất từ của hệ thống.

Khi $\Delta = 0.5$ (hình 3.8),



Hình 3.9: Đồ thị mômen từ tỉ đối m/m_0 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.

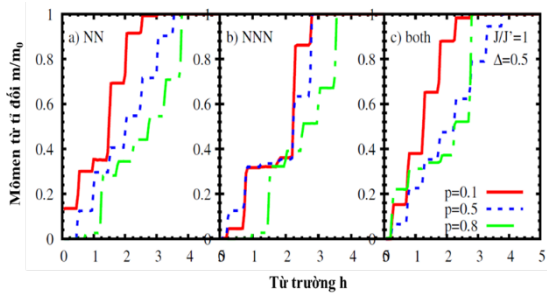
hình 3.9 hoàn toàn khác biệt so với trường hợp $J/J' = 0.5$ ở giá trị thăng giáng Δ nhỏ ($\Delta = 0.2$). Bước nhảy chính 1/3 vẫn duy trì ổn định kèm theo bước nhảy từ nhỏ. Xác suất phân bố p nhỏ ($p=0.1$) tác động vào trong tương tác giữa các vị trí NN sinh ra số bước nhảy nhỏ nhiều hơn so với trường hợp xác suất thăng giáng lớn ($p = 0.8$). Ở giá trị $p = 0.5$, bước nhảy từ chính 1/3 biến mất, các bước nhảy từ khác ổn định trong khoảng từ trường rộng hơn. Kết quả tương tự khi tác động thăng giáng vào trong cả hai loại tương tác NN và NNN.

Hình 3.10 cho thấy khi cường độ tương tác NN cùng với thăng giáng lớn, các bước nhảy từ ổn định hơn so với các trường hợp khảo

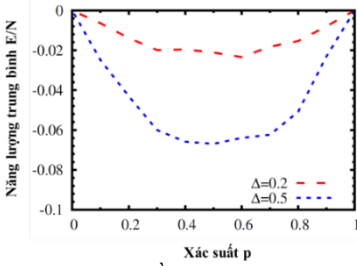
sát ở trong trường hợp $\Delta = 0.2$ với mọi giá trị xác suất khảo sát. Giá trị xác suất phân bố khác nhau tác động đến số lượng và vị trí của các bước nhảy được sinh ra trong từ trường. Ở giá trị xác suất lớn $p = 0.8$, các bước nhảy có xu hướng xảy ra ở phía từ trường lớn.

3.4.5. Khảo sát năng lượng của hệ thống

Với giá trị xác suất $p = 0$ và 1, hệ thống nằm trong trạng thái không có nhiễu loạn. Năng lượng trung bình của hệ thống nằm ở trạng thái cân bằng thấp hơn so với trường hợp không có thăng giáng ở các giá trị xác suất p khác 0 và 1.



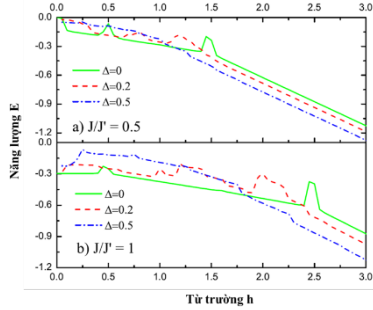
Hình 3.10: Đồ thị mômen từ tỉ đối m/m_0 phụ thuộc vào trường ngoài ở các giá trị xác suất phân bố khác nhau với $J/J' = 1$, $\tau = 0.01$, $\Delta = 0.5$ khi độ mất trật tự được thêm vào trong tương tác NN, NNN và cả hai loại tương tác.



Hình 3.11: 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.

Trong trường ngoài, cạnh tranh giữa năng lượng Zeeman và tương tác trao đổi làm cho biểu hiện của năng lượng khá phức tạp với nhiều điểm kỳ dị (Hình 3.12).

Năng lượng trung bình bên trong hệ thống giảm khi thăng giáng tăng 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 (Hình 3.11).



Hình 3.12: Đồ thị năng lượng hệ thống phụ thuộc vào từ trường ngoài với $p = 0.1$, $\tau = 0.01$ khi thăng giáng được thêm vào trong cả hai loại tương tác NN và NNN ở (a) $J/J' = 0.5$ và (b) $J/J' = 1$

Chương 4: Chuyển pha trong mô hình Bose – Hubbard của hạt boson với điện thế ghim tuần hoàn

4.1. Mô hình Bose – Hubbard

Hamiltonian:

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

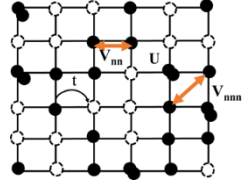
Trong đó: t là tham số nhảy; \hat{a}_i^\dagger và \hat{a}_i lần lượt là toán tử sinh hủy hạt boson ở vị trí thứ i ; $\hat{n}_i = \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i$ là toán tử số hạt boson ở vị trí thứ i ; U là cường độ tương tác trên cùng một nút mạng; μ là thế hóa học.

$U=\infty$: boson lõi cứng còn U hữu hạn: boson lõi mềm; Hamiltonian (4.1) chỉ biểu hiện pha siêu lỏng (SF) và pha cách điện Mott.

Mô hình Bose-Hubbard mở rộng:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + h.c.) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) + V_{nn} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j + V_{mnn} \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j - \sum_i (\mu + \mu_i) \hat{n}_i \quad (4.2)$$

V_{nn} là tương tác giữa các vị trí NN, V_{mnn} là tương tác giữa các vị trí NNN; μ_i là điện thế ghim trên mỗi nút mạng và lần lượt bằng 0 và ε ở trên các vị trí nút mạng xác định.



Hình 4.1: Mô hình mạng boson tương tác lõi mềm

4.2. Phương pháp Monte Carlo lượng tử

Xác định các tham số trật tự ρ_s và $S(\mathbf{Q})$, chúng ta có thể nhận biết được các pha trong hệ thống. Pha tinh thể: $S(\mathbf{Q}) \neq 0$, $\rho_s = 0$, pha SF có $S(\mathbf{Q}) = 0$, $\rho_s \neq 0$ trong khi pha SS thì $S(\mathbf{Q}) \neq 0$, $\rho_s \neq 0$.

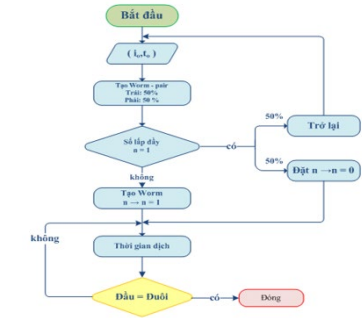
4.3. Biểu hiện pha siêu rắn (SS) dưới tác dụng của điện thế ghim tuần hoàn trong mạng vuông

4.3.1. Mô hình hạt boson lõi cứng:

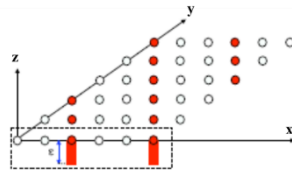
$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + h.c.) + V_{nn} \sum_{\langle ij \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j - \sum_i (\mu + \mu_i) \hat{n}_i \quad (4.3)$$

Hình 4.3 biểu diễn cấu trúc ghim các hạt ở vị trí xác định tương ứng với mật độ hạt $\rho=1/3$.

➤ *Khảo sát đường cong (ρ, μ)*

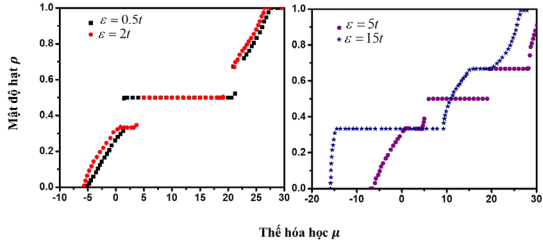


Hình 4.2: Sơ đồ thuật toán Worm.



Hình 4.3: Cấu trúc điện thế ghim tuần hoàn trong mô hình boson lõi cứng.

Quan sát trong hình 4.4 có thể thấy đường cong (ρ, μ) xuất hiện các đoạn nằm ngang (hay các cao nguyên) lần lượt xuất hiện ở các giá trị $\rho = 1/3, 1/2$ và $2/3$. Trên các cao nguyên hệ số nén $\kappa =$



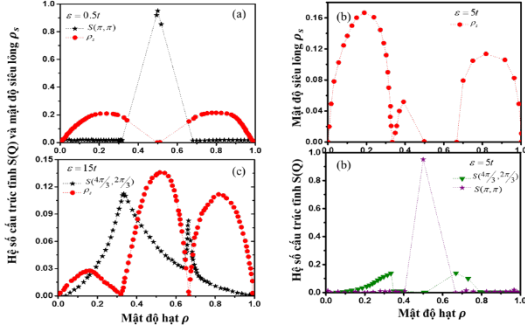
Hình 4.4: Đồ thị phụ thuộc của mật độ hạt ρ vào thế hóa học μ trong các giá trị điện thế ghim tuần hoàn khác nhau với $V_m = 6t$.

0 đặc trưng cho các pha tinh thể. Khi $\varepsilon = 0.5t$, chỉ xuất hiện cao nguyên tương ứng với pha tinh thể ô bàn cờ ở $\rho = 1/2$ giống với mô hình đồng nhất không có trường ngoài. Bước nhảy trong đường cong (ρ, μ) ở $\varepsilon = 0.5t$ biểu hiện quá trình phân tách pha. Tăng $\varepsilon = 2t$ và $\varepsilon = 5t$, hệ thống hình thành thêm các pha tinh ở mật độ hạt $\rho = 1/3$ và $2/3$. Khi ε vượt trội so với V_m ($\varepsilon = 15t$), pha tinh thể ở mật độ $\rho = 1/2$ biến mất, đường cong (ρ, μ) biến đổi liên tục ở cả phía trên và dưới mật độ tinh thể $\rho = 1/3$ và $2/3$. Pha SS có thể được hỗ trợ hình thành ở giữa pha SF và pha tinh thể với trật tự CDW. Ở phía trên mật độ tinh thể, pha SS được gây ra bởi khuyết tật giữa nút.

➤ *Khảo sát tham số trật tự của mô hình*

Các tham số trật tự $S(\mathbf{Q})$ và ρ_s được xác định trong hình vẽ (4.5). Khi ε nhỏ (hình 4.5a), ở $\rho = 1/2$, $S(\pi, \pi)$ có giá trị cực đại trong khi $\rho_s = 0$ tương ứng là pha tinh thể ô bàn cờ. Ở các giá trị mật độ còn lại $S(\pi, \pi) = 0$ còn $\rho_s \neq 0$ tương đương với pha SF. Với $\varepsilon = 5t$ (hình 4.13b), tại $\rho = 1/2, \rho = 1/3$ 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 $\rho < 1/3$, cả $S(4\pi/3, 2\pi/3)$ 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 $\rho = 1/3$ và $2/3$ chỉ có pha tinh thể tồn tại với $S(4\pi/3, 2\pi/3) \neq 0$, $\rho_S = 0$. Ở các vùng mật độ còn lại, $S(4\pi/3, 2\pi/3) \neq 0$ và



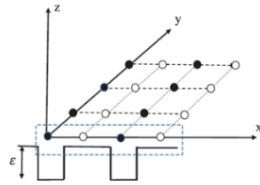
Hình 4.5: Đồ thị biểu diễn sự phụ thuộc của hệ số cấu trúc tinh $S(\mathbf{Q})$ và mật độ siêu lồng ρ_S vào mật độ hạt ρ ở các giá trị điện thế ghim tuần hoàn: (a) $\varepsilon = 0.5t$, (b) $\varepsilon = 5t$ và (c) $\varepsilon = 15t$ với $V_m = 6t$.

$\rho_S \neq 0$, theo định nghĩa ta có thể kết luận 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.

4.3.2. Mô hình hạt boson lõi mềm

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_j + h.c.) + \frac{U}{2} \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \sum_i (\mu + \mu_i) \hat{n}_i \quad (4.4)$$

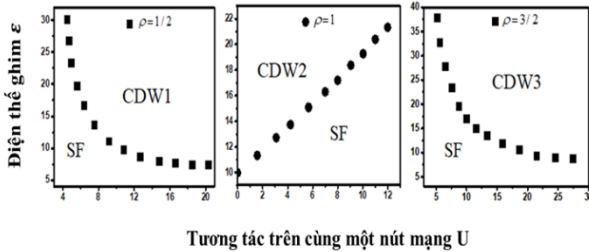
Điện thế ngoài tuần hoàn ghim các hạt ở vị trí xác định như hình 4.6 tương ứng với mật độ $\rho = 1/2$.



Hình 4.6: Cấu trúc điện thế ghim trong mô hình boson lõi mềm

➤ *Khảo sát giản đồ pha*

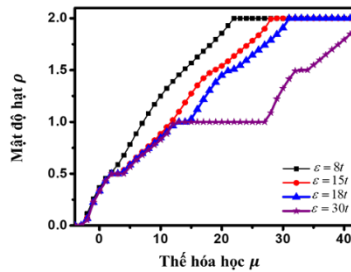
Bức tranh pha hình 4.7 cho thấy đường biên pha ở mật độ hạt $\rho = 1/2$ và $3/2$ điện thế ghim tới hạn ε_c giảm đơn điệu khi U tăng lên. Ngược lại, đường biên pha ở mật độ hạt $\rho = 1$ có biểu hiện khác biệt. Giá trị tới hạn ε_c tỉ lệ tuyến tính với năng lượng tương tác đẩy U .



Hình 4.7: 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 $3/2$ theo hàm (U, ε) .

➤ *Khảo sát đường cong (ρ, μ)*

Hình 4.8 cho thấy khi cường độ điện thế ghim đủ lớn, các đoạn 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 điện thế 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 CDW.

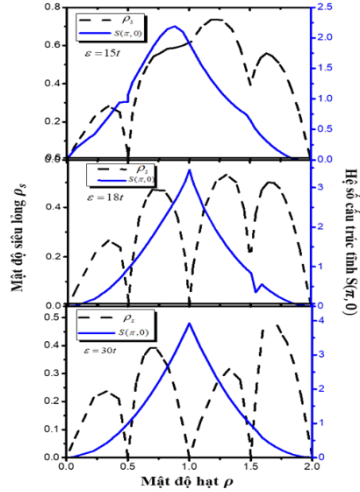


Hình 4.8: Đồ thị mật độ hạt ρ phụ thuộc vào thế hóa học μ cho các giá trị điện thế ghim khác nhau với cường độ tương tác $U = 8t$.

➤ *Khảo sát các tham số trật tự trong mô hình*

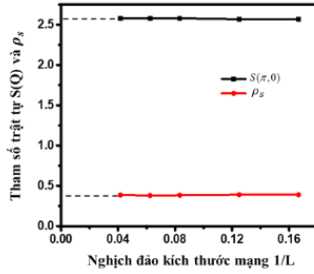
Các tham số trật tự là ρ_s và $S(\pi, 0)$ biến đổi theo mật độ hạt ρ ở các giá trị điện thế ghim tương ứng $\varepsilon = 15t, 18t$ và $30t$ theo hình 4.9. Lần lượt ở $\rho = 1/2, 1$ và $3/2$, giá trị ρ_s bằng 0 trong khi hệ số cấu trúc tinh $S(\pi, 0)$ khác không. Ở các vùng còn lại của mật độ khác mật độ $\rho = 1/2, 1$ và $3/2$, cả hai tham số trật tự là ρ_s và $S(\pi, 0)$ đều khác không. Khả năng pha SS tồn tại ở giữa hai pha SF và tinh thể CDW. Hệ thống 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.

Tham số trật tự trong giới hạn nhiệt động lực học



Hình 4.9: Đồ thị phụ thuộc của mật độ siêu lỏng ρ_s và hệ số cấu trúc tinh $S(\pi, 0)$ vào mật độ hạt ở các giá trị điện thế ghim khác nhau khi $U = 8t$.

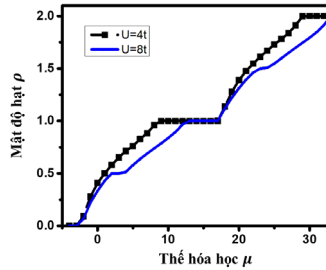
Để khẳng định sự ổn định của các tham số trật tự trong giới hạn nhiệt động lực học, chúng tôi đã mô phỏng cho hệ ở các kích thước mạng khác nhau với giá trị thể hóa $\mu = 10$ trong đơn vị năng lượng tương ứng với mật độ hạt $\rho \approx 0.83$ biểu diễn trong hình 4.10. Cả hai tham số đều tồn tại và khác không khi kích thước mạng được ngoại suy ra đến vô cùng.



Hình 4.10: Đồ thị tham số trật tự 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.

➤ *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 thể hóa học trung bình μ cho các giá trị tương tác U khác nhau biểu diễn trong hình 4.11. Rõ ràng, ở giá trị U nhỏ ($U = 4t$), chỉ có cao nguyên ở mật độ $\rho = 1$ xuất hiện. 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 $\rho = 1$ bị thu hẹp lại so với trường hợp tương tác U nhỏ.



Hình 4.11: Đồ thị mật độ hạt ρ phụ thuộc vào thể hóa học trung bình μ với điện thế ghim $\varepsilon = 20t$ ở hai giá trị tương tác $U = 4t$ và $U = 8t$.

KẾT LUẬN

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 Mangan bằng 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 AF, sự mở rộng các đám spin FM trong trường ngoài ở nhiệt độ xác định.
2. Sử dụng mô hình Ising có cạnh tranh tương tác cho mạng Shastry – Sutherland và chỉ ra vai trò của cường độ tương tác giữa các vị trí NN tác động lên sự hình thành và ổn định của bước nhảy từ chính $m/m_0 = 1/3$. Đã chỉ ra được các điều kiện và yếu tố ảnh hưởng đến quá trình phát sinh các bước nhảy phân số. Đó là khi cường độ tương tác $J/J' = 1$ với xác suất p và thẳng giáng Δ lớn tương ứng tương tác trao đổi AF giữa các vị trí NNN chiếm ưu thế so với tương tác AF trong các vị trí NN, chuỗi các bước nhảy từ ngày càng ổn định hơn. Lý thuyết này góp phần làm sáng tỏ cơ chế hình thành các bước nhảy nhỏ trong vật liệu tetraboxit đất hiếm RB4.
3. Tìm thấy ba pha tinh thể xuất hiện ở các mật độ $\rho = 1/3, 1/2$ và $2/3$ trong mô hình hạt boson lõi cứng dưới tác dụng của cường độ tương tác NN và điện thế ghim tuần hoàn và ở các mật độ tương ứng $\rho = 1/2, 1, 3/2$ trong mô hình boson lõi mềm khi điện thế ghim và cường độ tương tác trên cùng một vị trí đủ lớn. Khảo sát đường cong (ρ, μ) và các tham số trật tự cho thấy quá trình chuyển pha từ trạng thái SF sang trạng thái CDW xảy ra trong mô hình.

Danh mục các công trình liên quan đến luận án

Các bài báo liên quan đến luận án:

- [1] Bach Huong Giang, **Nguyen Thi Kim Oanh**, Nguyen Van Chinh, Bach Thanh Cong (2015) “First order magnetization process in Polycrystalline Perovskite Manganite”, Materials Transactions, Vol.56, No.9, p. 1320-1322.
- [2] **Oanh Nguyen**, Long Dang (2017) “A supersolid phase of hardcore boson in square optical superlattice”, The European Physical Journal B, Vol 90, No.4, 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: Condensed Matter, Volume 583, 412012.
- [4] **Oanh K. T. Nguyen**, Long D. Dang, Giang H. Bach and Cong T. Bach, “Signature of the supersolid phase in the soft-core boson model on the square lattice with periodic pinning potential”, submitted to Physical Review B.