

NGHIÊN CỨU ẢNH HƯỞNG CỦA TRƯỜNG TINH THỂ h_3 ĐẾN SỰ CHUYỂN PHA CỦA MÔ HÌNH XY HAI CHIỀU

LƯƠNG MINH TUẤN^{1,2}, DƯƠNG XUÂN NÚI^{1,3}
TRƯƠNG THỊ BẠCH YẾN⁴, NGUYỄN ĐỨC TRUNG KIÊN¹, ĐÀO XUÂN VIỆT¹,
¹Viện Tiên tiến Khoa học và Công nghệ, Trường ĐH Bách Khoa Hà Nội
²Bộ môn Vật lý, Khoa Cơ khí Xây dựng, Trường ĐH Xây dựng Hà Nội
³Khoa Cơ điện và Công trình, Trường ĐH Lâm nghiệp Hà Nội
⁴Khoa Khoa học Tự nhiên, Trường ĐH Cần Thơ

Tóm tắt: Hệ vật liệu từ hai chiều có các tham số tới hạn thực nghiệm thường biểu hiện khác thường, không thuộc lớp phổ quát Ising cũng như không thuộc lớp phổ quát XY mà có giá trị từ lớp phổ quát Ising đến lớp phổ quát XY. Để nghiên cứu chuyển pha của những vật liệu này người ta đưa ra mô hình XY h_q . Tính chất chuyển pha của mô hình XY h_q đã được nghiên cứu bằng lý thuyết tái chuẩn hóa và mô phỏng số. Các tác giả đã chỉ ra trong mô hình này với $q \leq 4$ chỉ có một chuyển pha bậc hai, với $q > 4$ có chuyển pha KT tùy thuộc vào giá trị của q . Tuy nhiên, các tham số tới hạn thực nghiệm có những bất thường với cả vật liệu bất đẳng hướng $q \leq 4$. Do đó, chúng tôi khảo sát sự chuyển pha của XY h_3 phụ thuộc vào trường tinh thể bất đẳng hướng h_3 bằng phương pháp mô phỏng Monte Carlo. Kết quả chỉ ra sự chuyển pha của XY h_3 phụ thuộc vào cường độ h_3 , với $h_3 > 0.01$ mô hình có một chuyển pha bậc 2 và nhiệt độ chuyển pha giảm khi cường độ trường tinh thể giảm; $h_3 \leq 0.01$ mô hình vẫn có một chuyển pha bậc hai, nhưng nhiệt độ chuyển pha không đổi và bằng nhiệt độ chuyển pha KT.

Từ khóa: Mô phỏng Monte Carlo, chuyển pha, vật liệu từ, mô hình XY h_q .

1. ĐẶT VẤN ĐỀ

Vật liệu từ hai chiều (2D) được quan tâm nghiên cứu sâu nổi bằng lý thuyết, mô phỏng và thực nghiệm. Các vật liệu từ 2D có phân cực từ mạnh, spin định hướng theo một số hướng nhất định, được mô tả bởi mô hình q – state clock (đồng hồ q trạng thái) [1]. Với vật liệu có phân cực từ yếu, spin có thể định hướng tự do trong mặt phẳng, được biểu diễn bởi mô hình XY [2]. Nhưng với những vật liệu có biểu hiện trung gian, tức là có thể định hướng theo mọi hướng nhưng ưu tiên hơn cho một số hướng đối xứng xác định được mô tả bằng mô hình XY h_q .

Mô hình XY h_q là mô hình XY có thêm tác động trường tinh thể bất đẳng hướng q -hướng (cường độ trường tinh thể là h_q) và được đề xuất bởi Jose vào năm 1977 [3]. Hiện tượng chuyển pha của mô hình XY h_q đã được nghiên cứu bằng với lý thuyết [3], mô phỏng [4-10] và kèm theo đó có những bằng chứng thực nghiệm phù hợp với mô hình này [10]. Khi trường tinh thể bằng không ($h_q = 0$) mô hình trở thành mô hình XY thông thường [2, 11] với một chuyển pha Kosterlitz-Thouless (KT) tại nhiệt độ $T \approx 0.89$ giữa pha mất trật tự ở nhiệt độ cao và pha giả trật tự ở nhiệt độ thấp [2, 12, 13]. Khi cường độ

trường tinh thể rất lớn ($h_q \rightarrow \infty$) mô hình trở thành mô hình q -state clock [1, 14] với sự chuyển pha phụ thuộc vào giá trị q . Bằng những tính toán lý thuyết và mô phỏng với mô hình XY_{h_q} các nghiên cứu đưa ra khẳng định: với $q \leq 4$ mô hình chỉ có một chuyển pha bậc hai; $q > 4$ mô hình có hai chuyển pha KT.

Khi nghiên cứu mô hình XY_{h_q} các tác giả còn quan tâm đến ảnh hưởng của cường độ trường tinh thể bất đẳng hướng, h_q , đến số lượng chuyển pha và loại chuyển pha của mô hình này [4, 6, 7, 9, 10]. Với $q > 4$, cụ thể $q = 6$, tính toán lý thuyết Jose và cộng sự đã xây dựng giản đồ pha cho mô hình với hai chuyển pha và các nhiệt độ chuyển pha hầu như không phụ thuộc vào cường độ trường tinh thể khi $h_6 \neq 0$. Gần đây, bằng phương pháp mô phỏng Monte Carlo (MC), các tác giả nghiên cứu vai trò của cường độ trường tinh thể đến chuyển pha của XY_{h₆} trên mạng hai chiều tam giác [6] và trên mạng hai chiều hình vuông [9]. Các tác giả chỉ ra rằng, trong khi chuyển pha nhiệt độ cao T_2 không phụ thuộc vào giá trị h_6 thì chuyển pha nhiệt độ thấp T_1 lại giảm khi độ lớn h_6 giảm và cả hai loại chuyển pha này là chuyển pha KT. Với $q = 4$, Taroni và cộng sự chỉ ra hệ số mũ tới hạn β của độ từ hóa phụ thuộc vào cường độ trường tinh thể h_4 . Kết quả mô phỏng phù hợp với kết quả thực nghiệm của các vật liệu trong một miền hệ số mũ tới hạn ($0.125 \leq \beta \leq 0.23$) [10]. Với $q < 4$, cụ thể với $q = 2, 3$ thì chuyển pha KT của mô hình XY bị phá vỡ ngay cả với các giá trị h_q rất nhỏ [5, 15]. Chuyển pha của XY_{h₂} với trường tinh thể h_2 là giống với chuyển pha bậc hai của mô hình Ising. Chuyển pha của XY_{h₃} với trường tinh thể h_3 là giống với chuyển pha bậc hai của mô hình 3-state clock. Mặt khác, Nguyen và cộng sự nghiên cứu chuyển pha của mô hình XY_{h₃} bằng phương pháp mô phỏng số và nhận định là với h_3 đủ nhỏ ($h_3 = 0.01$) thì mô hình sẽ xuất hiện chuyển pha KT [16]. Cùng với đó, gần đây, một số thực nghiệm nhận định giá trị trường tinh thể rất nhỏ, cỡ 10^{-6} , cũng tác động đến chuyển pha của lớp vật liệu này [17, 18].

Do đó, trong bài báo này chúng tôi nghiên cứu sự ảnh hưởng của cường độ trường tinh thể nhỏ (h_3) đến sự chuyển pha của mô hình 2DXY bằng mô phỏng Monte Carlo trên mạng tinh thể hai chiều hình vuông. Các kết quả mô phỏng với các đại lượng nhiệt dung riêng và tỉ số chiều dài tương quan chỉ ra sự phụ thuộc của chuyển pha của XY_{h₃} vào cường độ trường tinh thể bất đẳng hướng ba hướng h_3 : với $h_3 > 0.01$ mô hình có một chuyển pha bậc 2 và nhiệt độ chuyển pha giảm khi cường độ trường tinh thể giảm, $h_3 \leq 0.01$ vẫn xuất hiện chuyển pha bậc hai nhưng nhiệt độ chuyển pha không phụ thuộc vào cường độ trường tinh thể h_3 và bằng nhiệt độ chuyển pha KT.

2. MÔ HÌNH VÀ PHƯƠNG PHÁP

Mô hình XY trong mạng hai chiều hình vuông với sự xuất hiện của trường tinh thể bất đẳng hướng 3 hướng (XY_{h₃}) với Hamilton được cho dưới dạng [3]

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \cos(\theta_i - \theta_j) - h_3 \sum_i \cos(3\theta_i) \quad (1)$$

trong đó θ_i là góc của spin thứ i với trục x và có giá trị trong khoảng từ 0 đến 2π , $J=1$ là hằng số tương tác trao đổi giữa các spin. Thành phần thứ nhất mô tả tương tác trao đổi

của các cặp spin lân cận, i và j chạy qua mọi vị trí trong toàn bộ mạng hình vuông, thành phần thứ hai mô tả tương tác của trường tinh thể bất đẳng hướng 3 hướng với cường độ h_3 .

Chúng tôi tiến hành mô phỏng MC cho mạng hai chiều hình vuông có kích thước $N = L \times L$, với $L = 16, 32, 64, 128$, và áp dụng điều kiện biên tuần hoàn. Để đưa hệ về trạng thái cân bằng chúng tôi sử dụng kết hợp giữa thuật toán Metropolis và thuật toán Wolff. Trong đó, một bước MC (MCs) được định nghĩa bằng 5 bước Wolff và 1 bước Metropolis. Điều kiện cân bằng đã được kiểm tra thông qua sự hội tụ của nhiệt dung riêng.

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

Nhiệt dung riêng được định nghĩa

$$C = \frac{1}{k_B T^2} (\langle e^2 \rangle - \langle e \rangle^2) \quad (2)$$

trong đó $E = \langle H \rangle$ và $e = E/N$.

Khi vẽ nhiệt dung riêng theo nhiệt độ T , nếu đại lượng này xuất hiện các đỉnh nhọn là dấu hiệu của chuyển pha bậc hai, còn nếu các đỉnh tù cho ta dấu hiệu của chuyển pha KT và dựa vào sự phụ thuộc của đỉnh theo kích thước L ta có xác định được nhiệt độ chuyển pha. Để thấy dấu hiệu rõ ràng hơn và tính nhiệt độ chuyển pha này một cách chính xác, chúng tôi giới thiệu thêm đại lượng tỉ số chiều dài tương quan [19], với định nghĩa:

$$\xi = \frac{1}{2 \sin(k_m / 2)} \sqrt{\frac{\langle m(\vec{0})^2 \rangle}{\langle m(\vec{k})^2 \rangle} - 1} \quad (3)$$

trong đó

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

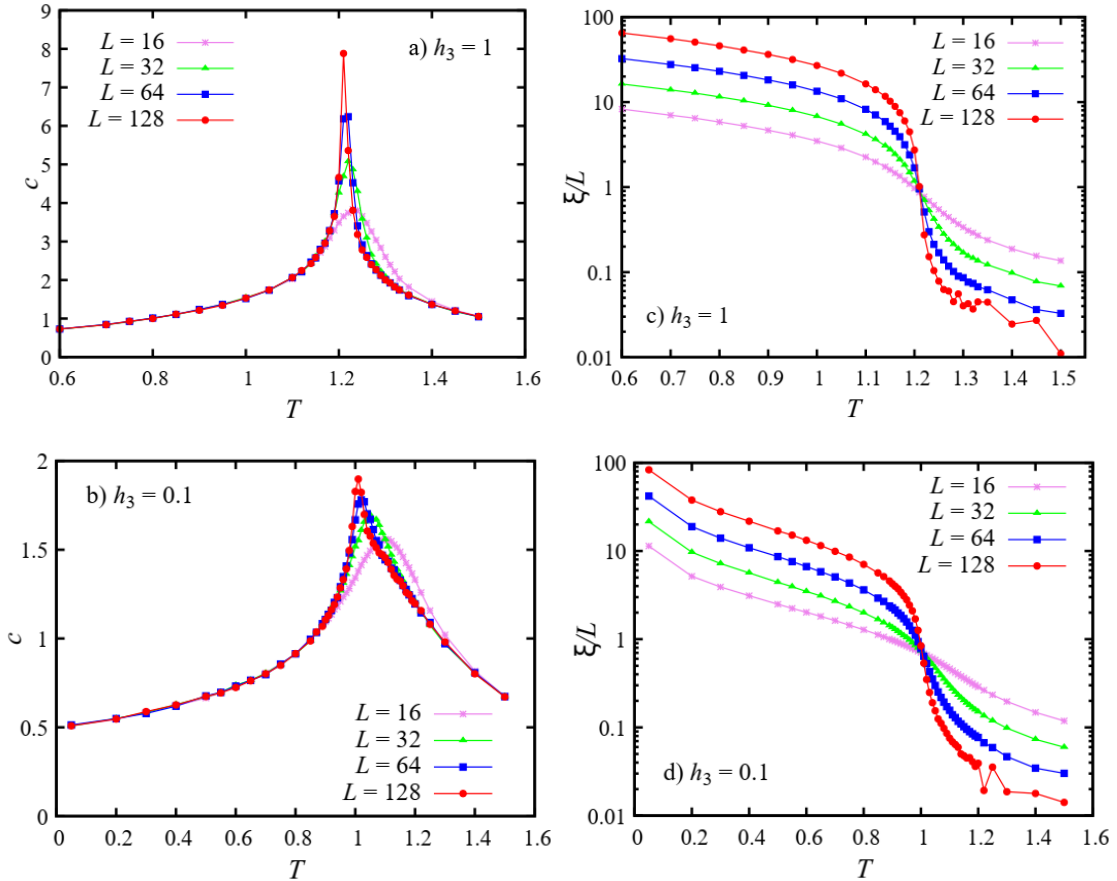
Tỉ số chiều dài tương quan (ξ/L) cũng là đại lượng quan trọng để xác định chính xác nhiệt độ chuyển pha và loại chuyển pha. ξ/L có đặc điểm tiến tới vô cùng ở pha trật tự, tiến tới 0 ở pha mất trật tự, và có giá trị hữu hạn ở pha giả trật tự khi kích thước $L \rightarrow \infty$.

3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

Trong mục này chúng tôi trình bày kết quả mô phỏng Monte Carlo đối với mô hình XYh₃ cho mạng hai chiều hình vuông. Bằng các kết quả thu được từ các đại lượng vật lý

nhật dung riêng và tỉ số chiều dài tương quan với các giá trị h_3 khác nhau. Chúng tôi thấy biểu hiện chuyển pha của mô hình này có thể chia làm hai vùng.

Đối với vùng $h_3 > 0.01$, xét cụ thể $h_3 = 1$ và 0.1 , các dấu hiệu chỉ ra hệ cho một chuyển pha bậc 2



Hình 1: Nhiệt dung riêng và tỉ số chiều dài tương quan phụ thuộc nhiệt độ cho các trường hợp $h_3 = 1, h_3 = 0.1$.

Hình 1, biểu diễn sự phụ thuộc vào nhiệt độ của nhiệt dung riêng và tỉ số chiều dài tương quan với các kích thước mạng $L = 16, 32, 64$ và 128 tại $h_3 = 1$ và 0.1 . Trong hình 1a, 1b nhiệt dung riêng xuất hiện một đỉnh nhọn và tăng rất nhanh khi L tăng, đây là dấu hiệu của chuyển pha bậc hai. Ngoài ra, so sánh giữa hai hình này thì đỉnh không chỉ phụ thuộc kích thước mà còn phụ thuộc vào độ lớn trường tinh thể. Cụ thể, với một giá trị h_3 thì đỉnh dịch chuyển về vùng nhiệt độ thấp khi kích thước tăng; còn với một giá trị kích thước khi giá trị h_3 giảm thì đỉnh cũng dịch chuyển về vùng nhiệt độ thấp. Đây là dấu hiệu cho thấy nhiệt độ chuyển phathay đổi khi cường độ trường thay đổi.

Sử dụng lí thuyết kích thước hữu hạn cho nhiệt dung riêng có thể tính được nhiệt độ chuyển pha bậc hai ứng với các giá trị h_3 khác nhau. Nhiệt độ chuyển pha bậc hai được

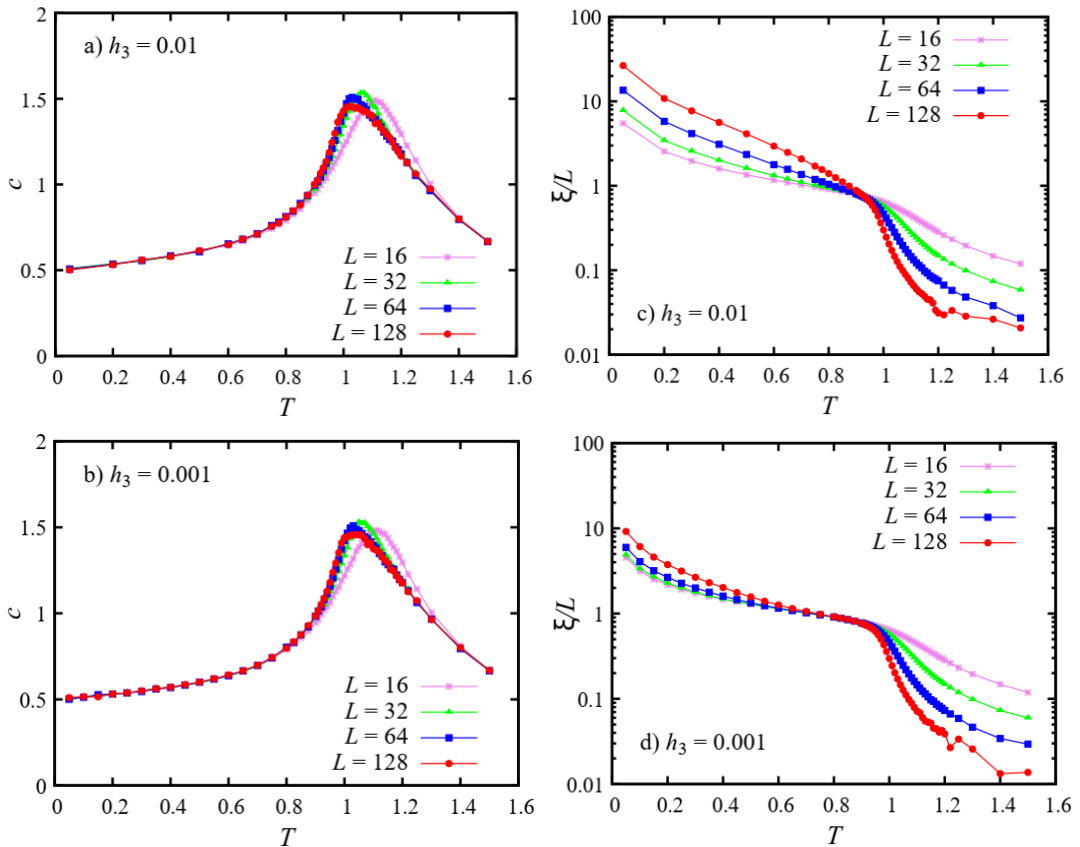
xác định thông qua sự phụ thuộc kích thước của các đỉnh nhiệt dung riêng bằng hàm lũy thừa theo biểu thức [20]:

$$T_c(L) = T_c(\infty) + c \cdot L^{-1/\nu} \quad (4)$$

Bằng các số liệu mô phỏng, chúng tôi vẽ $T_c(L)$ theo $L^{-1/\nu}$ và làm phù hợp các tham số c , ν cho mô hình XY h_3 và điểm giao cắt giữa đường dữ liệu với trục nhiệt độ. Từ đó chúng tôi tìm được nhiệt độ chuyển pha của mô hình khi $h_3 = 1$ là $T_c \approx 1.21$ và $h_3 = 0.1$ là $T_c \approx 1.00$. Kết quả này là phù hợp với các nghiên cứu trước đây cho vùng $h_3 > 0.01$ [4, 15].

Biểu hiện của chuyển pha bậc hai, với $h_3 > 0.01$, một lần nữa được khẳng định qua sự phụ thuộc kích thước của tỉ số chiều dài tương quan (ξ/L) ở hình 1c, 1d. Cụ thể với các kích thước khác nhau thì ξ/L cắt nhau tại một điểm, thể hiện đây là chuyển pha bậc hai. Ngoài ra, từ điểm giao cắt của các ξ/L ta cũng tính được giá trị T_c phù hợp với kết quả tính bằng biểu thức (4) cho nhiệt dung riêng. Mô hình XY h_3 với $h_3 > 0.01$, ngoài việc khẳng định lại có hiện tượng chuyển pha bậc hai chúng tôi còn chỉ ra nhiệt độ chuyển pha của mô hình giảm khi giảm cường độ trường tinh thể h_3 .

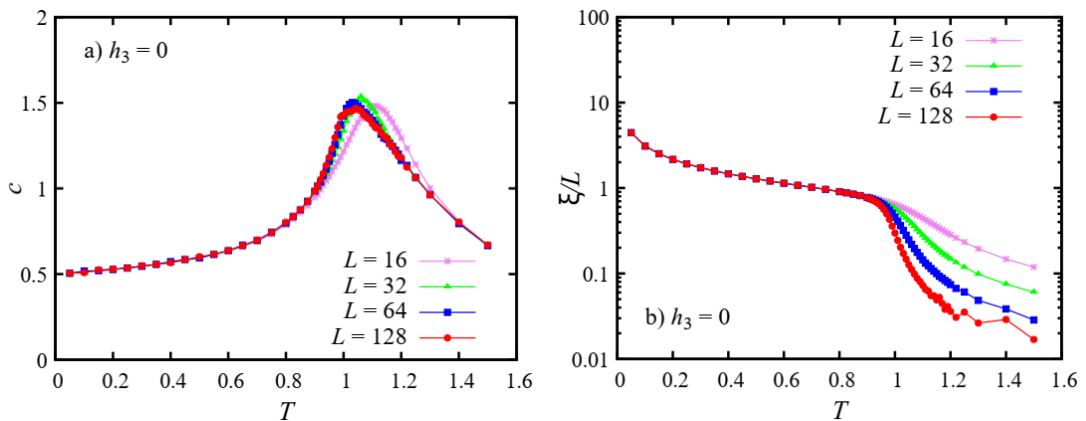
Đối với vùng $h_3 \leq 0.01$, cụ thể với $h_3 = 0.01$ và 0.001 , và thấy sự khác lạ trong hiện tượng chuyển pha của mô hình XY h_3 trong vùng này của h_3 .



Hình 2: Nhiệt dung riêng và tỉ số chiều dài tương quan phụ thuộc nhiệt độ cho các trường hợp $h_3 = 0.01, h_3 = 0.001$.

Hình 2, biểu diễn nhiệt dung riêng và tỉ số chiều dài tương quan theo nhiệt độ với các kích thước mạng $L = 16, 32, 64$ và 128 khi $h_3 = 0.01$ và 0.001 . Trong hình 2a, 2b đỉnh của nhiệt dung riêng tiến tới giá trị hữu hạn khi kích thước mạng tăng, đây là dấu hiệu của chuyển pha KT tương tự như trong trường hợp $h_3 = 0$, hình 3a.

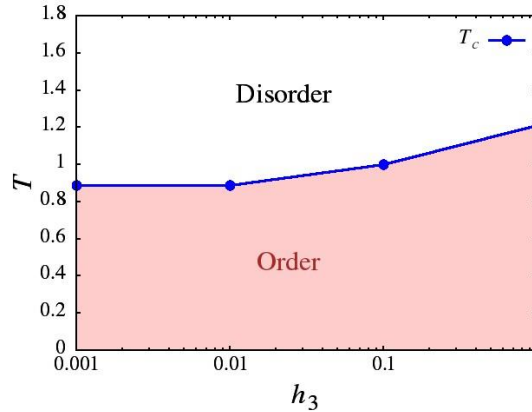
Cũng tương tự như trường hợp $h_3 > 0.01$, trong trường hợp $h_3 \leq 0.01$, tỉ số chiều dài tương quan ξ/L phụ thuộc nhiệt độ ở hình 2c, 2d vẫn có biểu hiện cắt nhau giữa với các kích thước khác nhau và chuyển pha vẫn là chuyển pha bậc hai. Mặc dù, $h_3 = 0.001$, với các kích thước mô phỏng trong nghiên cứu này, vẫn có một đoạn chồng chập nhau, tuy nhiên, khi kích thước tăng đoạn chồng chập ngắn dần, khác với trường hợp $h_3 = 0$ ở hình 3b. Vì thế khi $L \rightarrow \infty$ đoạn chồng chập sẽ giảm về không, nghĩa là tỉ số chiều dài tương quan sẽ cắt nhau tại một điểm, đây là biểu hiện của chuyển pha bậc. Các kết quả tính số là phù hợp với dự đoán của lí thuyết tái chuẩn hoá [3] và mô phỏng số $h_3 = 0.01$ [15], nhưng không phù hợp với kết luận của Nguyen và các cộng sự [16].



Hình 3: Nhiệt dung riêng và tỉ số chiều dài tương quan phụ thuộc nhiệt độ cho mô hình XY thông thường (trường hợp $h_3 = 0$).

Từ các kết quả tính toán chúng tôi xây dựng giản đồ pha sự phụ thuộc của nhiệt độ chuyển pha vào cường độ trường tinh thể trong hình 4. Từ giản đồ pha thấy rằng, cường độ trường $h_3 = 0.01$ là giá trị biên giữa hai vùng. Điều này có thể được giải thích rõ ràng hơn, vùng giá trị $h_3 > 0.01$, đóng góp của trường tinh thể so sánh được với tương tác trao đổi spin (J) nên thay đổi cường độ trường tinh thể dẫn đến thay đổi năng lượng của hệ và khi đó cả nhiệt dung riêng và ξ/L đều cho các biểu hiện rõ ràng về chuyển pha. Ngược lại, vùng $h_3 \leq 0.01, h_3 \ll J$, nên đóng góp của trường tinh thể không đáng kể vào năng lượng của hệ nên nhiệt dung riêng biểu hiện giống chuyển pha KT; nhưng ξ/L xem xét đến tương quan giữa các spin nên nó mô tả sự ảnh hưởng của cường độ trường lên hệ tốt hơn và vì thế nó phản ánh chính xác chuyển pha của hệ. Vậy với các giá trị $h_3 \neq 0$, thì mô hình XY_{h₃} chỉ cho chuyển pha bậc hai. Khi $h_3 > 0.01$, giảm giá trị h_3 thì nhiệt độ

chuyển pha T_c giảm và $T_c \rightarrow 1.49$ khi $h_3 \rightarrow \infty$. Khi $h_3 \leq 0.01$, h_3 giảm thì T_c không đổi và bằng $T_{KT} \approx 0.89$.



Hình 4: Biểu đồ pha $T-h_3$ của mô hình XYh_3 .

4. KẾT LUẬN

Chúng tôi đã tiến hành nghiên cứu hiện tượng chuyển pha của mô hình XY trong mạng hai chiều hình vuông với sự xuất hiện của trường tinh thể bất đẳng hướng ba hướng (XYh_3) bằng phương pháp mô phỏng Monte Carlo. Các đại lượng nhiệt dung riêng và tỉ số chiều dài tương quan đã được tính toán trong nghiên cứu này. Chuyển pha của mô hình này được chia làm hai vùng, với biên là $h_3 = 0.01$. Vùng $h_3 > 0.01$ mô hình có một chuyển pha bậc 2 phù hợp với các nghiên cứu lý thuyết [3] và mô phỏng trước đây với mô hình XYh_3 [4,15], nhưng nhiệt chuyển pha T_c này giảm dần khi giá trị của h_3 giảm. Vùng $h_3 \leq 0.01$, mô hình XYh_3 , vẫn có biểu hiện của một chuyển pha bậc hai nhưng nhiệt độ chuyển pha không đổi và bằng $T_{KT} \approx 0.89$ với các giá trị khác nhau của h_3 . Kết quả này phù hợp với tính toán lý thuyết nhóm tái chuẩn hoá [4] và mô phỏng số [15], nhưng không phù hợp với kết luận nghiên cứu mô phỏng mới gần đây của Nguyen và các cộng sự [16].

LỜI CẢM ƠN

Nghiên cứu này được tài trợ bởi Quỹ Phát triển khoa học và công nghệ Quốc gia (NAFOSTED) trong đề tài mã số 103.05-2019.44. Chương trình mô phỏng được thực hiện trên hệ máy tính của Viện Tiên tiến Khoa học và Công nghệ, Trường Đại học Bách khoa Hà Nội.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] J. Tobochnik, "Properties of the q -state clock model for $q=4, 5$, and 6 ," Phys. Rev. B 26, 6201 (1982)
- [2] J. M. Kosterlitz và D. J. Thouless, "Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems", *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 6, 1181 (1973).

- [3] S. Kirkpatrick J. V. Jose, L. P. Kadanoff và D. R. Nelson, “Renormalization, vortices, and symmetrybreaking perturbations in the two-dimensional planar model”, *Phys. Rev. B*, 16, 1217 (1977).
- [4] P. Reed, “Critical properties of the two-dimensional planar spin model in the presence of p -fold random anisotropy”, *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 24, L1299 (1991).
- [5] S.T. Bramwell, P.C.W. Holdsworth và J. Rothman, “Magnetization in Ultrathin Films: Critical Exponent β for the 2D-XY Model with 4-Fold Crystal Fields”, *Mod. Phys. Lett.*, B11, 139, (1997).
- [6] E. Rastelli, S. Regina và A. Tassi, “Monte carlo simulation of a planar rotator model with symmetry-breaking fields”, *Phys. Rev. B*, 69, 174407 (2004).
- [7] E. Rastelli, S. Regina và A. Tassi, “Monte Carlo simulation for square planar model with a small fourfold symmetry-breaking field”, *Phys. Rev. B*, 70, 174447 (2004).
- [8] C. M. Lapilli, P. Pfeifer và C. Wexler, “Universality Away from Critical Points in Two-Dimensional Phase Transitions”, *Phys. Rev. Lett.*, 96, 140603 (2006).
- [9] L. M. Tuan, T. T. Hoang, D. X. Nui, N. D. T. Kien, P. T. Huy và D. X. Viet, “Giản đồ pha của mô hình XY hai chiều với trường tinh thể bất đẳng hướng sáu hướng”, *Proceedings of SPMS2015*, TP HCM – VN, 135 (2015).
- [10] A. Taroni, S. T. Bramwell và P. C. W. Holdsworth, “Universal Window for Two Dimensional Critical Exponents”, *J. Phys.: Condens. Matter*, 20, 275233 (2008).
- [11] https://www.nobelprize.org/nobel_prizes/physics/laureates/2016/.
- [12] A. P. Young, “On the theory of the phase transition in the two-dimensional planar spin model”, *J. Phys. Cond: Solid State Phys*, 11, L453 (1978).
- [13] J. Tobochnik và G. V. Chester, “Monte Carlo study of the planar spin model”, *Phys. Rev. B*, 20, 3761 (1979).
- [14] F. Y. Wu, “The potts model”, *Reviews of Modern Physics*, 54(1), 235 (1982).
- [15] A. Taroni, Thesis of PhD, *University of London*, 152 (2007).
- [16] T. L. H. Nguyen và V. Thanh Ngo, “Study on the critical properties of thin magnetic films using the clock model”, *Adv. Nat. Sci: Nanosci. Nanotechnol.*, 8, 015013 (2017).
- [17] L. Fruchter, D. Colson và V. Brouet, “Magnetic critical properties and basal-plane anisotropy of Sr₂IrO₄”, *J. Phys.: Condens. Matter*, 28, 126003 (2016).
- [18] J. G. Vale, S. Boseggia, H. C. Walker, R. Springell, Z. Feng, E. C. Hunter, R. S. Perry, D. Prabhakaran, A. T. Boothroyd, S. P. Collins, H. M. Rønnow và D. F. McMorrow, “Importance of XY anisotropy in Sr₂IrO₄ revealed by magnetic critical scattering experiments”, *Phys. Rev. B*, 92, 020406 (2015).
- [19] D. X. Viet và H. Kawamura, “Monte carlo studies of chiral and spin ordering of the three-dimensional heisenberg spin glass”, *Phys. Rev. B*, 80, 064418 (2009).

Title: STUDY INFLUENCE OF SYMMETRY-BREAKING FIELD h_3 TO PHASE TRANSITION OF THE 2D XY MODEL

Abstract: Two dimensional magnetic materials have experimental critical exponents that often have different critical exponent, not belonging to the Ising universal class nor to the XY universal class, but their values lies in a “universal window”, bounded by the Ising and XY

critical exponent. The XYh_q model is introduced to study these materials. Theoretically, XYh_q model has been studied by using renormalization group and numerical simulation. In this model, the authors have shown: for $q \leq 4$, it has only the Ising phase transition; for $q > 4$, it has KT phase transition depending on the value of q . However, experimental critical exponents have unusual behaviour even with anisotropy $q \leq 4$. Therefore, we study the phase transition phenomena of XYh_3 model depending on the intensity of anisotropic crystal fields (h_3) using extensive Monte Carlo simulation. The results show that the phase transition of XYh_3 depends on the intensity of h_3 : for $h_3 > 0.01$ the model has a second-order phase transition and the phase transition temperature decreases as the crystal field strength decreases; for $h_3 \leq 0.01$ The model still has a second-order phase transition, but the phase transition temperature is constant and equal to the KT phase transition temperature.

Keywords: Monte Carlo simulation, phase transition, magnetic materials, XYh_q model.