

Siêu rắn: trạng thái mới của vật chất

Đặng Đình Long*, Phạm Thanh Đại

Khoa Vật lý kỹ thuật và Công nghệ nano, Trường Đại học Công nghệ, Đại học Quốc gia Hà Nội

Ngày nhận bài 26.4.2015, ngày chuyển phản biện 28.4.2015, ngày nhận phản biện 1.6.2015, ngày chấp nhận đăng 28.6.2015

Siêu rắn là một khái niệm để chỉ một trạng thái dị thường của vật chất được đưa ra từ hơn nửa thế kỷ trước nhưng không có bằng chứng thực nghiệm cho thấy có sự tồn tại của trạng thái này. Mãi đến năm 2004, nhóm của Kim và Chan tại Đại học Penn State (Hoa Kỳ) mới công bố tìm thấy trạng thái này trong hệ Helium-4 nhưng cho đến nay sự tồn tại của trạng thái này vẫn còn là đề tài tranh luận sôi nổi với nhiều ý kiến trái chiều. Bài báo này đưa ra các khái niệm cơ bản có liên quan đến trạng thái siêu rắn, các đặc trưng của nó cùng các điều kiện quan trọng để có thể quan sát thực nghiệm giúp cho việc nhận thức về trạng thái dị thường này được sáng tỏ hơn. Ngoài ra, bài báo cũng chỉ ra một hệ vật lý khả thi có thể quan sát được pha siêu rắn, đó là mạng quang học. Cuối cùng, bài báo đưa ra các thảo luận về các trạng thái dị thường khác của vật chất kèm theo các kiến nghị.

Từ khóa: *helium-4, hệ tương quan mạnh, mạng quang học, pha dị thường, pha siêu chảy, pha siêu rắn.*

Chỉ số phân loại 1.3

SUPERSOLIDITY: A NEW STATE OF MATTER

Summary

Supersolidity is an exotic phase of matter which has been proposed for a half of century. Unfortunately, there is a lack of evidence of its existence. Until 2004, there was a claim of finding this state in an experiment with a solid He-4 system established by Kim and Chan at Penn State University, USA. However, there is still many controversial discussions around this claim, and the existence of supersolid phase is still a mystery in science. In this paper, the authors propose several fundamental concepts associated with the supersolidity as well as its characteristics. Moreover, the authors also show the important conditions to achieve this phase in experiments and shed the light to this mystic phase of matter. Finally, the authors discuss the potential experiments which can be a host for the supersolid phase and the other exotic phases

Keywords: *exotic phases, helium-4, optical lattice, strongly correlated system, superfluidity, supersolidity.*

Classification number 1.3

Trạng thái siêu rắn là gì?

Việc tìm kiếm các pha mới của vật chất là một nhu cầu tất yếu của cộng đồng nghiên cứu vật lý nói chung và vật lý chất rắn nói riêng. Những nghiên cứu cơ bản này một mặt có tác dụng thúc đẩy phát triển khoa học và công nghệ, mặt khác nó có tác dụng đưa nhận thức của chúng ta về thế giới vật chất lên một tầm cao mới.

Trước khi tìm hiểu về trạng thái siêu rắn, chúng ta cần hiểu các trạng thái quen thuộc hơn. Như chúng ta đã biết, trạng thái thường gặp của vật chất là rắn, lỏng, khí hoặc plasma nhưng cũng có rất nhiều trạng thái khác thường hơn của vật chất, như trạng thái siêu dẫn hay trạng thái siêu lỏng của một đồng vị Helium (He-4 - một loại hạt boson) tại nhiệt độ thấp, ví dụ: dưới 2,17 K. Tính chất siêu chảy của He-4 lần đầu tiên được biết đến vào năm 1937 nhờ phát hiện của nhà vật lý người Nga Pyotr Kapitza [1] đã mở ra một hướng nghiên cứu mới trong vật lý chất rắn nhằm tìm kiếm các pha dị thường của vật chất cho đến tận ngày nay. Sự hấp dẫn trong việc nghiên cứu các tính chất siêu chảy đến từ ý nghĩa của nó trong việc minh chứng cho vai trò của tương tác trong cơ học lượng tử.

*Tác giả chính: Tel: 0967598228; Email: longdd@gmail.com

Cần chú ý rằng, vai trò của các tương tác này không thể hiện rõ nét ở các hệ cơ học cổ điển, ví dụ như các hệ vật lý có kích thước lớn (hệ vĩ mô) hoặc hệ khí ở nhiệt độ cao...

Trong những năm gần đây, nghiên cứu còn chỉ ra sự hình thành pha siêu chảy không những được tìm thấy ở các hệ hạt boson mà còn có khả năng tìm thấy trên các hệ hạt fermion như hệ hạt He-3 (một đồng vị của Helium nhưng là hạt fermion) [2]. Ngoài ra, trong vật lý thống kê lượng tử chúng ta còn biết đến một hiện tượng đặc trưng cho các hạt boson như sau: khi nhiệt độ được hạ xuống dưới nhiệt độ tới hạn (như trong trường hợp của He-4 là 2,17 K), các hạt boson có thể cùng tồn tại trong một trạng thái lượng tử với mức năng lượng thấp nhất gọi là hiện tượng ngưng tụ Bose Einstein. Điều này hoàn toàn khác với các hạt fermion bị quy định bởi nguyên lý loại trừ Pauli. Dường như có một mối liên hệ giữa hiện tượng ngưng tụ Bose Einstein và tính siêu chảy nhưng đáng tiếc là cho đến nay vẫn chưa có ai chỉ ra sự liên hệ đó thực sự như thế nào. Ngoài ra, chúng ta còn biết rằng: khi nghiên cứu chuyển pha hoặc đặc trưng pha thì tham số trật tự là một tham số vật lý quan trọng bậc nhất và không thể thiếu được. 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 (Long Range Order - LRO) đặc trưng cho các nguyên tử bị định xứ trong các nút mạng. Ý nghĩa của khái niệm đường chéo và ngoài đường chéo xuất phát từ các đặc trưng của tương tác trong ma trận của Hamiltonian đặc trưng cho hệ. Cụ thể là: số hạng mô tả ma trận thế năng có đặc trưng là ma trận đường chéo, các số hạng ngoài đường chéo đều bằng không. Ngược lại, số hạng mô tả ma trận động năng có đặc trưng là ma trận đường chéo bằng không, còn các số hạng ngoài đường chéo thì khác 0. Như chúng ta thấy, hai tham số trật tự này phủ định nhau và trước đây người ta không cho rằng hai tham số trật tự này có thể đồng thời tồn tại. Nói cách khác, không thể có một pha có đồng thời cả hai tham số trật tự 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 nêu trên trong cùng một pha, và thuật

ngữ pha siêu rắn ra đời để chỉ sự đồng tồn tại của hai tham số trật tự này. 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 thể tồn tại trật tự ODLRO trong các chất rắn kết tinh. Tuy nhiên, Andreev và Lifshitz (1969) và Chester (1970) đã đề xuất bức tranh khác bằng cách sử dụng mô hình của các sai hỏng mạng nhằm giải thích cho khả năng tồn tại của pha siêu rắn này [2, 3]. Lập luận của họ dựa trên quan điểm cho rằng, các sai hỏng mạng ở nhiệt độ thấp trở nên linh động và có thể là ứng cử viên số một cho trạng thái nền với mức năng lượng thấp nhất của các hệ lượng tử như He-4. Ở nhiệt độ thấp, do khả năng linh động nên các sai hỏng này có thể chuyển động không có ma sát và đi vào trạng thái ngưng tụ. Tuy nhiên, sau nhiều nỗ lực tìm kiếm thực nghiệm đều thất bại thì đến năm 2004, một cuộc bùng nổ trong nghiên cứu pha siêu rắn xảy ra ngay sau khi E. Kim và W. Chan công bố đã thành công trong việc quan sát thực nghiệm thấy pha siêu rắn [4]. Đáng tiếc là cho đến nay, hiện tượng này vẫn còn gây ra rất nhiều tranh cãi [5]. 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. Nói cách khác là hệ He-4 không sạch và không kiểm soát được. May mắn là 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 mạng quang học trong quá trình nghiên cứu các tính chất của hệ này. Các phát hiện này đã mở ra một lối thoát cho việc tìm kiếm pha siêu rắn trên mạng quang học. Thực tế là mạng quang học 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 có thể 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 và quan niệm nó như một mạng nhân tạo. Ưu điểm của mạng quang học là độ tinh khiết so với He-4 và khả năng kiểm soát từng tham số của hệ bằng cách thay đổi cường độ các 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

trung cho nút mạng (cỡ nửa bước sóng laser, ví dụ 300 nm với laser đỏ) gấp hàng nghìn lần khoảng cách các nguyên tử trong tinh thể. 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 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?

Trạng thái siêu rắn của Helium

Muốn hiểu về đặc trưng của các pha, chúng ta cần hiểu sự hình thành của các pha và yếu tố vật lý nào điều khiển cơ chế 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 siêu 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 loại một.

Tham số trật tự trong pha rắn

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

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

Đối với các pha không có sự phá vỡ bất biến tịnh tiến liên tục (pha lỏng hoặc 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 vector T là vector mạng tinh thể. Tiếp đến, chúng ta xét khai triển chuỗi Fourier $\delta\rho(r)$ trong không gian ba chiều theo tập hợp vector $\vec{k}$ đặc

trung cho mạng tinh thể:

$$\rho(\vec{k}) = \frac{1}{\Omega} \int d^3r \delta\rho(r) e^{-i\vec{k}\cdot\vec{r}} \quad (2)$$

Thực tế là giá trị bình phương của $\rho(\vec{k})$ cho ta hệ số cấu trúc tĩnh $S(\vec{k})$. Hệ số này mô tả các đỉnh của cường độ tán xạ của ánh sáng trong tinh thể. Nó có liên hệ với G là vector mạng đảo theo công thức: $G \cdot T = 2\pi n$ (n là số nguyên). Ở đây, hệ số cấu trúc tĩnh là một tham số trật tự để mô tả trật tự rắn của tinh thể. Nói cách khác, hệ số cấu trúc tĩnh là đặc trưng cho trật tự đường chéo DLRO, hay sự phá vỡ đối xứng dịch chuyển. Cần chú ý rằng, một hệ quả ngược lại của mối liên hệ này không phải lúc nào cũng đúng.

Tham số trật tự trong pha siêu chảy

Mặc dù, Kapitza phát hiện về tính siêu chảy năm 1937 nhưng phải một năm sau, mô hình của hiện tượng siêu chảy trên He-4 mới được xây dựng bởi Tisza (1938) [6] dựa trên hàm mật độ định xứ một hạt:

$$\rho(r) = \rho_S(r) + \rho_N(r) \quad (3)$$

Trong đó, thành phần $\rho_S(r) = \rho_s$ 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 (3) dễ dàng thấy rằng, khi hệ 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 thành phần lỏng thông thường thì 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 $\rho_S \neq 0$ và tăng dần khi tiếp tục hạ nhiệt độ xuống dưới nhiệt độ chuyển pha $T \rightarrow 0$. Về mặt nguyên tắc, $\rho_S = \bar{\rho}$ và tỷ

số $\rho_S / \bar{\rho}$ tiến gần đến 1 khi $T \rightarrow 0$. Trong các hệ ba chiều, hiện tượng siêu chảy đi kèm với hiện tượng ngưng tụ Bose Einstein xảy ra ở nhiệt độ thấp [7].

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

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

$$\tilde{n}(k) = \langle \hat{\psi}^\dagger(k) \hat{\psi}(k) \rangle / N \quad (4)$$

Trong đó, $\hat{\psi}(k)$ và $\hat{\psi}^\dagger(k)$ là toán tử sinh hủy Bose của hạt có động lượng $\hbar k$, ký hiệu ngoặc $\langle \rangle$ biểu diễn giá trị kỳ vọng của giá trị vật lý có tính đến các giới hạn nhiệt động lực học. Trong hệ có sự ngưng tụ Bose Einstein thì $\tilde{n}(k)$ sẽ có dạng:

$$\tilde{n}(k) = n_o \delta(k) + \tilde{n}_{NC}(k) \quad (5)$$

Số hạng đầu tiên biểu diễn thành phần tham gia vào trạng thái ngưng tụ, n_o là độ ngưng tụ. Trong khi đó thành phần thứ hai biểu diễn những đóng góp vào động lượng của những phần tử có mômen 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:

$$n(r, r') = \langle \hat{\psi}^\dagger(r) \hat{\psi}(r') \rangle \quad (6)$$

Trong đó, $\hat{\psi}(r)$ và $\hat{\psi}^\dagger(r')$ 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 ở trạng thái có động lượng $\hbar k$. Còn hàm ma trận mật độ đơn hạt (6) là biến đổi Fourier của hàm phân bố mômen động lượng (5). Thực tế là, trong các hệ có bất biến tịnh tiến liên tục (chất lỏng hoặc 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:

$$n(r) = \frac{1}{\Omega} \int d^3 r' n(r', r' + r) \quad (7)$$

Dễ dàng thấy phương trình (7) có tính chất $n(r) \rightarrow n_o$ 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 đối với một hạt đồng nhất khác ở vị trí bất kỳ trong hệ là khác 0. Hiệu ứng này chỉ có thể 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 quan trọng của các hiệu ứng lượng tử ở nhiệt độ thấp. Ngoài ra, hệ quả này cũng là đặc trưng của trật tự ngoài đường chéo ODLRO xuất hiện trong các trạng thái ngưng tụ Bose Einstein.

Tham số trật tự trong pha siêu rắn

Như chúng tôi đã trình bày về trật tự rắn và trật tự siêu chảy ở trên thì hai trật tự này có đặc trưng hoàn toàn khác nhau. Trật tự rắn được hỗ trợ và hình thành khi thế năng tương tác trở nên rất mạnh so với động năng của hạt. Ngược lại, trật tự siêu lỏng được hình thành nhờ vào 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 có khi nào hai trật tự này hỗ trợ nhau và cùng tồn tại không? Ý tưởng về một pha chứa đồng thời cả hai trật tự trái ngược nhau đã dẫn đến khái niệm về pha siêu rắn, ở đó có sự tồn tại đồng thời của cả trật tự đường chéo DLRO và trật tự ngoài đường chéo ODLRO. Nói một cách khác, trật tự rắn và trật tự lỏng cùng tồn tại đồng thời trong một pha đồng nhất, để phân biệt với trạng thái tách hai 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 không phải đồng nhất về pha. Ở khía cạnh nào đó, nó giống như trạng thái đá lạnh trong nước. Sự thú vị là ở chỗ, pha siêu rắn có cả hai đặc trưng về trật tự và là một pha đồng nhất chứ không có sự tách pha. Hiện tại, nhiều kết quả nghiên cứu chỉ ra sự tồn tại của pha siêu rắn nhưng cũng nhiều nhóm nghiên cứu bác bỏ sự tồn tại của pha này. Nguyên nhân chủ yếu là do các hệ He-4 có tạp và không kiểm soát được tham số. Như chúng tôi đã trình bày ở phần đặt vấn đề, cộng đồng khoa học muốn tìm kiếm và kiểm nghiệm sự tồn tại của các pha dị thường như pha siêu rắn trong mạng quang học để giảm bớt sự tranh cãi đối với kết quả đo. Lý do đơn giản là vì mạng quang học

rất tinh khiết và các tham số như tương tác và hình dạng đều có thể điều chỉnh được.

Mô hình lý thuyết của pha siêu rắn

Cho đến nay, giới nghiên cứu thống nhất cao về sự chưa hoàn chỉnh của các bằng chứng thực nghiệm để minh chứng cho một pha dị thường quan sát được trong hệ He-4. Mặc dù có rất nhiều bức tranh lý thuyết được đưa ra nhưng không có lý thuyết nào có thể giải thích cùng một lúc tất cả những câu hỏi hoặc những mâu thuẫn trong các kết quả thực nghiệm [5]. Trong một nỗ lực nghiên cứu khác gần đây, các tác giả đã đưa ra một bức tranh vật lý vận dụng tính toán từ nguyên lý đầu tiên áp dụng vào các mô hình thực tế của tinh thể He-4 nhằm giải thích các quan sát thực nghiệm [8, 9].

Một cách tiếp cận khác nhằm giải thích các cơ chế bên trong các pha dị thường cùng với chuyển pha lượng tử giữa chúng (ví dụ, từ pha siêu rắn sang siêu lỏng) và vai trò của các yếu tố định xứ có nguồn gốc từ tương tác, bất trật tự hoặc sự cầm tù của các hạt trong các mạng gián đoạn. Trong trường hợp này, sự phá vỡ đối xứng tịnh tiến tự phát được gắn với đối xứng tịnh tiến gián đoạn của Hamiltonian. Ưu điểm của các nghiên cứu này là người ta có thể sử dụng các mô hình đơn giản rồi áp dụng các phương pháp tính toán số chính xác để giải quyết rất nhiều vấn đề lý thuyết liên quan đến các pha đã đề cập ở trên. Các nghiên cứu này không những giải thích được các kết quả thực nghiệm mà còn đưa ra những định hướng cho các thí nghiệm. Thật vậy, người ta đã sử dụng Hamiltonian mạng để giải thích cho pha liên quan đến ứng xử của He-4 trong những nỗ lực khảo sát lý thuyết đầu tiên. Lớp các Hamiltonian này gọi là lớp các mô hình Bose Hubbard có dạng như sau:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + h.c.) + \frac{1}{2} U \sum_i \hat{n}_i (\hat{n}_i - 1) - \mu \sum_i \hat{n}_i \quad (8)$$

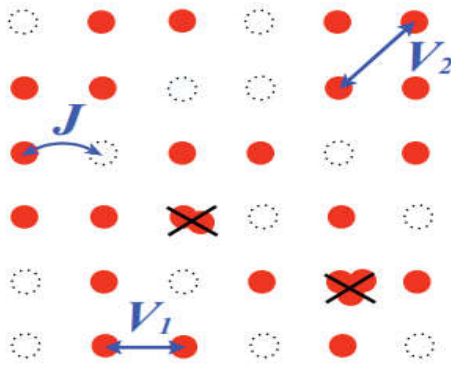
Trong đó: $\hat{b}_i$ và $\hat{b}_i^\dagger$ là toán tử sinh hủy hạt boson ở vị trí thứ i trong mạng và tuân theo quy tắc: $[\hat{b}_i, \hat{b}_j^\dagger] = \delta_{ij}$, toán tử $\hat{n}_i = \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i$ là toán tử số hạt, J là ma trận nhảy mô tả động năng của hệ, U là thế năng tương tác giữa các boson trên cùng một vị trí trong

mạng, μ là thế hóa có vai trò điều khiển số hạt trong hệ và chính là hàm thế hóa trong phân bố thống kê lớn. Hamiltonian (8) là mô hình tối giản để mô tả pha siêu chảy của hệ boson. Về mặt vật lý, khi động năng thắng thế hay tương tác giữa các boson rất yếu, $J \geq U$, hệ sẽ ở trạng thái siêu chảy, còn ngược lại, khi tương tác trở nên mạnh hơn so với động năng $J \leq U$ thì hệ sẽ chuyển sang trạng thái điện môi Mott. Các kết quả này đã được kiểm nghiệm cả về lý thuyết lẫn thực nghiệm [10]. Mặc dù Hamiltonian (8) mô tả rất tốt pha siêu chảy của hệ boson như He-4 chẳng hạn, nhưng nó vẫn chưa đủ để mô tả pha siêu rắn. Có nhiều cách để mô tả pha siêu rắn dựa trên lớp các mô hình Bose Hubbard (8) bằng cách thêm các tương tác tầm xa, ví dụ các tương tác lân cận gần nhất và xa hơn nữa. Thật thú vị là khi thêm các tương tác tầm xa thì ảnh hưởng của yếu tố hình học lại đóng vai trò quyết định. Cụ thể là, khi thêm tương tác lân cận gần nhất vào Hamiltonian (8), người ta thấy có sự tồn tại của pha siêu rắn trong mạng tam giác nhưng không xuất hiện trong mạng vuông [11-15].

Quay trở lại bài toán của chúng ta, khi các hạt composite boson kiểu He-4 tham gia vào quá trình vật lý. Do He có lớp các orbital mang điện tích âm bao phủ quanh hạt nhân nên thực tế là rất khó để các He-4 nằm cùng một vị trí do nguyên lý loại trừ Pauli. Nói cách khác, đối với trường hợp này thì thế năng tương tác trên cùng một vị trí nút mạng $U = \infty$, hay tại một vị trí nút chỉ tồn tại không nhiều hơn một phần tử, điều kiện này thường được gọi là điều kiện boson lõi cứng, mật độ phân tử ρ thỏa mãn $0 \leq \rho \leq 1$. 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. Với điều kiện này, Hamiltonian (8) sẽ trở thành:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\hat{b}_i^\dagger \hat{b}_j + h.c.) + V_1 \sum_{\langle ij \rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j + V_2 \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} \hat{n}_i \hat{n}_j - \sum_i \mu_i \hat{n}_i \quad (9)$$

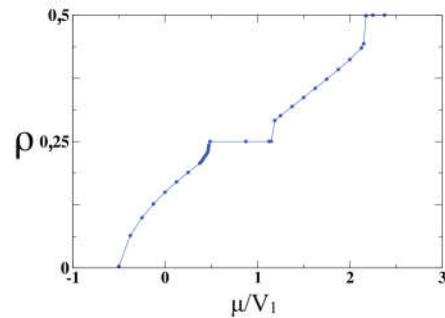
Trong đó, V_1 là thế năng tương tác giữa các phân tử lân cận gần nhất, V_2 là thế năng tương tác giữa các cặp lân cận gần thứ hai. Mô hình này được mô tả trên hình 1.



Hình 1: mô hình mạng và các tương tác trong mô hình boson lõi rắn

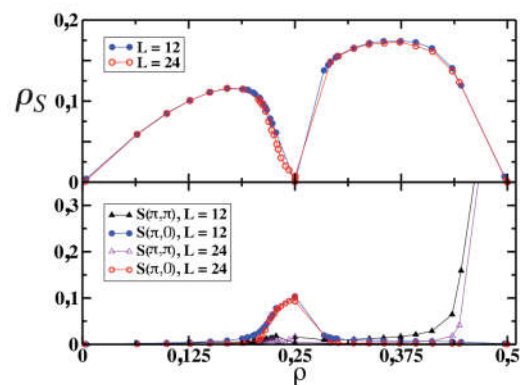
Sử dụng mô hình này, chúng tôi khảo sát giản đồ pha để tìm ra các điều kiện xuất hiện trạng thái siêu rắn. Phương pháp chúng tôi sử dụng để nghiên cứu là phương pháp Monte Carlo lượng tử có áp dụng thuật toán Worm [16, 17]. Với phương pháp này, chúng tôi có thể nghiên cứu được giản đồ pha ở các nhiệt độ bất kỳ với độ chính xác tùy ý. Hai tham số trật tự ODLRO và DLRO được chúng tôi sử dụng như một thước đo cho sự xuất hiện của pha siêu rắn. Tham số trật tự ODLRO được thể hiện với sự xuất hiện của mật độ siêu lỏng ρ_s , còn tham số trật tự DLRO được mô tả bởi hệ số cấu trúc tĩnh ký hiệu là $S(k)$, có giá trị khác không. Với các mạng có hình dạng khác nhau thì tính thể hình thành ở các mật độ khác nhau sẽ được đặc trưng bởi các vector mạng đảo khác nhau. Hệ quả là giá trị vector k cũng khác nhau tương ứng. Ví dụ: với mạng vuông thì tính thể ô bàn cờ sẽ được đặc trưng bởi vector hai chiều $k = (k_x, k_y) = (\pi, \pi)$, trong khi đó tính thể có hình dạng dải băng lại có vector đặc trưng $k = (k_x, k_y) = (0, \pi) = (\pi, 0)$. Đáng lưu ý, chúng ta cần phân biệt pha siêu rắn với trạng thái tách pha, ở đó hai tham số trật tự cũng khác không. Để phân biệt được, chúng ta nhìn vào sự phụ thuộc của mật độ siêu lỏng vào mật độ hạt trong hệ. Nếu đồ thị biểu diễn có nhảy bậc thì đó là trạng thái tách pha. Sử dụng phương pháp Monte Carlo lượng tử, chúng tôi dễ dàng quan sát được các tham số trật tự ρ_s , $S(k)$ và phân biệt được pha siêu rắn và sự tách pha. Để minh họa cho những tiên đoán lý thuyết, chúng tôi nghiên cứu một trường hợp mạng tinh thể là mạng vuông và quan sát các đặc trưng vật lý của hệ. Trước tiên, chúng tôi nghiên cứu sự phụ thuộc của mật độ hạt vào tỷ số tương đối giữa thế hóa

học và tương tác trong hình 2. Mục đích của nghiên cứu này để cho ta sự nhận biết sơ bộ về các pha ở các mật độ khác nhau.



Hình 2: sự phụ thuộc của mật độ hạt vào thế hóa học μ trong mạng vuông của mô hình boson lõi rắn

Nhìn vào hình 2, chúng ta dễ dàng phân biệt được các trạng thái khác nhau của hệ tại các mật độ hạt boson trong trường hợp mạng vuông. Do mô hình lõi rắn (9) có tính đối xứng giữa hạt và lỗ trống nên chúng tôi chỉ vẽ mật độ hạt từ 0 đến 0,5. Mật độ hạt từ 0,5 đến 1,0 là hoàn toàn tương tự. Chúng ta quan sát thấy mật độ hạt có xuất hiện bậc thang tại mật độ hạt $\rho = 0,25$, chứng tỏ tại đó có trạng thái tinh thể hình sao. Lân cận của bậc thang về phía mật độ thấp, ta thấy sự liên tục của mật độ hạt thể hiện pha đồng nhất nhưng lân cận về phía mật độ cao có nhảy bậc. Đây chính là dấu hiệu của sự tách pha. Để tìm hiểu sâu hơn về đặc trưng pha của các trạng thái này, chúng tôi quan sát mật độ siêu chảy ρ_s và hệ số cấu trúc tĩnh $S(k)$ như trong hình 3.

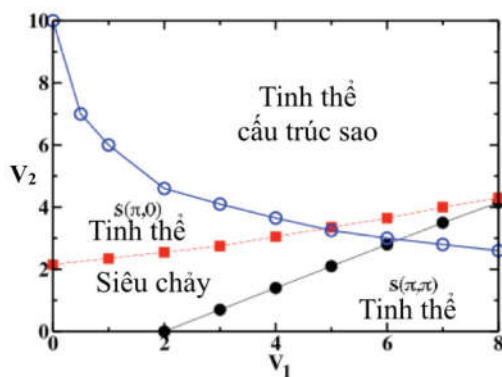


Hình 3: sự phụ thuộc của mật độ siêu chảy (hình trên) và cấu trúc tĩnh (hình dưới) $S[(0, \pi); (\pi, 0)]$ và $S(\pi, \pi)$ vào mật độ hạt với các kích thước khác nhau $L = 12, 24$ và tương tác $V_1 = 8,0, V_2 = 3,5$

Hình 3 cho chúng ta thấy, trạng thái siêu rắn tồn tại trong một miền mật độ rất rộng $0,175 < \rho < 0,25$. Cần lưu ý rằng, đây là một kết quả đáng chú ý vì trước năm

2008 chưa có nhóm tác giả nào phát hiện ra sự tồn tại của trạng thái chất rắn trong lân cận của pha tinh thể ở miền mật độ thấp.

Chúng tôi quan sát tại các điều kiện khác nhau của tương tác trong mô hình (9) và vẽ được giản đồ pha tại các mật độ hạt $\rho = 0,25$ và $0,5$ như hình 4. Điểm thú vị là khi nghiên cứu pha tại các mật độ hạt lân cận với mật độ hạt nêu trên, chúng tôi thu được một điều kiện tổng quát cho việc xuất hiện pha siêu rắn như sau: nếu tại mật độ hạt $\rho = 0,25$ hệ là trạng thái tinh thể hình sao và tại $\rho = 0,5$ hệ trong trạng thái tinh thể ô bàn cờ thì hệ nằm trong trạng thái siêu rắn trên toàn miền mật độ trên và dưới của $\rho = 0,25$. Đây là một kết quả mang tính tổng quát.



Hình 4: giản đồ pha của trạng thái nền (ground state) với các pha có thể xuất hiện tại các mật độ hạt khác nhau. Ký hiệu (○) phân cách tinh thể cấu trúc hình sao và trạng thái siêu chảy ở mật độ hạt $\rho=1/4$. Ký hiệu (●) phân cách tinh thể cấu trúc ô bàn cờ và trạng thái siêu chảy tại mật độ hạt $\rho=1/2$. Ký hiệu (■) phân cách tinh thể cấu trúc dải và trạng thái siêu chảy tại mật độ hạt $\rho=1/4$

Mô hình mạng sử dụng trên đây không chỉ là một công cụ lý thuyết đơn thuần mà nó còn được hiện thực hóa trong các hệ quang học. Ý nghĩa quan trọng nhất của các nghiên cứu này là người ta có thể tiến hành so sánh trực tiếp giữa lý thuyết và thực nghiệm đối với mạng quang với độ chính xác rất cao. Tuyệt vời hơn nữa là những kết quả nghiên cứu sử dụng mô hình này sẽ giảm thiểu những tranh luận khi dùng nó để giải thích pha siêu rắn trong thí nghiệm với He-4.

Trạng thái siêu rắn trong mạng quang học

Như chúng tôi đề cập ở trên, mạng quang là một “ứng cử viên” tốt cho việc quan sát trạng thái siêu rắn. Thực tế, mạng quang là một mạng nhân tạo, có cấu trúc trật tự giống như mạng tinh thể, được hình thành

khi chiếu các chùm tia laser đối đầu nhau tạo thành các hố thế bẫy các nguyên tử siêu lạnh, ví dụ các boson ở trạng thái ngưng tụ Bose Einstein. Các nguyên tử này được làm lạnh sẵn ở trạng thái ngưng tụ Bose và ứng xử trong mạng quang như các mạng tinh thể thực. Trong tinh thể thực có nhiều tương tác phức tạp và chứa nhiều tạp nên rất khó để kiểm soát các tham số vật lý của nó, ví dụ độ lớn của các tương tác. Thật may mắn, trong mạng quang người ta có thể thay đổi dễ dàng tất cả các tham số đặc trưng của mạng như chiều dài cơ sở mạng, chiều sâu của hố thế và tương tác giữa các nguyên tử. Chính vì lý do này, mạng quang học cung cấp mô hình lý tưởng để khảo sát ảnh hưởng của các tham số trong các vật liệu và cho chúng ta một bức tranh rõ ràng hơn về vai trò của các tham số. Trong mạng quang, các hố thế được hình thành tại các đáy thế của chùm laser giao thoa. Khác với mạng tinh thể, các hố thế tuần hoàn hình thành do tương tác giữa các ion cố định tại các nút mạng sinh ra trường tinh thể. Hạt tự do trong mạng tinh thể là electron, còn hạt tự do trong mạng quang là các nguyên tử siêu lạnh. Để hiểu sâu hơn về mạng quang, chúng ta cần hiểu sâu hơn về quá trình hình thành các hố thế như sau:

Bẫy điện thế trong mạng quang được hình thành dựa trên tương tác giữa mômen lưỡng cực điện với điện trường của ánh sáng laser. Khi nguyên tử được chiếu sáng bởi laser, điện trường E của sóng ánh sáng và mômen lưỡng cực dao động với tần số ω được biểu diễn như sau:

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

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

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

Với $E(r)$ và $p(r)$ là biên độ của dao động, e là vector đơn vị phân cực, $\alpha(\omega)$ là độ phân cực phức phụ thuộc vào tần số. Điện thế tương tác giữa mômen lưỡng cực và điện trường của sóng ánh sáng hình thành nên thế tương tác với chiều sâu hố thế:

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

Với ϵ_0 và c lần lượt là các hằng số điện môi và vận tốc ánh sáng, cường độ $I(r) = \epsilon_0 c |E^2|$, do đó nguyên

từ sẽ bị bẫy tại các vị trí biên độ của điện trường có cực đại hoặc cực tiểu. Ngoài ra, vì điện trường dao động tuần hoàn nên thế năng cũng dao động tuần hoàn theo. Sử dụng mô hình Lorentz để biểu diễn $\alpha(\omega)$, ta thu được mối liên hệ giữa điện thế hiệu dụng như sau:

$$V_{dip}(r) = \frac{3\pi c^2}{2\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\Delta} \right) I(r)$$

Trong đó: $\Delta = \omega - \omega_0$ là độ lệch tần số giữa tần số laser ω và tần số đặc trưng trong mô hình Lorentz mô tả dao động cổ điển của điện tử ω_0 , còn hằng số Γ liên quan đến sự chuyển dời đặc trưng của nguyên tử. Với cấu hình khác nhau của các nguồn ánh sáng laser, chúng ta có thể tạo ra các dạng hình học khác nhau như dạng mạng tam giác, vuông..., hoặc mạng 1 chiều, 2 chiều, 3 chiều. Quan trọng hơn nữa là tất cả các số hạng trong mô hình Hamiltonian (8) và (9) đều có thể điều khiển được thông qua việc thay đổi cường độ chùm laser. Một trong những thành tựu gây tiếng vang khi nghiên cứu mạng quang học là việc sử dụng mô hình Bose Hubbard (8) như một mô hình hoàn hảo để mô tả mạng quang [18, 19]. Nhờ phát hiện thú vị này mà mô hình (8) và (9) không còn là mô hình đồ chơi nữa mà nó thực sự là một mô hình đặc thù của mạng quang học.

Thông thường, bất kỳ 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. Kết quả thực nghiệm đầu tiên cho thấy tính đúng đắn trong tiên đoán lý thuyết về sự xuất hiện của các pha siêu chảy và điện môi Mott khi tăng cường độ chùm laser (tương ứng với việc gia tăng tương tác). Kết quả này mở ra hàng loạt các nghiên cứu khác nhằm kiểm nghiệm lại các định luật vật lý trong mạng quang. Thật đáng tiếc là cho đến nay vẫn chưa có bằng chứng thực nghiệm nào cho thấy sự tồn tại của trạng thái siêu rắn trong mạng quang học mặc dù những tiên đoán lý thuyết là rất chắc chắn và rõ nét. Công cuộc tìm kiếm trạng thái siêu rắn vẫn được tiếp tục rất sôi nổi.

Những trạng thái dị thường khác

Ngoài pha dị thường siêu rắn như chúng tôi đề cập ở trên, gần đây cộng đồng nghiên cứu vật lý còn quan

tâm đến một pha thú vị khác thể hiện vai trò lớn của các hiệu ứng lượng tử ở nhiệt độ thấp, đó là các pha spin lỏng lượng tử [20]. Trạng thái này thực sự vẫn còn khó hiểu đối với cả thực nghiệm lẫn các mô hình lý thuyết trong việc tìm ra đặc trưng pha của nó. Lý do một phần là sự cân bằng mong manh của tương tác vì mô đã không thể tạo ra sự phá vỡ đối xứng thông thường ở nhiệt độ thấp. Một phần là pha thủy tinh siêu lỏng thiếu tham số trật tự đặc trưng cho nó, không giống như pha siêu rắn có thể đặc trưng bằng tham số trật tự DLRO và ODLRO. Do vậy, người ta không có cách nào để nghiên cứu chuyển pha giữa các trạng thái. Hiện tại, để xác định trạng thái này, người ta dùng phương pháp loại trừ, tức là loại bỏ tất cả các tham số trật tự thông thường gắn liền với các pha đã biết khác. Tuy nhiên, trong thời gian gần đây, các nghiên cứu lý thuyết đã phân loại được một lớp các pha spin lỏng dựa trên sự suy biến topo của hàm sóng. Ví dụ, một vài tác giả đề xuất mô hình Hamiltonian với trạng thái nền là pha spin lỏng với trật tự topo Z_2 . Một trong các mô hình đầu tiên được nghiên cứu là mô hình dimer mạng tam giác [21]. Một hướng khác trong nghiên cứu bậc topo là các hệ toric code [22] vì nó là lớp các mô hình đơn giản nhất có thể giải chính xác được, ví dụ như mô hình Levin-Wen [23]. Cần chú ý là, để một mô hình thực sự giải thích cũng như có thể so sánh được với thực nghiệm thì mô hình đó phải chứa các số hạng tương tác hai nút giữa hai đối tượng (ví dụ: giữa hai spin lân cận nhau) và trạng thái spin lỏng đặc trưng cho trật tự topo. Một trong những nỗ lực thành công và được khá nhiều người sử dụng đó là mô hình Kagome/Bose Hubbard xây dựng bởi Balent, Girvin và Fisher [24]. Mặc dù mô hình này chứa tương tác 4 nút nhưng trạng thái chất lỏng spin Z_2 có mặt trên một miền khá rộng của giản đồ pha [25]. Cho đến nay, các nỗ lực tìm kiếm đặc trưng của các pha dị thường vẫn được tiếp tục và cho thấy rất nhiều tín hiệu khả quan.

Ý nghĩa của việc nghiên cứu các trạng thái mới của vật chất

Việc nghiên cứu các trạng thái mới của vật chất không chỉ có ý nghĩa về khoa học: tạo ra một cơ sở lý thuyết cho nghiên cứu thực nghiệm mà nó còn có thể có tiềm năng ứng dụng lớn. Một trong những câu hỏi lớn trong vật lý cho đến nay vẫn chưa có câu trả

lời thỏa đáng đó là hiện tượng siêu dẫn ở nhiệt độ cao. Những nỗ lực nghiên cứu không mệt mỏi để tìm ra bản chất vật lý và đặc trưng của pha siêu dẫn nhiệt độ cao đã tạo ra nhiều hướng đi mới trong nghiên cứu các pha dị thường của vật chất. Thực tế là, sự hiểu biết về các trạng thái dị thường như trạng thái siêu lỏng và trạng thái siêu rắn... là một trong những nỗ lực để hiểu về trạng thái siêu dẫn nhiệt độ cao với nhiều bí ẩn đang chờ khám phá. Ngoài ra, một trong những ứng dụng rõ nét nhất của trạng thái spin lỏng lượng tử là việc tìm ra hệ vật liệu có trạng thái bảo vệ qubit (protected qubit) cần thiết để chứa thông tin lượng tử - nền tảng cơ bản của máy tính lượng tử. Máy tính lượng tử đã và đang được cộng đồng công nghệ kỳ vọng là thế hệ tiếp theo của một công nghệ hoàn toàn mới, có chức năng ưu việt hơn và hiệu quả làm việc tốt hơn công nghệ máy tính thông thường.

Tài liệu tham khảo

- [1] P Kapitza (1938), “Viscosity of liquid helium below the λ -point”, *Nature*, **Vol.74**, p.141.
- [2] A.F Andreev and I.M Lifshitz (1969), “Quantum Theory of Defects in Crystals”, *Sov. Phys. JETP*, **Vol.29**, p.1107.
- [3] G.V Chester (1970), “Speculations on Bose-Einstein Condensation and Quantum Crystals”, *Phys. Rev. A* **Vol.2**, p.256.
- [4] E Kim and M Chan (2004), “Observation of hidden phases in supersolid 4He ”, *Nature*, **Vol.427**, p.225.
- [5] M Boninsegni, N Prokofiev (2012), “Colloquium: Supersolids: What and where are they?”, *Phys. Rev. Mod.*, **Vol.84**, p.759.
- [6] L Tisza (1938), *Nature*, **Vol.141**, p.913.
- [7] D.R Tilley and J Tilley (1990), “Superfluidity and Superconductivity (Graduate Student Series in Physics)”, *Taylor and Francis*.
- [8] M Boninsegni, N Prokofiev 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.
- [9] M Boninsegni, N Prokofiev and B Svistunov (2006), “Superglass Phase of He-4 ”, *Phys. Rev. Lett.*, **Vol.96**, p.105301.
- [10] I Bloch, J Dalibard and W Zwerger (2008), “Many-body physics with ultracold gases”, *Rev. Mod. Phys.*, **Vol.80**, p.885.
- [11] 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.
- [12] M Boninsegni and N Prokofiev (2005), “Supersolid Phase of Hard-Core Bosons on a Triangular Lattice”, *Phys. Rev. Lett.*, **Vol.95**, p.237204.
- [13] M Troyer, S Wessel (2005), “Supersolid Hard-Core Bosons on the Triangular Lattice”, *Phys. Rev. Lett.*, **Vol.95**, p.127205.
- [14] D Heidarian and K Damle (2005), *Phys. Rev. Lett.*, **Vol.95**, p.127206.
- [15] L Dang, M Boninsegni and L Pollet (2008), “Vacancy supersolid of hard-core bosons on the square lattice”, *Phys. Rev. B* **Vol.78**, p.132512.
- [16] N.V Prokofiev, 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.
- [17] 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.
- [18] 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.
- [19] D Jaksch and P Zoller (2005), “The cold atom Hubbard toolbox”, *Ann. Phys.*, **Vol.52**, p.52.
- [20] P Fazekas and P Anderson (1974), “On the ground state properties of the anisotropic triangular antiferromagnet”, *Philos. Mag.*, **Vol.30**, p.423.
- [21] R Moessner and S.L Sondhi (2001), “Resonating Valence Bond Phase in the Triangular Lattice Quantum Dimer Model”, *Phys. Rev. Lett.*, **Vol.86**, p.1881.
- [22] A Kitaev (2003), “Fault-tolerant quantum computation by anyons”, *Ann. Physics*, **Vol.303**, p.2.
- [23] M.A Levin and X.G Wen (2005), “String-net condensation: a physical mechanism for topological phases”, *Phys. Rev. B* **Vol.71**, p.045110.
- [24] L Balents et al (2002), “Fractionalization in an easy-axis Kagome antiferromagnet”, *Phys. Rev. B* **Vol.65**, p.224412.
- [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**, p.132409.