

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ



NGUYỄN THỊ PHƯƠNG THÚY

**NGHIÊN CỨU TÍNH CHẤT CHUYỂN PHA
SMECTIC - ISOTROPIC SỬ DỤNG TƯƠNG TÁC VI MÔ
TRONG CẤU TRÚC TINH THỂ LỎNG**

TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ LÝ THUYẾT VÀ VẬT LÝ TOÁN

Mã số: 9 44 01 03

Hà Nội – 2024

Công trình được hoàn thành tại: Học viện Khoa học và Công nghệ - Viện Hàn lâm KH&CN Việt Nam.

Người hướng dẫn khoa học:

1. Người hướng dẫn 1: PGS. TS. Ngô Văn Thanh, Trung tâm Thông tin - Tư liệu, Viện Hàn lâm KH&CN Việt Nam.
2. Người hướng dẫn 2: TS. Nguyễn Thị Lâm Hoài, Viện Vật lý, Viện Hàn lâm KH&CN Việt Nam.

Phản biện 1: GS. TS. Nguyễn Thế Toàn
Trưởng Đại học Khoa học tự nhiên, ĐHQG Hà Nội.

Phản biện 2: GS. TS. Phùng Văn Đồng
Trưởng ĐHQG Phenikaa.

Phản biện 3: PGS. TS. Tống Sỹ Tiến
Trưởng ĐHQG Phòng cháy Chữa cháy.

Luận án được bảo vệ trước Hội đồng đánh giá luận án tiến sĩ cấp Học viện, họp tại Học viện Khoa học và Công nghệ - Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam vào hồi 9 giờ 00', ngày 14 tháng 6 năm 2024.

Có thể tìm hiểu luận án tại:

1. Thư viện Học viện Khoa học và Công nghệ.
2. Thư viện Quốc gia Việt Nam.

MỞ ĐẦU

Lý do chọn đề tài

Tinh thể lỏng có mặt ở khắp nơi xung quanh cuộc sống của chúng ta. Hiện nay, màn hình tinh thể lỏng là ứng dụng phổ biến của tinh thể lỏng, trở thành một phương tiện hiển thị thông tin chiếm ưu thế phục vụ cho công việc và giải trí. Nhìn về tương lai, ứng dụng của tinh thể lỏng sẽ được đa dạng hóa và chế tạo là một trong những ngành công nghiệp hàng đầu và chủ chốt của thế kỉ 21. Dựa trên cấu trúc phân tử, cơ chế hình thành có thể phân loại tinh thể lỏng thành tinh thể lỏng thermotropic và tinh thể lỏng lyotropic. Dựa trên các quan sát cấu trúc quang học dưới kính hiển vi, các pha của tinh thể lỏng thermotropic đó là: pha nematic, pha smectic và pha cholesteric. Pha smectic được tìm thấy là một chất lỏng có độ nhớt cao, các phân tử trong pha smectic được sắp xếp có trật tự và định hướng chung theo từng lớp, gần như tách biệt nhau. Có nhiều loại cấu trúc pha khác nhau của pha smectic. Khi thay đổi nhiệt độ, pha smectic có thể xảy ra một số hiện tượng chuyển pha. Hiện tượng chuyển pha smectic - isotropic là chuyển pha từ pha tinh thể lỏng sang pha lỏng. Nghiên cứu thực nghiệm về hiện tượng chuyển pha smectic - isotropic đã được thực hiện trên nhiều hệ khác nhau.

Kết quả thực nghiệm về chuyển pha smectic - isotropic có dấu ấn quan trọng với cộng đồng khoa học được T. Stoebe và các cộng sự công bố trên tạp chí Physical Review Letters vào năm 1994. Kết quả nghiên cứu của Stoebe đã phát hiện ra hiện tượng tan chảy độ dao của các màng smectic. Ban đầu một nhóm các lớp tan chảy hay nói cách khác các phân tử ở các lớp đó mất trật tự vị trí và trật tự định hướng, sau đó từng lớp, từng lớp tiếp theo tan chảy và phá vỡ kết cấu theo lớp của màng smectic đó. Số lớp tan chảy tỉ lệ với nhiệt độ chuyển pha theo quy luật hàm số mũ.

Để giải thích hiện tượng tan chảy cấu trúc màng của pha smectic cũng như cơ chế của hiện tượng đó, các nghiên cứu lý thuyết dựa trên lý thuyết chuyển pha Landau-de Gennes. Ý tưởng chính của lý thuyết Landau-de Gennes là tại lân cận điểm chuyển pha tham số trật tự của hệ sẽ thay đổi. Tuy nhiên, tham số trật tự của pha smectic được định nghĩa rất khác nhau trong các nghiên cứu. Ngoài ra, các nghiên cứu

lý thuyết cũng tập trung vào kiểm chứng mối quan hệ giữa số lớp và nhiệt độ chuyển pha.

Về mô phỏng, vào năm 2020, GS. Hung T. Diep đã đề xuất mô hình Potts linh động 6 trạng thái để mô hình hóa các cấu trúc pha smectic. Nhóm nghiên cứu đã sử dụng phương pháp mô phỏng Monte Carlo với thuật toán Metropolis để khảo sát các hiện tượng chuyển pha smectic - isotropic. Nghiên cứu đã thiết lập thành công trật tự của pha smectic bằng cách làm lạnh hệ từ pha isotropic. Tuy nhiên, quá trình chuyển pha smectic - isotropic tại lân cận nhiệt độ chuyển pha chưa được mô tả thực sự rõ ràng.

Nghiên cứu về chuyển pha smectic - isotropic vẫn còn một số mặt hạn chế. Thứ nhất, hạn chế về mô hình lý thuyết cho pha smectic. Thứ hai, là hạn chế về kết quả nghiên cứu. Chưa thực sự có nghiên cứu mô phỏng nào mô tả quá trình tan chảy theo lớp quan sát được trong thực nghiệm, chưa được mô tả trong bất kì nghiên cứu mô phỏng nào.

Đó chính là động lực thúc đẩy chúng tôi tiến hành nghiên cứu về pha và hiện tượng chuyển pha tinh thể lỏng với tiêu đề: **Nghiên cứu tính chất chuyển pha smectic - isotropic sử dụng tương tác vi mô trong cấu trúc tinh thể lỏng.**

Mục tiêu nghiên cứu của luận án

- Phát triển các mô hình lý thuyết mô tả tương tác vi mô giữa các phân tử trong pha smectic nhằm mô phỏng quá trình chuyển pha của tinh thể lỏng.
- Nghiên cứu sự chuyển pha smectic sang pha đẳng hướng và khảo sát các đặc trưng chuyển pha.
- Cải tiến tối ưu hóa thuật toán mô phỏng Monte Carlo phù hợp với tinh thể lỏng.

Nội dung nghiên cứu của luận án

- Nghiên cứu về hiện tượng chuyển pha smectic của tinh thể lỏng sử dụng mô hình Potts.
- Nghiên cứu về hiện tượng chuyển pha smectic của tinh thể lỏng sử dụng mô hình Potts mở rộng có đóng góp của thế năng Lennard-Jones.

Chương 1

TỔNG QUAN VỀ TINH THỂ LỎNG

1.1 Giới thiệu về tinh thể lỏng

Tinh thể lỏng là trạng thái trung gian giữa trạng thái lỏng và trạng thái rắn. Hiện nay, vật liệu tinh thể lỏng đã được ứng dụng rộng rãi trong các hoạt động khoa học và công nghệ.

1.2 Phân loại tinh thể lỏng

a) Tinh thể lỏng thermotropic

Tinh thể lỏng thermotropic bao gồm các pha cấu trúc như: nematic, smectic và cholesteric. Pha nematic gồm các phân tử được sắp xếp ở vị trí ngẫu nhiên trong không gian. Pha smectic gồm các phân tử được sắp xếp có định hướng theo từng lớp, gần như tách biệt nhau. Pha cholesteric bao gồm các phân tử bất đối xứng tạo các cấu trúc xoắn.

b) Tinh thể lỏng lyotropic

Tinh thể lỏng lyotropic gồm các phân tử phân tử amphiphilic có một đầu ưa nước và một đầu kỵ nước. Khi hòa tan các phân tử amphiphilic trong dung môi phân cực, tạo thành một số pha như: pha lamellar, pha hexagonal, pha cubic.

1.3 Ứng dụng của tinh thể lỏng

Tinh thể lỏng có thể thay đổi tính phân cực của ánh sáng được ứng dụng để chế tạo màn hình tinh thể lỏng, các thiết bị điều khiển quang học. Bên cạnh đó, nhiệt kế tinh thể lỏng là một ứng dụng khác, dựa trên khả năng nhạy cảm với nhiệt độ của phân tử tinh thể lỏng.

1.4 Tình hình nghiên cứu chuyển pha tinh thể lỏng

Vật liệu tinh thể lỏng cũng có nhiều cấu trúc pha khác nhau, các đặc trưng và ứng dụng của các hiện tượng chuyển pha rất đa dạng. Phương pháp phổ biến để nhận biết cấu trúc pha của tinh thể lỏng là phương pháp sử dụng kính hiển vi phân cực quang học, phương pháp máy quét nhiệt vi sai và phương pháp tán xạ tia X góc nhỏ.

Phương pháp tổng quát để nghiên cứu các hiện tượng chuyển pha tinh thể lỏng là lý thuyết chuyển pha Landau-de Gennes, phương pháp năng lượng tự do Frank và lý thuyết thống kê phân tử.

Mô hình phân tử mô phỏng hệ tinh thể lỏng bao gồm một số mô hình như: mô hình Lebwohl-Lasher, mô hình Gay-Berne,...

Trong phần tiếp theo, chúng tôi tập trung thảo luận về nghiên cứu chuyển pha của pha smectic. Kết quả thực nghiệm về chuyển pha smectic - isotropic có dấu ấn quan trọng phải kể đến công bố của T. Stoebe và các cộng sự được trên tạp chí Physical Review Letters vào năm 1994. Kết quả của nghiên cứu đã mô tả rất chi tiết hiện tượng chuyển pha smectic - isotropic: Ban đầu một nhóm các lớp tan chảy hay nói cách khác các phân tử ở các lớp đó mất trật tự vị trí, sau đó từng lớp, từng lớp một mất trật tự vị trí phá vỡ kết cấu theo lớp của pha smectic và chuyển sang pha isotropic. Để xác định cơ chế của sự tan chảy theo lớp của pha smectic, các nhà nghiên cứu đã tiến hành đồng thời nghiên cứu lý thuyết và nghiên cứu thực nghiệm. Tuy nhiên, cơ chế xảy ra của hiện tượng tan chảy theo lớp vẫn chưa thực sự rõ ràng. Vào năm 2020, GS H. T. Diep và các cộng sự đã công bố nghiên cứu mô tả quá trình động học của sự chuyển pha smectic - isotropic bằng phương pháp mô phỏng. Tuy nhiên kết quả khảo sát chưa mô tả được hiện tượng tan chảy theo lớp của pha smectic.

1.5 Kết luận chương 1

Mở đầu chương này, chúng tôi đã giới thiệu về lịch sử phát hiện ra một trạng thái mới của vật chất đó là trạng thái tinh thể lỏng. Tinh thể lỏng bao gồm các phân tử hữu cơ được phân loại thành tinh thể lỏng thermotropic và tinh thể lỏng lyotropic. Tính dị hướng điện môi và hiện tượng lưỡng chiết là nguyên lý cơ bản cho nhiều ứng dụng của tinh thể lỏng. Chúng ta có thể thấy rằng, hiện tại chưa có sự đồng thuận về mặt lý thuyết của cơ chế xảy ra sự tan chảy theo lớp của chuyển pha smectic - isotropic. Bên cạnh đó, chưa thực sự có một mô hình lý thuyết nào mô tả đầy đủ và chính xác các đặc trưng của hiện tượng chuyển pha smectic - isotropic. Chính vì vậy, để giải quyết các vấn đề nghiên cứu trên, chúng tôi tiến hành nghiên cứu này với mục tiêu chính là thiết lập mô hình vật lý lý thuyết để nghiên cứu sự chuyển pha smectic - isotropic của tinh thể lỏng

Chương 2

MÔ HÌNH VÀ PHƯƠNG PHÁP MÔ PHỎNG

2.1 Các mô hình spin

Một mô hình spin tổng quát bao gồm: Cấu trúc mạng, tập hợp các các trạng thái của spin và định nghĩa về tổng năng lượng của mô hình spin.

Mô hình Ising gồm spin \mathbf{S}_i nằm tại nút mạng i , trong đó mỗi spin có thể nhận hai giá trị $\sigma_i = \pm 1$. Hamiltonian cho mô hình spin Ising là:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.1)$$

kí hiệu J_{ij} là thông số tương tác trao đổi, chỉ số lấy tổng i, j được lấy cho các spin lân cận trong mạng. Mô hình Ising mô tả rất tốt pha trật tự ở nhiệt độ thấp, sự xuất hiện pha mất trật tự ở nhiệt độ cao và quá trình chuyển pha từ pha trật tự sang pha mất trật tự.

Mô hình spin XY là một trong nhiều mô hình đơn giản trong cơ học thống kê hay còn được gọi là mô hình spin mặt phẳng. Hamiltonian của mô hình spin XY là:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y), \quad (2.2)$$

trong đó J_{ij} là hằng số tương tác trao đổi và tổng lấy theo các spin lân cận trong mạng tinh thể. Mô hình spin XY cổ điển đóng vai trò quan trọng khi nghiên cứu các hệ trong không gian hai chiều như tinh thể lỏng, màng mỏng của helium, màng của chất siêu dẫn.

Mô hình Heisenberg gồm tập hợp các vector spin trong không gian ba chiều với hình chiếu $\mathbf{S}_i = (S_i^x, S_i^y, S_i^z)$. Mô hình Heisenberg được định nghĩa bởi Hamiltonian:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j) = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z), \quad (2.3)$$

ở đây J_{ij} là năng lượng của tương tác trao đổi, i, j là các cặp spin lân cận gần nhất. Mô hình cổ điển Heisenberg là mô hình để nghiên cứu vật liệu từ là hợp kim của kim loại đất hiếm và kim loại chuyển tiếp.

Mô hình Potts mô hình với mỗi spin có q trạng thái ($q = 2, 3, 4, \dots$) các spin trong mô hình Potts tương tác với nhau thông qua Hamiltonian:

$$H = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j, \quad (2.4)$$

trong đó i, j là chỉ số của các nút mạng lân cận, J_{ij} là hằng số tương tác trao đổi. Trọng tâm chính của các mô hình Potts là tìm ra điểm tới hạn và quan sát hiện tượng xảy ra trong quá trình chuyển pha giữa các trạng thái trật tự - mất trật tự.

2.2 Mô hình Potts linh động

Mô hình Potts linh động là mô hình Potts trong đó các spin chưa lấp đầy hoàn toàn các vị trí nút mạng. Với số vị trí nút mạng là N_L , thì ta có số spin N_s thỏa mãn $N_L < N_s$ để đảm bảo tính linh động của các spin trong toàn bộ tinh thể. Biểu thức Hamiltonian của mô hình Potts linh động được cho bởi:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i, j \rangle} J_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (2.5)$$

trong đó $\langle i, j \rangle$ là những cặp phân tử lân cận, $\sigma_i = 1, 2, \dots, q$ là các trạng thái của phân tử, J_{ij} là biểu diễn tương tác trao đổi. Hàm delta Kronecker cho bởi:

$$\delta_{\sigma_i, \sigma_j} = \begin{cases} 1, & \sigma_i = \sigma_j, \\ 0, & \sigma_i \neq \sigma_j. \end{cases} \quad (2.6)$$

Mô hình Potts linh động đã được sử dụng để nghiên cứu chuyển pha của tinh thể lỏng bằng phương pháp mô phỏng Monte Carlo, trong đó khả năng di chuyển của các phân tử của mô hình Potts là đặc trưng cho sự linh động của các phân tử tinh thể lỏng. Sự linh động của các phân tử được thể hiện trong thuật toán mô phỏng, tức là trong quá trình mô phỏng các phân tử có thể di chuyển sang các vị trí trống lân cận.

2.3 Phương pháp mô phỏng Monte Carlo

2.3.1 Giới thiệu

Phương pháp Monte Carlo là phương pháp lấy mẫu thống kê thông qua các bộ số ngẫu nhiên thiết lập trên máy tính.

Ở trạng thái cân bằng nhiệt, tại nhiệt độ T , xác suất tìm thấy hệ ở trạng thái μ có năng lượng E_μ tuân theo phân bố Boltzmann:

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-E_\mu/k_B T}, \quad (2.7)$$

trong đó k_B là hằng số Boltzmann. Z là hàm tổng thống kê cho bởi:

$$Z = \sum_{\mu} e^{-E_\mu/k_B T}, \quad (2.8)$$

Thông thường, trung bình thống kê của các đại lượng vật lý được xác định theo công thức:

$$\langle A \rangle = \sum A_\mu p_\mu, \quad (2.9)$$

trong đó A_μ là giá trị xác định được ở trạng thái μ .

Khó khăn lớn nhất trong cơ học thống kê là nhằm xác định được hàm tổng thống kê của hệ. Một trong những phương pháp nghiên cứu để giải quyết vấn đề trên chính là phương pháp mô phỏng Monte Carlo. Ý tưởng của phương pháp mô phỏng Monte Carlo là thay thế tất cả các trạng thái của hệ bằng một tập hợp con các trạng thái $\{\mu_1, \mu_2, \mu_3, \dots, \mu_M\}$ để xác định trung bình thống kê.

Chúng ta xem xét các tập hợp trạng thái có đóng góp lớn vào trạng thái cân bằng nhiệt, hay nói cách khác ta lựa chọn các trạng thái tuân theo phân bố Boltzmann (phép thử quan trọng). Khi đó trung bình thống kê được xác định như sau:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{M} \sum_{i=1}^M A_{\mu_i}. \quad (2.10)$$

2.3.2 Thuật toán Metropolis

Ý tưởng của thuật toán Metropolis như sau: Để tính toán giá trị trung bình, chúng ta tạo ra chuỗi Markov liên tục của các trạng thái, trạng thái mới là được tạo ra từ trạng thái cũ với xác suất chuyển trạng thái cân bằng $P(\mu \rightarrow \nu)$, trong đó mỗi trạng thái xảy ra với một xác suất đã cho bởi phân bố Boltzmann cân bằng. Chuỗi Markov được tạo ra phải ergodicity và tuân theo điều kiện cân bằng chi tiết:

$$p_\mu P(\mu \rightarrow \nu) = p_\nu P(\nu \rightarrow \mu). \quad (2.11)$$

Ta tách xác suất chuyển trạng thái cân bằng bao gồm xác suất chuyển $g(\nu \rightarrow \mu)$ và xác suất chấp nhận $A(\nu \rightarrow \mu)$:

$$P(\nu \rightarrow \mu) = g(\nu \rightarrow \mu)A(\nu \rightarrow \mu). \quad (2.12)$$

kết hợp phương trình 2.7 và 2.11 ta được:

$$\frac{A(\mu \rightarrow \nu)}{A(\nu \rightarrow \mu)} = \frac{g(\nu \rightarrow \mu)}{g(\mu \rightarrow \nu)} e^{-\Delta E/k_B T}, \quad (2.13)$$

trong đó $\Delta E = E_\nu - E_\mu$.

Đối với thuật toán Metropolis, xác suất chấp nhận trạng thái mới được lựa chọn như sau:

$$A(\mu \rightarrow \nu) = \min \left(1, e^{-\Delta E/k_B T} \right). \quad (2.14)$$

2.3.3 Kỹ thuật biểu đồ

a) Kỹ thuật biểu đồ đơn

Để tránh những khó khăn khi nghiên cứu chuyển pha tại gần điểm tới hạn, Ferrenberg và Swendsen đã đề xuất phương pháp thiết lập biểu đồ $H(E)$ gần nhất với nhiệt độ T_c . Xác suất $P(T, E)$ cho bởi:

$$P(T, E) = \frac{H(E)e^{-(\beta-\beta_0)E}}{\sum_E H(E)e^{-(\beta-\beta_0)E}}, \quad (2.15)$$

Sử dụng xác suất này ta có thể xác định được các trung bình nhiệt động theo công thức:

$$\langle A \rangle = \sum_E AP(T, E). \quad (2.16)$$

b) Kỹ thuật biểu đồ kép

Kỹ thuật biểu đồ kép có thể tạo ra các biểu đồ $H(T_i, E)$ tại các nhiệt độ T_i . Ta sẽ tính được trung bình nhiệt động của các đại lượng theo công thức

$$\langle A(T) \rangle = \frac{\sum_E A(E)\rho(E)e^{-E/k_B T}}{Z(T)}. \quad (2.17)$$

Hàm mật độ trạng thái $\rho(E)$ cho bởi:

$$\rho(E) = \frac{\sum_{i=1}^n H(E, T_i)}{\sum_{i=1}^n N_i Z(T_i)^{-1} e^{-E/(k_B T_i)}}, \quad (2.18)$$

trong đó $Z(T_i)$ là hàm tổng thống kê tại nhiệt độ T_i :

$$Z(T_i) = \sum_E \rho(E) e^{-E/k_B T_i}. \quad (2.19)$$

2.3.4 Kỹ thuật Wang-Landau

a) Giới thiệu

Kỹ thuật Wang-Landau được đề xuất bởi Wang và Landau cho các mô hình thống kê cổ điển, cho phép chúng ta giải quyết những khó khăn khi nghiên cứu các hệ có chuyển pha loại 1 yếu và quá trình mô phỏng không phụ thuộc vào việc chia các điểm nhiệt độ.

b) Giải thuật Wang-Landau

Trọng tâm của kỹ thuật Wang-Landau là xác định mật độ trạng thái $g(E)$. Với kỹ thuật Wang-Landau, xác suất hệ tồn tại ở trạng thái μ có năng lượng E cho bởi:

$$p_\mu \propto \frac{1}{g(E_\mu)}. \quad (2.20)$$

Khi đó, hàm phân bố theo năng lượng E là:

$$P(E) \propto g(E) e^{-E/k_B T}. \quad (2.21)$$

Kỹ thuật Wang-Landau thực hiện các bước ngẫu nhiên trong không gian năng lượng, nếu E_i và E_j là năng lượng của trạng thái ban đầu và trạng thái sau. Nếu E_i và E_j là năng lượng của trạng thái ban đầu và trạng thái sau. Xác suất chuyển thỏa mãn điều kiện:

$$p(E_i \rightarrow E_j) = \min \left[1, \frac{g(E_i)}{g(E_j)} \right]. \quad (2.22)$$

Điều kiện để biểu đồ phẳng là:

$$H(E) \geq x\% \cdot \langle H(E) \rangle. \quad (2.23)$$

Trung bình thống kê của các đại lượng A tại một nhiệt độ cho trước T xác định theo công thức:

$$\langle A(T) \rangle = \frac{\sum_E A g(E) e^{-E/k_B T}}{\sum_E g(E) e^{-E/k_B T}}, \quad (2.24)$$

Với hàm tổng thống kê Z cho bởi:

$$Z = \sum_E g(E) e^{-E/k_B T}. \quad (2.25)$$

Hàm phân bố theo năng lượng E tại một nhiệt độ T được xác định bằng hệ thức:

$$P(E, T) = \frac{1}{Z} g(E) e^{-E/k_B T}. \quad (2.26)$$

Các nghiên cứu đã chỉ ra rằng hàm phân bố theo năng lượng sẽ được biểu diễn dưới dạng hàm phân bố Gauss. Với chuyển pha loại 1, hàm phân bố tại nhiệt độ chuyển pha có dạng đỉnh kép tương ứng với sự đồng tồn tại hai pha. Với chuyển pha loại 2, hàm phân bố có dạng thông thường.

2.4 Kết luận chương 2

Trong chương này, chúng tôi đã giới thiệu khái quát về các mô hình spin thường được sử dụng trong cơ học thống kê, cũng như trình bày chi tiết về mô hình Potts linh động chúng tôi sẽ sử dụng trong nghiên cứu. Sau đó, chúng tôi đã trình bày về thuật toán Metropolis. Trong thuật toán Metropolis, trung bình nhiệt động của các đại lượng được ngoại suy từ giá trị của đại lượng đó tại từng điểm nhiệt độ rời rạc. Kết quả thu được khá chính xác, ngoại trừ tại gần nhiệt độ chuyển pha, do giá trị một số đại lượng bị phân kì (trong chuyển pha loại 1). Bên cạnh đó, khi nhiệt độ của hệ tăng tới gần nhiệt độ chuyển pha, thời gian tương quan hay còn gọi là thời gian hệ đạt tới trạng thái cân bằng tăng dần, dẫn đến tốc độ hội tụ của hệ chậm. Trong trường hợp phải xác định chuyển pha loại 1 hay loại 2, kỹ thuật Wang-Landau sẽ được áp dụng để giải quyết khó khăn khi nghiên cứu hệ gần nhiệt độ chuyển pha.

Chương 3

NGHIÊN CỨU CHUYỂN PHA SMECTIC - ISOTROPIC SỬ DỤNG MÔ HÌNH POTTS

3.1 Giới thiệu chung

Chuyển pha smectic - isotropic thực chất là quá trình chuyển từ từ trạng thái tinh thể lỏng sang trạng thái lỏng thông thường. Các nghiên cứu về chuyển pha smectic - isotropic vẫn còn một số mặt hạn chế về mô hình nghiên cứu cho pha smectic và kết quả mô phỏng.

Trong luận án này, chúng tôi cũng sẽ sử dụng mô hình Potts 6 trạng thái được đề xuất bởi GS. Hung T. Diep để thiết lập pha smectic. Đồng thời, chúng tôi đã cải tiến thuật toán Metropolis và sử dụng kỹ thuật Wang-Landau biểu đồ phẳng để khảo sát chi tiết quá trình chuyển pha smectic - đẳng hướng.

3.2 Mô hình nghiên cứu

Mô hình nghiên cứu gồm $N_s = L^3$ phân tử nằm trong một mạng hình hộp với $N_L = L_x \times L_y \times L_z$ nút mạng. Hamiltonian của hệ được định nghĩa là:

$$\mathcal{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (3.1)$$

trong đó $\langle i, j \rangle$ là những cặp phân tử lân cận, σ_i là các trạng thái của phân tử, J_{ij} là năng lượng tương tác trao đổi.

$$J_{ij} = \begin{cases} J_{\parallel} = J > 0, & \text{tương tác hút trong cùng mặt phẳng,} \\ J_{\perp} = -aJ < 0, & \text{tương tác đẩy khác mặt phẳng.} \end{cases}$$

3.3 Các đại lượng vật lý

Năng lượng trung bình

$$\langle U \rangle = \frac{1}{N_2} \sum_{t=N_1+1}^{N_1+N_2} U(t), \quad (3.2)$$

trong đó, $\langle U \rangle$ là trung bình của năng lượng tại một nhiệt độ T , N_1 , N_2 lần lượt là số bước Monte Carlo để hệ đạt trạng thái cân bằng và xác định trung bình nhiệt động. $U(t)$ là năng lượng của trạng thái vi mô.

Nhiệt dung riêng

$$C_v = \frac{\langle U^2 \rangle - \langle U \rangle^2}{k_B T^2}. \quad (3.3)$$

Tham số trật tự

$$\langle M \rangle = \frac{1}{N_2} \sum_{t=N_1+1}^{N_1+N_2} M(t), \quad (3.4)$$

kí hiệu $M(t)$ là tham số trật tự của các trạng thái vi mô. Tham số trật tự của lớp m , có giá trị M_m được định nghĩa cho bởi:

$$M_m = \frac{1}{q-1} \left[\frac{q}{N_m} \max_{j \in [1, q]} \left(\sum_{i=1}^{N_m} \delta_{j, \sigma_i} \right) - 1 \right], \quad (3.5)$$

ở đây, N_m là số phân tử nằm trên lớp m .

Sự thăng giáng của tham số trật tự

$$\chi = \frac{\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2}{k_B T} \quad (3.6)$$

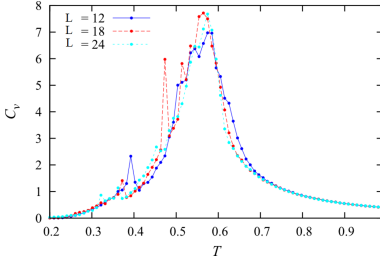
Hệ số khuếch tán

$$\langle D \rangle = \frac{1}{N_2} \sum_{t=N_1+1}^{N_1+N_2} D(t), \quad (3.7)$$

trong đó $D(t)$ là hệ số khuếch tán của các trạng thái vi mô.

3.4 Khảo sát hiệu ứng kích thước

Hiệu ứng kích thước có thể ảnh hưởng đến các kết quả mô phỏng. Phần này, chúng tôi khảo sát hệ với kích thước thay đổi lần lượt là $N_s = 12^3, 18^3, 24^3$. Kết quả mô phỏng của năng lượng khi kích thước thay đổi không có sự sai khác đáng kể. Hơn nữa khi khảo sát nhiệt dung riêng $C_v(T)$ trên Hình 3.6 cho thấy, đồ thị vẫn xuất hiện nhiều điểm chuyển pha, cho thấy ta vẫn có thể quan sát hiện tượng tan chảy theo lớp trong cả ba kích thước khảo sát. Chúng tôi sẽ sử dụng kích thước mô phỏng là $N_s = 12^3$ cho các phần khảo sát tiếp theo.

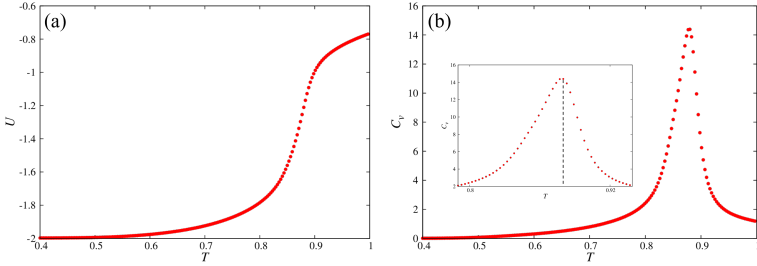


Hình 3.6: $c = 50\%$. Đồ thị biểu diễn nhiệt dung riêng C_v theo nhiệt độ T .

3.5 Khảo sát chuyển pha theo nồng độ

Chúng tôi sẽ mô phỏng hệ với các nồng độ ($c = N_s/N_L \times 100\%$) khác nhau. Hằng số tương tác trao đổi là $J_{\parallel} = 1.0$ và $J_{\perp} = -0.5$.

a) Trường hợp nồng độ phân tử $c = 100\%$



Hình 3.11: $c = 100\%$: (a) Đồ thị biểu diễn năng lượng U (b) Đồ thị biểu diễn nhiệt dung C_v theo nhiệt độ T

Kết quả thu được hệ có duy nhất một chuyển pha bậc 2 tại nhiệt độ $T = 0.8790$ (Hình 3.11). Điều này được giải thích là mô hình với $c = 100\%$ là tương đương với mô hình spin định xứ do các vị trí nút mạng đã được lấp đầy. Các phân tử chỉ có thể thay đổi trật tự định hướng.

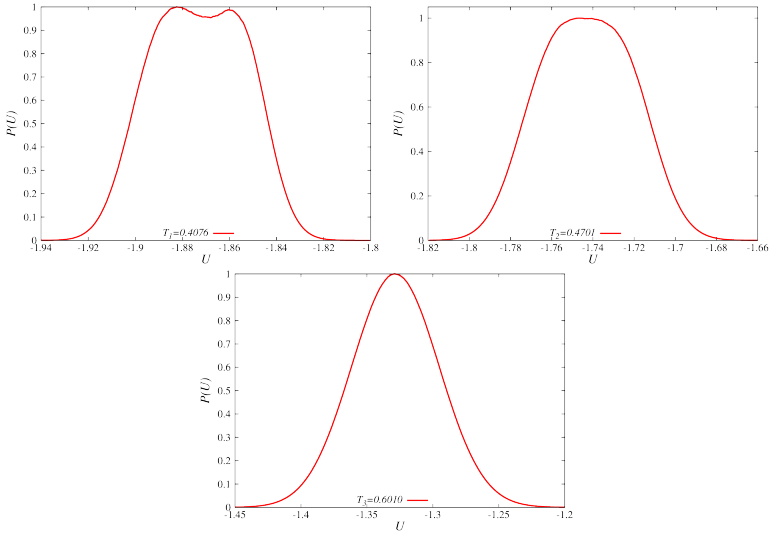
b) Trường hợp nồng độ phân tử $c = 80\%$

Ta xác định được hai nhiệt độ chuyển pha lần lượt là tại $T_1 = 0.4684$ và $T_2 = 0.8320$. Mô hình đã xuất hiện chuyển pha theo lớp. Tuy nhiên, các vị trí trống có thể là quá nhỏ. Do vậy, chỉ một số ít phân tử di chuyển lên các vị trí trống và các phân tử trong lớp lõi vẫn giữ nguyên vị trí. Chính vì vậy ta chỉ quan sát được hiện tượng chuyển pha loại 2 tại cả hai nhiệt độ chuyển pha.

c) Trường hợp nồng độ phân tử $c = 60\%$

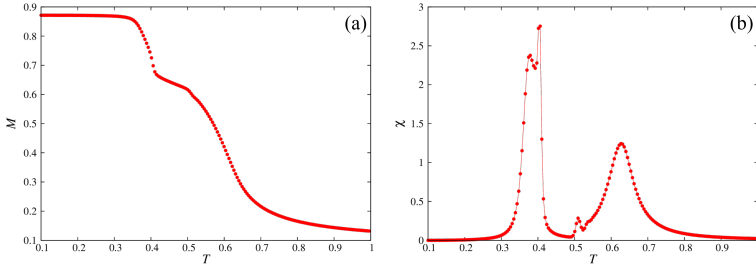
Trường hợp này, nồng độ phân tử đã giảm, ta dự đoán sẽ quan sát được sự chuyển pha loại 1 của pha smectic khi các lớp tan chảy. Đồ thị năng lượng biến đổi gián đoạn tại 3 điểm nhiệt độ. Ở hai nhiệt độ T_1 và T_2 , hàm phân bố năng lượng có đỉnh kép, hệ có chuyển pha loại 1 trên Hình 3.21a, 3.21b. Nhiệt độ chuyển pha cuối cùng hệ có chuyển pha loại 2 minh họa trên Hình 3.21c.

Chuyển pha loại 1 xuất hiện thể hiện có sự tan chảy các lớp bề mặt và sự chuyển pha loại 2 cho thấy sự mất trật tự định hướng của một số lớp phân tử trước khi hệ tan chảy hoàn toàn.



Hình 3.21: $c = 60\%$: Đồ thị hàm phân bố theo năng lượng U tại nhiệt độ (a) $T_1 = 0.4076$, (b) $T_2 = 0.4701$, (c) $T_3 = 0.6010$.

d) Trường hợp nồng độ phân tử $c = 50\%$

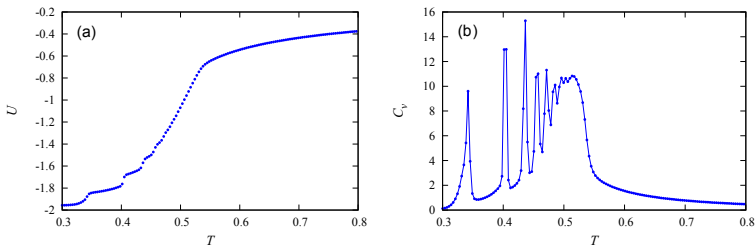


Hình 3.25: $c = 50\%$: (a) Đồ thị biểu diễn tham số trật tự M , (b) Đồ thị biểu diễn sự thăng giáng của tham số trật tự χ .

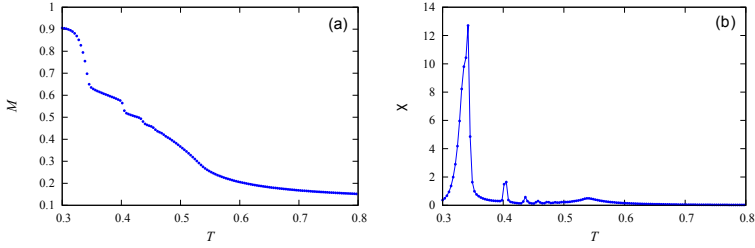
Trong phần này, chúng tôi dự đoán có thể xác định được số lớp tan chảy rõ ràng hơn. Từ đồ thị nhiệt dung riêng C_v ta xác định được 3 nhiệt độ chuyển pha. Kết quả thu được, ở T_1 hệ chuyển pha bậc nhất. Tại nhiệt độ T_3 , hệ có chuyển pha bậc 2. Đáng chú ý, tại $T_1 = 0.40503$, tham số trật tự M trên Hình 3.25a giảm xuống 0.66, tương ứng với việc tan chảy của 4 lớp phân tử.

e) Trường hợp nồng độ phân tử $c = 30\%$

Cuối cùng, chúng tôi dự đoán sẽ quan sát được hiện tượng chuyển pha theo lớp rõ ràng nhất tại nồng độ phân tử rất loãng này.



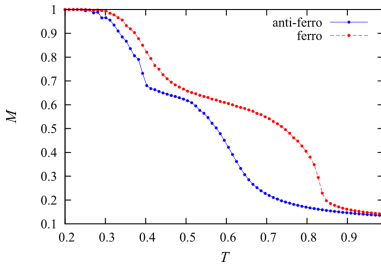
Hình 3.29: $c = 30\%$. (a) Đồ thị biểu diễn năng lượng U , (b) Đồ thị biểu diễn nhiệt dung C_v .



Hình 3.30: $c = 30\%$: (a) Đồ thị biểu diễn tham số trật tự M , (b) Đồ thị biểu diễn sự thăng giáng của tham số trật tự χ .

Thật vậy, chúng ta xác định được hệ có 9 điểm nhiệt độ chuyển pha trên Hình 3.29b. Ở đây, T_1 là nhiệt độ hệ bắt đầu xảy ra quá trình chuyển pha và nhiệt độ T_9 là nhiệt độ hệ đã chuyển pha hoàn toàn. Các hàm phân bố năng lượng $P(U)$ tại các điểm nhiệt độ tan chảy cho thấy tại 8 điểm nhiệt độ đầu tiên là chuyển pha loại 1. Điểm chuyển pha cuối cùng là chuyển pha loại 2 phù hợp với phần giải thích tại $c = 50\%$. Quan sát Hình 3.30 tại nhiệt độ $T_1 = 0.34182$ cho thấy sự mất trật tự của 4 lớp phân tử. Chúng ta tiếp tục quan sát khi nhiệt độ tăng lên tới $T_2 = 0.40308$, cho thấy sự tan chảy của 2 lớp tiếp theo.

3.6 Sự ảnh hưởng của loại tương tác giữa các lớp



Hình 3.33: Đồ thị biểu diễn tham số trật tự M theo nhiệt độ T trong hai trường hợp: tương tác giữa hai phân tử ở hai mặt phẳng lân cận là tương tác hút (ferro) và tương tác đẩy (anti-ferro).

Để xác định ảnh hưởng của tương tác giữa các phân tử ở hai mặt phẳng lân cận đến quá trình chuyển pha. Chúng tôi sẽ tiến hành mô phỏng hệ trong hai trường hợp sau: $J_{\perp} = -0.5$ (tương tác đẩy) và $J_{\perp} = +0.5$ (tương tác hút).

Chúng ta có thể quan sát tham số trật tự của hệ có tương tác hút là lớn hơn tham số trật tự của hệ có tương tác đẩy trên Hình 3.33. Điều này được giải thích là do trong trường hợp tương tác hút tương

tác giữa các phân tử lớn hơn, do vậy định hướng của các phân tử ít bị ảnh hưởng bởi thăng giáng nhiệt hơn.

3.7 Kết luận chương 3

Trong nghiên cứu này, kết quả thu được khi nồng độ của phân tử giảm thì nhiệt độ bắt đầu chuyển pha giảm và số lớp tan chảy tăng lên. Nói chung, hiện tượng tan chảy theo lớp của pha smectic trong nghiên cứu của chúng tôi cũng không bị ảnh hưởng bởi kích thước hệ và năng lượng tương tác giữa các phân tử.

Mở đầu phần nghiên cứu khảo sát chuyển pha smectic - isotropic bằng mô hình Potts linh động, chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của hiệu ứng kích thước. Kết quả chúng tôi chọn kích thước mô phỏng của hệ là $N_s = 12^3$ phân tử.

Tiếp theo, chúng tôi đã mô phỏng ảnh hưởng của nồng độ hay là ảnh hưởng của độ linh động của các phân tử đến hiện tượng chuyển pha của pha smectic. Kết quả thu được khi nồng độ của phân tử giảm: Nhiệt độ bắt đầu chuyển pha giảm. Số lớp tan chảy tăng lên. Cụ thể tại các nồng độ thấp (30 %, 50 % và 60 %) ta quan sát được các lớp tan chảy và hệ có chuyển pha loại 1. Tại nồng độ phân tử cao (80 - 100 %) chuyển pha smectic - isotropic là chuyển pha loại 2. Chuyển pha này được giải thích là do sự mất trật tự định hướng của các phân tử do trong mạng không có đủ vị trí trống cho sự linh động của các phân tử.

Bên cạnh đó, năng lượng tương tác giữa các phân tử nằm ở các lớp lân cận cũng được xem xét và hoàn toàn không ảnh hưởng đến các hiện tượng chuyển pha.

Chương 4

NGHIÊN CỨU CHUYỂN PHA SMECTIC - ISOTROPIC SỬ DỤNG MÔ HÌNH POTTS MỞ RỘNG

4.1 Mô hình mở rộng

Trong nghiên cứu này, để đặc trưng cho tính chất của tinh thể lỏng thực, chúng tôi mở rộng Hamiltonian bao gồm thêm thế năng Lennard-Jones. Mô hình trở thành mô hình nghiên cứu trong không gian ba chiều, do thêm thành phần là lực liên kết của các lớp phân tử. Hamiltonian của hệ như sau:

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} U(r_{ij}) - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \delta_{\sigma_i, \sigma_j}, \quad (4.1)$$

ở đây, biểu thức tường minh cho thế năng Lennard-Jones có dạng:

$$U(r_{ij}) = V_0 \left[\left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (4.2)$$

với V_0 là hằng số, $r_0 \simeq a_0$ là khoảng cách giữa các phân tử lân cận tại trạng thái cân bằng, $r_{ij} = \|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j\|$ là khoảng cách giữa các phân tử. Tổng thứ hai đã được mô tả chi tiết trong mô hình chuẩn.

Giá trị của $J_{\parallel} = 1.0$ và $J_{\perp} = -0.5$ sẽ được giữ nguyên. Chúng tôi sẽ mô phỏng hệ với các giá trị khác nhau của thế năng Lennard-Jones V_0 trong trường hợp nồng độ phân tử là $c = 30\%$ và $c = 50\%$, để xây dựng mô hình mô phỏng pha smectic tốt nhất.

4.2 Khảo sát trường hợp $V_0 = 1.0$

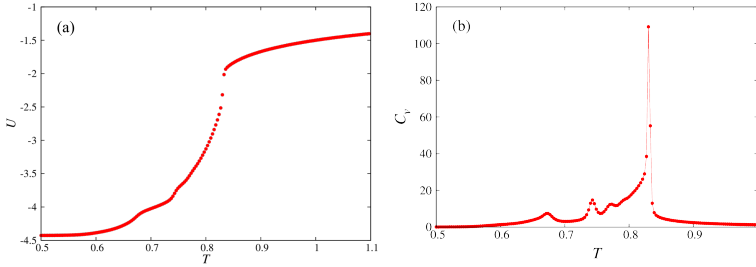
Kết quả thu được trong cả hai trường hợp, mô hình chỉ có chuyển pha loại 2. So sánh với kết quả trong trường hợp mô hình chuẩn, khi thêm vào thành phần thế năng Lennard-Jones, số chuyển pha trung gian giảm. Tuy nhiên với mô hình mở rộng trong trường hợp $V_0 = 1.0$ hệ không thể hiện được chuyển pha loại 1, do đó không thể hiện được sự chuyển pha theo lớp của pha smectic. Có thể nói rằng do đóng góp của lực Lennard-Jones lớn, lực này giữ các phân tử duy trì trật tự vị trí của chúng.

4.3 Khảo sát trường hợp $V_0 = 0.85$

a) Trường hợp nồng độ phân tử $c = 50\%$

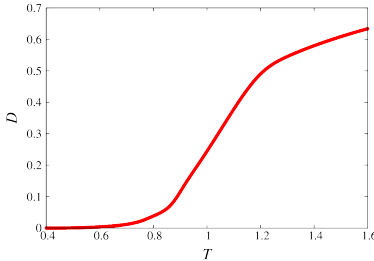
Kết quả thu được hệ chỉ xảy ra chuyển pha loại 2 thể hiện qua dạng hàm phân bố năng lượng đều không có dạng đỉnh kép.

b) Trường hợp nồng độ phân tử $c = 30\%$



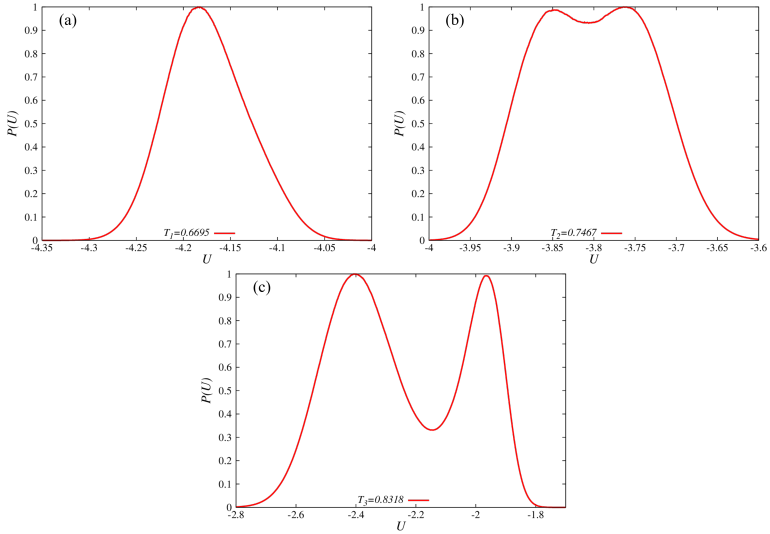
Hình 4.21: a) Đồ thị năng lượng U thay đổi theo nhiệt độ T , (b) Đồ thị nhiệt dung riêng C_v theo nhiệt độ T cho trường hợp nồng độ $c = 30\%$ với kích thước hệ $N_s = 12^3$, các hằng số tương tác $J_{\parallel} = 1.0$, $J_{\perp} = -0.5$, $V_0 = 0.85$.

Với nồng độ phân tử $c = 30\%$, ta xác định được ba chuyển pha như sau: tại nhiệt độ $T_1 = 0.6695$ hệ chuyển pha loại 2 và chuyển pha loại 1 tại $T_2 = 0.7466$ và $T_3 = 0.8318$ (Hình 4.21, Hình 4.23).



Hình 4.20: Đồ thị hệ số khuếch tán D theo nhiệt độ T cho trường hợp nồng độ $c = 30\%$ với kích thước hệ $N_s = 12^3$, các hằng số tương tác $J_{\parallel} = 1.0$, $J_{\perp} = -0.5$, $V_0 = 0.85$.

Trong trường hợp này, hệ có chuyển pha tan chảy theo lớp. Tại điểm chuyển pha T_1 trên Hình 4.20 các phân tử vẫn giữ nguyên trật tự vị trí và một số lớp phân tử bề mặt của pha smectic có sự thay đổi về trật tự định hướng. Tại T_2 một số lớp ngoài cùng bắt đầu tan chảy ra khi thể hiện sự mất trật tự cả về định hướng và vị trí. Tại nhiệt độ T_3 các phân tử ở các lớp còn lại mất hoàn toàn trật tự, hay nói cách khác tại nhiệt độ này pha smectic chuyển sang pha isotropic.



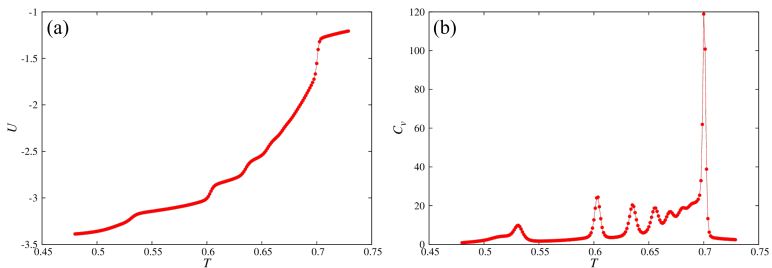
Hình 4.23: Hàm phân bố theo năng lượng U cho trường hợp nồng độ $c = 30\%$, các hằng số tương tác $J_{\parallel} = 1.0$, $J_{\perp} = -0.5$, $V_0 = 0.85$.

4.4 Khảo sát trường hợp $V_0 = 0.5$

a) Trường hợp nồng độ phân tử $c = 50\%$

Kết quả cho thấy hệ có ba nhiệt độ chuyển pha loại 2.

b) Trường hợp nồng độ phân tử $c = 30\%$



Hình 4.31: (a) Đồ thị biểu diễn năng lượng U , (b) Đồ thị biểu diễn nhiệt dung C_v cho trường hợp nồng độ $c = 30\%$, các hằng số tương tác $J_{\parallel} = 1.0$, $J_{\perp} = -0.5$, $V_0 = 0.5$.

Quan sát đồ thị $C_v(T)$ (Hình 4.31b) ta thu được 6 điểm chuyển pha. Hàm phân bố năng lượng tại toàn bộ các điểm nhiệt độ đều có dạng đỉnh kép là chuyển pha loại 1. Mô hình này không thể hiện chi tiết được quá trình chuyển pha smectic - đẳng hướng.

4.5 Kết luận chương 4

Trong nghiên cứu này, chúng tôi đã khảo sát sự ảnh hưởng của thế năng Lennard-Jones. Tóm lại, khi $V_0 = 0.85$, hệ tồn tại cả chuyển pha loại 1 và chuyển pha loại 2. Kết quả mô phỏng của chúng tôi đã trình bày chi tiết quá trình mất trật tự của các phân tử trong quá trình nhiệt độ của hệ tăng dần và dẫn tới chuyển pha.

Trong nghiên cứu này, pha smectic của tinh thể lỏng bao gồm các phân tử sắp xếp theo từng lớp, mỗi lớp các phân tử có cùng định hướng được mô phỏng bằng mô hình Potts mở rộng. Chúng tôi đã khảo sát sự ảnh hưởng của thế năng Lennard-Jones bằng cách lấy giá trị V_0 lân cận với giá trị tương tác hút của các phân tử trong cùng mặt phẳng ($J_{//} = 1.0$) trong một số nồng độ phân tử c khác nhau.

Tóm lại, khi $V_0 = 1.0$ chuyển pha smectic - isotropic là chuyển pha bậc 1 cho trường hợp nồng độ phân tử loãng $c = 30\%$ và là chuyển pha bậc 2 cho trường hợp $c = 50\%$.

Bên cạnh đó, khi $V_0 = 0.5$ chúng tôi thu được chuyển pha smectic - isotropic là chuyển pha bậc 2 cho toàn bộ các nồng độ phân tử.

Cuối cùng, trường hợp $V_0 = 0.85$, hệ tồn tại cả chuyển pha loại 1 và chuyển pha loại 2. Kết quả mô phỏng của chúng tôi đã trình bày chi tiết quá trình chuyển pha smectic - isotropic hay hành vi của các nguyên tử trong quá trình nhiệt độ của hệ tăng dần và dẫn tới chuyển pha. Cụ thể, khi nhiệt độ của hệ tăng lên đến khoảng $T_1 = 0.6695$, các phân tử ở lớp bề mặt bắt đầu mất trật tự định hướng và sau đó di chuyển lên những vị trí trống. Trong khi đó, các phân tử ở các lớp lõi bên trong cấu trúc tinh thể lỏng vẫn giữ nguyên trật tự định hướng và trạng thái tinh thể lỏng. Khi nhiệt độ của hệ đạt giá trị đủ lớn $T_3 = 0.8318$, trật tự định hướng và trật tự vị trí mất hoàn toàn, pha smectic chuyển sang pha isotropic. Bên cạnh đó, kết quả nghiên cứu đã giảm được số chuyển pha trung gian so với nghiên cứu trước (chỉ còn một chuyển pha tại $T_2 = 0.7467$). Từ các kết quả thu được, chúng ta cũng thấy được vai trò của thế năng Lennard-Jones, được xem như một tham số điều khiển, cho phép thay đổi số điểm chuyển pha.

KẾT LUẬN

Chuyển pha smectic - isotropic của tinh thể lỏng đã được khảo sát trong luận án này bằng phương pháp mô phỏng Monte Carlo. Cấu trúc pha smectic đã được thiết lập từ việc lựa chọn các tương tác vi mô thích hợp cho mô hình Potts linh động 6 trạng thái. Bằng việc cải tiến kỹ thuật mô phỏng so với nghiên cứu trước, kết quả mô phỏng đã đưa ra bức tranh tổng quát về chuyển pha smectic - isotropic, thể hiện được sự tan chảy theo lớp của pha smectic trong quá trình chuyển pha phù hợp với các kết quả thực nghiệm. Bên cạnh đó, ảnh hưởng của nồng độ phân tử, loại tương tác đến quá trình chuyển pha smectic - isotropic cũng đã được phân tích chi tiết.

Trong nghiên cứu sử dụng mô hình Potts, tương tác vi mô được biểu diễn trong Hamiltonian bao gồm tương tác trao đổi giữa các phân tử lân cận trong cùng mặt phẳng và các phân tử nằm trên hai mặt phẳng lân cận. Sử dụng phương pháp mô phỏng Monte Carlo với kỹ thuật Wang-Landau, chúng tôi đã nghiên cứu hiện tượng chuyển pha smectic - isotropic khi nồng độ phân tử thay đổi. Quan sát các đồ thị của các đại lượng nhiệt động và các hàm phân bố năng lượng tại các nhiệt độ chuyển pha, loại chuyển pha đã được xác định. Tại nồng độ phân tử cao (80 %, 100 %) chuyển pha smectic - isotropic là chuyển pha loại 2. Trong trường hợp nồng độ phân tử thấp thấp (30 %, 50 % và 60 %) ta quan sát được các lớp tan chảy và hệ có chuyển pha loại 1. Bên cạnh đó, năng lượng tương tác trao đổi giữa các phân tử nằm ở các lớp lân cận cũng được xem xét và hoàn toàn không ảnh hưởng đến sự tan chảy theo lớp của pha smectic trong quá trình chuyển sang pha isotropic.

Nghiên cứu chuyển pha smectic - isotropic tiếp theo, Hamiltonian của mô hình Potts được mở rộng bao gồm hai loại tương tác vi mô đó là tương tác trao đổi và tương tác Lennard-Jones giữa các phân tử lân cận gần nhất. Thành phần tương tác Lennard-Jones làm tăng liên kết giữa các phân tử của pha smectic, đặc biệt là liên kết giữa các mặt phẳng. Với việc khảo sát giá trị của hằng số Lennard-Jones, chúng tôi đã thu được với $V_0 = 0.85$ là tham số phù hợp cho mô hình nghiên cứu chuyển pha smectic, thể hiện được sự tan chảy theo lớp. Đồng thời, chi tiết về trật tự định hướng và trật tự vị trí của các phân tử cũng được biểu diễn trong các kết quả mô phỏng.

NHỮNG ĐÓNG GÓP MỚI CỦA LUẬN ÁN

1. Hiện tượng chuyển pha smectic đã được mô phỏng Monte Carlo bởi mô hình Potts linh động 6 trạng thái trong một công bố khoa học trước đây, tuy nhiên kết quả mô phỏng chưa đầy đủ khi chỉ xuất hiện một nhiệt độ chuyển pha. Chúng tôi đã cải tiến giải thuật Metropolis tại mỗi bước Monte Carlo. Đây là một kỹ thuật rất quan trọng nhằm tăng độ chính xác của thuật toán mô phỏng. Kết quả nghiên cứu chúng tôi thu được đã mô tả các tính chất đặc trưng của hiện tượng chuyển pha smectic - isotropic phù hợp với kết quả thực nghiệm như xuất hiện chuyển pha loại 1, thể hiện sự tan chảy theo lớp của pha smectic và đồng tồn tại pha smectic và pha isotropic trong quá trình chuyển pha.
2. Việc sử dụng kỹ thuật Monte Carlo nâng cao đã xác định một cách chính xác loại chuyển pha của chuyển pha smectic - isotropic. Quá trình chuyển pha trung gian rất phức tạp bao gồm cả chuyển pha loại 1 và chuyển pha loại 2.
3. Mô hình lý thuyết chưa được khảo sát cho chuyển pha smectic - isotropic trước đây đã được nghiên cứu. Đó là mô hình Potts linh động 6 trạng thái tương tác bằng tương tác trao đổi và tương tác Lennard-Jones. Nghiên cứu cũng cho phép mô phỏng quá trình chuyển pha smectic - isotropic chi tiết hơn thể hiện thông qua sự biến đổi của trật tự vị trí và trật tự định hướng tại từng nhiệt độ chuyển pha.

DANH MỤC CÁC CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ

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

1. Ngo, V. Thanh, **Phuong-Thuy Nguyen**, and Hung T. Diep. "Statistical Physics Approach to Liquid Crystals: Dynamics of Mobile Potts Model Leading to Smectic Phase, Phase Transition by Wang–Landau Method." *Entropy* 22.11 (2020): 1232.

2. **Phuong-Thuy Nguyen**, Van Anh T. Nguyen, V. Thanh Ngo. "Nghiên cứu chuyển pha smectic - đẳng hướng của tinh thể lỏng". *Tạp chí Khoa học và Công nghệ Việt Nam* 66.1 (2024): 01-07.