

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

PHẠM THANH ĐẠI

**NGHIÊN CỨU SỰ HÌNH THÀNH CỦA CÁC PHA DỊ THƯỜNG CỦA HỆ
BOSON KÍCH THƯỚC NANO BẰNG PHƯƠNG PHÁP MONTECARLO
LƯỢNG TỬ**

LUẬN VĂN THẠC SĨ VẬT LIỆU VÀ LINH KIỆN NANO

HÀ NỘI 1-2016

LỜI CẢM ƠN

Lời đầu tiên tôi xin gửi lời cảm ơn chân thành nhất tới TS.Đặng Đình Long-Khoa Vật lý kỹ thuật & Công nghệ nano là Thầy hướng dẫn của tôi. Thầy đã định hướng cho tôi biết hướng đi của đề tài và chỉ cho tôi các bước thực hiện công việc. Thầy luôn ưu ái dành nhiều thời gian để giảng giải cho tôi về các hiện tượng xảy ra trong quá trình thực nghiệm và giúp tôi tìm giải pháp để mang lại các kết quả tốt hơn. Ngoài ra,Thầy cũng giúp đỡ, động viên, đưa ra những lời khuyên tận tình để tôi có thể hoàn thiện luận án này.

Tôi xin cảm ơn các Thầy cô giáo và các cán bộ của Khoa Vật lý kỹ thuật và Công nghệ nano,Trường Đại học Công Nghệ - Đại học Quốc gia Hà Nội đã giảng dạy, chỉ bảo tận tình và chu đáo, giúp tôi có những bài học rất bổ ích và tích lũy những kiến thức quý báu trong quá trình học tập để hoàn thành luận văn, đồng thời hoàn thiện những kiến thức khoa học cho công việc học tập và công tác sau này.

Cuối cùng, tôi xin cảm ơn tất cả người thân, bạn bè đã luôn ủng hộ và động viên tôi khi tôi thực hiện luận văn này. Xin chúc tất cả mọi người luôn mạnh khỏe và đạt được nhiều thành công!

Hà Nội, 12- 2015

Học viên

Phạm Thanh Đại

LỜI CAM ĐOAN

Tôi xin cam đoan đây là công trình nghiên cứu của tôi và sự hướng dẫn của giáo viên hướng dẫn. Luận văn không có sự sao chép tài liệu, công trình nghiên cứu của người khác mà không chỉ rõ trong mục tài liệu tham khảo. Những kết quả và các số liệu trong khóa luận chưa được ai công bố dưới bất kỳ hình thức nào. Tôi hoàn toàn chịu trách nhiệm trước nhà trường về sự cam đoan này.

Hà Nội, 12- 2015

Học viên

Phạm Thanh Đại

BẢNG CHỮ CÁI VIẾT TẮT

MI	Điện môi Mott
SF	(Superfluid) Trạng thái siêu chảy
SS	(Supersolid) Trạng thái siêu rắn
$S(\pi,\pi)$	Hệ số cấu trúc tinh tại vector mạng đảo (π,π)
BEC	Ngưng tụ Bose-Einstein
μ	Thế hóa
ρ_s	Mật độ siêu chảy
ρ	Mật độ hạt
J	Yếu tố ma trận nhảy
H	Hamilton
U	Thế năng tương tác trên một nút
V_1	Thế năng tương tác của hai boson lân cận gần nhất
V_2	Thế năng tương tác của hai boson lân cận gần nhất thứ hai
$I(r)$	Cường độ điện trường
N	Số hạt boson của hệ
LxL	Kích thước mạng

Danh mục hình vẽ

Hình 2.1: Giảm đồ pha của He^4 ở nhiệt độ và áp suất thấp.	8
Hình 2.2: Mô hình của mạng quang	10
Hình 2.3: Các kiểu mạng quang cơ bản 1,2,3 chiều.....	13
Hình 2.4: Trạng thái điện môi Mott: các hạt boson nằm trong mạng quang.	15
Hình 3.1: Hình vẽ mô tả hai số hạng động năng (đặc trưng bởi giá trị J) và thế năng (đặc trưng bởi giá trị U) trong mô hình bose-hubbard.	20
Hình 3.2: Trạng thái siêu chảy (a) và Điện môi Mott (MI) (b) trong mô hình Bose Hubbard hai chiều	21
Hình 3.3: Trạng thái siêu chảy (a): nguyên tử tự do di chuyển trong mạng quang và trạng thái Điện môi Mott (MI) :nguyên tử định xứ trong trong mạng (b)	21
Hình 3.4: Mạng vuông và các tương tác sử dụng trong mô hình Bose Hubbard của Boson lõi rắn.....	23
Hình 4.1: Sơ đồ năng lượng trong mô hình hệ hai mức năng lượng.....	31
Hình 4.2: Biểu đồ mô tả các quỹ đạo khả dĩ trong không gian α của hệ.....	34
Hình 4.3: Cấu trúc khi có trường ngoài trong mạng vuông để mật độ hạt $\rho = \rho_C = 1/3$ tương ứng, phù hợp với tinh thể đối xứng trong khi $\rho = \rho_I = 1/2$	38
Hình 4.4: Giảm đồ mô tả WA- LOWA	39
Hình 5.1: Giảm đồ pha của mô Bose-Hubbard.	42
Hình 5.2: Mật độ hạt ρ phụ thuộc vào thế hóa μ/V_1 được tính toán trong trong mạng $L \times L = 6 \times 6$ và nhiệt độ nghịch đảo $\beta = 16$	43
Hình 5.3: Mật độ siêu rắn ở phần trên của đồ thị và chỉ số cấu trúc tinh thể theo mật độ hạt ở phía dưới của đồ thị. Mô phỏng được thực hiện trong các mạng có kích thước khác nhau $L \times L = 6 \times 6, L \times L = 12 \times 12, L \times L = 24 \times 24$	45
Hình 5.4: Mật độ siêu chảy và chỉ số cấu trúc theo nghịch đảo kích thước mạng tại mật độ hạt $\rho = 0.292$ tương ứng với thế hóa $\mu = 6$. Thế $V_1 = 4t$ và $V_2 = 4t$	46

Hình 5.5: Mật độ siêu chảy ở phần trên của đồ thị và chỉ số cấu trúc ở phần dưới của đồ thị tại nhiệt độ nghịch đảo $\beta = 16$	47
Hình 5.6: Mật độ hạt ρ theo thế hóa μ/V_1 tại nhiệt độ nghịch đảo $\beta = 16$ và kích thước $L \times L = 24 \times 24$ ($V_1 = 8t$, $V_2 = 4.1t$).	48
Hình 5.7: Sự phụ thuộc của mật độ hạt vào thế hóa khi có trường ngoài	50
Hình 5.8: Mối liên hệ giữa mật độ và thế hóa khi có trường ngoài và thế thế năng giữa hai hạt lân cận gần nhất $V_1 = 6$	51
Hình 5.9: Biểu đồ pha của các trạng thái cơ bản ở các mật độ khác nhau: (a) tại mật độ $\rho = 1/3$; (b) $\rho = 1/2$; (c) $\rho = 2/3$,	52
Hình 5.10: Mật độ siêu chảy và chỉ số cấu trúc tĩnh theo mật độ hạt khi có trường ngoài	53

MỤC LỤC

MỞ ĐẦU.....	1
CHƯƠNG I. TỔNG QUAN.....	5
CHƯƠNG 2. CÁC PHA ĐẶC TRƯNG CỦA HỆ BOSON Ở NHIỆT ĐỘ THẤP..	8
2.1. Các pha của He^4 ở nhiệt độ thấp	8
2.2. Các pha của nguyên tử siêu lạnh trong boson trong mạng quang	9
2.2.1. Mạng quang học	9
2.2.2. Pha điện môi Mott	14
2.2.3. Pha siêu rắn.....	15
2.2.3.1. Tham số trật tự trong pha rắn	15
2.2.3.2. Tham số trật tự trong pha siêu chảy	16
2.2.3.3. Tham số trật tự trong pha siêu rắn.....	18
CHƯƠNG 3: MÔ HÌNH BOSE-HUBBARD.....	19
3.1. Mô hình bose-hubbard	19
3.2. Đặc trưng Vật lý của mô hình Bose Hubbard	20
CHƯƠNG 4 : PHƯƠNG PHÁP MONTE CARLO LƯỢNG TỬ.....	25
4.1. Thuật toán Sâu (Worm) - WA.....	29
4.2. Hệ hai mức năng lượng	30
4.3. Hệ đơn hạt.	34
4.4. Hệ nhiều hạt.	36
4.5. Áp dụng phương pháp Monte Carlo lượng tử: Thuật toán Sâu	37
CHƯƠNG 5: KẾT QUẢ THẢO LUẬN.....	41
5.1. Giản đồ pha khi không có trường ngoài tính đến tương tác lân cận gần nhất V_1	41
5.2. Giản đồ pha khi không có trường ngoài: tính đến tương tác lân cận gần nhất thứ hai.....	43
5.3. Giản đồ pha khi có trường ngoài.....	49

KẾT LUẬN.....	56
TÀI LIỆU THAM KHẢO.....	57

MỞ ĐẦU

Trong những năm gần đây các hướng nghiên cứu nhằm tìm kiếm trạng thái mới của vật chất không chỉ có ý nghĩa khoa học, ví dụ các nghiên cứu này là cơ sở lý thuyết về sự hình thành và điều kiện tồn tại pha trong Vật lý, định hướng nghiên cứu thực nghiệm, mà còn có tiềm năng ứng dụng lớn [27, 31, 32]. Một trong những câu hỏi lớn trong Vật lý cho đến nay vẫn chưa có lời giải thích thỏa đáng đó là hiện tượng siêu dẫn ở nhiệt độ cao [2, 3]. Những cố gắng nghiên cứu không mệt mỏi để tìm ra bản chất Vật lý, cũng như đặc trưng của pha siêu dẫn nhiệt độ cao đã tạo ra nhiều hướng đi mới trong nghiên cứu các hệ tương quan mạnh nói chung và các pha dị thường của vật chất nói riêng. Thực tế, mối liên hệ giữa siêu dẫn nhiệt độ cao và các trạng thái dị thường của hệ boson, như trạng thái siêu chảy của He^4 [4, 13, 17, 18, 20, 26, 36, 39, 40], trạng thái siêu rắn [5, 6, 7, 10, 11, 12, 14, 15, 16, 19, 22, 24, 28, 32, 37, 38, 41, 42], trạng thái siêu thủy tinh [30, 31, 32], v. v. đã được đề cập trong các nghiên cứu gần đây. Do đó, những hiểu biết về các trạng thái dị thường của hệ boson, là một trong những nỗ lực nhằm vén bức màn bí ẩn của trạng thái siêu dẫn nhiệt độ cao, một trong những trạng thái khó hiểu nhất của Vật lý đến thời điểm này

He^4 là hệ boson điển hình được lựa chọn để nghiên cứu các pha dị thường ở nhiệt độ thấp nhằm chỉ ra vai trò của các hiệu ứng lượng tử trong quá trình hình thành các pha và chuyển pha lượng tử. Một trong những phát hiện đáng chú ý nhất trong hơn một thập kỷ qua đối với các nghiên cứu trên hệ He^4 đó là tuyên bố tìm thấy pha siêu rắn ở nhiệt độ rất thấp, khoảng 200 nK, của Kim và Chan [7]. Tuyên bố này là một phát hiện có tính đột phá vì nỗ lực của cộng đồng Vật lý trong hơn 5 thập kỷ tìm kiếm pha siêu rắn cuối cùng cũng đạt được thành tựu. Đáng tiếc là, sau tuyên bố của Kim và Chan, cộng đồng nghiên cứu pha siêu rắn không đạt được thống nhất. Thực tế là, kết luận về sự tồn tại của pha siêu rắn cũng như nhiều cách giải thích khác nhau cho kết quả trong thí nghiệm nổi tiến trên được đưa ra thảo luận rất sôi nổi. Cho đến bây giờ, bất đồng liên quan đến pha siêu rắn trên He^4 vẫn còn rất lớn [31, 32, 41, 48, 49, 50, 51, 52, 53]. Bản chất của vấn đề nằm ở chỗ: hệ He^4 chứa nhiều tạp và khó kiểm soát các thông số khi nhiệt độ càng thấp. Do đó, các kết quả thu được khó có thể được chứng minh và không có tính thuyết phục cao. Một trong những nỗ lực nhằm giảm bớt tranh cãi trong các phát hiện và nghiên cứu pha siêu rắn nói riêng và hệ tương quan mạnh nói

chung đó là chuyển hướng nghiên cứu sang mạng quang học, gọi tắt là mạng quang [8, 9, 27, 35, 41]. Mạng quang là mạng nhân tạo, có cấu trúc trật tự giống như mạng tinh thể, được hình thành khi chiếu các chùm tia laser ngược chiều nhau tạo thành các hố thế để bẫy các nguyên tử siêu lạnh [9, 27, 40]. Các nguyên tử siêu lạnh có thể là các hạt boson hoặc fermion. Tuy nhiên, trong khuôn khổ của khóa luận này, chúng tôi chỉ quan tâm đến các hệ boson. Mạng quang được xem là hệ Vật lý “thuần khiết” và có thể kiểm soát được các thông số phức tạp như tương tác bằng cách thay đổi cường độ các chùm laser. Chính vì lý do này, mạng quang được cộng đồng nghiên cứu coi như một hệ mô phỏng thực nghiệm (lý tưởng cho các hiệu ứng Vật lý đòi hỏi độ chính xác cao). Nghiên cứu trên mạng quang không chỉ sử dụng để kiểm nghiệm các định luật Vật lý mà còn là công cụ để phát hiện các hiệu ứng lượng tử, các hiệu ứng siêu tinh tế, ví dụ tương tác siêu trao đổi [40], pha siêu thủy tinh [30, 31, 32], chất lỏng spin lượng tử [25] v. v. . Tiềm năng ứng dụng của mạng quang là vô cùng lớn [9, 41].

Về mặt mô hình, mạng quang được mô tả hoàn hảo bằng mô hình Bose - Hubbard [8, 9]. Tất cả các tương tác xuất hiện trong mô hình Bose Hubbard đều có thể kiểm soát và tiến hành thực nghiệm trên mạng quang. Cần chú ý rằng, trước đây người ta coi mô hình Bose Hubbard như mô hình đồ chơi, tức là chỉ có giá trị về mặt lý thuyết. Tuy nhiên, kể từ sau khi những phát hiện lý thú trên mạng quang và sự tương ứng về các tham số Vật lý giữa mạng quang và mô hình Bose-Hubbard thì mô hình Bose-Hubbard không còn là mô hình đồ chơi thuần túy nữa mà nó được xem như mô hình thực nghiệm hoàn hảo của mạng quang. Nói cách khác mạng quang có vai trò như một công cụ mô phỏng lại và kiểm nghiệm thực nghiệm của mô hình Bose - Hubbard. Cũng chính vì điều này, người ta rất kỳ vọng vào mạng quang trong việc phát hiện và chứng minh sự tồn tại của pha siêu rắn (đang gây nhiều tranh cãi trong hệ He^4).

Trên phương diện lý thuyết, để nghiên cứu các pha dị thường của He^4 hay các nguyên tử siêu lạnh trong mạng quang, người ta có nhiều công cụ khác nhau. Về mặt giải tích, các phương pháp thường sử dụng như phương pháp trường trung bình, phương pháp khai triển nhiễu loạn hay phương pháp sóng spin, v. v. Đáng tiếc là các phương pháp này không phù hợp với các hệ tương quan mạnh như He^4 vì nó không mô tả được các thăng giáng lượng tử (phương pháp trường trung bình) hay không thể sử dụng phương pháp nhiễu loạn vì thế năng tương tác rất lớn so với động năng. Với các phương pháp tính toán số: nếu sử dụng phương pháp chéo hóa chính xác, chúng ta chỉ có thể tính toán cho các hệ kích thước nhỏ. Trong trường hợp này, các phương pháp

mô phỏng Monte Carlo lượng tử phát huy sức mạnh khi mô phỏng các hệ boson tương quan mạnh ở nhiệt độ thấp vì các phương pháp này cho phép chúng ta mô phỏng được các thăng giáng lượng tử và kích thước của hệ không bị giới hạn như trong phương pháp chéo hóa. Nhiều nghiên cứu đã chỉ ra sự tồn tại của pha siêu rắn trên các mạng quang với các dạng tương tác khác nhau cũng như cấu trúc hình học khác nhau. Cần chú ý rằng, với mô hình Bose Hubbard thì một mình tương tác lân cận gần nhất đã đủ để ổn định được pha siêu rắn trong mạng tam giác nhưng không đủ để ổn định pha này trên mạng vuông. Để có thể ổn định được pha siêu rắn trên mạng vuông, Batrouni et al. (2000) [15, 16] đã chỉ ra rằng: cần phải tính đến tương tác lân cận gần nhất và gần nhất kế tiếp.

Với nỗ lực và mong muốn đóng góp một phần nhỏ bé cho các nghiên cứu về pha dị thường trong các hệ boson tương quan mạnh chúng tôi đã chọn đề tài của khóa luận này là : *“Nghiên cứu sự hình thành các pha dị thường của hệ boson kích thước nano bằng phương pháp Monte Carlo lượng tử.”*

Mục tiêu của khóa luận

1. Sử dụng phương pháp Monte Carlo lượng tử sử dụng thuật toán Sâu áp dụng vào mô hình Bose-Hubbard để nghiên cứu hệ boson lõi rắn ở nhiệt độ thấp khi có trường ngoài nhằm chỉ ra vai trò của tương tác và các thăng giáng lượng tử trong việc hình thành các pha dị thường. Câu hỏi quan trọng nhất cần trả lời trong khóa luận là: *Chỉ với tương tác gần nhất và trường ngoài có thể ổn định được pha siêu rắn của hệ hạt boson lõi rắn trong mạng vuông không?*
2. Kiểm nghiệm lại các kết quả đã biết trong trường hợp không có trường ngoài và nghiên cứu sự xuất hiện của các pha mới khi có mặt trường ngoài.
3. Tìm kiếm các miền tham số, của cường độ của trường ngoài và tương tác của các lân cận gần nhất, có thể ổn định pha siêu rắn.

Ý nghĩa khoa học

Các kết quả nghiên cứu đưa ra các khái niệm cơ bản và đặc trưng của các pha dị thường của hệ boson tương quang mạnh ở nhiệt độ thấp, như pha siêu rắn, pha siêu chảy, v. v., cũng như vai trò của tương tác và thăng giáng lượng tử. Ngoài ra, các nghiên cứu mô phỏng nhằm kiểm nghiệm lại các kết quả nghiên cứu lý thuyết đã được công bố trước đây cũng như định hướng cho các thực nghiệm trong việc tìm kiếm các pha lượng tử và chuyển pha lượng tử của hệ nhiều hạt boson tương quan mạnh như hệ He^4 và nguyên tử siêu lạnh trong mạng quang học.

CHƯƠNG I. TỔNG QUAN

Năm 1937 tính chất siêu chảy của He^4 (một loại hạt boson) lần đầu tiên được biết đến nhờ phát hiện của nhà Vật lý người Nga Pyotr Kapitza [15] đã mở ra một hướng nghiên cứu về các pha dị thường của vật chất. Tính siêu chảy là một hiện tượng thú vị trong cơ học lượng tử ở cấp độ vi mô vì nó cho thấy vai trò quan trọng của tương tác gây ra các thăng giáng lượng tử khi nhiệt độ không còn có vai trò quyết định trong việc hình thành pha. Nói một cách khác, nó cho thấy vai trò quan trọng của các hiệu ứng lượng tử trong quá trình hình thành các pha dị thường ở nhiệt độ thấp. Sự chuyển pha của He^4 từ trạng thái lỏng thông thường sang trạng thái siêu chảy ở dưới nhiệt độ 2,17K với các tính chất đặc biệt như khả năng chảy không ma sát v. v., đã thu hút chú ý của cộng đồng nghiên cứu cho đến tận ngày nay.

Ngoài hiện tượng siêu chảy, chúng ta còn biết một hiện tượng khác cũng đặc trưng cho các hạt boson như sau: khi nhiệt độ được hạ xuống dưới nhiệt độ giới hạn (trong trường hợp của He^4 là 2,17K) các hạt boson có thể tồn tại trong cùng một trạng thái lượng tử với mức năng lượng thấp nhất gọi là hiện tượng ngưng tụ Bose Einstein [1]. Một điều thú vị khác là dường như có một mối liên hệ giữa hiện tượng ngưng tụ Bose Einstein và tính siêu chảy. Đáng tiếc là cho đến nay vẫn chưa có ai chỉ ra sự liên hệ đó thực sự như thế nào. Ở khía cạnh lý thuyết, pha siêu chảy cũng như ngưng tụ Bose Einstein được đặc trưng bởi sự tồn tại của tham số trật tự ngoài đường chéo tầm xa (Off Diagonal Long Range Order-ODLRO) để phân biệt với tham số trật tự theo đường chéo tầm xa (Long Range Order-LRO) đặc trưng cho pha rắn (pha tinh thể) khi các nguyên tử bị định xứ trong các nút mạng. Hai tham số trật tự này phủ định nhau, nói cách khác là chúng thường triệt tiêu nhau. Nghĩa là, thật khó có thể tưởng tượng được một pha có sự tồn tại của cả hai tham số trên.

Tuy nhiên, trong quá trình phát triển nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm đối với các hệ boson lại cho ra kết quả đáng kinh ngạc. Đó là có thể đồng thời tồn tại hai tham số trật tự nói trên cùng một pha, và thuật ngữ pha siêu rắn ra đời. Điều thú vị là trạng thái siêu rắn lần đầu tiên được gọi tên bởi Penrose và Onsager từ năm 1956 nhưng không phải để minh chứng cho sự tồn tại của nó mà là để bác bỏ nó. Họ lập luận và kết luận rằng không tồn tại trật tự ODLRO trong các chất rắn kết tinh. Tuy nhiên, Andreev và Lifshitz [5] (năm 1969) và Chester [14] (năm 1970) đã đề xuất bức tranh khác nhằm giải thích cho khả năng tồn tại của pha siêu rắn này. Lập luận của họ dựa

trên quan điểm cho rằng các sai hỏng mạng trong các tinh thể He^4 ở nhiệt độ thấp trở nên linh động và xuất hiện hiện tượng ngưng tụ Bose Einstein. Lý do là, ở nhiệt độ thấp, do khả năng linh động nên các sai hỏng này có thể chuyển động không có ma sát vì chúng cùng tồn tại ở mức năng lượng thấp nhất. Tuy nhiên, sau nhiều nỗ lực tìm kiếm thực nghiệm đều thất bại, đến năm 2004, một cuộc bùng nổ trong nghiên cứu pha siêu rắn xảy ra ngay sau khi E.Kim và W.Chan [7] công bố đã thành công trong việc quan sát thực nghiệm thấy pha siêu rắn. Đáng tiếc là, đến nay hiện tượng này vẫn còn gây ra rất nhiều tranh cãi. Một trong những nguyên nhân gây tranh cãi đó là He^4 trong thí nghiệm có chứa nhiều tạp và các tham số vật lý không điều khiển được, ví dụ như luôn có một hàm lượng nhỏ của He^3 trong các hệ He^4 . May mắn là trong nỗ lực nghiên cứu các tính chất mạng quang học, một nhóm các nhà khoa học đã đưa ra khả năng phát hiện được các pha dị thường như pha siêu chảy, pha rắn trong các hệ này. Các nghiên cứu này mở ra một lối thoát cho việc tìm kiếm pha siêu rắn trên mạng quang học. Mạng quang được hình thành do các chùm laser cùng tần số chiếu đối đầu vào nhau để hình thành nên các sóng dừng với các hố thế nằm tại các vị trí đáy sóng. Các nguyên tử ở nhiệt độ thấp cỡ nano Kelvin (nK), còn gọi là các nguyên tử siêu lạnh, sẽ bị giam cầm trong các hố thế này. Cũng bởi lý do là các hố thế trong mạng quang học có cấu trúc giống các mạng tinh thể nên người ta sử dụng khái niệm mạng quang học để chỉ cấu trúc mạng của hệ thống quang học này. Ưu điểm của mạng quang học là chúng thuần khiết hơn so với He^4 và khả năng kiểm soát từng tham số của hệ bằng cách thay đổi cường độ chùm laser. Cần chú ý rằng mạng quang học không giống như mạng tinh thể hoàn toàn vì khoảng cách giữa các hố thế đặc trưng cho nút mạng gấp hàng nghìn lần khoảng cách các nguyên tử trong tinh thể. Tuy vậy, các tham số trật tự đề cập ở trên đều có thể được đặc trưng và kiểm nghiệm về sự tồn tại trong mạng quang học. Cộng đồng nghiên cứu về các pha dị thường và đặc biệt là những nhóm đang tìm kiếm pha siêu rắn kỳ vọng sẽ quan sát thấy pha này xuất hiện trong mạng quang học do mạng quang học sạch và dễ kiểm soát hơn. Hệ quả là các kết quả sẽ đáng tin cậy và gây tranh cãi ít hơn. Vì vậy, việc nghiên cứu các đặc trưng và khả năng hình thành các pha trong mạng quang học trở thành một đề tài mang tính thời sự và nóng hổi trong những năm gần đây. Câu hỏi đặt ra là các yếu tố nào ảnh hưởng đến quá trình hình thành pha lượng tử và sự chuyển pha giữa chúng được kiểm soát như thế nào?

Trong khóa luận này, chúng tôi sử dụng phương pháp tính toán Monte Carlo lượng tử [23, 29, 34] để khảo sát ảnh hưởng của các tham số vật lý như: các yếu tố

hình học, trường ngoài và đặc biệt là các yếu tố định xứ như tương tác, độ mất trật tự đối với sự hình thành các pha dị thường và chuyển giữa chúng như pha siêu chảy, pha siêu rắn, điện môi Mott, siêu thủy tinh, pha thủy tinh spin lượng tử,...Thật may mắn những nghiên cứu của chúng tôi có thể được kiểm nghiệm trực tiếp trên mạng quang học hoặc cả các hệ boson khác như Hydro hoặc graphite hấp thụ He^4 ...Bài toán nghiên cứu của chúng tôi là tổng quát và có thể được áp dụng trong nhiều hệ vật lý có các điểm tương đồng như các hệ spin lượng tử thấp chiều.

Vấn đề đầu tiên chúng tôi cần giải quyết đó là chọn mô hình phù hợp để mô tả mạng quang học chính xác nhất có thể. Nếu mô hình quá đơn giản có thể dễ giải nhưng lại không mô tả được đầy đủ các tính chất tương quan mạnh của hệ. Nếu mô hình quá phức tạp gây khó khăn trong việc hiện thực hóa và kiểm nghiệm thực nghiệm. Do vậy chúng tôi chọn một trong những mô hình cơ bản mô tả tương quan mạnh của các hạt boson trong mạng quang là mô hình Bose Hubbard. Mô hình này có nguồn gốc từ mô hình Hubbard sử dụng để mô tả các hạt fermion và các tính chất của nó như tính siêu dẫn, chuyển động của các điện tử giữa các nguyên tử trong chất rắn kết tinh. Tuy nhiên, mô hình Bose Hubbard chỉ áp dụng cho các hệ boson [9]. Với đặc trưng này, chúng ta có thể sử dụng phương pháp Monte Carlo lượng tử để mô phỏng và mô hình hóa hệ boson mà không gặp phải các vấn đề về dấu như khi tính toán cho các hệ hạt fermion. Luận văn đã áp dụng thành công phương pháp Monte Carlo lượng tử với nền tảng là hình thức luận tích phân đường để nghiên cứu hệ boson mạng vuông khi có trường ngoài nhằm đưa ra một miền tham số tồn tại của các pha siêu rắn.

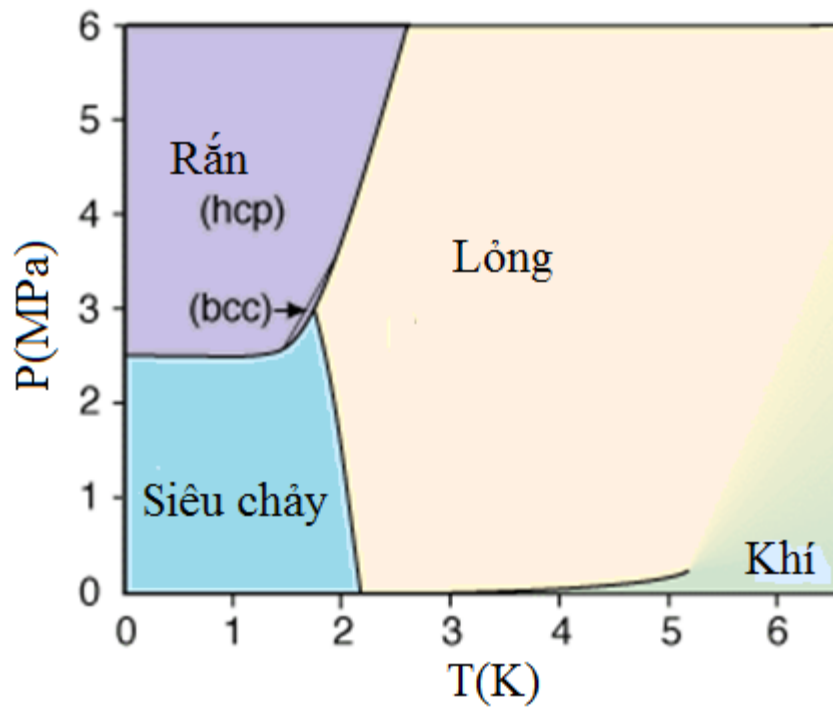
Trong luận văn đã chứng minh được sự tồn tại của pha siêu rắn khi tăng cường độ của trường ngoài đến một giá trị tới hạn trong mô hình tương tác gần nhất Bose-Hubbard. Đáng chú ý, pha siêu rắn này không xuất hiện trong mô Bose-Hubbard thông thường, tức là không có mặt trường ngoài.

CHƯƠNG 2. CÁC PHA ĐẶC TRƯNG CỦA HỆ BOSON Ở NHIỆT ĐỘ THẤP

2.1. Các pha của He⁴ ở nhiệt độ thấp

Heli là nguyên tố nhẹ thứ hai sau hydro. Ở nhiệt độ phòng, người ta biết đến nó như một chất khí. Trong điều kiện áp suất thông thường, Heli khí chuyển thành trạng thái lỏng ở nhiệt độ rất thấp, khoảng 4K và tiếp tục nằm trong trạng thái này dù tiếp tục hạ nhiệt độ. Muốn Heli đông đặc ở nhiệt độ thấp cần đặt một áp suất tương đối lớn, khoảng 2.5 Mpa [4].

Heli có hai đồng vị là He⁴ và He³, thông thường cả hai đồng vị này tồn tại cùng nhau trong một hỗn hợp khí. Tuy nhiên trạng thái của các đồng vị này rất khác nhau khi được làm lạnh đến vài độ K. Hỗn hợp hai đồng vị sẽ tự nhiên tách ra ở dưới 0.8 K. Dạng lỏng của của hai đồng vị trở thành siêu chảy tại nhiệt độ rất thấp He⁴ dưới 2.17 K, và He³ dưới 0.0025 K.



Hình 2.1: Giản đồ pha của He⁴ ở nhiệt độ và áp suất thấp.

Đồng vị He⁴ là các hạt boson và là đồng vị phổ biến hơn của Heli. Hình 2.1 là giản đồ pha của He⁴ tại nhiệt độ thấp. He⁴ sẽ giữ ở dạng lỏng dù nhiệt độ được hạ 0K nếu áp suất thấp hơn 2.5Mpa. Sở dĩ có hiện tượng này vì Heli có độ bất định về vị trí (giúp Heli ở trong trạng thái lỏng) gây ra bởi các hằng giáng lượng tử lớn hơn nhiều so

với năng lượng liên kết (giúp Heli đóng rắn). Do đó, He^4 sẽ không hóa rắn dù nhiệt độ có tiệm cận 0K trừ khi chúng ta tăng áp suất của hệ nhằm triệt tiêu các thăng giáng lượng tử. Khi Heli ở trạng thái lỏng, nó còn thực hiện một sự chuyển pha nữa thành một trạng thái lỏng nhưng có thể chảy không ma sát, thường gọi là trạng thái siêu chảy tại nhiệt độ 2.17K trong điều kiện áp suất thông thường.

Khi tăng áp suất trên 2.5 MPa, Heli nằm trong trạng thái rắn ở nhiệt độ thấp như mô tả trên giản đồ pha Hình 2.1. Pha rắn của He^4 có thể là dạng lục giác (hcp) hoặc dạng ngưng tụ lập phương (bcc). Trong các thí nghiệm của Kim và Chan (2005) [7] đã thành công trong việc hạ nhiệt độ của Heli xuống 200nK và áp suất khoảng 5Mpa. Những tín hiệu về sự chảy không ma sát giúp nhóm của Kim và Chan tin rằng Heli đã nằm trong trạng thái siêu rắn.

2.2. Các pha của nguyên tử boson siêu lạnh trong mạng quang

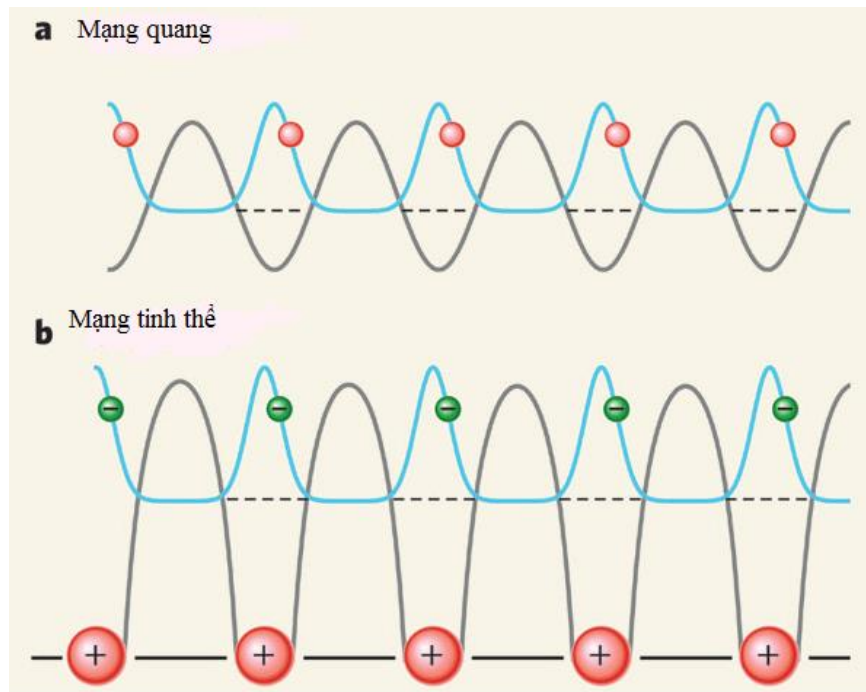
2.2.1. Mạng quang

Mạng quang là một mô hình mạng nhân tạo, được hình thành từ sự giao thoa các chùm tia laser đơn sắc cùng tần số chiếu ngược chiều nhau, tạo ra một mô hình không gian có cấu trúc giống như mạng tinh thể [8, 9, 41]. Điểm đặc biệt của không gian này là việc hình thành các điểm cực tiểu thế năng của chùm tia giao thoa. Các điểm cực tiểu này đóng vai trò như các bẫy thế năng, hệ quả là chúng có thể bẫy các nguyên tử vào đó, hình thành nên một cấu trúc tuần hoàn có đặc điểm giống như cấu trúc mạng tinh thể. Tuy nhiên, do khoảng cách giữa các điểm cực tiểu thế năng có bậc của bước sóng ánh sáng, tức là lớn hơn rất nhiều khoảng cách giữa các nguyên tử trong tinh thể. Do đó, mạng quang không hoàn toàn giống mạng tinh thể mà chỉ giống về đặc điểm cấu trúc. Ở đây, khái niệm “*mạng*” trong khái niệm mạng quang bắt nguồn từ sự tương đồng về cấu trúc tuần hoàn của thế năng như trong mạng tinh thể

Một đặc điểm lý thú của mạng quang khiến nó được chú ý là ứng xử của các nguyên tử trong mạng quang có nhiều đặc điểm giống như các điện tử trong mạng tinh thể. Ví dụ, các nguyên tử trong mạng quang có thể di chuyển do hiệu ứng xuyên hầm lượng tử, thậm chí có thể vượt qua các giếng có năng lượng lớn hơn năng lượng của nguyên tử để tạo thành các kênh dẫn như trong trường hợp của hiện tượng siêu chảy. Ở một giới hạn khác, như trong pha điện môi Mott các nguyên tử bị bẫy trong các hố thế

năng lượng cực tiểu và không thể di chuyển tự do tương tự như tinh thể hoặc các chất điện môi.

Hình vẽ 2.2 dưới đây cho chúng ta hình ảnh trực quan hơn về mạng quang (hình 2.2a) và mạng tinh thể (hình 2.2b). Trong mạng quang, các hố thế xuất hiện do các đáy thế tạo bởi chùm laser giao thoa, còn trong mạng tinh thể, các hố thế là do các ion cố định tại các nút mạng tạo ra. Hạt tự do trong mạng tinh thể là điện tử còn hạt tự do trong mạng quang là các nguyên tử siêu lạnh.



Hình 2.2 : Mô hình của mạng quang[27](a): nguyên tử bị bẫy trong giếng thế tuần hoàn (màu xám) được tạo thành từ các chùm laser giao thoa, hàm sóng của nguyên tử (màu xanh) điện tử. Mô hình mạng tinh thể thực (b): thế tuần hoàn được tạo thành bởi các điện tử và ion trong mạng tinh thể. Chấm màu xanh lá cây là điện tử và chấm màu đỏ là các ion

Các tinh thể mạng quang cho chúng ta một mô hình lý thuyết lý tưởng trong đó các thông số của mạng có thể kiểm soát được. Chính vì lý do này, mạng quang được sử dụng để nghiên cứu các hiện tượng trong mạng tinh thể khó quan sát được trong các tinh thể thực tế. Để hiểu được tại sao mạng quang lại có thể điều khiển các tham số dễ dàng, chúng ta hãy xem xét các đặc trưng cơ bản của mạng quang. Các thông số quan trọng của mạng quang: độ sâu của giếng bẫy nguyên tử, chu kỳ của mạng hay khoảng

cách giữa các nút mạng. Độ sâu của giếng trong mạng có thể được điều khiển thông qua việc thay đổi cường độ các chùm tia laser nhờ mối liên hệ sau:

$$E(r, t) = \hat{e}E(r) \exp(-i\omega t) \quad (2.1)$$

$$p(r, t) = \hat{e}p(r) \exp(-i\omega t) \quad (2.2)$$

$$p(r) = \alpha(\omega)E(r) \quad (2.3)$$

Với $E(r)$ và $p(r)$ là biên độ của dao động của điện trường và độ phân cực tương ứng, \hat{e} là vectơ đơn vị phân cực, $\alpha(\omega)$ là hệ số phân cực phức, phụ thuộc vào tần số. Điện thế tương tác $V_{dip}(r)$ giữa mômen lưỡng cực và điện trường của sóng ánh sáng biểu diễn dưới dạng:

$$V_{dip}(r) = -\frac{1}{2\epsilon_0 c} \text{Re}(\alpha) I(r) \quad (2.4)$$

Trong đó, c là vận tốc ánh sáng, $\text{Re}(\alpha)$ là phần thực của hệ số phân cực. Nguyên tử bị bẫy vào các hố thế, tại đó cường độ của chùm sáng cực đại hoặc cực tiểu phụ thuộc vào giá trị của tín hiệu đặc trưng bởi hàm phức của phân cực. Tương tác giữa điện trường và mômen lưỡng cực dẫn đến sự hấp thụ năng lượng điện từ của lưỡng cực. Điều này gây nên tác dụng nhiệt cho các nguyên tử trong mạng do vậy chúng ta cần phải tránh xảy ra tương tác này. Do đó, các nguyên tử phải nằm trong trạng thái siêu lạnh trong mạng và giữ nguyên được trạng thái ngưng tụ Bose. Hệ số tán xạ tỉ lệ với thành phần ảo của phân cực phức:

$$\Gamma_{sc} = \frac{1}{\hbar \epsilon_0 c} \text{Im}(\alpha) I(r) \quad (2.5)$$

Muốn hiểu được mối liên hệ giữa cường độ điện trường và tương tác của các hạt boson trong mạng quang, chúng ta biểu diễn mối liên hệ giữa hai đại lượng điện thế hiệu dụng V_{dip} và hệ số tán xạ Γ_{sc} của ánh sáng laser có cường độ điện trường $I(r)$ và phân cực phức $\alpha(\omega)$. Cường độ điện trường có thể dễ dàng tính toán khi biết cấu hình tia laser, chúng ta chủ yếu tập trung tính toán hàm phân cực của nguyên tử. Hàm phân cực phức có thể mô tả bởi mô hình dao động Lorentz cổ điển (bao gồm các điện tử cổ điển trong điện thế tuần hoàn tần số ω_0). Sử dụng mô hình để biểu diễn $\alpha(\omega)$, mối liên hệ giữa điện thế hiệu dụng và hệ số tán xạ được biểu diễn:

$$V_{dip}(r) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_o^2} \left(\frac{\Gamma}{\Delta} \right) I(r) \quad (2.6)$$

$$\Gamma_{sc}(r) = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_o^2} \left(\frac{\Gamma}{\Delta} \right)^2 I(r) \quad (2.7)$$

Trong đó: $\Delta = \omega - \omega_o$ là độ lệch tần số giữa tần số laser và tần số cộng hưởng nguyên tử. Giá trị $\Gamma_{sc}(r)$ là đặc trưng cho chuyển tiếp điện tử. $I(r)$ là cường độ điện trường nó quyết định độ sâu của hố thế. Nhìn vào biểu thức (2.6), nếu tăng (giảm) cường độ điện trường $I(r)$ thì hố thế sẽ tăng (giảm) tương ứng.

Một vài thông số cơ bản được quan tâm đối với mạng quang học như sau:

+ Tín hiệu lệch tần số: Nếu tần số ánh sáng laser nhỏ hơn tần số cộng hưởng nguyên tử $\Delta < 0$, điện thế lưỡng cực âm, nguyên tử bị hút về phía điện thế cực tiểu tức là vùng có cường độ điện trường cực đại. Ngược lại, khi $\Delta > 0$ các nguyên tử bị hút về vùng có cường độ điện trường cực tiểu.

+ Mức cường độ và độ lệch tần số: Thông thường chúng ta đạt được điện thế lưỡng cực càng lớn càng tốt. Mặt khác, giảm thiểu sự tán xạ photon nhỏ nhất có thể vì nó lan truyền tự do trong hệ thống và là nguyên nhân làm mất nhiệt của hệ thống. Điện thế lưỡng cực tỉ lệ với I/Δ trong khi hệ số tán xạ tỉ lệ với I/Δ^2 . Do vậy cường độ laser cao và độ lệch tần số lớn thường được sử dụng trong thực nghiệm

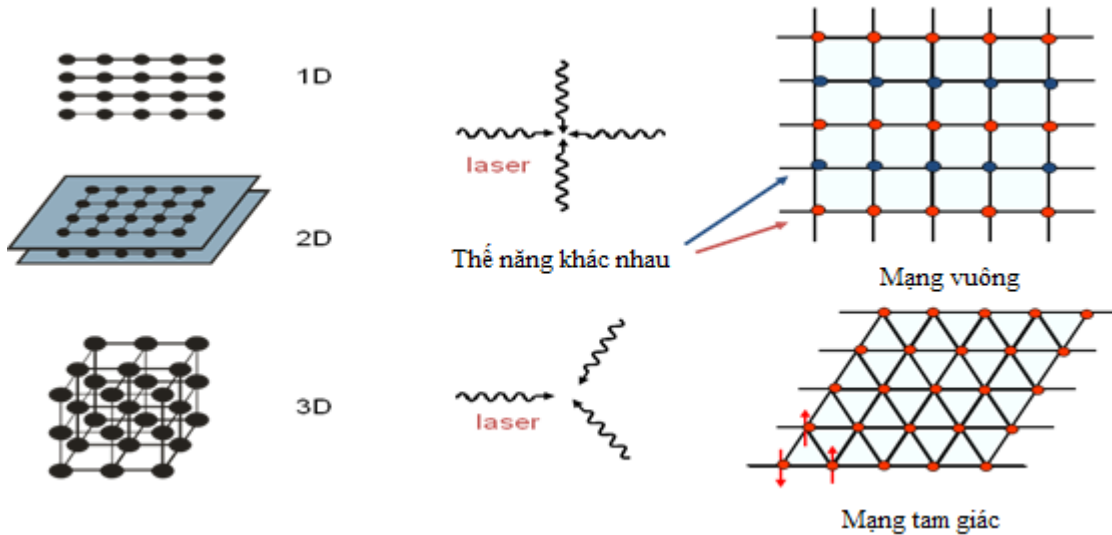
Chu kỳ của mạng có thể thay đổi thông qua thay đổi bước sóng và góc giữa các chùm tia laser.

Khi các nguyên tử được đặt trong một trường điện trường của ánh sáng sẽ tạo ra một dao động moment lưỡng cực điện trong nguyên tử. Điện trường của ánh sáng sẽ tương tác với sự thay lưỡng cực, điều này làm thay đổi các mức năng lượng của nguyên tử và làm cho nó thể bẫy các nguyên tử trung tính chỉ sử dụng chùm tia laser. Trong trường hợp chùm laser xa và góc lệch lớn ánh sáng sự thay đổi của các mức năng lượng có thể được coi như một phụ thuộc của điện trường.

$$\Delta E_i = \sum_{j \neq i} \frac{|\langle j | H | i \rangle|^2}{\varepsilon_i - \varepsilon_j} \quad (2.8)$$

Trong trường hợp này, Hamilton $H = -\mu \cdot E$ ($\mu = -er$) mô tả sự tương tác nguyên tử và ánh sáng và E_i, E_j là năng lượng không nhiễu loạn của trạng i, j tương ứng.

Dạng hình học mạng quang học: Với cấu hình khác nhau của các nguồn ánh sáng laser, dạng hình học khác nhau về điện thế bẫy dễ dàng được tạo ra. Ánh sáng của hai chùm tia laser hướng ngược chiều nhau, tạo thành sóng đứng hình sin một chiều ta thu được mạng một chiều. Bằng cách chiếu nhiều chùm tia laser chúng ta sẽ thu được mạng 1D, 2D hoặc 3D. Trong đó mỗi kích thước, dạng hình học khác nhau của mạng tinh thể có thể đạt được bằng cách can thiệp laser ở góc độ khác nhau.



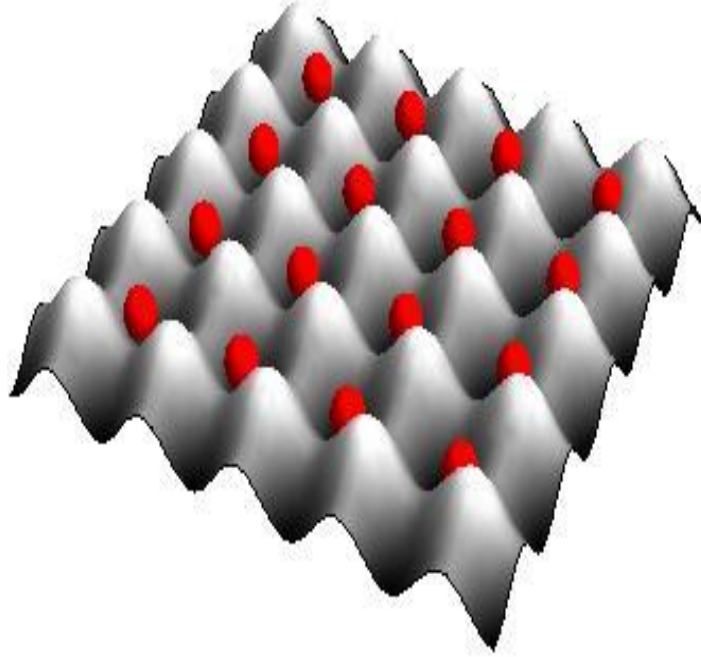
Hình 2.3: Các kiểu mạng quang cơ bản 1, 2, 3 chiều; mạng tam giác hoặc mạng vuông tạo bởi cách giao thoa số lượng và phương giao thoa khác nhau của các chùm tia laser.

Nguyên tử trong mạng quang học: Thông thường bất kì loại nguyên tử nào cũng có thể bị bẫy trong mạng quang học, nhưng các nguyên tử kiềm được sử dụng là chủ yếu do đặc tính của chúng được mô tả đơn giản trong mạng quang. Đặc tính của một chất khí trong mạng là quan trọng cho dù nguyên tử là boson hoặc fermion. Các

hạt fermion không thể tồn tại trong cùng trạng thái lượng tử theo nguyên lý loại trừ Pauli, còn hạt boson thì có thể xảy ra điều này. Đặc biệt khi bẫy các nguyên tử ở nhiệt độ thấp trong mạng quang, điều này dẫn đến tính chất thống kê khác nhau của các nguyên tử. Tuy nhiên, trong các nghiên cứu, chúng tôi sẽ tập trung nghiên cứu các hệ boson do chúng tôi quan tâm đến các đặc trưng pha dị thường và chuyển pha trong hệ boson

2.2.2. Pha điện môi Mott

Mặc dù lý thuyết vùng năng lượng của các chất rắn đã rất thành công trong việc mô tả tính chất điện khác nhau của vật liệu, nhưng năm 1937, Jan Hendrik de Boer và Evert Johannes Willem Verwey [25] chỉ ra rằng một loạt các oxit kim loại chuyển tiếp dự đoán là dẫn điện bằng lý thuyết vùng (vì chúng có một số lẻ của các điện tử trên mỗi ô cơ sở) lại là chất cách điện. Nevill Mott và Rudolf Peierls [26] sau đó (cũng năm 1937) dự đoán rằng sự bất thường này có thể được giải thích bằng cách thông qua các tương tác giữa các điện tử. Trong mạng tinh thể của một chất rắn, các khoảng cách giữa các hạt khác nhau. Khi khoảng cách đủ lớn bán kính Bohr chất rắn sẽ thành một điện môi. Khi khoảng cách giảm xuống sẽ có sự xen phủ orbital và các mức được tạo thành, điện môi tại thành vật dẫn. Thông thường, điện môi Mott (MI) phải có một số lẻ điện tử trên một ô cơ sở. Sau đó trạng thái nguyên tử được suy biến. Về mặt Vật lý, đặc trưng định xứ của điện môi Mott trái ngược với trạng thái không định xứ của pha siêu lỏng. Hình 2.4 mô tả trạng thái điện môi Mott với các nguyên tử định xứ tại các nút mạng tuần hoàn như trong tinh thể.



Hình 2.4:Trạng thái điện môi Mott: các hạt boson nằm trong mạng quang.

Điện môi Mott có thể được hiểu như giới hạn của thế xuyên hầm $J/U=0$

2.2.3.Pha siêu rắn

Muốn tìm hiểu pha siêu rắn, chúng ta cần hiểu sự hình thành các pha và yếu tố vật lý nào điều khiển sự hình thành các pha đó. Ngoài ra, sự biến đổi từ pha này sang pha khác hay còn gọi là sự chuyển pha là sự thay đổi trạng thái từ mức độ đối xứng này sang mức độ đối xứng khác. Không phải sự chuyển pha nào cũng giống nhau, ví dụ chuyển pha từ trạng thái lỏng sang trạng thái rắn là chuyển pha loại hai, trong khi chuyển pha từ trạng thái siêu rắn sang trạng thái rắn lại là chuyển pha bậc loại một.

2.2.3.1. Tham số trật tự trong pha rắn

Trong tinh thể vật rắn, vị trí của các nguyên tử trên các nút mạng được sắp xếp trật tự tuần hoàn trong không gian ba chiều. Để đặc trưng cho vị trí nút mạng trong tinh thể người ta sử dụng giá trị trung bình của hàm mật độ định xứ của các hạt $\rho(r)$ trong không gian Ω

$$\bar{\rho} = \frac{1}{\Omega} \int d^3r \rho(r) \quad (2.10)$$

Đối với các pha không có sự phá vỡ bất biến tịnh tiến liên tục (pha lỏng hoặc pha khí) thì $\rho(r) = \bar{\rho}$ và độ lệch mật độ định xứ $\delta\rho = \rho(r) - \bar{\rho} = 0$. Tính trật tự được biểu diễn thông qua điều kiện tuần hoàn: $\delta\rho(r) = \delta\rho(r+T)$ với vectơ T là vectơ mạng tinh thể.

Khai triển chuỗi Fourier $\delta\rho(r)$ trong không gian ba chiều tập hợp vectơ \vec{k} đặc trưng cho mạng tinh thể :

$$\rho(\vec{k}) = \frac{1}{\Omega} \int d^3r \delta\rho(r) e^{-ikr} \quad (2.11)$$

Thực tế là khi giá trị bình phương của $\rho(\vec{k})$ sẽ cho ta hệ số cấu trúc tinh $S(\vec{k})$. Hệ số này mô tả các đỉnh của cường độ tán xạ của ánh sáng trong tinh thể. Nó có liên quan với G là vectơ mạng đảo theo công thức $G = nk$ (n là số nguyên). Ở đây hệ số cấu trúc tinh là một tham số trật tự để mô tả trật tự rắn của tinh thể. Nói cách khác, hệ số cấu trúc tinh đặc trưng cho trật tự đường chéo DLRO, hay phá vỡ đối xứng dịch chuyển. Cần chú ý rằng, một hệ quả ngược lại của mối quan hệ này không phải lúc nào cũng đúng.

2.2.3.2. Tham số trật tự trong pha siêu chảy

Mô hình hiện tượng siêu chảy trên He^4 được xây dựng dựa trên mật độ định xứ của một hạt:

$$\rho(r) = \rho_s(r) + \rho_N(r) \quad (2.12)$$

Trong đó $\rho_s(r) = \rho_s$ và $\rho_N(r) = \rho_N$ tương ứng là mật độ định xứ trung bình đặc trưng cho pha siêu chảy và pha lỏng thông thường. Nhìn vào công thức thấy rằng khi He^4 đi vào trạng thái siêu chảy thì chỉ có một phần tham gia vào trạng thái này. Thành phần đặc trưng cho pha siêu chảy có tính chất chảy liên tục không ma sát, trong khi đó thành phần lỏng thông thường có sự tiêu hao và mất mát năng lượng. Quá trình hình thành pha siêu chảy xảy ra ở nhiệt độ chuyển pha T_c , khi đó thành phần $\rho_s \approx 0$ và tăng dần khi tiếp tục hạ nhiệt độ xuống dưới nhiệt độ chuyển pha $T \rightarrow 0$. Về nguyên tắc $\rho_s = \bar{\rho}$ và $\rho_s \approx 0$ tiến gần tới 1 khi $T \rightarrow 0$. Trong các hệ ba chiều, hiện tượng siêu chảy đi kèm với hiện tượng ngưng tụ BEC ở nhiệt độ thấp

Chúng ta biết rằng, khi hệ boson bị ngưng tụ tại một mức năng lượng thì phân bố của moment động lượng sẽ có đỉnh nhọn, ý nghĩa của điều này là tất các cả nguyên tử tập trung lại tại một trạng thái năng lượng.

Người ta sử dụng hàm phân bố momen động lượng lượng tử để mô tả quá trình này

$$\bar{n}(k) = \langle \hat{\psi}^+(k) \hat{\psi}(k) \rangle / N \quad (2.13)$$

Trong đó $\hat{\psi}^+(k)$ và $\hat{\psi}(k)$ là toán tử sinh hủy Bose của hạt có động lượng $\hbar k$ ký hiệu trong $\langle \dots \rangle$ Biểu diễn giá trị kỳ vọng của giá trị vật lý có tính đến các giới hạn nhiệt động. Trong sự ngưng tụ Bose Einstein thì $\bar{n}(k)$ sẽ có dạng

$$\bar{n}(k) = n_o \delta(k) + n_{NC}(k) \quad (2.14)$$

Số hạng đầu tiên biểu diễn thành phần tham vào trạng thái ngưng tụ, n_o là độ ngưng tụ. Trong đó khi thành phần thứ hai biểu diễn những đóng góp vào động lượng của những phần có momen khác 0, hay các thành phần thông thường.

Một trong những đại lượng cơ bản để biết được thành phần siêu chảy có xuất hiện trong hệ hay không. Đó là sử dụng khái niệm hàm ma trận mật độ đơn hạt như sau:

$$n(r, r') = \langle \hat{\psi}^+(r) \hat{\psi}(r') \rangle \quad (2.15)$$

Trong đó $\hat{\psi}^+(r)$ và $\hat{\psi}(r')$ là toán tử sinh hủy Bose của hạt tại các vị trí r và r' và nó là biến đổi Fourier của các toán tử sinh hủy Bose của hạt có trạng thái $\hbar k$. Còn hàm ma trận mật độ hạt là biến đổi Fourier của hàm phân bố động lượng. Thực tế là trong các hệ có bất biến tịnh tiến liên tục (chất lỏng hoặc chất khí) thì $n(r, r') = n(r - r')$. Khi bất biến tịnh tiến liên tục bị phá vỡ, hàm mật độ trung bình theo không gian được tính theo công thức:

$$n(r) = \frac{1}{\Omega} \int d^3 r' n(r', r + r') \quad (2.16)$$

Phương trình trên có tính chất $n(r) \rightarrow 0$ khi $r \rightarrow \infty$. Từ đây, một hệ quả quan trọng được rút ra là: ở giới hạn nhiệt động lực học, khi chúng ta hủy đi một hạt ở vị trí r thì ảnh hưởng của nó với một hạt đồng nhất khác ở vị trí bất kỳ trong hệ là khác 0. Hiệu ứng này chỉ xuất hiện trong cơ học lượng tử mà không có trong cơ học cổ điển.

Điều này cho thấy, việc phát hiện ra hiện tượng siêu chảy khẳng định vai trò của hiệu ứng lượng tử ở nhiệt độ thấp. Ngoài ra hệ này cũng là đặc trưng của trật tự ngoài đường chéo ODLRO xuất hiện trong các trạng thái ngưng tụ BEC

2.2.3.3. Tham số trật tự trong pha siêu rắn

Như ở trên đã trình bày về trật tự pha rắn và trật tự siêu chảy thì hai pha này có đặc trưng hoàn toàn khác nhau. Trật tự rắn được hỗ trợ và hình thành khi thế năng tương tác trở lên rất mạnh so với động năng của hạt. Ngược lại, trật tự siêu chảy được hình thành nhờ sự linh động và khả năng di chuyển không ma sát, nói cách khác trạng thái này được hình thành khi động năng lấn át thế năng. Chính vì vậy, hai trật tự này phủ định nhau. Tuy nhiên một câu hỏi được đặt ra là khi nào cả hai trật tự này hỗ trợ nhau và cùng tồn tại. Ý tưởng về một pha chứa đồng thời cả hai trật tự trái ngược nhau dẫn đến khái niệm về pha siêu rắn, ở đó có sự tồn tại đồng thời trật tự đường chéo DLRO và trật tự ngoài đường chéo ODLRO [5, 14]. Nói cách khác, trật tự rắn và trật tự lỏng cùng tồn tại trong cùng một pha đồng nhất, để phân biệt với trạng thái tách pha riêng biệt trong cùng một hệ. Trong trạng thái tách pha của một hệ sẽ tồn tại hai bộ phận, một phần ở pha siêu lỏng, một phần ở pha siêu rắn và hệ sẽ không phải đồng nhất về pha. Ở khía cạnh nào đó nó giống như trạng thái đá lạnh trong nước. Pha siêu rắn có cả hai đặc trưng về trật tự và là một pha đồng nhất chứ không phải sự tách pha. Hiện tại, nhiều kết quả nghiên cứu chỉ ra sự tồn tại của pha siêu rắn nhưng cũng nhiều nhóm phủ định điều này. Nguyên nhân chủ yếu là do các hạt He^4 có tạp và không kiểm soát được tham số. Các nhóm nghiên cứu muốn tìm một mô hình có thể gây ít tranh cãi hơn. Mạng quang được xem là giải pháp hiệu quả bởi mạng quang rất tinh khiết và các tham số như tương tác và hình dạng đều có thể điều khiển được.

CHƯƠNG 3: MÔ HÌNH BOSE-HUBBARD

3.1. Mô hình bose-hubbard

Mô hình Bose Hubbard [9] là mô hình đơn giản nhất có thể mô tả được pha siêu lỏng và pha điện môi, vốn là đặc trưng của các hệ tương quan mạnh khi yếu tố động năng và thế năng có vai trò tương đương nhau. Hamilton của mô hình Bose Hubbard được biểu diễn dưới dạng sau:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\mathcal{D}_i^+ \mathcal{D}_j + h.c.) + \frac{1}{2} U \sum_i \mathcal{N}_i (\mathcal{N}_i - 1) - \mu \sum_i \mathcal{N}_i \quad (3.1)$$

Trong đó:

\mathcal{D}_i và \mathcal{D}_i^+ là toán tử sinh hủy boson ở vị trí nút mạng thứ i .

\mathcal{D}_j toán tử boson ở vị trí nút thứ j trong mạng và tuân theo quy tắc:

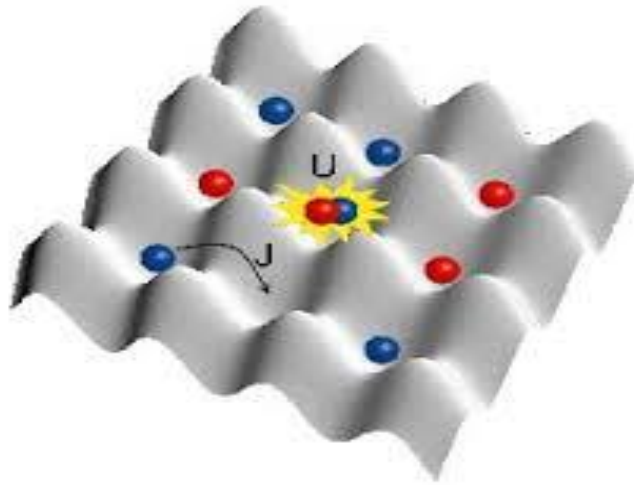
$$[\mathcal{D}_i, \mathcal{D}_j^+] = \delta_{ij}$$

Toán tử $\mathcal{N}_i = \mathcal{D}_i \mathcal{D}_i^+$ là tổng số phân tử trong cùng nút mạng thứ i .

J là yếu tố ma trận bước nhảy.

U là thế năng tương tác giữa các phân tử trên cùng một vị trí trong mạng.

μ là thế điện hóa (liên quan đến tổng số phân tử trong mạng).

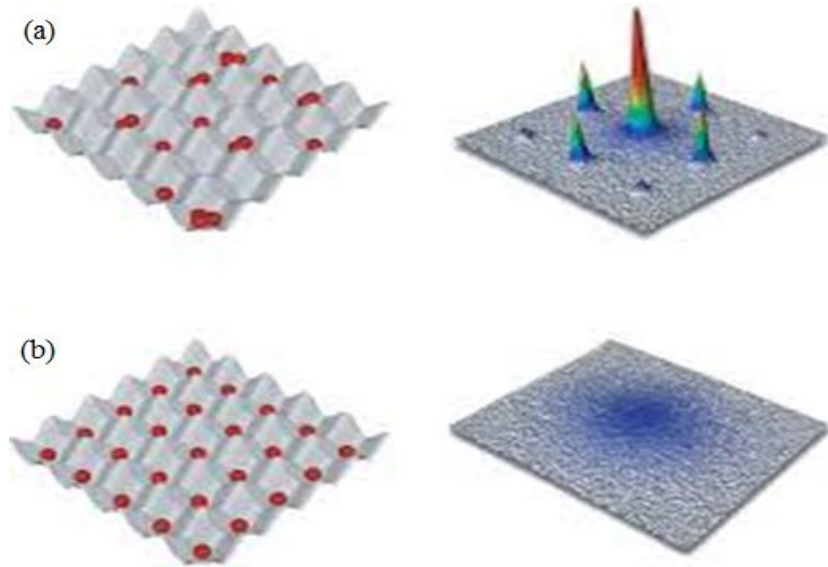


Hình 3.1 :Hình vẽ mô tả hai số hạng động năng (đặc trưng bởi giá trị J) và thế năng (đặc trưng bởi giá trị U) trong mô hình bose-hubbard.

Ở trong công thức(3.1) trên số hạng thứ nhất là động năng còn số hạng thứ hai là thế năng trong mô hình Bose Hubbard mỗi liên hệ của chúng trong mạng quang học được trình bày trong phân tích vật lý của mô hình Bose Hubbard.

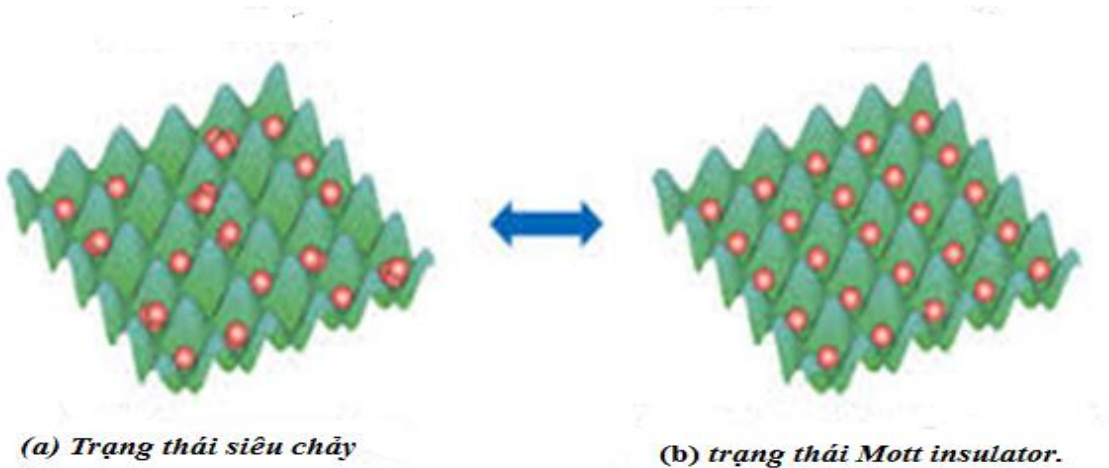
3.2.Đặc trưng Vật lý của mô hình Bose Hubbard

Mô hình Bose Hubbard được dùng để mô tả trạng thái siêu lỏng và pha điện môi Mott. Mặc dù đơn giản nhưng mô hình Bose Hubbard lại không dễ dàng giải được bằng các phương pháp giải tích phổ biến như lý thuyết nhiễu loạn hoặc trường trung bình. Lý do đơn giản là vì trong mô hình Bose Hubbard, tương tác của các boson có bậc của động năng và như vậy thăng giáng lượng tử mạnh không cho phép chúng ta sử dụng trường trung bình hay lý thuyết nhiễu loạn mà phải sử dụng các công cụ đặc trưng cho hệ tương quan mạnh như các phương pháp mô phỏng chính xác, phương pháp chéo hóa ma trận.



Hình 3.2 : *Trạng thái siêu chảy (a) và Điện môi Mott (MI) (b) trong mô hình Bose Hubbard hai chiều[27]*

Về mặt Vật lý, khi tương tác giữa các phân tử yếu so với động năng $U \leq J$ hệ sẽ ở trong trạng thái siêu chảy còn khi tương tác thế năng mạnh hơn nhiều so với động năng $U \geq J$ hệ sẽ chuyển sang trạng thái Điện môi Mott (MI). Quá trình này đã được kiểm chứng bằng thực nghiệm trong mạng quang bởi Greiner et al. như trong hình 3.2



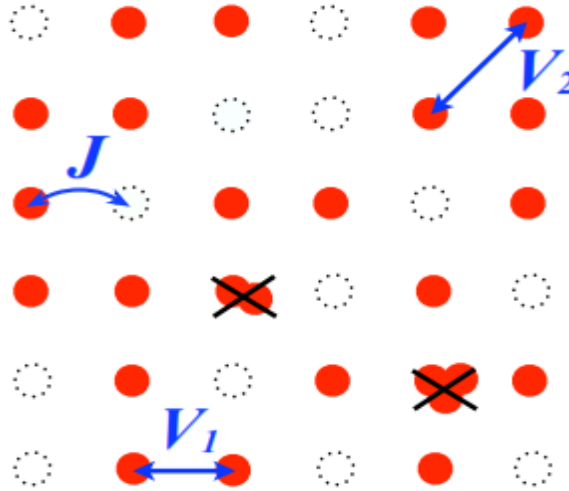
Hình 3.3 : *Trạng thái siêu chảy (a): nguyên tử tự do di chuyển trong mạng quang và trạng thái Điện môi Mott (MI) :nguyên tử định xứ trong mạng (b)*

Như chúng tôi đặt vấn đề ở phần mở đầu, chúng tôi muốn tìm kiếm các pha dị thường, ví dụ như pha siêu rắn và khả năng kiểm chứng thực nghiệm trên mạng quang học. Để thực hiện các nghiên cứu này, chúng tôi sẽ nghiên cứu các mô hình phức tạp hơn Hamilton (3.1), ví dụ như chúng tôi sẽ quan tâm đến các lân cận tầm xa hơn. Trong trường hợp đơn giản, xét trường hợp thế năng tương tác trên cùng một vị trí nút mạng $U = \infty$, tại một vị trí nút chỉ tồn tại không nhiều hơn một phân tử, điều kiện này thường được gọi là điều kiện lấp đầy gần một nửa, mật độ phân tử ρ thỏa mãn $0 \leq \rho \leq 1$. Khi đó ta xét đến thế năng tương tác giữa các phân tử lân cận gần nhất trong mạng, ta có mô hình Boson lõi rắn. Việc xét các lân cận xa hơn là cần thiết để thu được các mô tả chính xác hơn của các pha dị thường. Ví dụ: nếu không có lân cận thứ hai trong mạng vuông, sẽ không thể mô tả được pha siêu rắn.

Trong trường hợp lực tương tác giữa các hạt lân cận đủ mạnh và không có trường ngoài trạng thái cơ bản của hệ là một tinh thể, với mật độ hạt bằng $1/2$: “ô bàn cờ” với trật tự rắn. Không có pha tinh thể khác tại tỷ lệ lấp đầy khác trong mô hình này. Có những pha tinh thể khác tại mật độ khác như $\rho = 1/2$, chỉ ổn định khi có tương tác yếu, hay tương tác tầm xa, ví dụ như tương tác với hạt kế tiếp lân cận gần nhất. Khả năng khác để tạo ra pha tinh thể tại mật độ khác mật độ trên là tạo ra các hố thế ở những nút mạng nhất định. Ví dụ, ta có thể tạo ra các siêu mạng tuần hoàn bằng phương pháp chồng chập trường ngoài tại các vị trí có độ lấp đầy $\rho = 1/3$ hoặc $2/3$. Lựa chọn này chủ yếu là để hỗ trợ các hạt định xứ tại các hố thế và gián tiếp giúp việc hình thành pha siêu rắn. Về mặt mô hình, trường ngoài có thể được mô tả trong số hạng cuối cùng của Hamilton (3.1), chúng tôi sẽ trình bày chi tiết hơn trong Chương 4. Về mặt Vật lý, Hamilton (3.1) của mô hình Bose-Hubbard đã rất thành công khi mô tả pha siêu chảy và pha rắn điện môi Mott. Tuy nhiên, Hamilton (3.1) chưa đủ để mô tả pha siêu rắn. Một trong những nỗ lực để mô tả pha siêu rắn trong giới hạn boson lõi rắn của Batrouni (2000) [15, 16] đã đưa thêm tương tác lân cận gần nhất giữa hai boson. Tuy nhiên, nỗ lực này đã thất bại trong việc mô phỏng lại pha siêu rắn. Chính vì vậy, người ta phải đưa thêm các tương tác ở lân cận tầm xa hơn, cụ thể là tương tác lân cận xa thứ hai. Cần chú ý rằng, việc đưa thêm tương tác vào bài toán sẽ làm bài toán phức tạp hơn về mặt Toán học nhưng là cần thiết. Một ý tưởng khác để tìm kiếm pha siêu rắn là ta có thể đưa thêm trường ngoài mà không cần đến các tương tác tầm xa hơn như chúng tôi đề cập ở trên Từ phương trình (3.1), Hamilton của mô hình Bose Hubbard sẽ được biểu diễn như sau :

$$H = -j \sum_{ij} (b_i^\dagger b_j + h.c) + V_1 \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + V_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} n_i n_j - \sum_i \mu_i n_i \quad (3.2)$$

V_1 là thế năng tương tác giữa các phân tử lân cận gần nhất, V_2 là thế năng tương tác giữa các phân tử lân cận gần nhất thứ hai. Điều thú vị là, chỉ với tương tác V_1 không thể tìm được trạng thái siêu rắn trong mạng vuông trong khi tương tác V_2 giúp ổn định trạng thái siêu rắn ở các mật độ xung quanh $\rho = 1/4$



Hình 3.4 : Mạng vuông và các tương tác sử dụng trong mô hình Bose Hubbard của Boson lõi rắn : J là năng lượng nhảy, V_1 và V_2 là các thế năng tương tác lân cận gần nhất, và gần nhất tiếp theo. Các chấm tròn đặc biểu diễn các hạt boson lõi rắn, các chấm tròn rỗng biểu diễn các lỗ trống chưa bị chiếm đầy bởi boson. Với boson lõi rắn, trên một vị trí nút mạng không có quá 1 boson.

Từ mô hình chúng ta có thể khảo sát giản đồ pha trong mạng hai chiều, mạng ba chiều, mạng hình học phụ thuộc vào các thông số V_1, V_2 và tác động của trường ngoài. Đáng lưu ý là tất cả các tương tác trong mô hình Bose Hubbard đều có thể được biểu diễn và điều khiển trong mạng quang học. Chính vì điều này, mô hình Bose Hubbard không còn là một mô hình đồ chơi như mô hình Hubbard thông thường mà nó là một mô hình hoàn hảo cho các mạng quang trong thực nghiệm. Phần tiếp theo, chúng tôi sẽ trình bày về kỹ thuật sử dụng để tính toán và mô phỏng mô hình Bose Hubbard.

CHƯƠNG 4 : PHƯƠNG PHÁP MONTE CARLO LƯỢNG TỬ

Phương pháp mô phỏng Monte Carlo MC là một công cụ số thường được sử dụng để khảo sát các hệ có kích thước lớn, đặc biệt là các hệ lượng tử tương quan mạnh (ví dụ: thế năng tương tác có cùng bậc với động năng) khi lý thuyết nhiễu loạn không thể mô tả được.

Giả sử chúng ta muốn tính toán tỷ số giữa hai tổng hoặc tích phân N chiều cho bởi công thức sau :

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_n} A(i_1, i_2, \dots, i_N) W(i_1, i_2, \dots, i_N) \quad (4.1)$$

$$Z = \sum_{i_1} \sum_{i_2} \dots \sum_{i_n} W(i_1, i_2, \dots, i_N)$$

Trong đó A , W trong đó là hàm tùy ý, v là véc tơ chỉ số đặc trưng cho cấu hình của hệ $v = \{i_1, i_2, \dots, i_n\}$. Tại mọi thời điểm W luôn xác định dương và liên tục. Một cách tự nhiên $p(v) = W(i_1; i_2; \dots; i_N) / Z$ có thể được xem như tỷ trọng cấu hình bởi. Thông thường, $\langle A \rangle$ là trung bình của tất cả các giá trị $A(v)$ đối với tất cả cấu hình dương và tương ứng với $p(v)$. Rút gọn lại ta có:

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_v A(v) W(v)}{\sum_v W(v)} \quad (4.2)$$

Nhìn vào biểu thức trên, chúng ta thấy đại lượng $\langle A \rangle$ tương tự giá trị trung bình của tất cả các trạng thái cân bằng của hệ như trong các tính toán thống kê. Nếu trạng thái của hệ được liệt kê bằng các chỉ số v , và E_v thì trạng thái v xảy ra trong trạng thái cân bằng có thể tính bằng thống kê Gibbs thông thường.

$$p(v) = e^{-E_v} / Z ; W(v) = e^{-E_v} \quad (4.3)$$

Đặt $W(v)=1$, $Z = \sum_v W(v) = \sum_v$ tính toán sẽ được rút gọn và dễ dàng phân tích. Có hai vấn đề đặt ra tại sao lại tìm thấy $\langle A \rangle$ với độ chính xác cao.

Hàm W , A là những hàm điển hình lấy giá trị gần như nhau với các cấu hình v , gọi chúng là những nhóm phụ set $A\{v\}$. Bây giờ chúng ta chia tất cả cấu hình vào

nhóm phụ, sau đó chúng ta cần tính ước lượng giá trị trung bình như là một giá trị tiêu biểu cho cấu hình từ các nhóm phụ khác. Toàn bộ hệ sẽ được miêu tả. Tất cả các cấu hình trong hệ ta có $\theta = 1$, tất cả các cấu hình khác ta có $\theta = 0$. Thuật toán MC đơn giản nhất như sau:

1. Khởi tạo biến đếm $i=0$, $Ketqua=0$
2. Sử dụng số ngẫu nhiên tìm một điểm trong bên trong V_0 với đồng tỷ trọng có thể. $x_1 = a \cdot \text{randm}(), x_2 = a \cdot \text{randm}()$,
3. Cập nhật biến đếm $i=i + 1$, $Ketqua= Ketqua+ \theta(v)$, và quay lại điểm thứ hai. Theo thời gian tính toán sẽ được tiến hành $V_0 = (Ketqua/ i)$

Điều quan trọng ở đây là lựa chọn tính toán dựa trên những yếu tố quan trọng nhất, các điều kiện cần thiết nhất. Chú ý đây không phải tối ưu hóa vấn đề bởi vì cần thêm rất nhiều điều kiện để có một kết quả đúng, và đóng góp chủ yếu không đến từ giá trị lớn nhất của W , nhưng với số lần tính toán lớn nhất của W cấu hình sẽ vào khoảng rất gần W . Mặt khác chúng ta hiểu rằng có thể bỏ qua một số cấu hình với rất ít điều kiện. Tuy nhiên đó là với các hệ nhỏ. Đối với các bài toán hệ lớn hơn phương pháp được đưa ra là thuật toán **Metropolis**.

Thuật toán Metropolis được sử dụng khá phổ biến trong cơ học thống kê để tính giá trị trung bình của các đại lượng tuân theo một phân bố thống kê nào đó. Thuật toán dựa trên điều kiện quan trọng nhất áp dụng vô hạn các bước tính toán để hội tụ đến giá trị chính xác nhất cần tìm. Phương pháp phù hợp cho thời đại phát triển của máy tính. MetA đề nghị thay thế tổng ban đầu của toàn bộ cấu hình bằng tổng ngẫu nhiên theo (4.2)

$$\langle A \rangle = \frac{\sum_v A(v)W(v)}{\sum_v W(v)}$$

Ở đây cấu hình sinh ra bởi một số ngẫu nhiên, và được đưa vào tổng cấu hình với một xác suất chắc chắn. Có hai luật phải được thỏa mãn như sau:

Bắt đầu từ bất kỳ cấu hình mở đầu nào trong quá trình tính tổng ngẫu nhiên, quá trình tạo ra cấu hình mới được đưa vào trong tổng phải cho phép tất cả các cấu hình khác được tạo ra trong rất nhiều lần thử. Quá trình này phải đảm bảo sự hội tụ bằng

cách thỏa mãn phương trình cân bằng chi tiết. Điều này vô cùng quan trọng bởi từ đó ta có thể không bỏ lỡ bất cứ giới hạn nào ta có thể thấy với hệ.

Xác suất phải có một cấu hình v trong tổng ngẫu nhiên tương ứng với W_v . Trong giới hạn vô hạn của việc tính toán tổng ngẫu nhiên và tổng toàn phần sẽ chấp nhận lẫn nhau. Vậy làm thế nào để sắp xếp một quá trình ngẫu nhiên sao cho xác suất của cấu hình baogồm trong tổng có thể tương ứng với giá trị của nó. Trong giới hạn vô hạn của thời gian ta có thể viết.

$$\frac{\sum_v A_v}{\sum_v} = \frac{\sum_v A_v M_v}{\sum_v M_v} = \frac{c \sum_v A_v W(v)}{c \sum_v W(v)} \quad (4.4)$$

Tất cả các cấu hình sẽ được đếm, và M_v cho ta biết chúng được đếm bao nhiêu lần . Số lần chuyển đổi thứ hai cho số lần mỗi cấu hình xuất hiện trong tổng là dương bởi vì M_v tương ứng với trọng số cấu hình $M_v = c W(v)$. Quá trình chấp nhận một cấu hình mới được mô tả như sau:

1. Khởi tạo biến đếm : $Z=0$; Ketqua=0
chọn một cấu hình bất kỳ v vào trong tổng
2. Đưa cấu hình vào trong $Z = Z + 1$; Ketqua=Ketqua+A(v)
3. Đưa ra v' từ v bởi thay đổi một chỉ số i_k , chỉ số i_k này có thể chọn ngẫu nhiên. Thay đổi $k = [\text{rndm} * N] + 1$ và i_k có thể lấy bất kể giá trị nào với dãy a_1, a_2, a_k sao đó lấy ngẫu nhiên giá trị mới cho i_k trong dãy mới $s = [\text{rndm} * K] + 1$. Cấu hình sẽ chuyển từ $v - v' \{i_1, \dots, i_k, \dots\} - \{i_1, \dots, i'_k, \dots\}$. ở đây $i'_k = a_s$. Thủ tục biến $v - v'$ gọi là chấp nhận cấu hình. Việc chọn điểm cho phương pháp hết sự linh hoạt, ta có thể chọn bất cứ điểm nào và cách chấp nhận cấu hình cũng có rất nhiều cách. Việc chọn phương pháp chấp nhận cấu hình phù hợp sẽ khiến việc tính toán chở nên đơn giản hơn.
4. Chúng ta phải đưa ra đóng góp của cấu hình như thế nào với tổng với xác suất tương ứng của nó. Ban đầu chúng ta chắc chắn rằng cấu hình v đã được chấp nhận, xác suất chấp nhận v' có thể xác định thông qua so sánh $W(v')$ và $W(v)$

(v'). Cụ thể ta chấp nhận v' trên $W(v)/W(v')$. $Mv = cW(v)$ phải được thiết lập:

$$M_v = M_v \frac{W(v')}{W(v)} = W(v') \frac{M_v}{W(v)} \quad (4.5)$$

$$M_{v''} = M_{v'} \frac{W(v'')}{W(v')} = W(v'') \frac{M_{v'}}{W(v')} = W(v'') \frac{M_v}{W(v)} \quad (4.6)$$

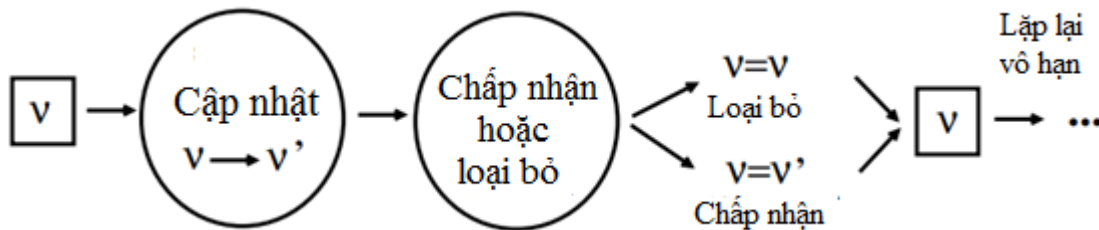
$$M_{v'''} = M_{v''} \frac{W(v''')}{W(v'')} = W(v''') \frac{M_{v''}}{W(v'')} = W(v''') \frac{M_v}{W(v)} \quad (4.7)$$

$$R = W(v)/W(v') \quad (4.8)$$

Nếu $R > 1$ khi đó bước nhảy được chấp nhận và khi đó ta đặt $X_{n+1} = X_t$.

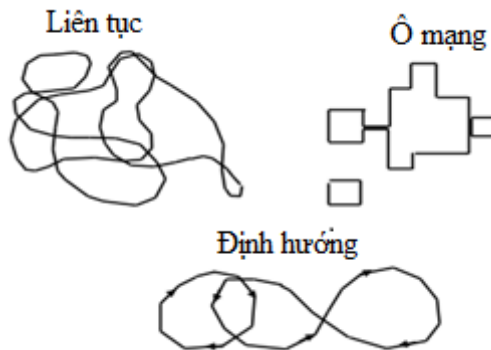
Nếu $R < 1$ bước nhảy được chấp nhận với xác suất r . Quá trình nhảy này được thực hiện bằng cách so sánh R với số ngẫu nhiên η phân bố đồng nhất trong khoảng $[0, 1]$ và được chấp nhận nếu $r > \eta$.

Phụ thuộc vào việc chấp nhận hay loại bỏ v' , thay đổi cấu hình theo cách sau. Nếu v' bị loại không làm gì cả $v=v$, nếu v' được chấp nhận thay đổi $v=v'$. Quá trình với hai điểm trên được lặp lại thành chu kỳ.



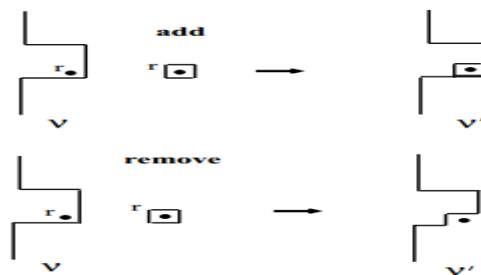
4.1 .Thuật toán Sâu (Worm) - WA

WA lần đầu tiên được giới thiệu cho mô hình thống kê lượng tử Prokof'ev, Svistunov và Tupitsyn (1998) [33]. Sau đó, thuật toán Sâu được tổng quát thành mô hình cổ điển bởi Prokof'ev và Svistunov (2001) [29]. Ý tưởng của WA vô cùng đơn giản, chúng ta tưởng tượng rằng tất cả không gian cấu hình đều được đại diện bởi tập hợp các đường khép kín.



Năng lượng của hệ là hàm của quãng đường E_{path} các phần của hàm sẽ đạt được bằng cách lấy tổng tất cả các tích phân đường đóng, hay còn gọi là cấu hình đóng (Closed Path – CP), $Z = \sum_{CPE} e^{-E_{path}}$

Một cách trực tiếp nhất để thay đổi cấu hình CP là thêm/ bớt một vòng nguyên tố. Chỉ có một mảnh nhỏ cấu hình CP được chỉ ra ở đây

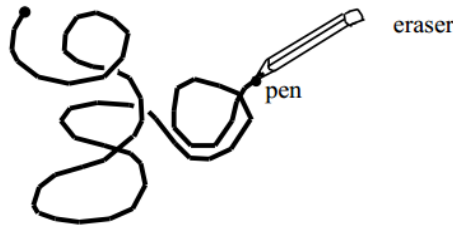


Bằng cách lặp đi lặp lại nhiều lần có thể tạo ra những đường liên tục thay đổi hình dạng và số lượng các vòng.

WormAlgorithm(WA) sử dụng một chiến lược cho chấp nhận cấu hình nhất cấu hình CP.

Nó bao gồm hai bước chính:

1. Không gian cấu hình được mở rộng bao gồm một vòng không kín, như là ai đó vẽ một vòng tròn mới nhưng không kết thúc nó ngay. Nó chỉ ra cấu hình CP_g . Theo số lần tăng lên hai điểm không kín gặp nhau tại một điểm nào đó và chúng ta có lại cấu hình CP. Trong mọi cấu hình với một vòng không kín là một bước trung gian của thuật toán, từ đó ta tính được hàm tương quan $g(i) = \langle \sigma_i \sigma_j \rangle$.
2. Tất cả các chấp nhận cấu hình CP_g đều phải được tạo ra duy nhất từ điểm cuối cùng của vòng không kín. WA là phép vẽ và xóa các vòng trên giấy



4.2. Hệ hai mức năng lượng

Để trình bày phương pháp Monte Carlo lượng tử cho hệ nút mạng, chúng ta bắt đầu từ một hệ Vật lý lượng tử đơn giản là hệ hai mức năng lượng. Như tên gọi của nó, hệ chỉ có hai mức năng lượng đặc trưng bởi hai trạng thái $|1\rangle$ và $|2\rangle$. Ví dụ, trong trường hợp spin $S=1/2$ thì hai trạng thái đó tương ứng với hai trạng thái spin-up và spin-down. Mặc dù hệ hai mức năng lượng vô cùng đơn giản nhưng chúng ta có thể hiểu được các tính nhiệt động học của hệ. Quan trọng hơn, chúng ta có được cái nhìn trực quan về phương pháp Monte Carlo lượng tử. Với hai trạng thái $|1\rangle$ và $|2\rangle$, ta có thể viết Hamilton của hệ như sau:

$$H = \mu \hat{\tau}_z - j \hat{\tau}_x \quad (4.9)$$

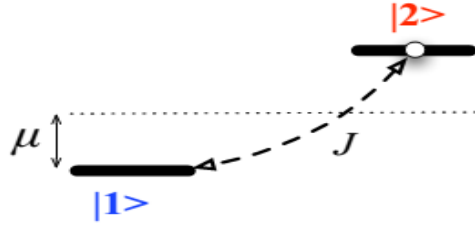
Trong đó, τ là ma trận Pauli có dạng :

$$\hat{\tau}_x = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_y = \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{\tau}_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \quad (4.10)$$

J là số thực. Ở dạng ma trận, Hamilton có thể viết lại như sau :

$$H = \begin{pmatrix} \mu & J \\ J^* & -\mu \end{pmatrix} \quad (4.11)$$

Thông thường, người ta gọi J là biên độ nhảy của spin giữa hai trạng thái đặc trưng cho động năng của hệ, còn μ là sự dịch của hai mức năng lượng (như hình 4.1) đặc trưng cho thế năng của hệ. Như vậy, khoảng cách giữa hai mức năng lượng của hệ là 2μ



Hình 4.1 : Sơ đồ năng lượng trong mô hình hệ hai mức năng lượng

Với ý nghĩa như vậy, ta có phương trình trị riêng :

$$\begin{pmatrix} \mu & -j \\ -j & -\mu \end{pmatrix} \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} = E \begin{pmatrix} |1\rangle \\ |2\rangle \end{pmatrix} \quad (4.12)$$

Với $|1\rangle$ và $|2\rangle$ là các vectơ riêng đặc trưng cho hai trạng thái của hệ hai mức năng lượng.

Để tìm được các trị riêng, tương ứng với các mức năng lượng, chúng ta tính định thức của ma trận Hamilton (1) như sau:

$$\det(H - E) = 0 \quad (4.13)$$

$$E^2 = j^2 + \mu^2 \quad (4.14)$$

Tương đương với:

Giá trị năng lượng của hệ tương ứng với hai mức năng lượng là trị riêng của phương trình định thức (4.13). Giải phương trình bậc 2 đơn giản, ta thu được:

$$E_{1,2} = \pm \sqrt{j^2 + \mu^2} \quad (4.15)$$

Từ đây, chúng ta có thể tìm được mức năng lượng trạng thái cơ bản $|g\rangle$ và trạng thái kích thích $|e\rangle$ tương ứng như sau:

$$\begin{aligned} |g\rangle &= \sin\theta|1\rangle + \cos\theta|2\rangle \\ |e\rangle &= \cos\theta|1\rangle - \sin\theta|2\rangle \end{aligned} \quad (4.16)$$

$$\cos\theta = \sqrt{\frac{E+\mu}{2E}} \quad (4.17)$$

Các thông số của hệ sẽ được tính theo phương trình Schrodinger.

Nếu tại thời điểm $t=0$ hệ thống đã được đưa vào trạng thái Ψ sau đó sau thời điểm t , xác suất hoặc biên độ dịch để tìm thấy nó vẫn ở trạng thái đó là

$$A_{\Psi\Psi}(t) = \langle \Psi | \Psi(t) \rangle = \langle \Psi | e^{-iHt} | \Psi \rangle \quad (4.18)$$

Trong phương trình riêng cơ bản ta có thể viết lại

$$\Psi = \sum_{\alpha=g,e} |\alpha\rangle \langle \alpha | \Psi \rangle \quad (4.19)$$

$$A_{\Psi\Psi}(t) = \sum_{\alpha=g,e} e^{-iE_\alpha t} \langle \Psi | \alpha \rangle \langle \alpha | \Psi \rangle = \sum_{\alpha=g,e} e^{-iE_\alpha t} |\langle \alpha | \Psi \rangle|^2 \quad (4.20)$$

Điều này đúng với bất cứ hệ lượng tử nào. Ví dụ ta quan tâm đến xác suất để quay lại trạng thái $|1\rangle$ sau thời gian t :

$$A_{11}(t) = \sin^2\theta e^{iEt} + \cos^2\theta e^{-iEt} \quad (4.21)$$

$$A_{11}(t) = \cos(Et) + i \frac{\xi}{E} \sin(Et) \quad (4.22)$$

$$A_{22}(t) = \cos(Et) - i \frac{\xi}{E} \sin(Et) \quad (4.23)$$

Hàm tổng thống kê Z của hệ được tính như sau:

$$Z = \sum_{\alpha=g,e=1,2} e^{-E_\alpha/k_B T} \quad (4.24)$$

Với E là năng lượng của hệ, k_B hằng số Boltzmann (để đơn giản ta chọn $k_B=1$), T nhiệt độ của hệ.

Z có thể coi như là tổng tất cả xác suất quay lại trạng thái ban đầu $A_{\psi\psi}(\tau)$ trong đó $\{\psi\}$ là cấu hình cơ sở và $\tau = -i/T$ là thời gian ảo.

$$Z = \sum_a \left[\sum_{\psi} |\langle a|\psi\rangle|^2 \right] e^{-iE_a(-i/T)} = \sum_{\psi} \left[\sum_a e^{-iE_a(-i/T)} |\langle a|\psi\rangle|^2 \right] \quad (4.25)$$

$$\equiv \sum_{\psi} A_{\psi\psi}(\tau = -i/T)$$

Phương trình trên cũng là phương trình chung cho nhiều hệ, khi tính được xác suất của hai cấu hình cơ sở $|1,2\rangle$ ta dùng chúng để tính tổng thống kê của hệ hai hạt

$$Z_{TLS} = 2 \cos(-iE/T) = 2 \cosh(E/T)$$

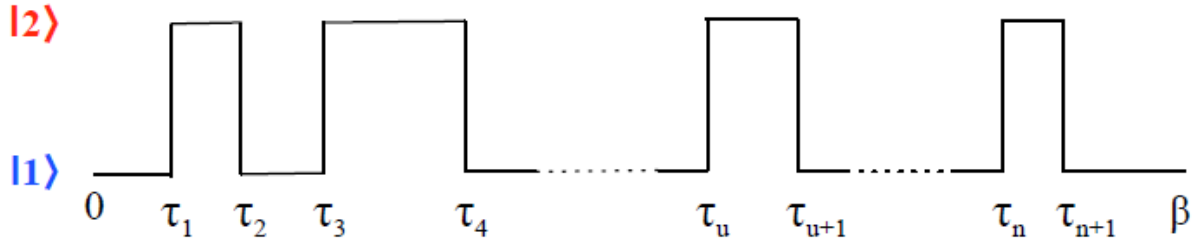
$$Z = e^{E/T} + e^{-E/T} \quad (4.26)$$

Trong mô phỏng MC lượng tử trạng thái của hệ không thể hiện rõ ràng mà chỉ qua các trị riêng về trạng thái $|a\rangle$ và năng lượng E_a . Nó có nghĩa rằng ta không thể sử dụng hệ thức $e^{-H/T}|a\rangle = e^{E_a/T}|a\rangle$ đối với các phần tử chỉ nằm trên đường chéo. Thay vào đó ta sẽ tính trung bình thống kê trong cấu hình cơ sở với các phần tử $e^{-H/T}$ không nằm trên đường chéo.

Trong biểu diễn tích phân đường, hàm tổng thống kê Z được viết lại ở dạng chi tiết hơn như sau:

$$Z = \sum_{\alpha_1, \dots, \alpha_{L-1}=1,2} \langle \alpha_0 | e^{-Hd\tau} | \alpha_{L-1} \rangle \langle \alpha_{L-1} | e^{-Hd\tau} | \alpha_{L-2} \rangle \dots \langle \alpha_1 | e^{-Hd\tau} | \alpha_L \equiv \alpha_0 \rangle \quad (4.27)$$

Như vậy, hạt có thể nhảy từ trạng thái này sang trạng thái khác trong khoảng thời gian khác nhau như hình vẽ



Hình vẽ 4.2: Biểu đồ mô tả các quỹ đạo khả dĩ trong không gian α của hệ

Tổng trên là tập hợp tất cả giá trị khả dĩ của hệ: $\alpha_0, \alpha_1, \dots, \alpha_{L-1}, \alpha_L \equiv \alpha_0$ tạo thành quỹ đạo $\alpha(\tau)$ trong không gian α chính là tích phân đường trong hình thức luận tích phân đường của Feynman. Khi giới hạn $d\tau$ rất nhỏ, $e^{-Hd\tau} \approx 1 - Hd\tau$ chúng ta có xác suất chuyển giữa hai trạng thái:

$$\langle \alpha' | e^{-Hd\tau} | \alpha \rangle \approx \begin{cases} e^{-\mu_\alpha d\tau}, \mu_{\alpha=1,2} = \pm \mu(khi | \alpha' \rangle = | \alpha \rangle) \\ Jd\tau(khi | \alpha' \rangle \neq | \alpha \rangle) \end{cases} \quad (4.28)$$

Hàm tổng thống kê Z có dạng như sau:

$$Z = \sum_{n=0}^{\infty} \int_0^{\tau} d\tau_1 \int_{\tau_1}^{\tau_2} d\tau_2 \dots \int_{\tau_{n-1}}^{\tau_n} d\tau_n (iJ)^n e^{-i\mu_{\alpha_0}(\tau_1-0) - i\mu_{\alpha_1}(\tau_2-\tau_1) \dots - i\mu_{\alpha_n}(\tau-\tau_n)} \quad (4.29)$$

Với công thức tổng thống kê như trên, ta có thể tính được giá trị kỳ vọng của các đại lượng Vật lý theo các nguyên lý thống kê thông thường [1].

4.3. Hệ đơn hạt

Từ các kết quả thu được ở hệ hai mức năng lượng chúng ta có thể mở rộng cho hệ đơn hạt trong mạng (d) chiều. Hamilton của hệ đơn hạt có thể được viết dưới dạng :

$$H = -j \sum_{\langle ij \rangle} (b_i^+ b_j + h.c) + \sum_i \mu_i n_i \quad (4.30)$$

Trong đó, $\langle ij \rangle$ là ký hiệu hai nút mạng i và j nằm lân cận nhau, n_i là số hạt tại vị trí nút mạng thứ i nên trong trường hợp hệ đơn hạt n_i có thể nhận giá trị là 0 hoặc 1, μ_i là năng lượng của hạt tại vị trí i còn J_i là biên độ chuyển tiếp giữa hai vị trí lân cận gần

nhất, $\hat{b}_i(\hat{b}_i^\dagger)$ là toán tử sinh hủy hạt ở vị trí thứ i . Ma trận của Hamilton(4.30) gồm hai thành phần: thành phần đường chéo đặc trưng cho thế năng tương tác được mô tả bởi toán tử U và có $\langle \alpha | e^{-d\tau H} | \alpha \rangle \approx e^{-d\tau U_\alpha}$ ngoài đường chéo là K .

$$H = K + U; \quad U | \alpha \rangle = U_\alpha | \alpha \rangle$$

$$K | \alpha \rangle = \sum_\gamma K_{\gamma\alpha} | \gamma \rangle; \quad K_{\alpha\alpha} = 0. \quad (4.31)$$

$$U | \alpha \rangle = U_\alpha | \alpha \rangle, | \alpha \rangle = \{ | n_i \rangle \}$$

Biểu thức hàm tổng thống kê Z của hệ:

$$Z = \sum_{\{\alpha_i\}, \alpha_L = \alpha_0} \langle \alpha_L | e^{-d\tau H} | \alpha_{L-1} \rangle \langle \alpha_{L-1} | e^{-d\tau H} | \alpha_{L-2} \rangle \dots \langle \alpha_1 | e^{-d\tau H} | \alpha_0 \rangle \quad (4.32)$$

Khi giới hạn $d\tau \rightarrow 0$ sử dụng xấp xỉ $e^{-d\tau H} \approx 1 - d\tau K - d\tau U + O(\Delta\tau^2)$

Bởi vậy $\langle \alpha | e^{-d\tau H} | \alpha \rangle \approx e^{-d\tau U_\alpha}$;

Trọng số cấu hình ngoài đường chéo $W_o = \langle \alpha | e^{-d\tau H} | \varphi \neq \alpha \rangle \approx -d\tau K_{\alpha\varphi}$

Trọng số cấu hình của hệ thống $W_v = \exp \left\{ - \int_0^\beta d\tau U_{\alpha(\tau)} \right\} \prod_{i=1}^L (-d\tau K_{\alpha_i \alpha_{i+1}})$

L là trọng số cấu hình ngoài phần đường chéo khi chuyển tiếp từ trạng thái α_i sang trạng thái α_{i+1} . Hàm tổng thống kê biểu diễn theo trọng số cấu hình:

$$Z = \sum_{L=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_{\tau_{L-1}}^\beta d\tau_L \sum_v W_v = \sum_{L=0}^{\infty} \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_{\tau_{L-1}}^\beta d\tau_L \sum_{\alpha_0, \dots, \alpha_L = \alpha_0} \exp \left\{ - \sum_{i=1}^L \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} d\tau U_{\alpha(\tau)} \right\} \prod_{i=1}^L (-K_{\alpha_i \alpha_{i+1}}) \quad (4.33)$$

Công thức trên tính tổng tất cả các cấu hình có thể, $\tau_0 = \tau_L$ là thời gian ảo

$$Z = \sum_{k=0}^{\infty} (j)^k \int_0^\beta d\tau_1 \dots \int_{\tau_{k-1}}^\beta d\tau_L \sum_{i_{CP}(\tau)} \exp \left\{ - \sum_{i=1}^L \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} \mu_{i(\tau)} d\tau \right\} \quad (4.34)$$

4.4. Hệ nhiều hạt.

Trong hệ đơn hạt xét ở trên, chúng ta chỉ quan tâm đến thành phần động năng của hạt và phần thế năng có vai trò như thế hóa. Trong bài toán nhiều hạt, chúng ta sẽ xét thêm cả tương tác giữa các hạt để mô tả lại Hamilton (3.2) của mô hình Bose-Hubbard như đã trình bày trong chương trước, Hamilton của hệ có dạng:

$$H = -j \sum_{ij} (b_i^\dagger b_j + h.c) + V_1 \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + V_2 \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \sum_i \mu n_i \quad (4.35)$$

Chúng ta hoàn toàn có thể tách Hamilton (4.35) thành hai thành phần: $H=K+U$

Với $K = -j \sum_{ij} (b_i^\dagger b_j + h.c)$ đóng vai trò là động năng và thành phần thứ hai là

$$U = V_1 \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + V_2 \sum_{\langle ij \rangle} n_i n_j + \sum_i \mu n_i \quad (4.36)$$

Đóng vai trò là thế năng. Về mặt nguyên tắc, việc phát triển phương pháp từ hệ đơn hạt sang hệ nhiều hạt không có nhiều khác biệt nên ta có thể tính toán tương tự. Hàm tổng thống kê:

$$Z = \sum_{L=0}^{\infty} \int_0^{\beta} d\tau_1 \dots \int_{\tau_{L-1}}^{\beta} d\tau_L \sum_{i_{CP}(\tau)} W_L [i_{CP}(\tau)] \quad (4.37)$$

$$\text{Trọng số cấu hình } W_L [i_{CP}(\tau)] = J^L \exp \left\{ - \sum_{i=1}^L \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} U(\tau) \right\} \equiv W(K_s, \xi_K; x_1, \dots, x_K; y)$$

Trọng số $W(K_s, \xi_K; x_1, \dots, x_K; y)$ Có K_s là số chuyển tiếp giữa hai vị trí lân cận gần nhất, x_i là thời gian ảo, ξ_k là số định xứ trong không gian. Khi đã xây dựng được không gian cấu hình của tổng thống kê Z , tất cả các đại lượng Vật lý cần quan tâm của hệ đều có thể được xác định.

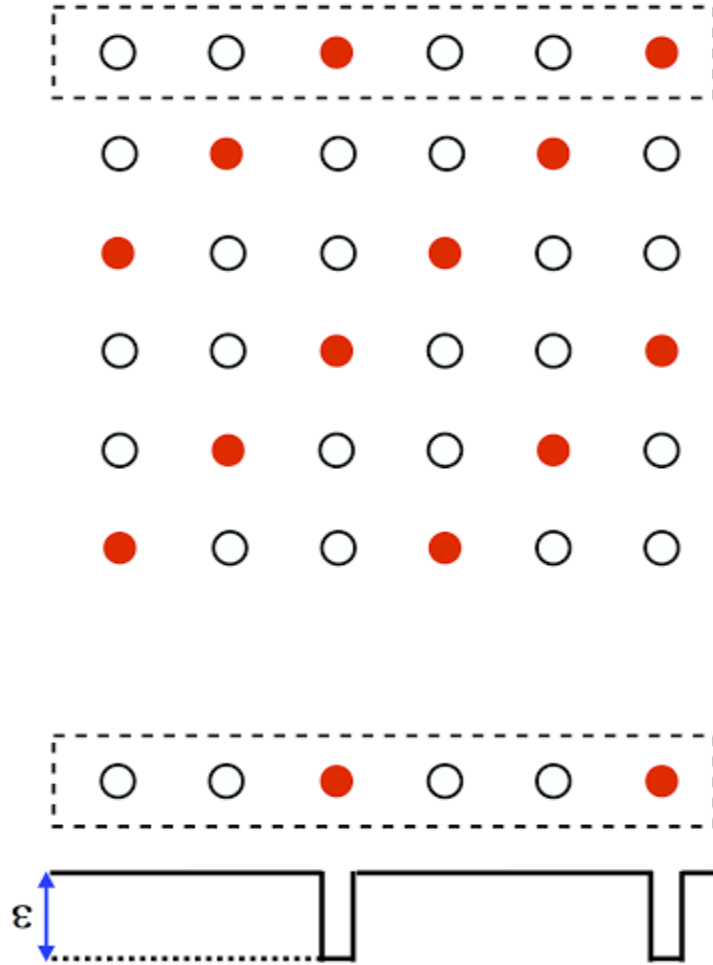
4.5.Áp Dụng phương pháp Monte Carlo lượng tử: Thuật toán Sâu

Như đã đề cập trong Chương 3, chúng tôi quan tâm đến giới hạn hữu hạn lỗi rắn của các hạt boson. Do bị ràng buộc bởi giới hạn này nên không tồn tại hơn một hạt ở trên cùng một vị trí nút mạng. Như vậy, trong không gian cấu hình, trục thời gian ảo sẽ chỉ có một đường xuất phát tại vị trí của hạt.

Mục đích chính là tìm ra sự tồn tại của pha siêu rắn tồn tại ở phía hạt và lỗ trống tại các mật độ tương ứng với trạng thái tinh thể ô bàn cờ. Ngoài ra chúng tôi cũng tìm pha siêu rắn chính xác tại các mật độ (hệ số lấp đầy) tương ứng và không tương ứng (nhưng tương ứng với vị trí đặt trường ngoài) với trạng thái cổ điển rắn ô bàn cờ ở mật độ 1/2. Pha siêu chảy luôn biến mất giá trị mật độ tại đó pha rắn xuất hiện. Đó là dấu hiệu của pha siêu rắn khi có tác động của trường ngoài. Trạng thái tương tự với He⁴ trong mạng tam giác. Trong luận văn này chúng tôi tìm kiếm pha siêu rắn có thể tồn tại bền vững với chỉ một lực tương tác với hạt lân cận gần nhất và có sự hỗ trợ của trường ngoài. Ta viết lại Hamiltonian (3.2) để mô tả kỹ hơn phương pháp:

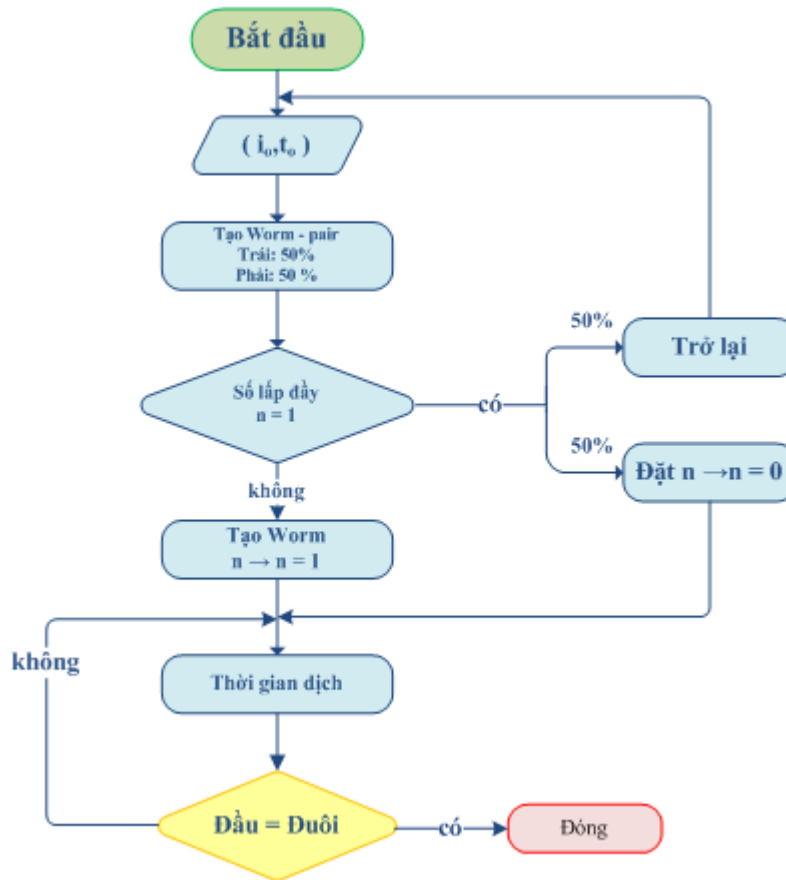
$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (b_i^\dagger b_j + h.c) + V_1 \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j + V_2 \sum_{\langle i,j \rangle} n_i n_j - \sum_i \mu_i n_i \quad (4.38)$$

Số hạng thứ nhất là động năng, được mô tả nhờ Boson nhảy từ nút này sang nút kia trong hình thức luận tích phân đường. Số hạng thứ hai là lực tương tác giữa hai hạt nằm tại hai nút mạng lân cận gần nhất, số hạng thứ ba mô tả tương tác giữa hai hạt ở nút mạng lân cận gần thứ hai. Số hạng thứ tư là thế hóa quyết định số hạt trong hệ. Mật độ boson $\rho = N_b/N$, $N = L \times L$ là số nút mạng còn N_b là số Boson trong hệ, được hoàn toàn xác định bởi thế hóa $\mu = \mu_i + \varepsilon$. Trường ngoài có thể mô tả thông qua thế hóa này bằng cách cho thế hóa phụ thuộc vào vị trí của hạt. Trong luận văn này chúng tôi đưa trường ngoài $\varepsilon = -\varepsilon_i$ tại các nút i , và bằng 0 tại các nút khác. Để đơn giản chúng tôi đặt $\varepsilon > 0$ và được xem như là độ lớn của cường độ trường ngoài. Một trong các ví dụ của việc đưa trường ngoài tại các nút mạng xác định được mô tả trên hình 4.3. Vị trí các nút có trường ngoài được mô tả bởi các nút màu đỏ, các vị trí khác được mô tả bởi các nút không lấp đầy. Chúng tôi nhấn mạnh rằng, trong các tính toán để kiểm nghiệm lại các kết quả đã biết và kiểm tra sự đúng đắn của phương pháp, chúng tôi không đưa vào trường ngoài. Nói cách khác, thế hóa trong trường hợp này là đồng nhất. Chỉ số $n_i = b_i^\dagger b_i$ là toán tử số hạt tại vị trí i .



Hình 4.3: Cấu trúc khi có trường ngoài trong mạng vuông để mật độ hạt $\rho = \rho_C = 1/3$ tương ứng, phù hợp với tinh thể không đối xứng trong khi $\rho = \rho_I = 1/2$

Có rất nhiều hướng phát triển của kỹ thuật Monte Carlo lượng tử. Tuy nhiên, các kỹ thuật tính toán về cơ bản đều gặp vấn đề tại gần các điểm chuyển pha khi độ dài tương quan trở nên rất lớn. Để giải quyết vấn đề này, nhóm của Prokofiev và Pollet [23, 33] đã phát triển một thuật toán cho phép chúng ta mô phỏng tốt hơn khi tiệm cận các điểm chuyển pha.



Hình 4.4: Giản đồ mô tả WA- LOWA

Nếu như phương pháp tích phân đường như chúng tôi trình bày ở trên sử dụng các “đường” trong không thời gian ảo và các đường này liên tục thì với thuật toán Sâu, các tác giả nhóm Prokofiev và Pollet đã cắt các đường thành hai phần và cho hai đầu cắt đó di chuyển trong không thời gian ảo. Khi hai đầu gặp nhau thì một cấu hình mới được xác định. Nhờ thuật toán Sâu và phương pháp tích phân đường, chúng tôi có thể xác định được các đại lượng Vật lý theo phương pháp thống kê.

Sử dụng thuật toán Sâu, chúng ta có thể tạo ra không gian cấu hình và tính tổng thống kê. Từ đó, các đại lượng thống kê Vật lý đều được tính toán dễ dàng. Để đặc trưng cho các pha khác nhau, chúng tôi đưa ra hai tham số trật tự đặc trưng cho các trạng thái: Thứ nhất là mật độ siêu chảy ρ_s (tham số đặc trưng cho sự bất định sứ, hay pha lỏng), nó bằng số vòng cuốn của các đường trong không – thời gian ảo, được cho bởi công thức sau:

$$\rho_s = \frac{\langle M^2 \rangle L^{2-d}}{\beta d} \quad (4.39)$$

Ở đây, $\langle \dots \rangle$ ký hiệu của trung bình hóa, M là số vòng cuộn, L là kích thước của hệ, d là số chiều không gian còn β là nghịch đảo nhiệt độ, đóng vai trò là thời gian ảo trong không gian cầu hình

Thứ hai là hệ số cấu trúc tĩnh tại véc tơ sóng \mathbf{Q} (tham số đặc trưng cho sự định xứ, hay pha rắn) như sau:

$$S(\mathbf{Q}) = \frac{1}{N^2} \left\langle \left| \sum_{i=1}^N n_i e^{i\mathbf{Q} \cdot \mathbf{r}_i} \right|^2 \right\rangle \quad (4.40)$$

Ở đây, $N = L \times L$ là số nút mạng, n_i là số boson trên nút mạng thứ i . Trong bài toán Boson lõi rắn thì số boson trên một nút mạng tối đa là 1. Đặc trưng rắn của hệ sẽ thể hiện bởi giá trị khác không của $S(\mathbf{Q})$ tại các vectơ mạng đảo \mathbf{Q} đặc trưng trong giới hạn nhiệt động lực học. Ví dụ: $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ là vectơ mạng đảo đặc trưng cho trạng thái tinh thể rắn có cấu trúc ô bàn cờ.

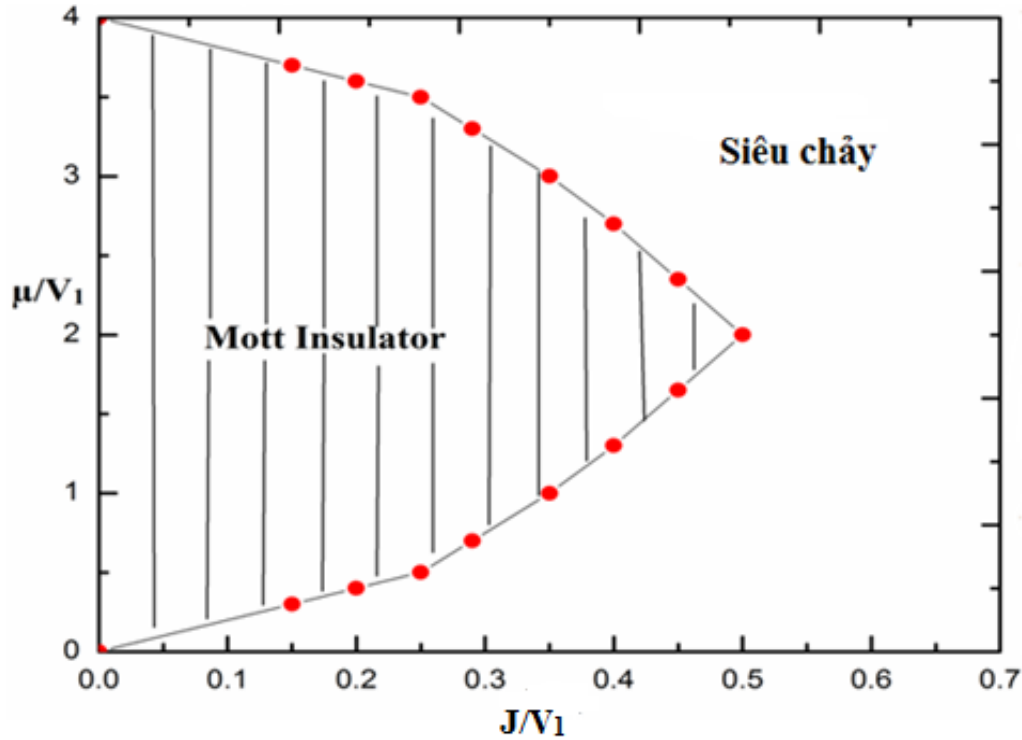
Sử dụng hai tham số trên, chúng tôi sẽ mô tả được các pha khác nhau. Trong pha siêu lỏng thì mật độ siêu chảy ρ_s khác không còn hệ số cấu trúc tĩnh bằng không. Ngược lại, trong pha rắn hoặc pha tinh thể thì mật độ siêu chảy ρ_s bằng không còn hệ số cấu trúc tĩnh khác không. Nếu cả hai tham số trên khác không và chúng ta loại bỏ được khả năng đồng tồn tại của các pha, nói cách khác là không có nhảy bậc trong sự phụ thuộc của số hạt vào thể tích, ta sẽ có pha siêu rắn. Cần nói thêm rằng, sự phụ thuộc của số hạt vào thể tích sẽ cho chúng ta biết được độ nén của hệ. Trường hợp hai pha tách biệt cùng tồn tại thì độ nén không xác định nên có sự nhảy bậc của đồ thị số hạt phụ thuộc thể tích và độ nén là vô hạn. Ngược lại, trong pha rắn, độ nén là bằng không, số hạt sẽ không thay đổi khi tăng thể tích trong một khoảng xác định. Tại các pha siêu lỏng và pha siêu rắn, sự phụ thuộc của số hạt vào thể tích là liên tục và độ nén có giá trị xác định. Chúng tôi không quan tâm đến giá trị định lượng của độ nén mà chỉ quan tâm đến giá trị định tính của độ nén, có liên quan đến sự ổn định pha. Trong chương tiếp theo, chúng tôi sẽ sử dụng hai tham số trật tự ở trên để nghiên cứu các đặc trưng pha của hệ.

CHƯƠNG 5: KẾT QUẢ THẢO LUẬN

5.1. Giảm đồ pha khi không có trường ngoài tính đến tương tác lân cận gần nhất V_1

Do chúng tôi quan tâm đến các hiệu ứng lượng tử nên nhiệt độ sử dụng trong mô phỏng được đưa xuống rất thấp, tương ứng với trạng thái cơ bản của hệ, đủ để loại bỏ ảnh hưởng của các hiệu ứng của nhiệt độ có bậc tương ứng với $k_B T$. Nói cách khác, chúng tôi muốn loại bỏ ảnh hưởng của nhiệt độ để thấy rõ vai trò của tương tác trong việc hình thành các pha. Ở giới hạn này, nó cho thấy rõ các hiệu ứng lượng tử thể hiện ở các tương tác dẫn đến việc hình thành pha như thế nào. Về mặt kỹ thuật, trong quá trình mô phỏng, nghịch đảo của nhiệt độ (vai trò như thời gian ảo trong hình thức luận tích phân đường của Feynman) được thiết lập ở mức $\beta = 1/T \approx L$ (chiều của mạng). Bằng kỹ thuật này, chúng tôi có thể khống chế hệ trong trạng thái cơ bản. Ngoài ra, để đảm bảo loại bỏ được các hiệu ứng gây ra do kích thước hữu hạn, ví dụ như do kích thước mạng nhỏ quá như $L \times L = 4 \times 4$, chúng tôi có thể tăng kích thước mô phỏng lên đến kích thước $L \times L = 24 \times 24 = 576$ ô mạng. Các kích thước mô phỏng sử dụng trong phần thảo luận thường là $L \times L = 12 \times 12 = 144$ ô mạng. Ngoài ra, như chúng tôi đã trình bày trong chương 3, chúng tôi chọn $J = 1$ làm đơn vị để tính năng lượng. Do đó, nếu như không cần phải so sánh tỉ số tương đối thì các giá trị của số hạng nhảy và tương tác thì chúng tôi sẽ tính mặc định theo thang đơn vị của J .

Để kiểm tra tính đúng đắn của phương pháp Monte Carlo lượng tử và thuật toán Sâu, chúng tôi đã vẽ lại giảm đồ pha khi không có trường ngoài và chỉ tính đến tương tác lân cận gần nhất như biểu diễn trên hình 5.1. Thuật toán Sâu cho phép chúng tôi mô phỏng ở trạng thái nhiệt độ khác không nhưng chúng tôi đã thu được pha ở trạng cơ bản bằng cách mô phỏng hệ ở nhiệt độ đủ thấp như thảo luận ở trên.

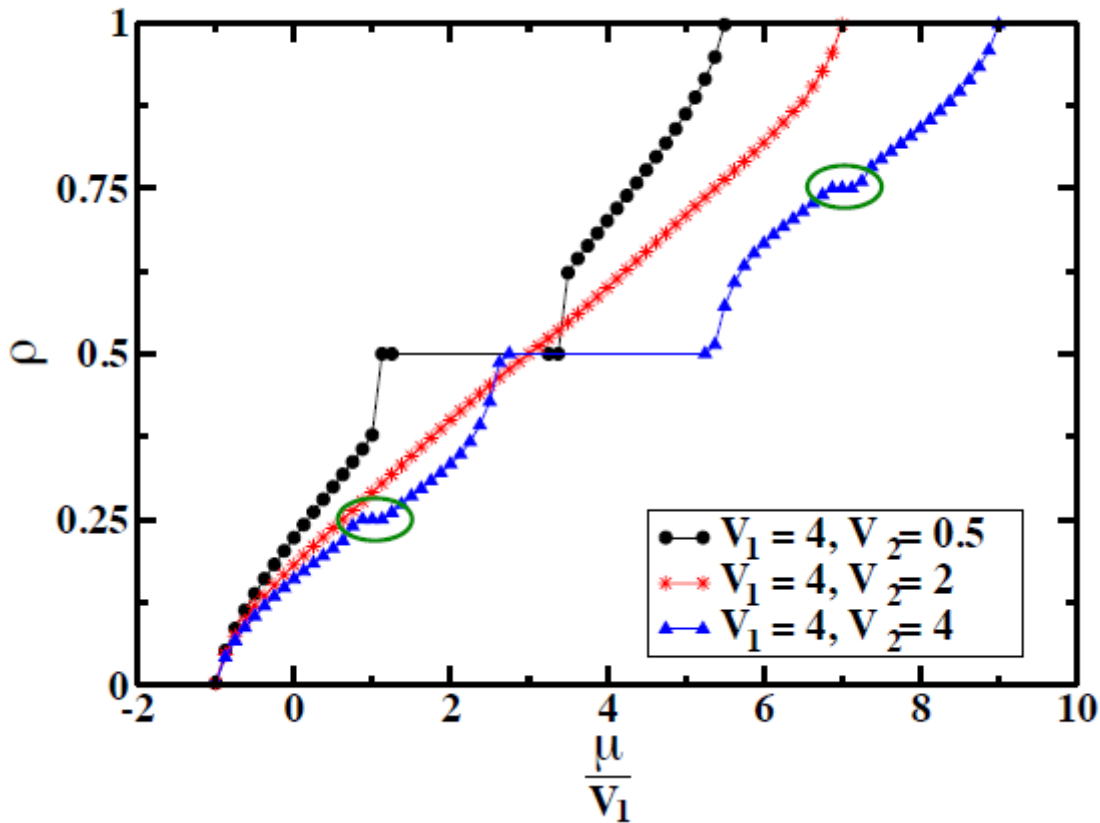


Hình 5.1: Giản đồ pha của mô Bose-Hubbard.

Quan sát giản đồ pha hình 5.1 ta thấy có hai trạng thái trên giản đồ được biểu thị khác nhau và phân cách bởi đường biên. Trạng thái thứ nhất là trạng thái điện môi Mott – MI (dạng thù hình là chất rắn), đặc trưng bởi tham số trật tự là hệ số cấu trúc tĩnh $S(\pi,\pi) \neq 0$ còn mật độ siêu chảy bằng 0. Trạng thái thứ hai là trạng thái siêu chảy (SF) được đặc trưng bởi mật độ siêu chảy khác không còn hệ số cấu trúc tĩnh $S(\pi,\pi) = 0$. Biên ngăn cách giữa hai trạng thái này là đường biểu diễn bởi các chấm màu đỏ. Khi tăng số hạng nhảy (đặc trưng cho động năng) J hoặc giảm V_1 thì trạng thái rắn dần chuyển sang trạng thái siêu chảy và ngược lại. Ví dụ, tại mật độ hạt $\rho=0.5$ tương ứng với thế hóa $\mu/V_1=2$ thì giá trị $J/V_1=0.5$ đánh dấu sự chuyển trạng thái từ MI sang trạng thái SF. Như chúng tôi đã trình bày ở phần mô hình, do có sự đối xứng giữa lỗ trống và hạt trong Hamilton (4.38) nên các kết quả của hệ cho mật độ từ 0.0 đến 0.5 vẽ giống như từ 0.5 đến 1. Các kết quả này phù hợp với kết quả tính toán của Batrouni [15, 16] cho thấy phương pháp chúng tôi sử dụng là đáng tin cậy.

5.2. Giải đồ pha khi không có trường ngoài: tính đến tương tác lân cận gần nhất thứ hai.

Chúng tôi cần nhấn mạnh rằng, với tương tác lân cận gần nhất, chúng tôi không mô phỏng được pha siêu rắn. Nói cách khác, hai tham số trật tự là mật độ siêu chảy và hệ số cấu trúc tinh không bao giờ khác nhau đồng thời. Do đó, một cách tự nhiên là chúng tôi cần các yếu tố khác để tăng cường sự định xứ cho hệ. Một trong các ý tưởng được đưa ra là cho thêm tương tác tầm xa hơn. Chúng ta có thể đặt câu hỏi là tương tác tầm xa đến thế nào là phù hợp hay chỉ là cho thêm tương tác tầm xa để làm phức tạp bài toán. Câu trả lời là: chúng ta cho thêm tương tác tầm xa đến khi pha siêu rắn xuất hiện. Thực tế là, các tính toán sử dụng phương pháp sóng spin đã cho các kết quả định tính như sau: thêm tương tác lân cận gần nhất thứ hai có thể ổn định pha siêu rắn. Kết quả này cũng đã thu được bởi một vài nhóm tác giả sử dụng phương pháp Monte Carlo lượng tử khai triển nhiễu loạn hàm tổng thống kê hoặc biến phân.



Hình 5.2: Mật độ hạt ρ phụ thuộc vào thế hóa μ/V_1 được tính toán trong mạng $L \times L = 6 \times 6$ và nhiệt độ nghịch đảo $\beta = 16$. Hai đường tròn đánh dấu trên hình thể hiện pha rắn.

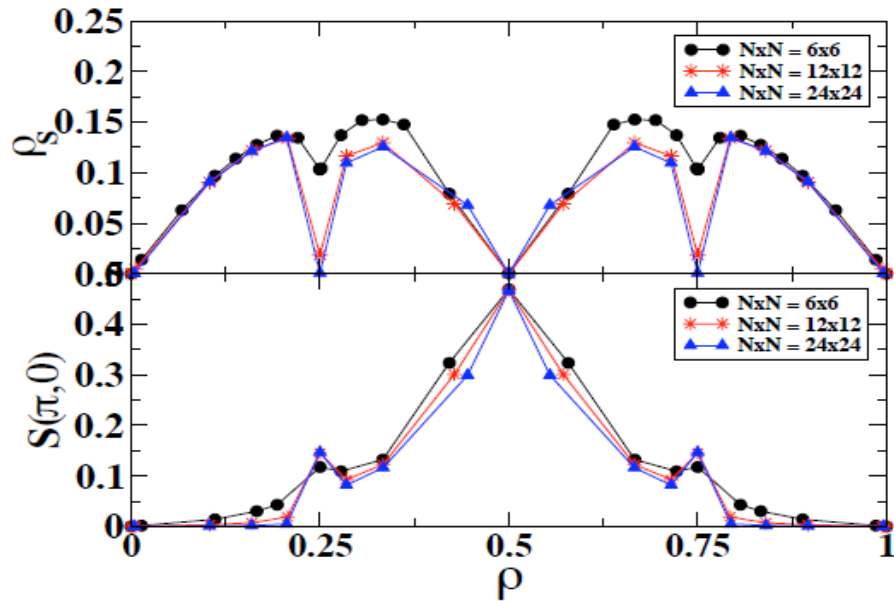
Trong trường hợp V_2 rất nhỏ so với V_1 , ví dụ trong trường hợp $V_1 = 4$ và $V_2 = 0.5$ như kết quả mô phỏng ở hình 5.2 mật độ hạt tăng từ 0 đến 0.5 và không đổi tại giá trị 0.5 khi tăng thể tích, tạo ra một cao nguyên tại mật độ này. Cao nguyên này là dấu hiệu của pha rắn vì độ nén của pha đặc trưng bằng độ thay đổi của mật độ theo thể tích bằng không.

Sự phụ thuộc của mật độ hạt vào thể tích có một thay đổi đặc biệt khi $V_2 \approx V_1$, ví dụ tại các tham số $V_2 = 4$ và $V_1 = 4$: có hai cao nguyên hình thành tại các mật độ khác giá trị 0.5 tại $1/4$ và $3/4$ đối xứng nhau được khoanh tròn trên hình 5.2. Tại mật độ $\rho = 1/2$ pha dải rắn $S(\pi, 0)$ hoặc $S(0, \pi)$ được quan sát thấy nhưng tại mật độ $1/4$, pha này không có dấu hiệu tồn tại.

Trong dải giữa hai giới hạn mật độ trên (mật độ hạt thay đổi đều từ 0 đến 0.5) Chúng tôi quan sát cả hai yếu tố cấu trúc (biên mất) và mật độ siêu chảy (ổn định) và kết luận hệ ở trạng thái siêu chảy. Nếu có một pha rắn đối xứng tại mật độ $1/4$ và $1/2$, ta hoàn toàn có thể suy nghĩ về một bức tranh pha siêu rắn như sau: pha siêu rắn được tạo ra bằng cách pha thêm các hạt (lỗ trống) vào hệ. Do các hạt này sẽ không tham gia vào việc hình thành trật tự rắn (do đã có sẵn), chúng ta có quyền hy vọng điều này sẽ làm cho pha rắn chuyển thành pha siêu rắn. Chúng ta cần chú ý tránh nhầm lẫn pha siêu rắn (đường cong phụ thuộc mật độ và thể tích tron tru) với sự đồng tồn tại của pha rắn và pha siêu dẫn (thể hiện qua sự nhảy bậc của mật độ tại một giá trị của thể tích).

Mặc dù không có pha siêu rắn được hình thành khi pha các hạt vào pha rắn ô bàn cờ tại mật độ $1/2$ nhưng có sự tách pha ở đây. Vì vậy có thể thấy rằng pha siêu rắn không ổn định tại mật độ xung quanh $1/2$. Như chúng tôi đã trình bày ở trên về sự xuất hiện một pha rắn hình sao tại mật độ $1/4$ thể hiện bằng việc xuất hiện cao nguyên tại mật độ này. Một câu hỏi đặt ra là có thể xuất hiện pha nào giữa hai pha rắn trong giai đoạn tách pha (một pha rắn tại mật độ $1/4$ và một pha rắn tại mật độ $1/2$).

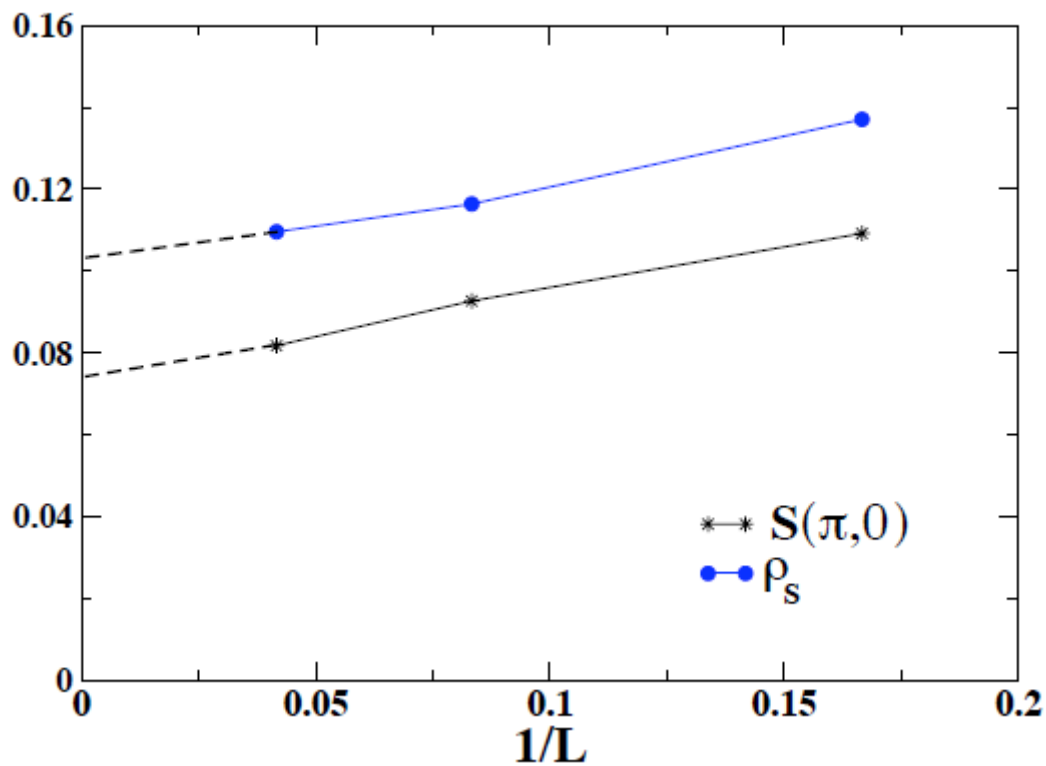
Trước tiên, ta tìm pha rắn hình sao tại mật độ $1/4$ chuyển thành pha siêu rắn và trạng thái rắn $S(\pi, 0)$ tại mật độ $1/2$ bằng cách pha vào hệ các hạt.



Hình 5.3: Mật độ siêu chảy ở phần trên của đồ thị và chỉ số cấu trúc tĩnh theo mật độ hạt ở phía dưới của đồ thị. Mô phỏng được thực hiện trong các mạng có kích thước khác nhau $L \times L = 6 \times 6, L \times L = 12 \times 12, L \times L = 24 \times 24$.

Trong hình 5.3 thể hiện mật siêu chảy ở phần trên và chỉ số cấu trúc tĩnh ở phần dưới tại mật độ $1/2$. Tại $V_1=4$ và $V_2=4$

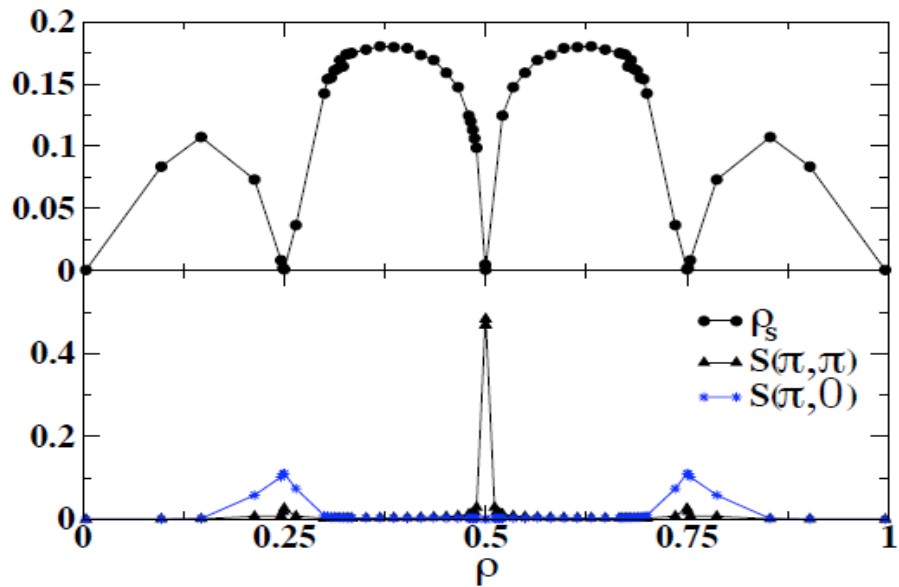
Mật độ siêu chảy tăng từ 0 tại mật độ hạt $\rho = 0$ và đạt cực đại 0.14 tại $\rho \approx 0.2$. Sau đó giảm và biến mất tại $\rho \approx 0.25$. Khi ở trên mật độ $1/2$ mật độ siêu chảy lại tăng và đạt giá trị cực đại lần hai 0.16 tại $\rho \approx 0.292$ và giảm tới 0 tại $\rho = 1/2$. Tương ứng với chỉ số cấu trúc $S(\pi, 0)$ cũng tăng và đạt cực đại tại mật độ $1/4$. Để loại bỏ các hiệu ứng gây ra do hình dạng, chúng tôi thực hiện ở các mô phỏng tại kích thước lớn hơn nhằm khẳng định sự tồn tại của cả hai tham số trật tự siêu chảy và hệ số cấu trúc tĩnh như hình vẽ 5.4



Hình 5.4: Mật độ siêu chảy và chỉ số cấu trúc theo nghịch đảo kích thước mạng tại mật độ hạt $\rho = 0.292$ tương ứng với thế hóa $\mu = 6$. Thế $V_1 = 4$ và $V_2 = 4$. Đường nét đứt thể hiện ngoại suy đến vô hạn của mạng.

Từ hình 5.4 ta có thể chỉ ra rằng cả hai tham số nói trên đều khác không trong giới hạn nhiệt động lực (kích thước hệ được ngoại suy ra vô hạn). Điều đó cho thấy hai tham số trật tự này thực sự khác không và đồng tồn tại.

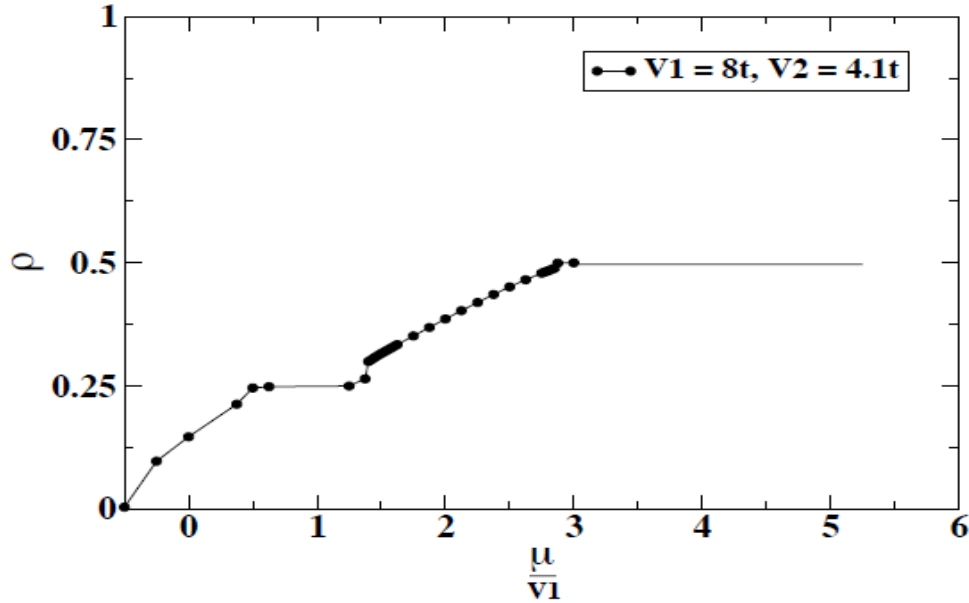
Tiếp đó, chúng tôi muốn quan sát quá trình chuyển từ pha rắn hình sao tại mật độ $1/4$ thành pha rắn ô bàn cờ tại mật độ $1/2$ bằng cách pha các hạt vào hệ (sử dụng thế hóa để điều khiển số hạt) như hình 5.5



Hình 5.5 : Mật độ siêu chảy ở phần trên của đồ thị và chỉ số cấu trúc ở phần dưới của đồ thị tại nhiệt độ nghịch đảo $\beta = 16$ và kích thước $L \times L = 24 \times 24$ ($V_1 = 8, V_2 = 4.1$) tại các mật độ khác nhau

Tương tự như kết quả tìm thấy với bộ tham số $V_1 = 4, V_2 = 4$, ta có thể thấy trong hình 5.6 pha siêu rắn là bền và không có sự đồng tồn tại pha do sự phụ thuộc rất trơn chu chứ không có nhảy bậc ở gần các cao nguyên mật độ.

Như vậy, chúng tôi cũng đã kiểm nghiệm lại được sự xuất hiện của pha siêu rắn khi tính đến tương tác lân cận gần nhất thứ hai. Sự xuất hiện của pha siêu rắn được thể hiện bằng giá trị hữu hạn của hai tham số trật tự là mật độ siêu chảy và hệ số cấu trúc tĩnh trong giới hạn nhiệt động lực học. Các kết quả này cho thấy phương pháp chúng tôi có thể mô tả được pha siêu rắn bằng hai tham số trật tự nói trên.



Hình 5.6: Mật độ hạt ρ theo thế hóa μ/V_1 tại nhiệt độ nghịch đảo $\beta = 16$ và kích thước $L \times L = 24 \times 24$ ($V_1 = 8, V_2 = 4.1$).

Mục tiêu quan trọng nhất của luận văn là trả lời câu hỏi: *có tồn tại pha siêu rắn trong mạng vuông mà không cần sự có mặt của tương tác lân cận gần nhất thứ hai?* Ý tưởng của chúng tôi là sử dụng trường ngoài để tăng cường yếu tố định xứ làm phong phú thêm sự xuất hiện của các pha mà không cần tương tác V_2 . Chúng tôi hy vọng với sự xuất hiện của trường ngoài cùng với tương tác lân cận gần nhất V_1 , chúng tôi sẽ ổn định được pha siêu rắn mà không cần tới các tương tác tầm xa hơn

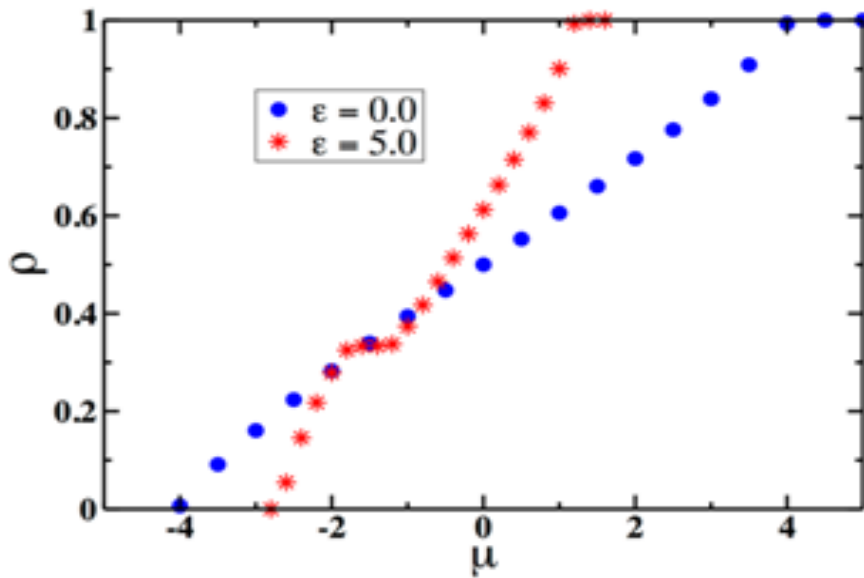
Về mặt thực nghiệm, người ta có thể hiện thực hóa trên mạng quang. Bằng cách đưa thêm cặp tia laser có cường độ nhỏ hơn ta có thể chồng chập lên một mạng quang có sẵn. Việc thay đổi các hạt có thể được thực hiện bằng cách bơm các hạt đoạn nhiệt vào hệ. Như vậy, trạng thái siêu rắn tồn tại cả trên giữa các nút mạng và cả các chỗ trống ứng với tinh thể tại đúng vị trí đặt trường ngoài, phù hợp với trường hợp có thể năng ngoài tác dụng vào hệ. Thật thú vị là, một vài tác giả đưa ra ý tưởng về trạng thái siêu rắn như sau: khi hệ đã xác định trạng thái rắn, các hạt có thể chui ngầm lượng tử và trao đổi vị trí với nhau. Nói cách khác là các hạt sẽ trao đổi để đi vào trạng thái siêu

chảy khi đang ở trong trạng thái rắn, đó chính là bức tranh trạng thái siêu rắn ở các mật độ tương ứng với trường ngoài. Lấy cảm hứng từ ý tưởng này chúng tôi cũng nghiên cứu pha siêu rắn chính xác với tinh thể được lấp đầy ở các mật độ tương ứng với trường ngoài. Chúng tôi cũng sử dụng hai tham số trật tự là mật độ siêu chảy và hệ số cấu trúc tinh. Đáng tiếc là, mật độ siêu chảy luôn luôn bị triệt tiêu vì mật độ tiến tới giá trị tương ứng và không tương ứng với trường ngoài. Nghĩa là, chúng tôi không tìm thấy bức tranh pha siêu rắn và chứng minh rằng ý tưởng này không đúng. Thực tế, thế năng bên ngoài không làm phát sinh cơ chế vật lý mới, với sự liên hệ từ những gì đã được quan sát trong trường hợp không có bất kỳ thế năng bên ngoài nào. Mặc dù, các pha siêu rắn không xuất hiện ở sự sắp xếp đối xứng như trong sắp xếp bất đối xứng, nó có thể xuất hiện ở lân cận sắp xếp bất đối xứng. Lý do như sau: sự định vị rất mạnh để phá hủy các liên kết yếu ở pha tinh thể. Tuy nhiên từ pha tinh thể sự sắp xếp pha siêu chảy sẽ được tăng cường khi các trật tự rắn yếu hơn. Do đó cả hai trật tự có thể tồn tại cùng nhau.

Để hiểu rõ sự diễn biến của của những pha trên chúng ta bắt đầu bằng thảo luận sự tồn tại của các pha hình thành khi có trường ngoài.

5.3. Giảm đồ pha khi có trường ngoài

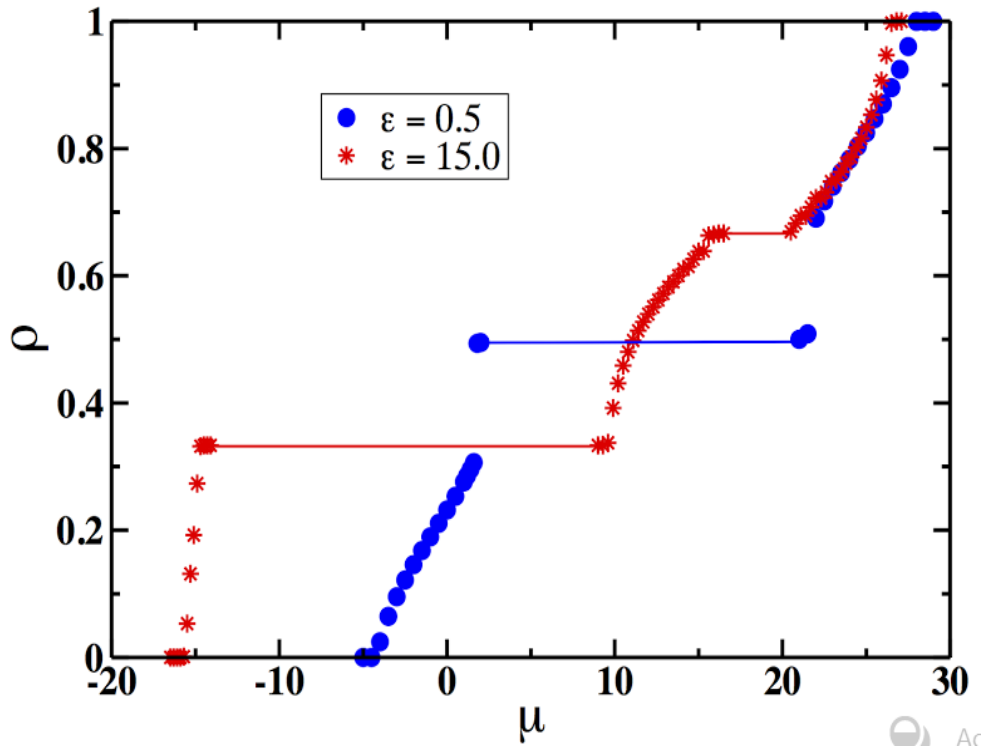
Như đã thảo luận trong Chương 3, thế hóa μ có vai trò không chế số hạt của hệ. Với các giá trị μ khác nhau, hệ sẽ có số hạt tương ứng. Để chứng minh điều này, chúng tôi đã thay đổi thế hóa trong mô phỏng và quan sát sự thay đổi số hạt như trên hình vẽ với các giá trị khác nhau của trường ngoài ε .



Hình 5.7: Sự phụ thuộc của mật độ hạt vào thế hóa khí có trường ngoài với điều kiện $V_1 = 0.5$. Hệ có trạng thái siêu chảy khi không có trường ngoài, đặc trưng bởi các chấm tròn, Hệ xuất hiện trạng thái rắn khi có trường ngoài tại mật độ $1/3$ đặc trưng bởi hình hoa thị có phần đi ngang của mật độ

Về kĩ thuật, để tính được các điểm biên giữa hai trạng thái rắn và trạng thái siêu chảy thì ta sử dụng hai yếu tố đó là cấu trúc tĩnh và cấu trúc siêu chảy như đã trình bày ở chương 3. Khi cấu trúc tĩnh $S(\pi, \pi) \neq 0$ thì hệ ở trạng thái rắn còn khi cấu trúc $S(\pi, \pi) = 0$ tĩnh thì hệ lại ở trạng thái siêu chảy.

Như đã trình bày ở trên, có nhiều cách để mô tả pha siêu rắn dựa trên mô hình Bose- hubbard bằng cách thêm các tương tác tầm xa: tương tác với hạt lân cận gần nhất hoặc xa hơn nữa. Tuy nhiên khi thêm các tương tác tầm xa thì ảnh hưởng của yếu tố hình học lại đóng vai trò chủ yếu. Khi thêm vào thêm vào hệ tương tác tầm xa lân cận gần nhất thì có xuất hiện pha siêu rắn trong mạng tam giác nhưng không có xuất hiện trong mạng vuông [15, 16].

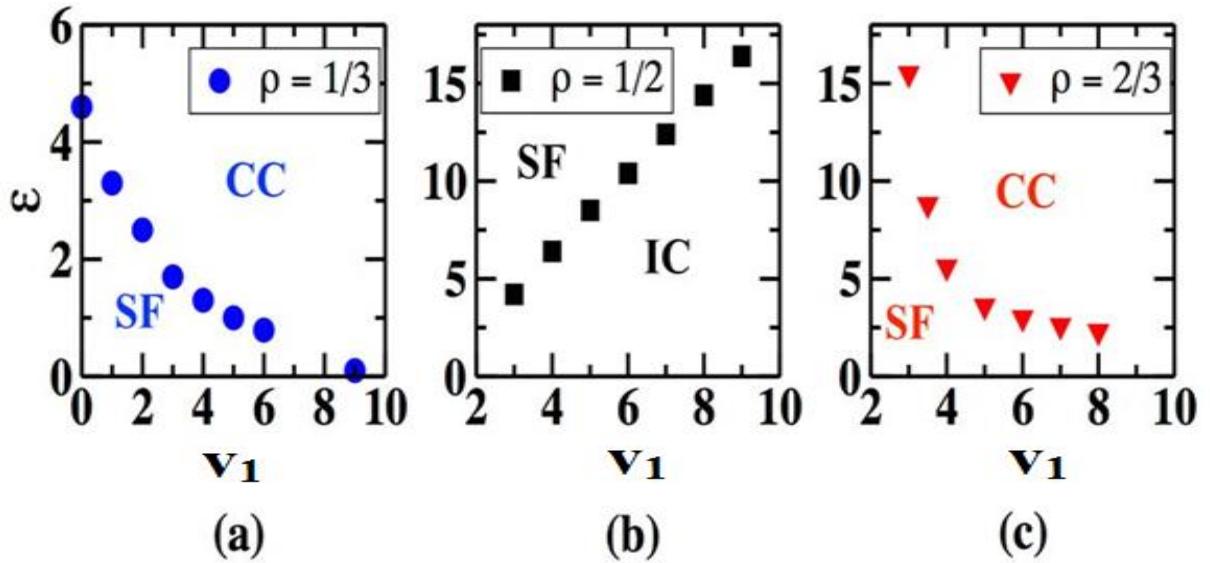


Hình 5.8: Mối liên hệ giữa mật độ và thế hóa khi có trường ngoài và thế thế năng giữa hai hạt lân cận gần nhất $V_1=6$.

Thế năng $V_1=6$ đủ để cả hai pha đối xứng và pha bất đối xứng tồn tại trong mô hình có sự tác dụng của thế năng ngoài.

Tại $V_1=6$ khi không có thế ngoài hệ sẽ hoàn toàn ở trạng thái tinh thể (ô bàn cờ).

Nếu thế năng ngoài đủ nhỏ $\epsilon = 0.5$ có sự nhảy pha tại $\rho(\mu)$ là pha bất đối xứng $\rho = 1/2$. Dấu hiệu tách pha giữa pha ô bàn cờ và pha siêu chảy giống như cơ chế không có thế năng ngoài. Có hai pha tinh thể xuất hiện tại $\rho = \rho_c=1/3$ với thế năng ngoài, với $\rho = 2/3$ không tồn tại với tất cả trạng thái không có thế ngoài. Pha này gây ra bởi vì thế ngoài được xuất hiện trong pha đối xứng $\rho = \rho_c= 1/3$.



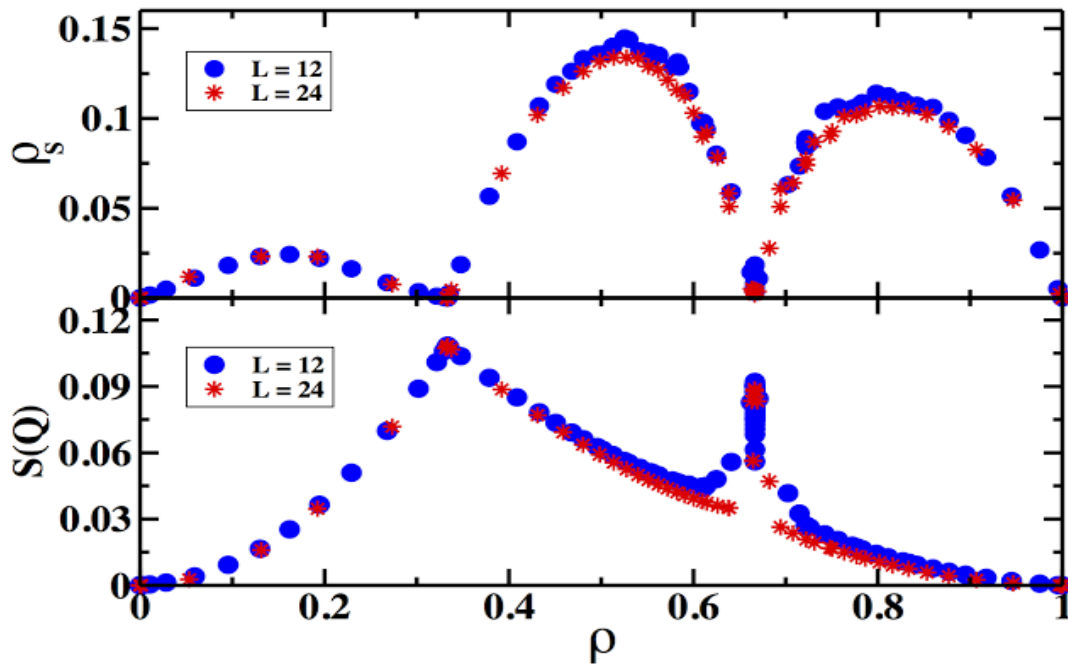
Hình 5.9: Giản đồ pha của các trạng thái cơ bản ở các mật độ khác nhau: (a) tại mật độ $\rho = 1/3$, các pha quan sát được là pha siêu chảy (SF) và pha rắn tương ứng với trường ngoài (CC); (b) $\rho = 1/2$, các pha quan sát được là pha siêu chảy (SF) và pha rắn không tương xứng với trường ngoài (IC); (c) $\rho = 2/3$, các pha quan sát được là pha siêu chảy (SF) và pha rắn tương xứng với trường ngoài (CC)

Hình 5.9 là trạng thái cơ bản được mô phỏng trong mặt phẳng (V_1, ϵ) với kích thước mạng đủ lớn $L = 12, 24$ để loại ảnh hưởng của kích thước, chúng tôi tính toán mối liên hệ giữa mật độ siêu rắn và mật độ pha tinh thể. $\rho = \rho_c = 1/3$ (hình 5.9a) và $\rho = 1/2$ (hình 5.9c) $\rho_c = 1/2$ (hình 5.9b). Trong giản đồ pha tại hai điểm hai tinh thể đối xứng, hệ là siêu chảy tại thế năng ngoài nhỏ $\epsilon < \epsilon_c$. Tại điểm $\epsilon_c(V_1)$ cực tiểu thế năng ngoài cho pha tinh thể xuất hiện, như một hàm của lực đẩy giữa các hạt lân cận nhất V_1 . Thật thú vị, pha đối xứng $\epsilon_c(V_1)$ là giảm tuyến tính với V_1 nhưng nó không xảy ra tương tự với hai tinh thể đối xứng. So sánh tinh thể đối xứng tại $\rho = 1/3$, thế năng bên ngoài mạnh hơn là cần thiết để ổn định tinh thể đối xứng tại $\rho = 2/3$. Tại đường $\rho(\mu)$ trong (hình 5.7) với đỉnh rộng hơn $\rho = \rho_c = 1/3$ và nhỏ hơn tại $\rho = 2/3$, phù hợp với trạng thái này. Trong một vị trí sau đó, sự hỗ trợ từ thế năng bên ngoài đến hạt những hạt boson tại những vị trí định xứ thì mạnh hơn các hạt boson khác, do đó những hạt boson đó trở nên linh động hơn và có thể chảy không ma sát. Như ta thấy

kết quả, pha siêu chảy có thể xuất hiện cả khi lực tương tác rất lớn $V_1 \gg 9$, trong khi pha siêu chảy hoàn toàn biến mất khi $V_1=9$.

Trong hình 5.9b, chúng tôi đã chỉ ra trạng thái khác của tinh thể bất đối xứng: sự có mặt của của lực tương tác của hạt lân cận gần nhất là nguyên nhân gây ra sự hình thành của pha tinh thể bất đối xứng tại $\rho_i = 2/3$ khi không có thế năng ngoài. Tuy nhiên trong hình 5.9b thế năng ngoài nén tinh thể tại mật độ ρ_i một giá trị lớn hơn V_1 cần thiết để ổn định tinh thể bất đối xứng tại $\rho_i=1/2$ trong trường hợp có thế năng ngoài ngoài xuất hiện. Điều này là bởi sự không phù hợp của hai pha tinh đối nghịch. Một độ lớn thích hợp của giá trị ε là nguyên nhân của pha bất đối xứng biến mất toàn bộ.

Khả năng có được pha siêu rắn tại chính xác sự tồn tại cùng lúc pha đối xứng và bất đối xứng đã được nghiên cứu. Tuy nhiên chúng tôi đã chưa tìm được dấu hiệu nào của tương tự pha siêu rắn. Bức tranh vật lý rời khỏi những sự sắp xếp này, bước tiếp theo trong các nghiên cứu tương lai.



Hình 5.10: Mật độ siêu chảy và chỉ số cấu trúc tinh thể theo mật độ hạt khi có trường ngoài

Hình 5.10 chỉ ra hàm giữa mật độ siêu chảy ρ_s và chỉ số cấu trúc tinh $S(Q) = (4\pi/3, -2\pi/3)$ như là hàm của mật độ hạt. Trong thực nghiệm mạng quang, ta có thể thêm các hạt, như vậy ta đã thay đổi mật độ hạt. Chọn lựa các chỉ số như $V_1=6$ và $\varepsilon=15$ tương ứng trong một hệ trong đó chỉ pha tinh thể được hình thành từ pha đối xứng, tại một mật độ $\rho_c=1/3$ và $\rho=2/3$, trong khi tinh thể bất đối xứng không tồn tại tại trật tự bất đối xứng $\rho_I=1/2$ bởi thế năng bên ngoài.

Cả hai ρ_s và $S(Q)$ thì xác định tại mọi điểm ngoại trừ ρ_c nơi mà pha siêu chảy biến mất. Quy luật này nằm ngoài khả năng có pha siêu rắn tại sự sắp xếp tinh thể. Hơn nữa thực tế $\rho(\mu)$ liên tục tại mọi điểm (hình 5.8), cho phép chúng tôi loại trừ khả năng tách pha giữa siêu chảy và tinh thể như chúng tôi đã quan sát được tại lân cận pha tinh thể ô bàn cờ trong trường hợp không có thế năng ngoài. Do đó dựa trên định nghĩa chặt chẽ, ta có thể kết luận rằng hệ siêu rắn tại mọi điểm, ngoại trừ tại mật độ đối xứng ρ_c . Chính xác tại $\rho = \rho_c$ pha siêu chảy biến mất, là một kết quả có ý nghĩa lớn. Thật vậy, siêu rắn trong mô hình mạng tam giác là một tinh thể bất đối xứng được pha xen kẽ các hạt, ví dụ mật độ siêu chảy của một tinh thể thuần luôn luôn là không. Tuy nhiên một cách tự nhiên mật độ tinh thể đã được ổn định bởi thế năng ngoài phải ưu tiên các tính chất khác hơn một tính chất bất đối xứng, điều mà chỉ quan sát được trong trường hợp không có thế năng ngoài. Tuy nhiên chúng tôi tìm kiếm mật độ siêu chảy luôn luôn biến mất tại ρ_c ngay khi chúng ta tiếp cận giới hạn nhiệt động. Chúng tôi cũng lặp lại các phân tích tương tự cho các lựa chọn khác về các chỉ số, bao gồm những chỉ số đó cho các hai trường hợp đối xứng và bất đối xứng, nhưng sự xuất hiện của một pha bất đối xứng tại mật độ cao hơn không biến đổi vật lý của hệ thống trong lân cận của ρ_c ví dụ, một siêu rắn pha tồn tại trên cả hai nút mạng và chỗ trống, nhưng không tồn tại trong cả hai sắp xếp đối xứng $\rho = \rho_c = 1/3$ và $\rho_c = 2/3$

Trạng thái vật lý của hệ gần pha tinh thể bất đối xứng là tương tự trong trường hợp không có thế năng ngoài. Cụ thể mật độ siêu chảy lại biến mất tại ρ_I . Ở đây cũng vậy, có thể chấp nhận rằng sự yếu của tinh thể bất đối xứng gây ra bởi thế ngoài có thể tăng đến một giá trị “tinh thể mềm”, có thể siêu chảy. Tuy nhiên điều đã quan sát được là cứ khi pha tinh thể bất đối xứng tồn tại, mật độ siêu chảy tại ρ_I biến mất.

Tương tự mô hình mạng tam giác, ở đây luôn luôn có một chuyển pha bậc nhất trong các chỗ trống ngay sau khi tinh thể bất đối xứng được hình thành. Mặt khác trong các vị trí giữa các nút mạng, phụ thuộc vào giá trị của V_1 mà có thể có chuyển pha bậc

nhất thành siêu chảy hoặc chuyển pha bậc hai thành siêu rắn. Chuyển pha bậc hai từ tinh thể đối xứng tại ρ_c thành một pha siêu rắn tạp và sau đó mật độ được tăng lên, thành pha siêu chảy theo đó chuyển pha bậc nhất từ siêu chảy thành tinh thể bất đối xứng tại ρ_I . Sự chuyển pha từ siêu rắn thành siêu chảy được bắt đầu bởi sự thay đổi độ dốc trên đường $\rho(\mu)$.

Đây là kết quả của thế năng thực nghiệm thích hợp, như các nghiên cứu của hai mạng quang đặt chồng lên nhau, ví dụ mạng quang với cường độ mạnh và một mạng có cường độ yếu hơn. Với mạng này yêu cầu có thể có trạng thái siêu rắn gần mật độ đối xứng đã được tạo ra, có thể xác định siêu chảy là một hàm của mạng có cường độ yếu hơn. Tuy nhiên, một báo cáo gần đây trên sự ngưng tụ của loại hệ hạt phân cực tự phát sinh bên trong bán dẫn microcavities đã mở ra một hướng nghiên cứu mới có thể tìm được siêu rắn tồn tại ở nhiệt độ phòng.

KẾT LUẬN

Chúng tôi đã áp dụng thành công phương pháp Monte Carlo lượng tử sử dụng thuật toán Sâu để tính toán cho mô hình Bose Hubbard mở rộng với hệ boson lõi rắn trong mạng vuông có tính đến tương tác lân cận gần nhất trong điều kiện có mặt từ trường ngoài.

Ngoài ra, chúng tôi đã tìm được được giản đồ của trạng thái cơ bản nhờ các mô phỏng ở nhiệt độ rất thấp và với các cường độ trường ngoài khác nhau. Tính toán chỉ ra rằng, khi trường ngoài vượt quá giá trị ngưỡng, hệ sẽ hình thành các pha rắn tại các mật độ $\rho = 1/3$ và $\rho = 2/3$. Đáng chú ý là các pha rắn này không xuất hiện khi không có trường ngoài. Tại mật độ $\rho = 1/2$, tương tác lân cận gần nhất vẫn có ảnh hưởng khi trường ngoài yếu, pha rắn dạng ô bàn cờ vẫn tồn tại như khi không có trường ngoài.

Thứ vị nhất là chúng tôi đã tìm được pha siêu rắn khi tăng hoặc giảm mật độ hạt xung quanh các pha rắn. Đây là một kết quả đáng chú ý vì các tác giả khác không tìm thấy pha siêu rắn trong mô hình không có trường ngoài. Chúng tôi cũng chỉ ra rằng, pha siêu rắn xuất hiện đồng thời với sự có mặt của các pha rắn tại các mật độ khác nhau. Ngay khi trường ngoài quá yếu, không đủ để ổn định pha rắn thì pha siêu rắn sẽ biến mất. Kết quả này cho thấy vai trò của các thăng giáng lượng tử đến từ tương tác là vô cùng quan trọng. Các thăng giáng này thể hiện vai trò mạnh mẽ khi thăng giáng nhiệt được loại bỏ ở nhiệt độ thấp.

Các kết quả nghiên cứu của chúng tôi có thể được kiểm chứng thực nghiệm bằng các hệ nguyên tử siêu lạnh bẫy trong mạng quang, các hệ Helium hấp thụ trên graphite hay các cặp exciton ngưng tụ trong các hốc vi mô.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

Tài Liệu Tiếng Việt

- [1] Bùi Quang Báu, Nguyễn Văn Hùng, Bùi Bằng Đoàn (2004), *Vật Lý thống kê*, Nhà xuất bản Đại học Quốc gia Hà Nội.
- [2] Phạm Thúc Tuyên (2011), *Cơ học lượng tử*, Nhà xuất bản Đại học Quốc gia Hà Nội.
- [3] Nguyễn Văn Hùng (2000), *Lý thuyết chất rắn*, Nhà xuất bản Đại học Quốc gia Hà Nội.

Tài Liệu Tiếng Anh

- [4] An Qu, A. Trimeche, J. Dupont-Roc, J. Grucker, and Ph. Jacquier (2015), *Cavitation density of superfluid helium-4 around 1 K*, Phys. Rev. B 91, 214115.
- [5] A.F.Andreev and I.M.Lifshitz (1969), *Quantum Theory of Defects in Crystals*, Sov.Phys.JETP Vol. 29, p. 1107.
- [6] B. Bujnowski, J. K. Corso, A. L. C. Hayward, J. H. Cole, and A. M. Martín (2014), *Supersolid phases of light in extended Jaynes-Cummings-Hubbard systems*, Phys. Rev. A 90, 043801.
- [7] E.Kim and M.Chan (2004), *Observation of hidden phases in supersolid He⁴*, Nature Vol. 427, p. 225.
- [8] D.Jaksch, C. Bruder, J. I. Cirac, C. W. Gardiner, and P. Zoller (1998), *Cold Bosonic Atoms in Optical Lattices*, Phys.Rev.Lett. Vol. 81, p. 3108.
- [9] D. Jaksch and P. Zoller (2005), *The cold atom Hubbard toolbox*, Ann.Phys. Vol. 52, p. 52 .
- [10] Daisuke Yamamoto and Ipei Danshita (2013), *Magnon supersolid and anomalous hysteresis in spin dimers on a triangular lattice*, Phys. Rev. B 88, 014419.
- [11] Fei Lin, T. A. Maier, V. W. Scarola (2015), *Strengthening Supersolids with Disorder in the Extended Bose-Hubbard Model*, arXiv:1510.00291v1.
- [12] Fabien Trouselet, Pamela Rueda-Fonseca, and Arnaud Ralko (2015), *Competing supersolids of Bose-Bose mixtures in a triangular lattice*, Phys. Rev. B 91, 085104
- [13] Francesco Ancilotto, Martí Pi, and Manuel Barranco (2015), *Vortex arrays in nanoscopic superfluid helium droplets*, Phys. Rev. B 91, 100503(R)
- [14] G.V. Chester (1970), *Speculations on Bose-Einstein Condensation and Quantum Crystals*, Phys.Rev.A Vol. 2, p. 256.

- [15] G. G. Batrouni and R. T. Scalettar (2000), *Phase Separation in Supersolids*, Phys. Rev. Lett. 84 , 1599.
- [16] G.G. Batrouni, R.T. Scalettar, V. G. Rousseau, B. Grémaud (2013), *Competing Supersolid and Haldane Insulator phases in the extended one-dimensional bosonic Hubbard model*, Phys. Rev. Lett. 110, 265303.
- [17] G. I. Harris, D. L. McAuslan, E. Sheridan, Y. Sachkou, C. Baker, W. P. Bowen (2015), *Laser cooling and control of excitations in superfluid helium*, arXiv:1506.04542v1.
- [18] I. H. Neumann and R. J. Zieve (2015), *Vortex pinning by surface geometry in superfluid helium*, Phys. Rev. B 89, 104521.
- [19] Ikuo Ichinose, Takumi Ishima, Naohiro Kobayashi, Yoshihito Kuno (2015), *Crystal, Superfluids, Supersolid and Hetero-Structure in System of Two-Component Strongly-Correlated Bosons in a Cubic Optical Lattice*, arXiv:1112.5516v3.
- [20] Johan Carlstrom and Egor Babaev (2014), *Entropy-and Flow-Induced Superfluid States*, Phys. Rev. Lett. 113 .
- [21] Jian-Ping Lv, Qing-Hu Chen, Youjin Deng (2014), *Two-species hard-core bosons on the triangular lattice: A quantum Monte Carlo study*, Phys. Rev. A 89, 013628.
- [22] Kwai-Kong Ng (2015), *Valence bond supersolid in a bilayer extended Bose Hubbard model*, Phys. Rev. B 91, 054516.
- [23] L. Pollet, K. V. Houcke, and S. M. A. Rombouts (2007), *Engineering local optimality in quantum Monte Carlo algorithms*, J. Comput. Phys., Vol. 225, p. 2249.
- [24] L. Dang, M. Boninsegni and L. Pollet (2008), *Vacancy supersolid of hard-core bosons on the square lattice*, Phys. Rev. B Vol. 78, 132512 .
- [25] L. Dang, Stephen Inglis, and Roger G. Melko (2011), *Quantum spin liquid in a spin-1/2 XY model with four-site exchange on the kagome lattice*, Phys. Rev. B Vol. 84, 2011, p. 132409.
- [26] Luca Galantucci, Michele Sciacca, and Carlo F. Barenghi (2015), *Coupled normal fluid and superfluid profiles of turbulent helium II in channels*, Phys. Rev. B 92, 174530.
- [27] Markus Greiner, Olaf Mandel, Tilman Esslinger, Theodor W. Hänsch & Immanuel Bloch (2002), *Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms*, Nature 415, 39-44.

- [28] M. Boninsegni and N. Prokof'ev (2005), *Supersolid Phase of Hard-Core Bosons on a Triangular Lattice*, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 95, p. 237204.
- [29] M. Boninsegni, N. Prokof'ev, and B. Svistunov (2006), *Worm algorithm and diagrammatic Monte Carlo: A new approach to continuous-space path integral Monte Carlo simulations*, *Phys. Rev. E* Vol. 74, p. 036701.
- [30] M. Boninsegni, N. Prokof'ev, and B. Svistunov (2006), *Superglass Phase of He-4*, *Phys. Rev. Lett.* Vol. 96, p. 105301.
- [31] M. Boninsegni, N. Prokofiev, Colloquium (2012), *Supersolids: What and where are they?*, *Phys. Rev. Mod.* Vol. 84, p. 759.
- [32] Massimo Boninsegni (2015), *Superfluidity of 4He nanoclusters in confinement*, *Phys. Rev. B* 92, 174112.
- [33] M. Troyer S. Wessel (2005), *Supersolid Hard-Core Bosons on the Triangular Lattice*, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 95, p. 127205.
- [34] N. V. Prokof'ev, B. V. Svistunov, and I. S. Tupitsyn (1998), *Exact, Complete, and Universal Continuous-Time Worldline Monte Carlo Approach to the Statistics of Discrete Quantum Systems*, *JETP*, Vol. 87, p. 310.
- [35] Ole Jürgensen, Klaus Sengstock, Dirk-Sören Lühmann(2015), *Twisted complex superfluids in optical lattices*, *Scientific Reports* 5, Article number: 12912 .
- [36] P. Kapitza (1938), *Viscosity of liquid helium below the λ -point*, *Nature*, Vol. 74, p. 141.
- [37] R. G. Melko, A. Paramekanti, A. A. Burkov, A. Vishwanath, D. N. Sheng, and L. Balents (2005), *Supersolid Order from Disorder: Hard-Core Bosons on the Triangular Lattice*, *Phys. Rev. Lett.*, Vol. 95, p. 127207.
- [38] Ryota Suzuki, Akihisa Koga (2014), *Supersolid states in a hard-core Bose-Hubbard model on a layered triangular lattice*, *J. Phys. Soc. Jpn.* 83, 064003.
- [39] R. Hänninen (2015), *Kelvin waves from vortex reconnection in superfluid helium at low temperatures*, *Phys. Rev. B* 92, 184508.
- [40] Steven T. Bramwell, Michael F. Faulkner, Peter C. W. Holdsworth, Andrea Taroni (2015), *Phase order in superfluid helium films*, arXiv:1508.07773.
- [41] Simon Jesenko (2010) *Ultracold atoms in optical lattice*, *Phys. Seminar*, May 25.
- [42] Tapan Mishra, Ramesh V. Pai, Subroto Mukerjee(2014), *Supersolid in a one-dimensional model of hard-core bosons*, *Phys. Rev. A* 89, 013615.

- [43] Tian-Sheng Zeng, Lan Yin (2014), *Supersolidity of a dipolar Fermi gas in a cubic optical lattice*, Phys. Rev. B 89, 174511.
- [44] Timothy R. Prisk, Narayan C. Das, Souleymane O. Diallo, Georg Ehlers, Andrey A. Podlesnyak, Nobuo Wada, Shinji Inagaki, and Paul E. Sokol (2013), *Phases of superfluid helium in smooth cylindrical pores*, Phys. Rev. B 88, 014521.
- [45] V. G. Rousseau (2014), *Superfluid density in continuous and discrete spaces : Avoiding misconceptions*, Phys. Rev. B 90,134503.
- [46] Wei Han, Gediminas Juzeliūnas, Wei Zhang, and Wu-Ming Liu (2015), *Supersolid with nontrivial topological spin textures in spin-orbit-coupled Bose gases*, Phys. Rev. A 91, 013607.
- [47] Wanzhou Zhang, Ruoxi Yin, and Yancheng Wang (2013), *Pair supersolid with atom-pair hopping on the state-dependent triangular lattice*, Phys. Rev. B 88, 174515.
- [48] Wanzhou Zhang, Yuan Yang, Lijuan Guo, Chengxiang Ding, and Tony C. Scott (2015), *Trimer superfluid and supersolid on two-dimensional optical lattices*, Phys. Rev. A 91, 033613.
- [49] Yuta Murakami, Philipp Werner, Naoto Tsuji, and Hideo Aoki (2014), *Supersolid Phase Accompanied by a Quantum Critical Point in the Intermediate Coupling Regime of the Holstein Model*, Phys. Rev. Lett. 113, 266404.
- [50] Y. Kuno, K. Suzuki, I. Ichinose (2014), *Superfluidity and solid orders in two-component Bose gas with dipolar interactions in an optical lattice*, Phys. Rev. A 90, 063620.
- [51] Y. Kuno, K. Suzuki, I. Ichinose (2014), *Superfluid, Supersolid and Checkerboard Solid in Two-Component Bosons in an Optical Lattice: Study by Means of Gross-Pitaevskii Theory and Monte-Carlo Simulations*, J.Phys.Soc.Jpn.83, 074501.
- [52] Yong qiang Li, Liang He, and Walter Hofstetter (2013), *Lattice-supersolid phase of strongly correlated bosons in an optical cavity*, Phys. Rev. A 87, 051604(R).
- [53] Zhihao Lan and Carlos Lobo (2014), *Optical lattices with large scattering length : Using few-body physics to simulate an δ - δ phonon system*, Phys. Rev. A 90, 033627 .