

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC  
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ

---



NGUYỄN HỒNG SƠN

NGHIÊN CỨU VỀ ĐIỀU KIỆN TỒN TẠI VÀ CÁC  
TÍNH CHẤT CHUYỂN PHA TÔ PÔ TRONG MỘT SỐ  
HỆ ĐIỆN TỬ TƯƠNG QUAN

LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ

Hà Nội – 2023

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC  
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ

NGUYỄN HỒNG SƠN

NGHIÊN CỨU VỀ ĐIỀU KIỆN TỒN TẠI VÀ CÁC  
TÍNH CHẤT CHUYỂN PHA TÔ PÔ TRONG MỘT SỐ  
HỆ ĐIỆN TỬ TƯƠNG QUAN

Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết và vật lý toán

Mã số: 9 44 01 03

LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ

NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC:

PGS.TS Trần Minh Tiên

Hà Nội – 2023

## **LỜI CAM ĐOAN**

Tôi xin cam đoan đây là công trình nghiên cứu của riêng tôi. Các số liệu, kết quả mới mà tôi công bố trong luận án là trung thực và chưa được ai công bố trong bất kỳ công trình nào khác.

Hà nội, ngày ..... tháng ..... năm 2023

**Tác giả**

**Nguyễn Hồng Sơn**

## LỜI CẢM ƠN

Tôi xin cảm ơn PGS-TS Trần Minh Tiến đã tận tình hướng dẫn tôi hoàn thành luận án này. Xin cảm ơn đến cán bộ, thầy giáo và cô giáo của Viện Vật lý đã giúp đỡ tôi trong thời gian học tập và nghiên cứu tại Viện Vật lý.

Tôi xin cảm ơn các cán bộ phòng sau đại học Viện Vật lý, phòng đào tạo Học viện Khoa học và Công nghệ đã hỗ trợ và tạo điều kiện hoàn thành các thủ tục bảo vệ luận án.

Tôi xin cảm ơn Lãnh đạo Trường Đại học Công đoàn, tập thể Khoa Bảo hộ lao động đã giúp đỡ, tạo điều kiện mọi mặt trong quá trình học tập và bảo vệ luận án

Cuối cùng, tôi xin cảm ơn gia đình, bạn bè luôn ở bên động viên và giúp đỡ tôi vượt qua mọi khó khăn trong quá trình học tập và hoàn thành luận án.

## MỤC LỤC

DANH MỤC CHỮ VIẾT TẮT .....	5
DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ .....	6
MỞ ĐẦU .....	10
1. Chất điện môi tô pô và lý do chọn đề tài	10
2. Mục tiêu nghiên cứu	13
3. Nội dung nghiên cứu	13
4. Đối tượng nghiên cứu	14
5. Phương pháp nghiên cứu	14
6. Tính thời sự, cấp thiết và cập nhật của vấn đề và phương pháp nghiên cứu	15
7. Ý nghĩa khoa học và thực tiễn của đề tài	16
8. Những đóng góp mới của luận án	17
9. Cấu trúc của luận án	17
10. Quy ước	18
CHƯƠNG 1. CHẤT ĐIỆN MÔI TÔ PÔ VÀ LÝ THUYẾT TRƯỜNG TRUNG BÌNH ĐỘNG .....	19
Phần I. Chất điện môi tô pô	19
1.1. Trạng thái điện môi	19
1.2. Trạng thái Hall lượng tử	20
1.3. Bất biến tô pô	21
1.4. Các trạng thái biên và tương ứng khối – biên	23
1.5. Mô hình Haldane	24
1.6. Mô hình Kane - Mele	28
1.7. Kết luận phần I	30
Phần II. Lý thuyết trường trung bình động	30
1.8. Lý thuyết trường trung bình tĩnh	31
1.9. Lý thuyết trường trung bình động	37
1.10. Kết luận phần II	43
CHƯƠNG 2. HIỆU ỨNG TƯƠNG QUAN ĐIỆN TỬ TRONG CHẤT ĐIỆN MÔI TÔ PÔ CHERN .....	44

2.1. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu	44
2.2. Mô hình Haldane - Falicov – Kimball	46
2.3. Áp dụng lý thuyết trường trung bình động	48
2.4. Kết quả tính số	50
2.4.1. Chuyển pha Mott	51
2.4.2. Trật tự điện tích	56
2.5. Kết luận	58
CHƯƠNG 3. ĐIỆN MÔI TÔ PÔ TỪ TÍNH TRONG MÔ HÌNH TRAO ĐỔI KÉP VỚI LIÊN KẾT SPIN – QUỸ ĐẠO .....	59
3.1. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu	59
3.2. Mô hình trao đổi kép và liên kết spin – quỹ đạo	60
3.3. Áp dụng lý thuyết trường trung bình động	64
3.4. Kết quả tính số	66
3.4.1. Điện môi tô pô phản sắt từ	68
3.4.2. Điện môi tô pô sắt từ	71
3.5. Kết luận	74
CHƯƠNG 4. PHA ĐIỆN MÔI TÔ PÔ TRONG MẠNG TINH THỂ LIEB SẮT TỪ .....	75
Phần I: Lý thuyết trường trung bình động cho mạng tinh thể có cấu trúc dải năng lượng phẳng	75
4.1. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu	75
4.2. Mô hình Hubbard trong mạng siêu perovskite và nghiệm lý thuyết trường trung bình động	77
4.3. Kết luận phần I	94
Phần II. Các trạng thái điện môi tô pô trong mạng tinh thể Lieb khi có liên kết spin – quỹ đạo và từ trường	95
4.4. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu	95
4.5. Mô hình	96
4.6. Kết quả tính số	98
4.7. Kết luận phần II	105

KẾT LUẬN .....	106
DANH MỤC CÔNG TRÌNH CỦA TÁC GIẢ.....	108
TÀI LIỆU THAM KHẢO.....	110

## DANH MỤC CHỮ VIẾT TẮT

Viết tắt	Tiếng Anh	Tiếng Việt
AFM	antiferromagnetic	phản sắt từ
AFMI	antiferromagnetic insulator	điện môi phản sắt từ
AFMTI	antiferromagnetic topological insulator	điện môi tô pô phản sắt từ
DFT	density functional theory	lí thuyết hàm mật độ
DMFT	dynamical mean field theory	lý thuyết trường trung bình động
DOS	density of states	mật độ trạng thái
ED	exact diagonalization	chéo hóa chính xác
FDWN	frequency domain wind number	số vòng quấn miền tần số
FM	ferromagnetic	sắt từ
FM M	ferromagnetic metal	kim loại sắt từ
FMTI	ferromagnetic topological insulator	điện môi tô pô sắt từ
MED	modified exact diagonalization	chéo hóa chính xác cải biên
NRG	numerical renormalization group	nhóm tái chuẩn hóa tính số
PM	paramagnetic	thuận từ
PM M	paramagnetic metal	kim loại thuận từ
PMTI	paramagnetic topological insulator	điện môi tô pô thuận từ
QAHE	quantum anomalous Hall effect	hiệu ứng Hall dị thường lượng tử
QHE	quantum Hall effect	hiệu ứng Hall lượng tử
QSHE	quantum spin Hall effect	hiệu ứng Hall spin lượng tử
SE	spin exchange	trao đổi spin
SED	simple exact diagonalization	chéo hóa chính xác thông thường
SOC	spin – orbital coupling	liên kết spin – quỹ đạo



## DANH MỤC CÁC HÌNH VẼ

Hình 1.1. Các trạng thái của vật chất. (a) – (c) Trạng thái cách điện. (a) Một điện môi nguyên tử. (b) Một cấu trúc dải điện môi mô hình đơn giản. (d) – (f) Trạng thái Hall lượng tử. (d) Chuyển động cyclotron của các electron. (e) Các mức Landau, được xem như một cấu trúc dải. (c) và (f) Hai bề mặt khác nhau về $g$ . (c) $g = 0$ đối với hình cầu và (f) $g = 1$ đối với hình bán vòng.....	20
Hình 1.2. Hiệu ứng Hall lượng tử khi loại bỏ phần chuyển động cyclotron của điện tử khi ở biên khối điện môi. ....	24
Hình 1.3. Từ thông qua mạng con.....	25
Hình 1.4. Mạng tổ ong và ký hiệu các vector sử dụng trong biểu thức (1.6). ....	26
Hình 1.5. Vùng Brillouin cho mạng tổ ong với các vector cơ sở của mạng đảo $B_1 = 2\pi/3a(1, \sqrt{3}), B_2 = 2\pi/3a(1, -\sqrt{3})$ . ....	27
Hình 1.6. Giản đồ pha của mô hình Haldane. ....	28
Hình 1.7. Cấu trúc dải liên kết spin – quỹ đạo $\lambda_{SO}$ mô tả trong mô hình Kane – Mele	29
Hình 1.8: Sự suy biến của giản đồ Feynman khi $d \rightarrow \infty$ của giản đồ bất khả quy bậc hai theo nhiễu loạn năng lượng riêng $\Sigma_{ij}^{(2)}$ . ....	39
Hình 1.9. Mật độ trạng thái của mô hình Hubbard tại $T = 0$ .....	43
Hình 2.1. Mật độ trạng thái của fermion linh động đối với các giá trị khác nhau của $U$ ( $t = 1, t_2 = 0,5$ ).....	51
Hình 2.2. Phần ảo của năng lượng riêng $\text{Im}\Sigma(i\omega)$ đối với các giá trị khác nhau của $U$ ( $t = 1, t_2 = 0,1$ ).....	52
Hình 2.3. Giá trị tuyệt đối của hệ số tái chuẩn hóa $Z$ là hàm của $U$ ( $t = 1; t_2 = 0,1$ ).....	53
Hình 2.4. Giản đồ pha của các trạng thái đối xứng nghịch đảo không gian khi lấp đầy một nửa. CI kí hiệu pha điện môi Chern, và MI kí hiệu pha điện môi Mott. Pha kim loại khe giả tồn tại giữa hai pha ( $t = 1$ ). ....	56

Hình 3.1. Cấu trúc dấu $v_{ij}$ của số hạng SOC trong mạng tinh thể tổ ong. ....	61
Hình 3.2: Mật độ điện tử $n$ và độ từ hóa mạng con $m_A$ , $m_B$ thông qua thế hóa $\mu$ đối với các giá trị khác nhau của SE và SOC cố định $\lambda = 0,5$ . Các đường chấm chấm nằm ngang cho thấy mật độ điện tử $n = 0,5$ ; 1 và 1,5. ....	67
Hình 3.3. Độ từ hóa mạng con $m_A = -m_B$ và số Chern spin $C_s$ khi lấp đầy một nửa và SOC $\lambda = 0,5$ . ....	69
Hình 3.4. DOS mạng con đối với thành phần spin up (đường liền nét màu xanh) và spin down (đường đứt nét màu đỏ) khi lấp đầy một nửa và SOC $\lambda = 0,5$ . ....	70
Hình 3.5. Giản đồ pha của trường hợp lấp đầy một nửa. Các chữ viết tắt AFMI, AFMTI, và PMTI lần lượt kí hiệu cho pha điện môi AFM tô pô tầm thường, điện môi tô pô AFM và điện môi tô pô PM. ....	71
Hình 3.6. Độ từ hóa mạng con $m_A = m_B$ và khe năng lượng $\Delta$ trong trường hợp lấp đầy một phần tư và SOC $\lambda = 0,5$ . ....	72
Hình 3.7. DOS mạng con đối với spin lên (đường liền nét màu xanh) và spin xuống (đường đứt nét màu đỏ) trong trường hợp lấp đầy một phần tư và SOC $\lambda = 0,5$ . ....	73
Hình 3.8. Giản đồ pha của trường hợp lấp đầy một phần tư. Các chữ viết tắt FMTI, FM M và PM M lần lượt kí hiệu điện môi tô pô FM, kim loại FM, kim loại PM. ....	74
Hình 4.1. Cấu trúc lý tưởng của hợp chất perovskite $ABX_3$ . Bát diện chung đỉnh $BX_6$ tạo ra mạng lập phương tâm cạnh. ....	76
Hình 4.2. Mật độ số hạt $n_c$ của các electron $c$ là hàm của mức năng lượng $\varepsilon_c$ tại $U = 5$ và $\mu = U/2$ ( $t^* = 1$ ). ....	86
Hình 4.3. Độ từ hóa $m_c$ phụ thuộc vào mật độ điện tích $n_c$ của các electron $c$ đối với các giá trị khác nhau của thế hóa $\mu$ . PS kí hiệu pha phân tách pha, $U = 5$ , $t^* = 1$ . ....	88
Hình 4.4. Độ từ hóa $m_c$ của mạng lập phương C như là hàm của tương tác Coulomb $U$ khi lấp đầy một nửa, $\mu = U/2$ , và $\varepsilon_c = 0$ , $t^* = 1$ . ....	89
Hình 4.5. Giản đồ pha từ của mạng lập phương C. SF (UF) kí hiệu cho sắt từ bão hòa (không bão hòa). Sự tách pha xảy ra ở biên pha $U = 5$ , $t^* = 1$ . ....	89
Hình 4.6. Mật độ trạng thái (DOS) của các electron của mạng con C và A khi lấp đầy một nửa ( $\mu = U/2$ , $\varepsilon_c = 0$ ) trong mạng Lieb hai chiều. Đường liền nét màu lam, đường chấm chấm màu lục, và hình tròn đặc màu đỏ là DOS tính bằng DMFT với ED cải biên ( $n_s^a = n_s^c = 3$ ), ED thông thường ( $n_s^a = n_s^c = 4$ ) và NRG. ....	91

Hình 4.7. Sự phụ thuộc vào tương tác của độ từ hóa mạng con tính bằng DMFT với NRG, ED cải biên (MED) ( $n_s^a = n_s^c = 3$ ), và ED thông thường (SED) ( $n_s^a = n_s^c = 5$ ) khi lấp đầy một nửa ( $\mu = U/2, \varepsilon_c = 0$ ) trong mạng Lieb hai chiều. ....	92
Hình 4.8. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa mạng con tính toán bằng DMFT với ED cải biên ( $n_s^a = n_s^c = 3$ ) khi lấp đầy một nửa ( $\mu = U/2, \varepsilon_c = 0$ ) trong mạng Lieb hai chiều. ....	94
Hình 4.9. (a) Cấu trúc mạng Lieb với SOC và điều biến mạng. Các mũi tên cho thấy dấu $v_{ij} = 1$ của SOC. Trong chiều ngược lại $v_{ij} = -1$ . (b) Một băng nano với biên mở thẳng trong trục y và biên tuần hoàn theo trục x. ....	97
Hình 4.10. Tiến hóa của cấu trúc dải năng lượng với $N_y$ tăng. Thông số của mô hình $\lambda = 0,4; \delta = 0; h_A = h_B = h_C = 0$ được lựa chọn như một ví dụ. ....	98
Hình 4.11. Cấu trúc dải năng lượng với các từ trường khác nhau và SOC ấn định. Màu nâu (xanh) biểu diễn cấu trúc dải năng lượng đối với thành phần spin lên (xuống). Đường chấm chấm cho thấy vị trí của thể hóa khi lấp đầy một nửa, một phần ba và một phần sáu. ....	99
Hình 4.12. Cấu trúc dải năng lượng với các từ trường khác nhau $h_A \neq 0, h_B = h_C = 0$ với SOC ấn định. Màu nâu (xanh) biểu diễn cấu trúc dải năng lượng đối với thành phần spin lên (xuống). Đường chấm chấm cho thấy vị trí của thể hóa học khi lấp đầy một phần ba (bên trái) và lấp đầy một phần sáu (bên phải). ....	100
Hình 4.13. Cấu trúc dải năng lượng với các từ trường khác nhau $h_A = 0, h_B = h_C \neq 0$ với SOC ấn định. Màu nâu (xanh) thể hiện cấu trúc dải năng lượng đối với thành phần spin lên (xuống). Đường chấm chấm cho thấy vị trí của thể hóa ở độ lấp đầy một phần ba (bên trái) và ở mật độ một phần sáu và lớn hơn một phần sáu một chút (bên phải). ....	102
Hình 4.14. Cấu trúc dải năng lượng với các từ trường khác nhau $0 < h_A < h_B = h_C$ với SOC ấn định. Màu nâu (xanh) biểu diễn cấu trúc dải năng lượng đối với thành phần spin lên (xuống). Đường chấm chấm cho thấy vị trí của thể hóa ở mật độ 1/2 và 1/6. ....	103
Hình 4.15. Cấu trúc dải năng lượng với các từ trường khác nhau $0 < h_B = h_C < h_A$ với SOC ấn định. Màu nâu (xanh) thể hiện cấu trúc dải năng lượng đối với thành phần spin lên (xuống). Đường chấm chấm cho thấy vị trí của thể hóa ở mật độ 1/2 và 1/6. ....	104

Hình 4.16. Cấu trúc dải năng lượng với các từ trường khác nhau  $h_B = h_C < 0 < h_A$  với SOC ấn định. Màu nâu (xanh) thể hiện cấu trúc dải năng lượng đối với thành phần spin lên (xuống). Đường chấm chấm cho thấy vị trí của thể hóa ở mật độ 1/2 và 1/3. ....105

## MỞ ĐẦU

### 1. Chất điện môi tô pô và lý do chọn đề tài

Chất điện môi tô pô vừa là một loại vật liệu mới được khám phá, vừa thể hiện một trạng thái lượng tử mới được nghiên cứu, hứa hẹn có những triển vọng ứng dụng vào thực tế của loại vật liệu chức năng lượng tử, cũng như triển vọng lý thuyết về những khám phá tính chất lượng tử cơ bản chưa từng biết tới có khả năng thể hiện trong các tính chất vật lý của loại vật liệu này [1-5].

Trạng thái điện môi tô pô là một phân loại mới của các pha vật chất. Thông thường, các pha vật chất được phân loại theo lý thuyết Landau, mô tả trạng thái bị phá vỡ tự phát về mặt đối xứng thông qua thông số trật tự [6]. Khám phá hiệu ứng Hall lượng tử đã dẫn đến một phân loại pha khác dựa trên khái niệm tô pô, không có thông số trật tự [7-9]. Tô pô ban đầu được biết đến trong toán học với các tính chất như tính đồng phôi, tính bảo toàn dưới biến dạng liên tục của vật (do kéo, xoắn nhưng không có cắt xé hay dán) [4,5,10,11]. Trong hiệu ứng Hall lượng tử, độ dẫn Hall là một bất biến tô pô, và do vậy nó rất bền vững, không biến đổi khi các thông số của hệ thay đổi, trừ phi hệ trải qua chuyển pha lượng tử [8,9]. Trạng thái có hiệu ứng Hall lượng tử không có phá vỡ đối xứng tự phát nào, nhưng nó xác định pha tô pô theo nghĩa các tính chất cơ bản (như là giá trị lượng tử của độ dẫn Hall và số trạng thái biên không khe) không nhạy cảm với sự thay đổi các thông số của vật liệu trừ khi hệ trải qua chuyển pha lượng tử [1-5].

Gần đây, các nghiên cứu khám phá ra rằng liên kết spin – quỹ đạo của điện tử có thể dẫn đến pha điện môi có bất biến tô pô và thực tế đã quan sát được về các pha này trong vật liệu thực [12-14]. Chất điện môi tô pô, cũng giống như các chất điện môi thông thường, có khe năng lượng khối ngăn cách dải năng lượng điện tử và hóa trị [1-5]. Khe năng lượng trong khối xuất hiện do liên kết spin – quỹ đạo của điện tử. Khác với chất điện môi thông thường, biên (bề mặt hay cạnh trong trường hợp hai chiều) của khối điện môi tô pô có trạng thái kích thích không khe (gapless) [1-5]. Chất điện môi tô pô có liên hệ gần gũi với trạng thái Hall lượng tử, bởi vì trạng thái Hall lượng tử cũng có các trạng thái biên kích thích (hay còn gọi là mode) không khe [15]. Các trạng thái biên của chất điện môi tô pô dẫn đến hình thành tính chất dẫn điện trên biên (bề mặt hay cạnh) của chất điện môi tô pô, trong khi ở trong khối chất điện môi tô pô cách điện [1-5]. Đối với chất điện môi tô pô hai chiều, bất

biến tô pô, cũng giống như trong hiệu ứng Hall lượng tử, thể hiện qua độ dẫn Hall điện tích hay spin được lượng tử hóa [1-5]. Số lượng tử hóa trong độ dẫn Hall này là bất biến tô pô. Trong chất điện môi tô pô ba chiều, bất biến tô pô là các chỉ số bất biến tô pô, mở rộng từ trường hợp bất biến tô pô hai chiều [1-5,16-18]. Đại lượng vật lý thể hiện bất biến tô pô trong chất điện môi ba chiều là hệ số điện từ, thể hiện sự phản hồi tuyến tính của phân cực điện và từ đối với từ trường và điện trường tương ứng [19,20]. Các trạng thái tô pô như vậy có các tính chất đặc biệt và hữu ích cho các ứng dụng khác nhau từ spintronic đến tính toán lượng tử [1-5].

Vật liệu điện môi tô pô hai chiều  $Z_2$ , thông thường còn được gọi là chất điện môi Hall spin lượng tử, được lý thuyết tiên đoán trước và sau đó thực nghiệm tìm thấy trong giếng lượng tử HgTe/CdTe [12-14]. Trạng thái điện môi tô pô trong giếng lượng tử này quan sát thấy khi độ dày của giếng lượng tử nhỏ hơn một giá trị tới hạn [13,14]. Trong trạng thái điện môi tô pô của giếng lượng tử HgTe/CdTe, một cặp các trạng thái biên với các spin ngược nhau truyền theo các hướng ngược nhau [16]. Kết quả dẫn đến độ dẫn Hall spin được lượng tử hóa, tương tự trong hiệu ứng Hall lượng tử. Chất điện môi tô pô ba chiều cũng được lý thuyết dự đoán trong các hợp chất  $\text{Bi}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Sb}_2\text{Te}_3$ ,  $\text{Bi}_2\text{Se}_3$  và cũng được thí nghiệm quan sát thấy [21-27]. Ngoài các ví dụ đặc trưng nêu ở trên, còn có nhiều vật liệu khám phá mới cũng có tính chất điện môi tô pô  $Z_2$  được bảo toàn bởi đối xứng nghịch đảo thời gian [1-5]. Trong các chất điện môi ở trên, tương quan điện tử không đóng vai trò thiết yếu. Tương quan điện tử thể hiện tính chất giải kết (disentanglement) của hệ. Một hệ điện tử có thể giải kết được là khi hàm mật độ hạt của hai hạt của hệ bằng tích số của các hàm mật độ hạt của từng hạt, nghĩa là  $\rho_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2) = \rho(\mathbf{r}_1)\rho(\mathbf{r}_2)$ , trong đó  $\rho_2(\mathbf{r}_1, \mathbf{r}_2)$  là hàm mật độ hạt của hai hạt và  $\rho(\mathbf{r})$  là hàm mật độ hạt của một hạt. Hệ điện tử có thể giải kết được là hệ điện tử không có tương quan. Hệ điện tử có tương quan là hệ điện tử không giải kết được. Tương quan điện tử mạnh hay yếu tùy thuộc vào mức độ giải kết của hệ. Do tương tác Coulomb giữa các điện tử làm điện tử không giải kết được, nên khái niệm tương quan điện tử tương đồng với tương tác Coulomb. Tuy vậy, trong một số gần đúng, như gần đúng Hartree-Fock, điện tử vẫn giải kết được mặc dù có tính đến tương tác Coulomb. Do vậy, tương quan điện tử còn được hiểu là tính chất của tương tác Coulomb ở phạm vi ngoài gần đúng Hartree-Fock. Tương quan điện tử có thể dẫn đến hiệu ứng và tính chất thú vị cho hệ điện tử. Hiệu

ứng Hall lượng tử phân số là một ví dụ kinh điển cho thấy vai trò chính yếu của tương quan điện tử [28,29]. Tương quan điện tử tạo ra các trạng thái kích thích có điện tích phân số, dẫn đến độ dẫn Hall có dạng phân số [28]. Từ đây vấn đề đặt ra là khi có tương quan điện tử, điều kiện tồn tại và các tính chất của các pha tô pô như thế nào, có thay đổi gì không.

Thứ nhất, chúng ta biết rằng tương quan điện tử có thể tạo ra trạng thái điện môi, điển hình như trạng thái điện môi Mott [30-33]. Vậy tương quan điện tử có tạo ra chuyển pha điện môi Mott trong một chất điện môi tô pô hay không, hay ít nhất ảnh hưởng của tương quan điện tử lên trạng thái điện môi tô pô như thế nào, cho đến nay vẫn là vấn đề chưa được giải quyết trọn vẹn, và được quan tâm nghiên cứu rất nhiều cả về mặt lý thuyết lẫn thực nghiệm [34,35]. Các nghiên cứu về vai trò tương quan điện tử lên trạng thái điện môi tô pô phần lớn dựa trên nghiên cứu các mô hình lý thuyết tối thiểu cho hệ tương quan điện tử kết hợp với liên kết spin – quỹ đạo làm định hướng cho nghiên cứu thực nghiệm tìm kiếm chất điện môi Mott tô pô. Bên cạnh đó, mô phỏng lượng tử có khả năng tạo ra các mô hình tối thiểu một cách nhân tạo, và như vậy kết hợp với nghiên cứu lý thuyết, vừa dễ định hướng cho nghiên cứu thực nghiệm, vừa tăng cường khả năng hiểu biết bản chất lượng tử của trạng thái điện môi tô pô [36]. Do vậy, hướng nghiên cứu này khá sôi động, và có nhiều triển vọng trong tương lai.

Thứ hai, tương quan điện tử còn có thể tạo ra các trạng thái trật tự tầm xa [31-32]. Các trạng thái này có thể có tính chất tô pô hay không, trong điều kiện như thế nào trật tự tầm xa có thể song song đồng tồn tại với bất biến tô pô cũng là vấn đề nghiên cứu hấp dẫn. Đặc biệt gần đây, các chất điện môi tô pô từ được tìm thấy [37-40]. Trong các chất điện môi tô pô từ, trật tự tầm xa như sắt từ hay phản sắt từ đồng tồn tại với bất biến tô pô. Do vậy có thể thấy vai trò quan trọng của tương quan điện tử trong vấn đề hình thành các trạng thái từ tính lẫn mối quan hệ với bất biến tô pô. Các nghiên cứu thực nghiệm chủ yếu đi tìm các chất điện môi vừa có độ từ hóa tự phát, vừa có bất biến tô pô, thể hiện qua lượng tử hóa độ dẫn Hall spin hay trạng thái kích thích không khe trên bề mặt [39,40]. Các nghiên cứu lý thuyết phần lớn dựa trên tính toán từ nguyên lý ban đầu [37]. Trong tính toán nguyên lý ban đầu, tương quan điện tử thường không được tính tới hay có tính tới thì cũng không được tính tới toàn vẹn. Do vậy, vai trò tương quan điện tử trong quá trình hình thành độ

từ hòa tự phát và khả năng song song đồng tồn tại với bất biến tô pô không tầm thường là vấn đề cần được quan tâm nghiên cứu.

Thứ ba, chúng ta biết rằng tương quan điện tử trong các hệ có cấu trúc dải năng lượng phẳng rất đặc biệt, bởi vì đối với dải năng lượng phẳng, bất kỳ tương tác Coulomb nào, dù mạnh hay yếu, cũng đều dẫn đến tương quan điện tử mạnh [41]. Do vậy, vai trò của tương quan điện tử trong hệ có cấu trúc dải năng lượng phẳng trở nên quan trọng và có thể ảnh hưởng đặc biệt tới tính chất tô pô. Vai trò của dải năng lượng phẳng đối với pha điện môi tô pô được quan tâm nghiên cứu ngay từ khi các pha tô pô được phát hiện [42,43]. Nhưng trong các nghiên cứu này tương quan điện tử không được tính đến. Do vậy, vấn đề đặt ra là khi có dải năng lượng phẳng, tương quan điện tử có tác động gì không và có ảnh hưởng như thế nào lên điều kiện tồn tại và các tính chất của các pha tô pô.

Để giải quyết các vấn đề mới đặt ra ở trên, có tính khoa học, thời sự và cấp thiết, đề tài nghiên cứu về điều kiện tồn tại và các tính chất chuyển pha tô pô trong một số hệ điện tử tương quan được lựa chọn làm đề tài nghiên cứu của luận án này.

## **2. Mục tiêu nghiên cứu**

Mục tiêu nghiên cứu của luận án tập trung vào 3 vấn đề nghiên cứu chính về điều kiện tồn tại và các tính chất chuyển pha tô pô do tương quan điện tử. Cụ thể ba mục tiêu nghiên cứu chính của luận án là

1. Chỉ ra vai trò của tương quan điện tử lên chuyển pha Mott trong một chất điện môi tô pô và điều kiện tồn tại pha điện môi tô pô dưới sự tác động của tương quan điện tử.
2. Chỉ ra vai trò tương của quan điện tử với tạp từ trong khả năng có thể dẫn đến các trạng thái tô pô từ tính, cùng với điều kiện cho sự tồn tại của trạng thái tô pô từ tính.
3. Chỉ ra vai trò của dải năng lượng phẳng với trạng thái điện môi tô pô khi có tương quan điện tử và điều kiện tồn tại của pha điện môi tô pô cùng với các tính chất của nó.

## **3. Nội dung nghiên cứu**

Với 3 mục tiêu nghiên cứu đề ra, kết cấu của luận án này gồm 3 nội dung:

1. Nghiên cứu vai trò của tương quan điện tử lên chuyển pha Mott trong một chất điện môi tô pô được cụ thể hóa thông qua nghiên cứu chuyển pha



Mott trong mô hình Haldane - Falicov – Kimball. Tính toán và khảo sát hàm mật độ trạng thái để xác định điều kiện tồn tại của pha điện môi và tính chất của chúng. Bất biến tô pô (số Chern) được tính toán để xác định điều kiện tồn tại của pha tô pô. Từ các kết quả thu được, xây dựng giản đồ pha xác định điều kiện tồn tại của pha điện môi tô pô.

2. Nghiên cứu vai trò của tương quan điện tử với tạp từ trong khả năng có thể dẫn đến các trạng thái tô pô từ tính được cụ thể hóa qua nghiên cứu chuyển pha từ và tô pô trong mô hình trao đổi kép khi có liên kết spin – quỹ đạo. Độ từ hóa tự phát và bất biến tô pô (số Chern) được tính toán. Khảo sát sự thay đổi của độ từ hóa và số Chern theo các thông số của mô hình để từ đó rút ra điều kiện tồn tại và tính chất của pha điện môi tô pô từ tính.
3. Nghiên cứu vai trò của dải năng lượng phẳng đối với trạng thái điện môi tô pô khi có tương quan điện tử được cụ thể hóa qua nghiên cứu khả năng tồn tại các pha có trật tự tầm xa trong mô hình đặc trưng có dải năng lượng phẳng, mô hình liên kết chặt trên mạng tinh thể Lieb, khi có tương quan điện tử. Trước tiên, luận án xây dựng phương pháp trường trung bình động cho hệ có dải năng lượng phẳng. Từ kết quả tính toán thu được xác định điều kiện tồn tại và tính chất của các pha trật tự điện tử tầm xa trong mô hình. Kết hợp với liên kết spin – quỹ đạo của điện tử mô hình hóa tác động của trật tự tầm xa lên điện tử linh động bằng trường hiệu dụng. Điều kiện tồn tại và tính chất của các pha điện môi tô pô được khảo sát thông qua xác định các mode biên theo sự biến thiên của các thông số của mô hình.

#### **4. Đối tượng nghiên cứu**

Đối tượng nghiên cứu của ba nội dung nghiên cứu kể trên là các các chất điện môi tô pô 2 chiều, có tương quan điện tử, từ tính hay mạng tinh thể có cấu trúc đặc biệt.

#### **5. Phương pháp nghiên cứu**

Trong cả ba vấn đề nghiên cứu của luận án, tương quan điện tử đóng vai trò trung tâm. Tương quan điện tử được đề cập từ rất lâu trước đây trong nghiên cứu cơ chế hình thành pha điện môi Mott, pha sắt từ [30-33]. Đặc biệt, khi chất siêu dẫn

hiệu ứng tương quan điện tử được tìm thấy, tương quan điện tử được coi là chìa khóa then chốt dẫn đến hiện tượng siêu dẫn ở nhiệt độ cao, tuy cho đến nay cơ chế tạo ra siêu dẫn nhiệt độ cao vẫn chưa có lời giải đáp [32,44]. Cho đến bây giờ, tương quan điện tử vẫn là một trong những vấn đề trọng tâm nghiên cứu trong vật lý các chất cô đặc và vật lý vật liệu [32,44]. Mặt khác, do không có lời giải chính xác cho các hệ tương quan điện tử, ngoại trừ các trường hợp đặc biệt, nên tương quan điện tử là vấn đề thách thức trong nghiên cứu cơ bản [32,44]. Phương pháp nghiên cứu truyền thống, như lý thuyết trường trung bình, không thích hợp cho nghiên cứu hệ tương quan điện tử. Ít nhất, gần đúng trường trung bình thuần túy không thể nào mô tả được chuyển pha Mott [31]. Các phương pháp tính số như phương pháp mô phỏng Monte Carlo, chéo hóa chính xác... cũng có những hạn chế nhất định khi áp dụng vào hệ tương quan điện tử. Chẳng hạn, phương pháp mô phỏng Monte Carlo có vấn đề về dấu khi tính toán ở nhiệt độ thấp, hay phương pháp chéo hóa chính xác có vấn đề về hiệu ứng kích thước hữu hạn [45,46].

Một trong những phương pháp khắc phục được nhược điểm của gần đúng trường trung bình thuần túy là lý thuyết trường trung bình động [47-50]. Lý thuyết trường trung bình động là một mở rộng của lý thuyết trường trung bình trước đây (có thể gọi là lý thuyết trường trung bình tĩnh). Lý thuyết trường trung bình động tính được thăng giáng địa phương theo thời gian mà lý thuyết trường trung bình tĩnh đã không thể làm được [47-50]. Lý thuyết trường trung bình động được áp dụng rộng rãi và thành công trong nghiên cứu các hệ tương quan điện tử và các vật liệu tương quan điện tử [47-50]. Do vậy, trong luận án này phương pháp nghiên cứu đề giải quyết các vấn đề mà luận án đặt ra là sử dụng chủ yếu lý thuyết trường trung bình động.

## **6. Tính thời sự, cấp thiết và cập nhật của vấn đề và phương pháp nghiên cứu**

Hiệu ứng tương quan điện tử trong các hệ vật lý cô đặc vẫn là một trong những vấn đề trọng tâm nghiên cứu của vật lý ngày nay. Bài tổng quan gần đây nhất về mô hình lý thuyết tương quan điện tử có đưa ra bốn vấn đề lớn còn bỏ ngỏ, chưa có lời giải đáp và cần phải nghiên cứu tiếp tục về hiệu ứng tương quan điện tử [32]. Bốn vấn đề lớn đó là

1. Tương quan điện tử có dẫn đến siêu dẫn nhiệt độ cao?

2. Các pha kỳ lạ nào có thể xuất hiện do tương quan điện tử?
3. Tính chất lỏng phi Fermi kiểu gì biểu hiện ở nhiệt độ hữu hạn do tương quan điện tử?
4. Các gợn đúng trong nghiên cứu tương quan điện tử có khả tín?

Hiệu ứng tương quan điện tử lên điều kiện tồn tại và tính chất của các pha tô pô thuộc về vấn đề lớn thứ hai mà bài tổng quan đưa ra. Gần đây có các nghiên cứu về tính chất tô pô của pha điện môi tô pô Mott [51-55]. Đặc biệt có các nghiên cứu tiếp nối về mô hình Haldane – Falicov – Kimball mà chúng tôi đã đề xuất trong nghiên cứu của luận án này [56,57]. Chất điện môi tô pô từ tính cũng đang là một trong những vấn đề được quan tâm nghiên cứu rất nhiều, nhất là gần đây tìm thấy các chất điện môi tô pô có độ từ hóa tự phát nội tại, tức là các chất điện môi có độ từ hóa tự phát do điện tử linh động tạo ra, không do các tạp từ tạo ra [58-62]. Cơ chế trao đổi kép, kết hợp với liên kết spin – quỹ đạo đề xuất trong luận án này vẫn có thể thích hợp cho chất điện môi từ tính nội tại [63-66]. Lý thuyết trường trung bình động vẫn là một phương pháp nghiên cứu hiện đại, hữu hiệu và được sử dụng rộng rãi trong nghiên cứu hệ tương quan điện tử [67-69]. Phương pháp trường trung bình động cho hệ có dải năng lượng phẳng được xây dựng trong luận án có thể được áp dụng trong nghiên cứu hiệu ứng tương quan điện tử trong các hệ có dải năng lượng phẳng hay cực hẹp. Đặc biệt, gần đây hiệu ứng tương quan điện tử trong hệ hai lớp xoắn có cấu trúc điện tử có dải năng lượng phẳng hay cực hẹp đang được quan tâm nghiên cứu rất nhiều [70,71].

### **7. Ý nghĩa khoa học và thực tiễn của đề tài**

Luận án đóng góp hiểu biết về vai trò của tương quan điện tử lên điều kiện tồn tại và tính chất chuyển pha của các chất điện môi tô pô. Các mô hình lý thuyết nghiên cứu trong luận án có thể hiện thực hóa bằng mô phỏng lượng tử thông qua mạng quang học nhân tạo, và do đó có thể so sánh kết quả nghiên cứu với kết quả mô phỏng lượng tử, làm tiền đề cho tìm kiếm các vật liệu tương quan có tính chất tô pô, cũng như làm rõ bản chất lượng tử của các pha điện môi tô pô có tương quan điện tử. Phương pháp trường trung bình động cho hệ có dải năng lượng phẳng phát triển trong luận án có thể ứng dụng trong nghiên cứu các hợp chất perovskite, các hệ có dải năng lượng phẳng hay cực hẹp.

## 8. Những đóng góp mới của luận án

Luận án có những đóng góp mới sau:

- Chỉ ra tương quan điện tử mạnh có thể tạo ra trạng thái điện môi Mott, nhưng không có tính chất tô pô.
- Chỉ ra tương quan điện tử yếu không làm thay đổi bản chất tô pô của pha điện môi, nhưng có khả năng chuyển pha điện môi sang pha kim loại.
- Chỉ ra tương quan điện tử trung bình có thể tạo ra pha kim loại từ chất điện môi tô pô.
- Chỉ ra ở nhiệt độ thấp, tương quan điện tử có thể tạo ra trạng thái có trật tự tầm xa như trạng thái trật tự điện tích. Trạng thái trật tự tầm xa có thể có tính chất tô pô không tầm thường và tương quan điện tử có thể làm chuyển pha từ trạng thái có trật tự tầm xa và tô pô tầm thường sang trạng thái có trật tự tầm xa và tô pô không tầm thường.
- Đề xuất cơ chế hình thành hiệu ứng Hall dị thường lượng tử trong các chất điện môi tô pô từ tính. Đó là cơ chế kết hợp trao đổi kép và liên kết spin quỹ đạo.
- Chỉ ra điều kiện tồn tại và tính chất của các pha điện môi tô pô từ tính.
- Xây dựng và phát triển lý thuyết trường trung bình động cho các hệ có dải năng lượng phẳng.
- Tìm ra các trạng thái điện môi tô pô kỳ lạ, mà mỗi thành phần spin có tính chất tô pô khác nhau, trong hệ có dải năng lượng phẳng.

## 9. Cấu trúc của luận án

Trong luận án này, ngoài phần mở đầu và kết luận, chúng tôi trình bày 4 chương. Trong chương 1, chúng tôi trình bày tổng quan về chất điện môi tô pô và lý thuyết trường trung bình động. Chương này gồm 2 phần. Phần I, chúng tôi trình bày về điện môi tô pô, tập trung vào đối tượng nghiên cứu chính của luận án là chất điện môi tô pô hai chiều. Sau nội dung giới thiệu về trạng thái điện môi, trạng thái Hall lượng tử, bất biến tô pô và các trạng thái biên và tương ứng khối biên, chúng tôi trình bày hai mô hình được sử dụng trong luận án là mô hình Haldane và mô hình Kane – Mele. Phần II, chúng tôi trình bày một cách ngắn gọn những kiến thức cơ bản nhất về lý thuyết trường trung bình động, phương pháp nghiên cứu chủ yếu các nội dung nghiên cứu đặt ra trong luận án. Chương này đề cập đến lý thuyết trường

trung bình tĩnh, nó cho kết quả tốt khi áp dụng cho mô hình Ising khi số chiều vô cùng lớn. Sau đó, trên cơ sở mở rộng lý thuyết trường trung bình tĩnh, chúng tôi xây dựng lý thuyết trường trung bình động.

Ở chương 2, chúng tôi trình bày hiệu ứng tương quan điện tử trong chất điện môi tô pô Chern. Trước tiên, chúng tôi đề xuất mô hình Haldane - Falicov - Kimball và việc áp dụng lý thuyết trường trung bình động để khảo sát sự chuyển pha do tương quan điện tử trong mô hình này. Sau đó, chúng tôi trình bày kết quả tính số cho trường hợp lấp đầy một nửa, tương ứng hai loại nghiệm không tầm thường mô tả chuyển pha Mott, trật tự điện tích.

Chương 3 đề cập đến điện môi tô pô từ tính trong mô hình trao đổi kép với liên kết spin – quỹ đạo. Chúng tôi, nghiên cứu về điều kiện tồn tại và tính chất các pha điện môi từ tính có tính chất tô pô không tầm thường. Trong chương này, chúng tôi đề xuất mô hình trao đổi kép và liên kết spin – quỹ đạo và ứng dụng lý thuyết trường trung bình động cho mô hình. Kết quả tính số cho điện môi phản sắt từ cho trường hợp lấp đầy một nửa và điện môi tô pô sắt từ khi lấp đầy một phần từ hoặc ba phần từ.

Nội dung của chương 4 là pha điện môi tô pô trong mạng tinh thể Lieb sắt từ và gồm 2 phần. Phần thứ nhất xây dựng lý thuyết trường trung bình động cho mạng tinh thể có cấu trúc dải năng lượng phẳng. Phần này mô tả về mô hình Hubbard cho siêu mạng perovskite và nghiệm lý thuyết trường trung bình động. Phần thứ hai trình bày về trạng thái điện môi tô pô trong mạng tinh thể Lieb khi có liên kết spin – quỹ đạo và từ trường. Ứng dụng lý thuyết đã xây dựng trong phần I, để đơn giản chúng tôi chỉ xét tương quan điện tử trong mạng Lieb như từ trường ngoài tác động hiệu dụng lên điện tử và coi từ trường ngoài là thông số đầu vào. Cuối cùng là kết quả tính số mô tả cấu trúc dải năng lượng với các thông số khác nhau.

## 10. Quy ước

Trong luận án này chúng tôi sử dụng hệ đơn vị tự nhiên với các hằng số cơ bản  $c = \hbar = k_B = 1$  [72,73]. Tuy vậy, ở một số chỗ, như ở độ dẫn Hall, chúng tôi vẫn sử dụng hệ đơn vị quốc tế, với đơn vị cho độ dẫn Hall  $e^2/h = 1/R_K$  ( $R_K = 25812,807\Omega$  được gọi là hằng số von Klitzing) thể hiện đơn vị của lượng tử hóa độ dẫn Hall.

# CHƯƠNG 1. CHẤT ĐIỆN MÔI TÔ PÔ VÀ LÝ THUYẾT TRƯỜNG TRUNG BÌNH ĐỘNG

Trong chương này chúng tôi trình bày tổng quan ngắn gọn về đối tượng nghiên cứu của luận án là chất điện môi tô pô và phương pháp nghiên cứu sử dụng trong luận án là lý thuyết trường trung bình động.

## Phần I. Chất điện môi tô pô

Trong phần I, chúng tôi trình bày tổng quan về chất điện môi tô pô, chủ yếu chất điện môi tô pô hai chiều, vì đối tượng nghiên cứu của luận án là chất điện môi tô pô hai chiều. Có nhiều bài tổng quan về chất điện môi tô pô nói chung, trong đó có viết về chất điện môi tô pô hai chiều. Trong phần này chúng tôi chỉ trình bày những khía cạnh về chất điện môi tô pô hai chiều có quan hệ gần gũi nhất với nội dung nghiên cứu của luận án. Các khía cạnh khác về chất điện môi tô pô có thể tham khảo trong các bài tổng quan và sách chuyên khảo khác [1-5].

### 1.1. Trạng thái điện môi

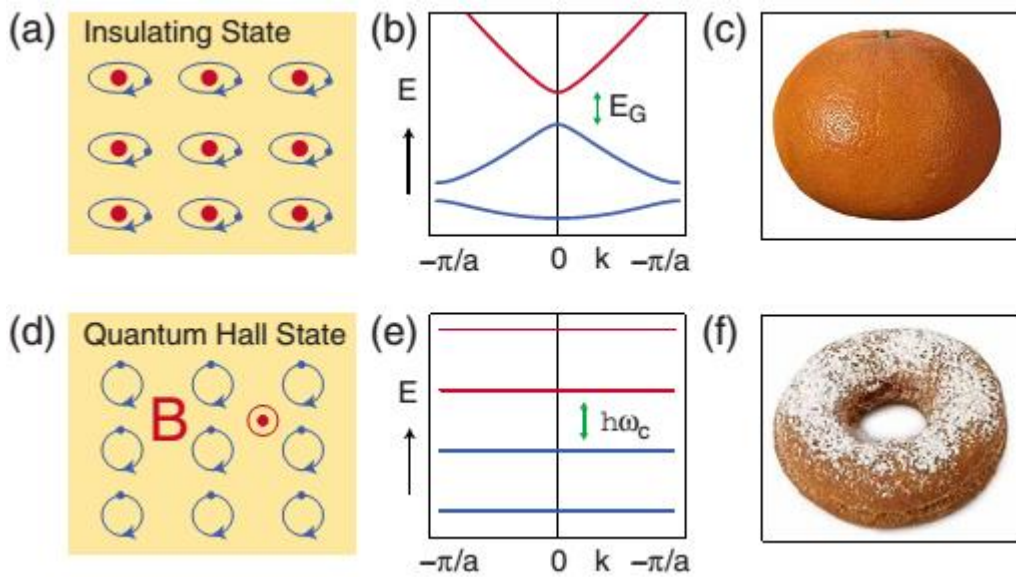
Trạng thái điện môi là một trong các trạng thái cơ bản nhất của vật chất. Chất điện môi đơn giản nhất là điện môi nguyên tử, với liên kết điện tử và nguyên tử trong một lớp vỏ kín. Một vật liệu như vậy trở về mặt điện bởi vì cần phải có một năng lượng đủ lớn để đánh bật điện tử ra khỏi lớp vỏ kín. Liên kết mạnh giữa các nguyên tử trong tinh thể dẫn đến liên kết đồng hóa trị. Một trong những thành công của cơ học lượng tử thế kỉ 20 là việc phát triển lý thuyết dải năng lượng trong chất rắn. Lý thuyết này sử dụng đối xứng tịnh tiến của tinh thể để phân loại các trạng thái điện tử theo động lượng tinh thể xác định trong vùng Brillouin tuần hoàn. Các trạng thái Bloch được xác định trong ô cơ sở là các trạng thái riêng của Hamiltonian Bloch trong không gian động lượng. Các trị riêng của Hamiltonian Bloch xác định dải năng lượng và tạo ra cấu trúc điện tử của chất rắn. Trong chất điện môi, tồn tại một khe năng lượng ngăn cách các trạng thái của dải hóa trị bị lấp đầy và dải dẫn còn trống. Chúng ta có thể tưởng tượng thay đổi Hamiltonian nội suy liên tục giữa hai dải năng lượng, dải dẫn và dải hóa trị, mà không làm mất khe năng lượng. Một quá trình như vậy xác định một tương đương tô pô giữa các trạng thái điện môi khác nhau. Phải chăng như vậy tất cả các trạng thái điện tử có khe năng lượng đều tương đương nhau về mặt tô pô, và như vậy tương đương với chân không? Câu trả lời là không, mà ví dụ điển hình là trạng thái Hall lượng tử [1].

## 1.2. Trạng thái Hall lượng tử

Trạng thái Hall lượng tử quan sát thấy khi các điện tử bị giam giữ trong một không gian hai chiều được đặt trong một từ trường mạnh. Trong cơ học cổ điển, điện tử trong một từ trường ngoài sẽ chuyển động theo các quỹ đạo tròn vuông góc với từ trường. Trong cơ học lượng tử, các quỹ đạo tròn của điện tử với tần số cyclotron  $\omega_c = eB/m^*c$  với  $m^*$  là khối lượng hiệu dụng của điện tử trong chất bán dẫn, được lượng tử hóa dẫn đến các mức năng lượng Landau [74]:

$$\varepsilon_m = \omega_c \left( m + \frac{1}{2} \right), \quad (1.1)$$

với  $m$  là một số nguyên dương.



Hình 1.1. Các trạng thái của vật chất. (a) – (c) Trạng thái cách điện. (a) Một điện môi nguyên tử. (b) Một cấu trúc dải điện môi mô hình đơn giản. (d) – (f) Trạng thái Hall lượng tử. (d) Chuyển động cyclotron của các electron. (e) Các mức Landau, được xem như một cấu trúc dải. (c) và (f) Hai bề mặt khác nhau về  $g$ . (c)  $g = 0$  đối với hình cầu và (f)  $g = 1$  đối với hình bánh vòng [1].

Nếu  $n$  mức Landau được lấp đầy và các mức còn lại bị bỏ trống thì có một khe năng lượng ngăn cách các trạng thái bị lấp đầy và các trạng thái bỏ trống, tương tự như một chất điện môi. Nhưng không giống như trong chất điện môi, một điện trường trong mặt phẳng của hệ làm cho quỹ đạo điện tử trôi đi dẫn đến một dòng điện Hall được tạo ra có đặc trưng bởi độ dẫn Hall được lượng tử hóa:

$$\sigma_{xy} = \frac{ne^2}{h}.$$

(1.2)

Thực nghiệm đo độ dẫn Hall  $\sigma_{xy}$  chính xác tới một phần của  $10^9$ . Độ chính xác này là biểu hiện của bản chất tô pô của độ dẫn Hall  $\sigma_{xy}$ .

### 1.3. Bất biến tô pô

Bản chất tô pô của độ dẫn Hall được Thouless, Kohmoto, Nightingale, và den Nijs giải thích [8]. Cách dẫn sau được Kohmoto trình bày trong tài liệu [9]. Phương trình Schrodinger cho hệ điện tử không tương tác hai chiều trong từ trường đều được viết như sau:

$$H\Psi = \left[ \frac{1}{2m} (\mathbf{p} + e\mathbf{A})^2 + U(x, y) \right] \Psi = E\Psi, \quad (1.3)$$

trong đó  $\mathbf{p} = -i\nabla$  là moment động lượng và  $\mathbf{A}$  là thế Gauge trong mặt phẳng  $x - y$ ,  $m$  là khối lượng của điện tử, và  $e$  là điện tích của các điện tử. Chúng ta xét trong trường hợp thế  $U(x, y)$  là thế tuần hoàn trong cả hai hướng  $x$  và  $y$ , tức là,

$$U(x + a, y) = U(x, y + b) = U(x, y),$$

trong đó  $a, b$  là các hằng số mạng. Áp dụng định lý Bloch cho không gian mạng đảo (vùng Brillouin mạng đảo) phương trình (1.3) viết lại thành [75]:

$$\hat{H}(k_x, k_y) u_{k_x, k_y}^\alpha = E^\alpha u_{k_x, k_y}^\alpha, \quad (1.4)$$

với

$$\hat{H}(k_x, k_y) = \frac{1}{2m} (-i\nabla + \mathbf{k} + e\mathbf{A})^2 + U(x, y),$$

trong đó  $\mathbf{k}$  là động lượng có hai thành phần  $k_x, k_y$ . Chú ý rằng trị riêng  $E^\alpha$  phụ thuộc vào  $\mathbf{k}$ , và  $\alpha$  là chỉ số dải năng lượng,  $u_{k_x, k_y}^\alpha$  là hàm sóng Bloch.

Từ lý thuyết phản hồi tuyến tính, độ dẫn Hall được biểu diễn dưới dạng [74]:

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2 \hbar}{2} \sum_{E^\alpha < E_F < E^\beta} \frac{(v_y)_{\alpha\beta} (v_x)_{\beta\alpha} - (v_x)_{\alpha\beta} (v_y)_{\beta\alpha}}{(E^\alpha - E^\beta)^2}, \quad (1.5)$$

trong đó  $E_F$  là năng lượng Fermi và tổng lấy trên tất cả những trạng thái bên trên và bên dưới mức năng lượng Fermi. Chỉ số  $\alpha$  và  $\beta$  là chỉ số dải năng lượng. Công thức (1.5) được viết cho chất điện môi khi mức năng lượng Fermi nằm giữa khe năng



lượng, và do vậy phân cách các mức năng lượng nằm dưới và nằm trên mức năng lượng Fermi một cách rõ ràng. Hay nói cách khác mẫu số trong công thức (1.5) không bị triệt tiêu và không tạo ra phân kỳ. Yếu tố ma trận của toán tử vận tốc  $\mathbf{v} = (-i\nabla + e\mathbf{A})$  liên hệ với Hamiltonian phụ thuộc vào  $\mathbf{k}$  (1.4) có dạng:

$$\begin{aligned}(v_x)_{\alpha\beta} &= \frac{1}{\hbar} \left\langle \alpha \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial k_x} \right| \beta \right\rangle, \\ (v_y)_{\beta\alpha} &= \frac{1}{\hbar} \left\langle \alpha \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial k_y} \right| \beta \right\rangle.\end{aligned}\tag{1-6}$$

Chúng ta có

$$\left\langle \alpha \left| \frac{\partial \hat{H}}{\partial k_j} \right| \beta \right\rangle = -(E^\alpha - E^\beta) \left\langle \frac{\partial u^\alpha}{\partial k_j} \right| \beta \right\rangle = (E^\beta - E^\alpha) \left\langle \alpha \left| \frac{\partial u^\beta}{\partial k_j} \right. \right\rangle, j = 1, 2.\tag{1.7}$$

Từ (1.6) và (1.7), biểu thức (1.5) được viết thành

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi i} \sum_{E^\alpha < E_F < E^\beta} \left( \left\langle \frac{\partial u^\alpha}{\partial k_y} \right| \beta \right\rangle \left\langle \beta \left| \frac{\partial u^\alpha}{\partial k_x} \right. \right\rangle - \left\langle \frac{\partial u^\alpha}{\partial k_x} \right| \beta \right\rangle \left\langle \beta \left| \frac{\partial u^\alpha}{\partial k_y} \right. \right\rangle \right).\tag{1.8}$$

Từ đây, chúng ta có:

$$\sigma_{xy}^\alpha = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi i} \int d^2k \int d^2r \left( \frac{\partial u_{k_x k_y}^{\alpha*}}{\partial k_y} \frac{\partial u_{k_x k_y}^\alpha}{\partial k_x} - \frac{\partial u_{k_x k_y}^{\alpha*}}{\partial k_x} \frac{\partial u_{k_x k_y}^\alpha}{\partial k_y} \right),\tag{1.9}$$

trong đó  $\sigma_{xy}^\alpha$  là sự đóng góp cho độ dẫn Hall từ dải năng lượng lấp đầy hoàn toàn  $\alpha$ .

Chúng ta xác định một trường vector trong vùng Brillouin như sau:

$$\widehat{\mathbf{A}}(k_x, k_y) = \left\langle u_{k_x k_y} \left| \nabla_k \right| u_{k_x k_y} \right\rangle = \int d^2r u_{k_1 k_2}^* \nabla_k u_{k_1 k_2},\tag{1.10}$$

trong đó  $\nabla_k$  là toán tử vector mà có các thành phần  $\partial/\partial k_x$  và  $\partial/\partial k_y$ . Để đơn giản ký hiệu chỉ số dải năng lượng  $\alpha$  đã được lược bỏ đi trong hàm sóng, khi chúng ta chỉ xét sự đóng góp của vùng đơn. Từ (1.9) và (1.10) chúng ta thu được

$$\sigma_{xy}^\alpha = \frac{e^2}{h} \frac{1}{2\pi i} \int d^2k [\nabla_k \times \widehat{\mathbf{A}}(k_x, k_y)]_3,\tag{1.11}$$

trong đó,  $[\dots]_3$  biểu diễn thành phần thứ ba của vector.

Trong toán học biểu thức

$$C_1^{(\alpha)} = \frac{1}{2\pi i} \int d^2k [\nabla_k \times \widehat{\mathbf{A}}(k_x, k_y)]_3, \quad (1.12)$$

thể hiện thông lượng của một trường vector qua một mặt kín (chính là vùng Brillouin), là một bất biến tô pô [8,9,11,75]. Có thể nhận thấy, nếu biểu thức dưới dấu tích phân trong công thức (1.12) xác định tron tru thì  $C_1^{(\alpha)} = 0$  theo định lý Stokes. Nhưng nếu hàm sóng Bloch có không điểm thì khi đó  $C_1^{(\alpha)}$  khác 0, và  $C_1^{(\alpha)}$  bằng một số nguyên, vì khi đó tích phân trong công thức (1.12) bằng số vòng quấn quanh không điểm đó [9]. Số  $C_1^{(\alpha)}$  được gọi là số Chern, và nó chỉ nhận các giá trị nguyên [8,9,11,75]. Như vậy độ dẫn Hall có dạng

$$\sigma_{xy} = \frac{e^2}{h} \sum_{E_\alpha < E_F} C_1^{(\alpha)} = \frac{e^2}{h} C_1, \quad C_1 = \sum_{E_\alpha < E_F} C_1^{(\alpha)}, \quad (1.13)$$

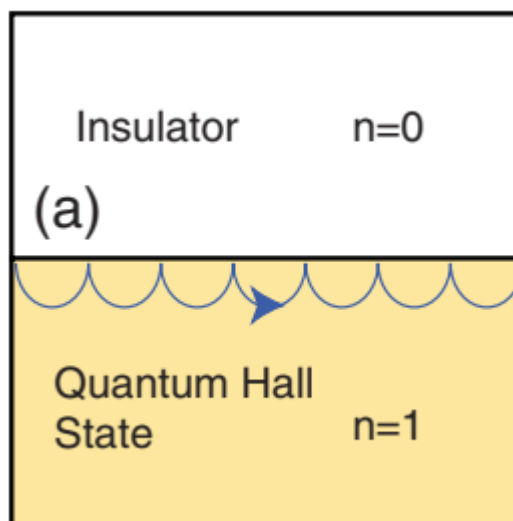
với  $C_1$  là số nguyên. Số Chern này cũng chính là số mức năng lượng Landau được lấp đầy trong công thức (1.2). Công thức (1.12) và (1.13) thể hiện bản chất tô pô của hiệu ứng Hall lượng tử.

#### ***1.4. Các trạng thái biên và tương ứng khối – biên***

Một hệ quả cơ bản của sự phân loại tô pô của cấu trúc dải năng lượng có khe là sự tồn tại của các trạng thái dẫn điện không khe ở mặt phân giới giữa chất điện môi tô pô và chân không, tức là ở biên (bề mặt hay cạnh) của chất điện môi [1].

Các trạng thái biên trong hiệu ứng Hall lượng tử đã được Halperin chỉ ra [15]. Có thể hình dung một cách đơn giản trạng thái biên trong hiệu ứng Hall lượng tử như cách loại bỏ một phần chuyển động cyclotron của điện tử khi gặp biên, như minh họa trên hình 1.2. Điểm quan trọng của trạng thái biên này là nó có tính chất chiral, có nghĩa là điện tử tùy theo spin chỉ chuyển động theo một hướng dọc theo biên. Các trạng thái này bền vững, không bị mất trật tự ảnh hưởng vì không có trạng thái cho tán xạ ngược. Sự tồn tại các trạng thái biên như vậy có bản chất tô pô. Hình dung biên như là mặt phân cách giữa hai chất điện môi có số Chern khác nhau (một là khối có hiệu ứng Hall lượng tử với số Chern khác không và hai là chân không có số Chern bằng không). Như vậy, bắt buộc ở biên khe năng lượng phải triệt tiêu, bởi

vì nếu khe năng lượng không triệt tiêu thì số Chern là bất biến tô pô, không thể thay đổi. Khe năng lượng triệt tiêu có nghĩa là ở đó có trạng thái kích thích không khe. Đây chính là nguyên lý tương ứng khối – biên, được Jackiw và Rebbi tìm ra [76]. Nguyên lý tương ứng khối – biên thể hiện bản chất điện môi tô pô trong khối và trạng thái kích thích không khe ở biên tương ứng với nhau. Nếu khối là chất điện môi tô pô thì trạng thái biên kích thích không có khe (gapless mode) và ngược lại.

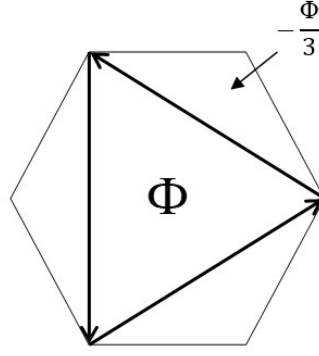


Hình 1.2. Hiệu ứng Hall lượng tử khi loại bỏ phần chuyển động cyclotron của điện tử khi ở biên khối điện môi [1].

Nguyên lý tương ứng khối – biên này được sử dụng trong nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm để xác định một chất điện môi có tính chất tô pô không tầm thường hay tầm thường [1-5].

### 1.5. Mô hình Haldane

Mô hình Haldane là mô hình lý thuyết đầu tiên cho thấy hiệu ứng Hall lượng tử có thể xảy ra khi không có các mức năng lượng Landau, hay nói cách khác mô hình Haldane là mô hình mạng tinh thể cho hiệu ứng Hall lượng tử mà không có tác động của từ trường ngoài lên toàn mạng tinh thể [77]. Mô hình thể hiện fermion chuyển động trong một mạng tinh thể tổ ong, mà mỗi mạng con của mạng tổ ong có từ thông bằng nhau và ngược chiều xuyên qua. Vì từ thông xuyên qua mỗi mạng con ngược chiều và bằng nhau, nên xét trên toàn mạng, tổng từ thông bằng 0, cũng có nghĩa tương đương như không có từ trường ngoài tác động lên toàn mạng.



Hình 1.3. Từ thông qua mạng con

Hamiltonian của mô hình Haldane có thể viết như sau [77]:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + t_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} e^{\pm i\varphi} c_i^\dagger c_j + m \sum_i \epsilon_i c_i^\dagger c_j, \quad (1.14)$$

trong đó  $c_i^\dagger$  ( $c_i$ ) là toán tử sinh (hủy) fermion tại nút mạng  $i$ ,  $t$  là thông số nhảy nút lân cận gần nhất và  $t_2$  là thông số nhảy nút lân cận gần thứ hai cho fermion linh động,  $\epsilon_i = \pm 1$  đối với hai mạng con của mạng tổ ong;  $m$  là thông số thể hiện mức độ bất đối xứng giữa hai mạng con của mạng tổ ong,  $\varphi$  là pha Peierls mà fermion có được khi chuyển động trong một từ thông. Từ thông qua một tam giác như trên hình 1.3 bằng:

$$\Phi = 3\varphi\Phi_0, \quad (1.15)$$

trong đó  $\Phi_0 = hc/e$  là đơn vị lượng tử hóa từ thông. Vì từ thông qua một ô mạng lục giác bằng 0 nên số hạng nhảy nút  $t$  không có pha Peierls.

Hamiltonian Bloch viết trong không gian mạng đảo có dạng [77]:

$$H = \varepsilon(\mathbf{k}) + \sum_i d_i(\mathbf{k})\sigma_i, \quad (1.16)$$

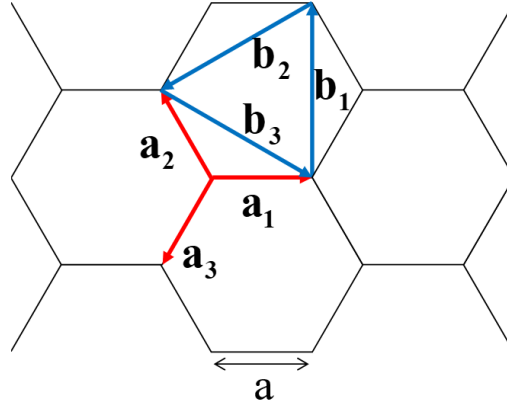
trong đó  $\varepsilon(\mathbf{k}) = 2t_2 \cos\varphi (\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}_1) + \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}_2) + \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{b}_3))$

$$d_1(\mathbf{k}) = -t(\cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1) + \cos(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2)),$$

$$d_2(\mathbf{k}) = -t(\sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_1) + \sin(\mathbf{k}\cdot\mathbf{a}_2)),$$

$$d_3(\mathbf{k}) = m - 2t_2 \sin \varphi [\sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_1) + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_2) + \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_3)],$$

với  $\mathbf{a}_1 = a(1,0)$ ,  $\mathbf{a}_2 = a(-1/2, \sqrt{3}/2)$  và  $\mathbf{a}_3 = a(-1/2, -\sqrt{3}/2)$ ;  $\mathbf{b}_1 = \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_3$ ,  $\mathbf{b}_2 = \mathbf{a}_3 - \mathbf{a}_1$  và  $\mathbf{b}_3 = \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2$ ; và  $\sigma_i$  là các ma trận Pauli.  $a$  là hằng số mạng.



Hình 1.4. Mạng tổ ong và ký hiệu các vector sử dụng trong biểu thức (1.6).

Phổ năng lượng của Hamiltonian Bloch bằng

$$E(\mathbf{k}) = \varepsilon(\mathbf{k}) \pm |d(\mathbf{k})|,$$

(1.17)

trong đó

$$|d(\mathbf{k})| = \sqrt{d_1^2(\mathbf{k}) + d_2^2(\mathbf{k}) + d_3^2(\mathbf{k})}.$$

(1.18)

Có thể nhận thấy khi  $t_2=0$  và  $m = 0$ , mô hình Haldane mô tả fermion chuyển động trong mạng tổ ong. Đó chính là mô hình liên kết chặt cho mạng graphene [78]. Chúng ta biết rằng lân cận quanh điểm

$$K = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{\sqrt{3}}, \frac{1}{3\sqrt{3}} \right),$$

và

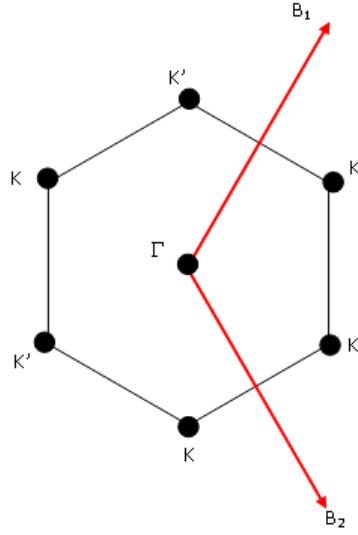
$$K' = \frac{2\pi}{a} \left( \frac{1}{\sqrt{3}}, -\frac{1}{3\sqrt{3}} \right),$$

của vùng Brillouin, hệ thức tán sắc

$$E(\mathbf{k}) = v|\Delta\mathbf{k}|,$$

(1.19)

trong đó  $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{K}$  (hay  $\Delta\mathbf{k} = \mathbf{k} - \mathbf{K}'$ ), và  $v = 3ta/2$  [78]. Hệ thức tán sắc này thể hiện fermion có tính chất như electron Dirac. Khi  $t_2 \neq 0$  và  $m \neq 0$ , khe năng lượng sẽ mở ra. Xét Hamiltonian Bloch quanh các điểm  $K$  và  $K'$



Hình 1.5. Vùng Brillouin cho mạng tổ ong với các vector cơ sở của mạng đảo

$$B_1 = \frac{2\pi}{3a}(1, \sqrt{3}), B_2 = \frac{2\pi}{3a}(1, -\sqrt{3}).$$

Hamitionian Bloch có thể khai triển như sau (a=1):

$$H_K = -\frac{3t}{2}(k_y\sigma_x - k_x\sigma_y) + (m - 3\sqrt{3}t_2 \sin \varphi)\sigma_z, \quad (1.20)$$

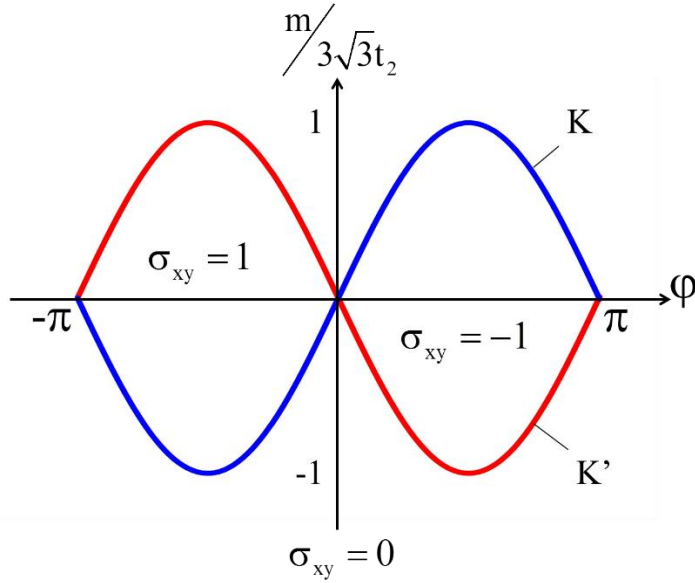
$$H_{K'} = \frac{3t}{2}(k_y\sigma_x + k_x\sigma_y) + (m + 3\sqrt{3}t_2 \sin \varphi)\sigma_z. \quad (1.21)$$

Như vậy, có thể thấy khe năng lượng ở K và K' có thể triệt tiêu tại các giá trị khác nhau của m đối với  $\varphi \neq 0, \pi$  khi  $m = 3\sqrt{3}t_2 \sin \varphi$ .

Chúng ta xét  $\varphi > 0$

- 1)  $m > 3\sqrt{2}t \sin \varphi$ , độ dẫn Hall  $\sigma_{xy} = 0$
- 2)  $-3\sqrt{2}t \sin \varphi < m \leq 3\sqrt{2}t \sin \varphi$ : Khi  $m = 3\sqrt{2}t \sin \varphi$  khe năng lượng tại K đóng lại, trong khi khe năng lượng tại K' vẫn mở. Độ dẫn Hall  $\sigma_{xy} = -\frac{e^2}{h}$ .
- 3)  $m \leq -3\sqrt{2}t \sin \varphi$ : Khe năng lượng tại K' đóng, trong khi khe năng lượng tại K mở khi  $m = -3\sqrt{2}t \sin \varphi$ , độ dẫn Hall  $\sigma_{xy} = 0$  và số Chern hay độ dẫn Hall do đó số ( $\varphi < 0$ ) đổi dấu. Giản đồ pha thu được được tổng kết trên hình 1.6. Mô hình Haldane không có bất biến nghịch đảo thời gian, do  $d_3(\mathbf{k})=d_3(-\mathbf{k})$  chỉ khi  $\varphi = 0, \pi$ . Chất điện môi tô pô không có đối xứng

ngược đảo thời gian gọi là chất điện môi tô pô Chern do bất biến tô pô của chúng chính là số Chern. Mô hình Haldane đã được hiện thực hóa bằng mạng quang học cho các nguyên tử cực lạnh [79].



Hình 1.6. Giải đồ pha của mô hình Haldane.

### 1.6. Mô hình Kane - Mele

Mô hình Kane – Mele ban đầu được đề xuất như là một mô hình cho graphene [16,17]. Hamiltonian của mô hình có thể viết dưới dạng:

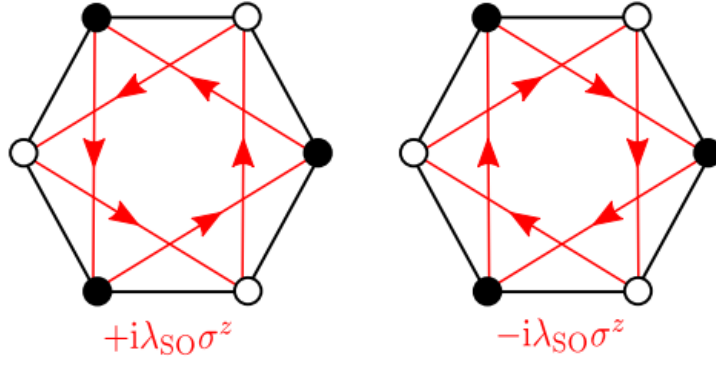
$$H_{KM} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{c}_i^\dagger \hat{c}_j + i\lambda_{SO} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \hat{c}_i^\dagger (v_{ij} \cdot \sigma) \hat{c}_j, \quad (1.22)$$

ở đây  $\hat{c}_i^\dagger = (c_{i\uparrow}^\dagger, c_{i\downarrow}^\dagger)$  là một spinor, và  $c_{i\sigma}^\dagger (c_{i\sigma})$  là toán tử sinh (hủy) điện tử trong trạng thái Wannier ở mạng tinh thể  $i$  với spin  $\sigma$ .  $\langle i,j \rangle$  và  $\langle\langle i,j \rangle\rangle$  ký hiệu các nút mạng tinh thể lân cận gần nhất và gần nhất tiếp theo.

Liên kết spin – quỹ đạo ( $\lambda_{SO}$ ) được mô tả bởi số hạng nhảy nút lân cận gần nhất thứ hai với giá trị phức và dấu  $\pm 1$  phụ thuộc vào chiều của bước nhảy, và định hướng spin như được minh họa trên hình 1.7. Dấu này có thể viết dưới dạng

$$v_{ij} = \frac{\mathbf{d}_{ik} \times \mathbf{d}_{kj}}{|\mathbf{d}_{ik} \times \mathbf{d}_{kj}|} = \pm 1, \quad (1.23)$$

$\mathbf{d}_{ik}$  là vector ba chiều (với thành phần z triệt tiêu) kết nối các vị trí  $i$  và  $k$ , và  $k$  là vị trí mạng trung gian bao gồm trong quá trình nhảy từ vị trí  $i$  tới vị trí  $j$ .



Hình 1.7. Cấu trúc dẫu liên kết spin – quỹ đạo  $\lambda_{SO}$  mô tả trong mô hình Kane – Mele [34]

Hamiltonian có thể viết lại như sau:

$$H_{KM} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \hat{c}_{j\sigma} + i\lambda_{SO} \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} v_{ij} \hat{c}_{i\sigma}^\dagger \sigma \hat{c}_{j\sigma}. \quad (1.24)$$

Như vậy, mô hình Kane – Mele có thể xem như bao gồm hai mô hình Haldane cho mỗi thành phần spin với liên kết spin – quỹ đạo là số hạng nhảy nút  $t_2$  ngược dấu nhau  $\lambda_{SO} = \pm it_2$  và pha Peierls  $\varphi = \pi/2$  trong mô hình Haldane.

Với mỗi thành phần spin cho độ dẫn Hall

$$\sigma_{xy}^{(\sigma)} = -\frac{e^2}{h} C_1^{(\sigma)}, \quad (1.25)$$

$C_1^{(\sigma)} = \sigma = \pm 1$ . Cho nên độ dẫn Hall điện tích

$$\sigma_{xy}^c = \sigma_{xy}^{(\uparrow)} + \sigma_{xy}^{(\downarrow)} = 0. \quad (1.26)$$

Nhưng độ dẫn Hall spin khác không

$$\sigma_{xy}^s = \frac{1}{2} (\sigma_{xy}^{(\uparrow)} - \sigma_{xy}^{(\downarrow)}) = \frac{e^2}{h}. \quad (1.27)$$

Do vậy mô hình Kane – Mele cho độ dẫn Hall spin được lượng tử hóa. Hay nói cách khác hiệu ứng Hall spin lượng tử xảy ra trong mô hình Kane – Mele. Có thể nhận thấy Hamiltonian Bloch thỏa mãn tính chất

$$\Theta H(\mathbf{k}) \Theta^{-1} = H(-\mathbf{k}), \quad (1.28)$$



trong đó  $\Theta = \exp(i\pi\sigma_y) K$ , với  $K$  là lấy liên hợp phức.  $\Theta$  chính là biến đổi nghịch đảo thời gian trong mạng đảo [1,16,17].

Do vậy mô hình Kane – Mele có tính đối xứng nghịch đảo thời gian. Từ đây Kane và Mele xây dựng thêm bất biến tô pô được bảo toàn bởi nghịch đảo thời gian bên cạnh độ dẫn Hall spin. Bất biến tô pô được bảo toàn bởi nghịch đảo thời gian nhận 2 giá trị  $\nu = 0, 1$ , đồng cấu với nhóm  $Z_2$  [16,18]. Do vậy chất điện môi tô pô có tính đối xứng nghịch đảo thời gian còn gọi là chất điện môi tô pô  $Z_2$ . Chất điện môi tô pô  $Z_2$  đầu tiên được tìm thấy trong giếng lượng tử HgTe/CdTe [1-5].

Sau nghiên cứu lý thuyết của Kane và Mele, người ta tổng quát hóa bất biến tô pô được bảo toàn bằng nghịch đảo thời gian từ mạng tinh thể hai chiều lên mạng tinh thể ba chiều [1-5]. Thực nghiệm cũng đã tìm ra các chất điện môi tô pô ba chiều, được bảo toàn bởi nghịch đảo thời gian. Các chất điện môi này cũng được gọi là chất điện môi tô pô  $Z_2$  [1-5]. Bên cạnh chất điện môi tô pô Chern và  $Z_2$  còn có các loại chất điện môi tô pô khác. Căn cứ theo các tính chất đối xứng được bảo toàn và số chiều không gian, người ta tìm thấy 10 phân loại khác nhau của chất điện môi tô pô [80]. Do đối tượng nghiên cứu của luận án, tập trung về chất điện môi tô pô Chern và  $Z_2$ , nên trong chương này chúng tôi không trình bày các phân loại khác của điện môi tô pô. Chúng ta có thể tham khảo trong các bài tổng quan và sách chuyên khảo [1-5].

### ***1.7. Kết luận phần I***

Trong phần này chúng tôi trình bày vắn tắt về chất điện môi tô pô hai chiều, chủ yếu tập trung trình bày về hiệu ứng Hall lượng tử, bất biến tô pô, nguyên lý tương ứng khối – biên và mô hình lý thuyết tối thiểu cho chất điện môi tô pô Chern và  $Z_2$ .

### **Phần II. Lý thuyết trường trung bình động**

Trong phần này chúng tôi trình bày về lý thuyết trường trung bình động, phương pháp nghiên cứu chủ yếu các nội dung nghiên cứu đặt ra trong luận án. Có nhiều bài viết tổng quan về lý thuyết trường trung bình động và chúng tôi tham khảo các tài liệu đó khi viết chương này [48-50].

Nghiên cứu lý thuyết về vật liệu lượng tử chủ yếu dựa trên hai nền tảng là vật lý lượng tử và vật lý thống kê. Hai nền tảng đó kết hợp với nhau tạo ra lĩnh vực

ngiên cứu vật lý hệ nhiều hạt. Trong suốt thế kỷ 20, nhiều lý thuyết và phương pháp đã được xây dựng để nghiên cứu vật lý hệ nhiều hạt như lý thuyết hàm Green, lý thuyết phiếm hàm mật độ, mô phỏng Monte Carlo hay động học phân tử... Lý thuyết phiếm hàm mật độ đã đạt được những thành tựu xuất sắc trong nghiên cứu và tiên đoán tính chất các vật liệu bán dẫn truyền thống [81]. Thế nhưng đối với những vật liệu mà tương quan điện tử trong đó trung bình hay mạnh thì lý thuyết phiếm hàm mật độ chưa thể nghiên cứu trọn vẹn các tính chất vật lý của những vật liệu đó, ít nhất như ở dạng hiện nay. Do đó đã xuất hiện những hướng nghiên cứu mới, kết hợp giữa lý thuyết phiếm hàm mật độ và phương pháp hàm Green trong vật lý hệ nhiều hạt, để giải quyết vấn đề nghiên cứu các tính chất của vật liệu điện tử tương quan mạnh một cách tốt hơn. Một trong những hướng nghiên cứu đó là lý thuyết trường trung bình động (DMFT – Dynamical Mean Field Theory) [47-50]. Những nghiên cứu sử dụng lý thuyết trường trung bình động cho thấy những ưu điểm trong thu nhận và tiên đoán các tính chất vật lý của các vật liệu tương quan điện tử [48-50].

Lý thuyết trường trung bình động là lý thuyết được xây dựng trên cơ sở mở rộng lý thuyết trường trung bình tĩnh [48-50]. Thông thường trong lý thuyết trường trung bình, tương tác giữa các hạt được thay thế bằng một trường tĩnh hiệu dụng, và bài toán nhiều hạt dẫn đến bài toán một hạt tương tác với trường hiệu dụng đó. Gần đúng trường trung bình như vậy đã loại bỏ các thăng giáng cả về thời gian và không gian quanh giá trị trung bình. Lý thuyết trường trung bình động thay thế tương tác của các hạt bằng một trường hiệu dụng động, phụ thuộc vào thời gian, và đưa bài toán nhiều hạt về bài toán một hạt tương tác với một trường động lực hiệu dụng giống như một tạp trong một bể dẫn. Lý thuyết trường trung bình động đã tính tới thăng giáng theo thời gian tại địa phương, nhưng vẫn loại bỏ thăng giáng phi địa phương trong không gian.

### ***1.8. Lý thuyết trường trung bình tĩnh***

Lý thuyết trường trung bình tĩnh hay còn được gọi là lý thuyết trường trung bình cổ điển. Nguyên lý chung của lý thuyết trường trung bình này là thay thế tương tác hai vật thành tương tác của một vật với một trường hiệu dụng (hay còn gọi là trường trung bình, trường phân tử Weiss). Ví dụ như chúng ta có tương tác hai vật ở dạng  $H_{AB}=AB$ . Toán tử A và B được viết lại như sau:

$$A = \langle A \rangle + \delta A, \quad (1.29)$$

$$B = \langle B \rangle + \delta B. \quad (1.30)$$

Trong đó  $\langle A \rangle$ ,  $\langle B \rangle$  là giá trị trung bình nhiệt động của toán tử A và B.  $\delta A$ ,  $\delta B$  là thăng giáng của toán tử A và B quanh giá trị trung bình

$$\delta A = A - \langle A \rangle, \quad (1.31)$$

$$\delta B = B - \langle B \rangle. \quad (1.32)$$

Khi đó Hamiltonian tương tác  $H_{AB}$  có thể viết lại như sau:

$$\begin{aligned} H_{AB} &= (\langle A \rangle + \delta A)(\langle B \rangle + \delta B) \\ &= \langle A \rangle \langle B \rangle + \delta A \langle B \rangle + \delta B \langle A \rangle + \delta A \delta B. \end{aligned} \quad (1.33)$$

Lý thuyết trường trung bình cho rằng thăng giáng  $\delta A \delta B$  là nhỏ và loại bỏ chúng. Khi đó Hamiltonian tương tác gần đúng thành

$$\begin{aligned} H_{AB} &\approx \langle A \rangle \langle B \rangle + \delta A \langle B \rangle + \delta B \langle A \rangle \\ &= A \langle B \rangle + B \langle A \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \equiv H_{AB}^{MF} \end{aligned} \quad (1.34)$$

Hamiltonian  $H_{AB}^{MF}$  là gần đúng trường trung bình của Hamiltonian nguyên thủy  $H_{AB}$ . Các giá trị trung bình  $\langle A \rangle$ ,  $\langle B \rangle$  thể hiện trường hiệu dụng (hay trường trung bình) tác động lên toán tử B và A tương ứng. Vì  $\langle A \rangle$  và  $\langle B \rangle$  không phụ thuộc vào thời gian, lý thuyết trường trung bình này còn được gọi là lý thuyết trường trung bình tĩnh. Như vậy, trong khuôn khổ lý thuyết trường trung bình, Hamiltonian tương tác hai vật  $H_{AB}$  được đưa trở thành Hamiltonian  $H_{AB}^{MF}$  thể hiện tương tác một vật với một trường hiệu dụng. Các trường hiệu dụng  $\langle A \rangle$  và  $\langle B \rangle$  có thể xác định một cách tự hợp thông qua động lực học của hệ được xác định bằng Hamiltonian  $H_{AB}^{MF}$ .

Để minh họa cho lý thuyết trường trung bình này, chúng ta xét mô hình Ising, thể hiện tương tác trao đổi spin giữa các moment từ. Hamiltonian của mô hình Ising có dạng:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j, \quad (1.35)$$

trong đó,  $\sigma_i = \pm 1$ , tương ứng +1 cho trường hợp spin hướng lên, -1 cho spin hướng xuống. Đây chính là Hamiltonian của mô hình Ising. Khi  $J > 0$  mô hình thể hiện tương tác trao đổi sắt từ và khi  $J < 0$  mô hình thể hiện tương tác trao đổi phản sắt từ. Khi  $J > 0$  trạng thái cơ bản là sắt từ, do các spin song song cùng chiều để năng lượng

trạng thái cơ bản thấp nhất. Khi  $J < 0$ , trạng thái cơ bản là phản sắt từ, do các spin song song so le nhau để trạng thái cơ bản có năng lượng nhỏ nhất.

Mô hình Ising, từng được Ising đề xuất độc lập, nhưng thực chất nó là một trường hợp riêng của mô hình Heisenberg. Hamiltonian của mô hình Heisenberg có dạng

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j, \quad (1.36)$$

trong đó, toán tử spin có đầy đủ 3 thành phần  $\vec{S}_i = (\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z)$ .  $J$  là tương tác trao đổi spin giữa nút mạng  $i$  và  $j$ . Các thành phần của toán tử spin  $\sigma_i^x, \sigma_i^y, \sigma_i^z$  có thể biểu diễn qua ma trận Pauli.

Xét thành phần theo phương  $z$ , ma trận Pauli có dạng

$$\sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

Ma trận Pauli này có 2 trạng thái riêng, ứng với các trị riêng  $\pm 1$ .

$$\begin{aligned} \sigma^z \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \sigma^z \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix} &= - \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \end{aligned}$$

Do đó, khi loại bỏ tương tác giữa các thành phần  $x, y$  của toán tử spin và chỉ xét thành phần  $z$ , Hamiltonian Heisenberg trở thành Hamiltonian Ising.

Hamiltonian (1.35) viết trong trường hợp chưa có từ trường ngoài, Trong trường hợp có từ trường ngoài đồng nhất Hamiltonian được viết lại như sau:

$$H = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i, \quad (1.37)$$

trong đó  $h$  là từ trường ngoài.

Xét trường hợp  $J > 0$  và áp dụng lý thuyết trường trung bình mô tả ở trên. Toán tử spin có thể viết như sau

$$\sigma_i = \langle \sigma_i \rangle + \delta \sigma_i, \quad (1.38)$$

trong đó  $\langle \sigma_i \rangle$  là giá trị trung bình nhiệt động của spin tại nút  $i$  và

$$\delta \sigma_i = \sigma_i - \langle \sigma_i \rangle.$$

(1.39)

Thay (1.38) vào (1.37) ta được:

$$\begin{aligned}
 H &= -J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j - h \sum_i \sigma_i = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\langle \sigma_i \rangle + \delta \sigma_i)(\langle \sigma_j \rangle + \delta \sigma_j) - h \sum_i \sigma_i \\
 &= H_{mf} + H_1 + J \sum_{\langle ij \rangle} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle,
 \end{aligned}
 \tag{1.40}$$

trong đó,  $H_{mf}$  là gần đúng trường trung bình

$$H_{mf} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\langle \sigma_i \rangle \sigma_j + \sigma_i \langle \sigma_j \rangle) - h \sum_i \sigma_i,
 \tag{1.41}$$

$H_1$  là thăng giáng của spin quanh giá trị trung bình

$$H_1 = -J \sum_{\langle ij \rangle} \delta \sigma_i \delta \sigma_j,
 \tag{1.42}$$

thành phần

$$J \sum_{\langle ij \rangle} \langle \sigma_i \rangle \langle \sigma_j \rangle,$$

là hằng số. Lý thuyết trường trung bình loại bỏ  $H_1$ .

Trong trường hợp các nút mạng đồng nhất  $\langle \sigma_i \rangle = \langle \sigma_j \rangle = m$ .  $m$  được gọi là độ từ hóa. Khi đó (1.41) viết lại:

$$\begin{aligned}
 H_{mf} &= -J \sum_{\langle i,j \rangle} (m \sigma_j + m \sigma_i) - h \sum_i \sigma_i \\
 &= -zJm \sum_i \sigma_i - h \sum_i \sigma_i,
 \end{aligned}
 \tag{1.43}$$

trong đó  $z$  là số nút lân cận gần nhất (còn được gọi là số tọa độ). Khi đó, mô hình Ising tương tác ban đầu trở thành bài toán một vật:

$$H_{mf} = -h_{mf} \sum_i \sigma_i,
 \tag{1.44}$$

trong đó  $h_{mf} = h + mJz$  (1.45)

Tổng thống kê được tính bằng:

$$Z = \text{Tr} e^{-\beta H}, \quad (1.46)$$

trong đó:  $\beta = 1/T$  là nhiệt độ nghịch đảo, và H là Hamiltonian của hệ.

Thay (1.44) vào (1.46) ta có:

$$\begin{aligned} Z &= \text{Tr} e^{-\beta h_{mf} \sum_i \sigma_i} = \text{Tr} \prod_i e^{-\beta h_{mf} \sigma_i} \\ &= (\text{Tr} e^{-\beta h_{mf} \sigma_i})^N = (e^{-\beta h_{mf}} + e^{\beta h_{mf}})^N, \end{aligned} \quad (1.47)$$

trong đó, N là số nút mạng. Chúng ta thu được:

$$Z = [2 \cosh(\beta h_{mf})]^N. \quad (1.48)$$

Giá trị trung bình nhiệt động được tính bằng công thức:

$$\langle A \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-\beta H} A) \quad (1.49)$$

Từ đây độ từ hóa được tính bằng

$$m = \langle \sigma_i \rangle = \frac{1}{Z} \text{Tr}(e^{-\beta H} \sigma_i) = \tanh(\beta h_{mf}). \quad (1.50)$$

Từ đó thu được phương trình:

$$m = \tanh(\beta h + z\beta Jm) \quad (1.51)$$

Đây là phương trình tự hợp xác định độ từ hóa m.

Trường hợp từ trường ngoài  $h = 0$ ,  $T_c$  là nhiệt độ tới hạn có tính chất

$$\begin{cases} T > T_c, m = 0 \\ T < T_c, m \neq 0 \end{cases}$$

Khi  $h = 0$ , biểu thức (1.51) viết lại thành:

$$m = \tanh(z\beta Jm) \quad (1.52)$$

Khi  $T \rightarrow T_c$  thì  $m \rightarrow 0$ , chúng ta thu được

$$m = z\beta_c Jm + O(m^2). \quad (1.53)$$

Do vậy

$$\beta_c = \frac{1}{zJ} = \frac{1}{T_c} \quad (1.54)$$

Suy ra  $T_c = zJ$ .

Chúng ta có thể ước lượng được thăng giáng quanh giá trị trung bình

$$\langle (\sigma - m)^2 \rangle = \langle \sigma^2 - 2\sigma m + m^2 \rangle = \langle \sigma^2 \rangle - m^2 = 1 - m^2. \quad (1.55)$$

Thay (1.51) vào (1.55) ta có:

$$\begin{aligned} \langle (\sigma - m)^2 \rangle &= 1 - \tanh^2(\beta h_{mf}) = 1 - \frac{\sinh^2(\beta h_{mf})}{\cosh^2(\beta h_{mf})} \\ &= \frac{1}{\cosh^2(\beta Jzm)} \end{aligned} \quad (1.56)$$

Trong trường hợp  $T = 0$ , thăng giáng  $\langle (\sigma - m)^2 \rangle$  bằng 0, không phụ thuộc vào số chiều.

Chúng ta xác định tiếp giá trị trung bình  $\langle H_1 \rangle$ :

$$\langle H_1 \rangle = -J \sum_{\langle ij \rangle} \langle (\sigma_i - m)(\sigma_j - m) \rangle = -J \sum_{\langle ij \rangle} \langle \sigma_i - m \rangle \langle \sigma_j - m \rangle = 0, \quad (1.57)$$

vì các nút độc lập với nhau.

Tiếp theo chúng ta tính:

$$\begin{aligned} \langle H_1^2 \rangle &= J^2 \sum_{\langle ij \rangle} \sum_{\langle lk \rangle} \langle (\sigma_i - m)(\sigma_j - m)(\sigma_l - m)(\sigma_k - m) \rangle = J^2 \sum_{\langle ij \rangle} \langle (\sigma_i - m)^2 \rangle^2 \\ &= NzJ^2 \langle (\sigma - m)^2 \rangle^2 = \frac{N}{z} (zJ)^2 \langle (\sigma - m)^2 \rangle^2 = \frac{N}{z} (zJ)^2 \frac{1}{\cosh^4(\beta Jzm)} \end{aligned} \quad (1.58)$$

Với giá trị  $J$  xác định, khi  $z \rightarrow \infty$  thì năng lượng cơ bản  $E = -JNz$  sẽ vô cùng lớn. Để đảm bảo ý nghĩa vật lý năng lượng cơ bản luôn có giá trị hữu hạn chúng ta cần điều chỉnh kích cỡ của  $J$  cho phù hợp bằng cách đặt:

$$J = \frac{J^*}{z}. \quad (1.59)$$

Với  $J^*$  không thay đổi khi  $z \rightarrow \infty$

Lúc này,  $E/N = -Jz = -J^*$  và (1.58) viết lại:

$$\langle H_1^2 \rangle = \frac{N}{z} J^{*2} \frac{1}{\cosh^4 \left( \frac{J^* m}{T} \right)} \quad (1.60)$$

Khi số chiều tiến tới vô cùng  $z \rightarrow \infty$  thì  $\langle H_1^2 \rangle \rightarrow 0$  và bằng giá trị  $\langle H_1^2 \rangle - \langle H_1 \rangle^2 \rightarrow 0$  lý thuyết trường trung bình cho kết quả chính xác. Như vậy lý thuyết trường trung bình cho mô hình Ising cho kết quả chính xác trong không gian vô hạn chiều. Đây chính là ý tưởng xem xét động lực học của các hệ vật lý khi số chiều không gian trở lên vô cùng lớn, bởi vì ở giới hạn số chiều không gian vô cùng, có thể chúng ta tính được chính xác động lực học của các hệ vật lý bằng lý thuyết tương tự như lý thuyết trường trung bình cho mô hình Ising. Một thành công của mở rộng lý thuyết trường trung bình là lý thuyết trường trung bình động cho tương tác Coulomb cục bộ.

### 1.9. Lý thuyết trường trung bình động

Lý thuyết trường trung bình động cho tương tác Coulomb cục bộ nguyên thủy được xây dựng thông qua mô hình Hubbard. Trong mô hình Hubbard, Hamiltonian được viết như sau [33,81,82]:

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} - \mu \sum_i n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1.61)$$

trong đó,  $t_{ij}$  là tham số nhảy từ nút  $i$  sang nút  $j$ ;  $U$  là tương tác Coulomb của hai điện tử trên cùng nút  $i$  (các điện tử chỉ tương tác với nhau khi chúng định xứ trên cùng 1 nút),  $\mu$  là thế hóa xác định mật độ điện tử trong mạng  $n = \sum_{i\sigma} \langle n_{i\sigma} \rangle / N$  ( $n_{i\sigma} = n_{i\sigma}^+ n_{i\sigma}$  là toán tử số điện tử tại nút  $i$ ,  $N$  là số nút của mạng tinh thể). Hamiltonian (1.61) được viết dưới dạng lượng tử hóa lần hai cho hệ các electron với tương tác Coulomb cục bộ.

Để xây dựng lý thuyết cho mô hình Hubbard trong không gian vô hạn chiều, trước tiên chúng ta cần xét đặc tính fermion của mô hình ở giới hạn số chiều không gian vô cùng. Trước tiên chúng ta xét mật độ trạng thái khi chưa có tương tác:

$$\rho(\omega) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}),$$



(1.62)

trong đó:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{1}{N} \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} e^{-ik(R_i - R_j)} = -2t \sum_{\alpha=1}^d \cos k_{\alpha},$$

(1.63)

là hệ thức tán sắc của fermion.

Thay (1.63) vào (1.62) chúng ta có:

$$\begin{aligned} \rho(\omega) &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \delta(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}}) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ix(\omega - \varepsilon_{\mathbf{k}})} \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{ix(\omega + 2t \sum_{\alpha=1}^d \cos k_{\alpha})} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\omega x} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} e^{(2tx \sum_{\alpha=1}^d \cos k_{\alpha})i} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\omega x} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \prod_{\alpha} e^{2itx \cos k_{\alpha}} = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{i\omega x} \prod_{\alpha} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_{\alpha}}{2\pi} e^{2itx \cos k_{\alpha}} \end{aligned}$$

Mặt khác, ta có hàm Bessel

$$J_0(2tx) = \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_{\alpha}}{2\pi} e^{2itx \cos k_{\alpha}},$$

tích phân theo động lượng  $k_{\alpha}$  cho chúng ta

$$\rho(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} dx e^{i\omega x} (J_0(2tx))^d.$$

(1.64)

Khai triển hàm Bessel theo  $tx$ , chúng ta được:

$$(J_0(2tx))^d = e^{d \ln J_0(2tx)} = \exp \left\{ -dx^2 t^2 - \frac{dx^4 t^4}{4} - \frac{dx^6 t^6}{9} + dO(t^7) \right\}.$$

Khi  $d \rightarrow \infty$ , để  $\rho(\omega)$  hữu hạn, chúng ta cần phải hiệu chỉnh thông số nhảy nút bằng cách đặt  $t = t^*/\sqrt{2d}$ , với  $t^*$  là hằng số. Khi đó ở giới hạn  $d \rightarrow \infty$ , biểu thức (1.64) trở thành:

$$\rho(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} dx e^{i\omega x} (J_0(2tx))^d = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{1}{2\pi} dx e^{i\omega x} e^{-\frac{x^2 t^{*2}}{2}} = \frac{e^{-\frac{\omega^2}{2t^{*2}}}}{t^* \sqrt{2\pi}}$$

(1.65)

Tương tác Coulomb cục bộ  $U$  và thế hóa học  $\mu$  không cần hiệu chỉnh khi  $d \rightarrow \infty$  do đóng góp của chúng cho năng lượng của hệ không phụ thuộc vào số chiều không gian như thành phần nhảy nút.

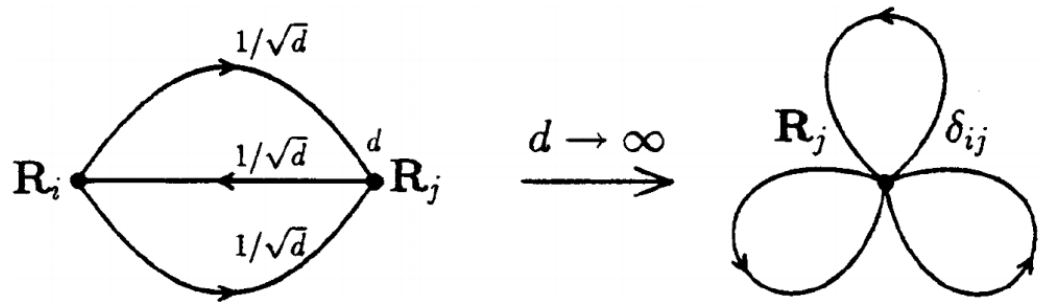
Khi đó hàm Green một hạt trong hệ không tương tác cũng phụ thuộc vào  $d$  và khi xét hai nút lân cận gần nhất chúng ta có [83]:

$$G_{ij,\sigma}^0 \sim \frac{1}{\sqrt{d}}, \quad (1.66)$$

bởi vì  $|G_{ij,\sigma}^0|^2$  thể hiện xác suất fermion nhảy từ nút mạng  $i$  sang nút mạng  $j$ . Quanh nút mạng  $i$  có  $2d$  nút mạng lân cận. Do vậy,  $|G_{ij,\sigma}^0|^2 \sim 1/2d$ . Đối với hai nút mạng  $i, j$  bất kỳ

$$G_{ij,\sigma}^0 \sim \frac{1}{d^{R(i,j)/2}},$$

Trong đó  $R(i,j)$  là khoảng cách Manhattan giữa hai nút mạng  $i, j$  (khoảng cách Manhattan giữa hai nút mạng  $i, j$  là khoảng cách ngắn nhất đi từ nút  $i$  đến nút  $j$  theo các đoạn thẳng nối các nút mạng) [48]. Khi  $d \rightarrow \infty$  năng lượng riêng sẽ trở nên đơn giản và giản đồ Feynman liên thông tối giản sẽ suy biến, ví dụ như giản đồ bậc 2 trên hình 1.8.



Hình 1.8: Sự suy biến của giản đồ Feynman khi  $d \rightarrow \infty$  của giản đồ bất khả quy bậc hai theo nhiều loạn năng lượng riêng  $\Sigma_{ij}^{(2)}$  [83].

Thông thường, năng lượng riêng  $\Sigma_{ij}^{(2)}$  đóng góp cho năng lượng riêng thông qua tổng  $\langle i,j \rangle$ . Từ đó, chúng ta thấy  $\Sigma_{ij}^{(2)}$  có bậc cỡ  $1/\sqrt{d}$  ngoại trừ  $i=j$ . Từ giản đồ Feynman trong Hình 1.8 chúng ta có 03 đường tương ứng với  $G_{ij}^0$ , từ đó chúng đóng

góp  $1/d^{3/2}$ . Mặt khác, chúng ta có tổng theo  $j(i)$  cho đóng góp  $d$  lần. Vì vậy, khi  $d \rightarrow \infty$  chỉ có giản đồ kiểu như giản đồ (b) hình cánh hoa cho đóng góp khác 0. Tất cả các giản đồ kiểu khác cánh hoa cho đóng góp bằng 0 khi  $d \rightarrow \infty$ . Tóm lại, đặc tính này đúng cho mọi bậc nhiễu loạn, do đó ở giới hạn  $d \rightarrow \infty$  năng lượng riêng làm hàm định xứ trong không gian, chúng ta có:

$$\Sigma_{ij,\sigma}(\omega) \equiv \Sigma_{ii,\sigma}(\omega)\delta_{ij}. \quad (1.67)$$

Khai triển Fourier công thức (1.67) chúng ta thu được:

$$\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) \equiv \Sigma_{\sigma}(\omega). \quad (1.68)$$

Vì vậy ở giới hạn  $d \rightarrow \infty$  chúng ta có thể thay thế mạng tương tác ban đầu bằng mô hình hiệu dụng của một nút gắn với một môi trường tự hợp tạo bởi động lực của tất cả các nút khác trong mạng. Mô tả bài toán một nút trong môi trường tự hợp có thể miêu tả bằng động lực học tại một nút trong phạm vi tác động của tác dụng trong thời gian ảo lên các bậc tự do của fermion, được diễn tả bởi công thức sau

$$S_{\text{eff}} = -\int_0^{\beta} d\tau \int_0^{\beta} d\tau' \sum_{\sigma} c_{0\sigma}^{\dagger}(\tau) \mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau') c_{0\sigma}(\tau') + U \int_0^{\beta} d\tau n_{0\uparrow}(\tau) n_{0\downarrow}(\tau) \quad (1.69)$$

trong đó  $\mathcal{G}_0^{-1}(\tau - \tau')$  đóng vai trò là trường hiệu dụng Weiss. Ý nghĩa vật lý của trường hiệu dụng là ở chỗ nó như biên độ hiệu dụng đối với fermion được tạo ra trên nút đang xem xét ở thời điểm  $\tau$  (từ môi trường hiệu dụng bên ngoài). Khác với trường hợp cổ điển, hàm Weiss suy rộng là một hàm phụ thuộc thời gian thay cho một số trong trường trung bình cổ điển. Như vậy lý thuyết trường trung bình động diễn tả ở đây đã bỏ qua thăng giáng không gian nhưng lại tính tới một cách đầy đủ các thăng giáng định xứ tạm thời.  $\mathcal{G}_0^{-1}(\tau)$  đóng vai trò hàm Green không tương tác cho tác dụng  $S_{\text{eff}}$ , nhưng cần phân biệt nó với hàm Green cục bộ không tương tác của mô hình mạng tinh thể ban đầu.

Để khép kín các hệ phương trình, chúng ta cần bổ sung vào phương trình (1.69) biểu thức liên hệ  $\mathcal{G}_0^{-1}(\tau)$  với các đại lượng định xứ có thể tính được từ bản thân hàm tác dụng  $S_{\text{eff}}$ . Điều kiện để xác định hàm  $\mathcal{G}_0^{-1}(\tau)$  chính là hàm Green thu

được trong mô hình hiệu dụng một nút (1.69) trùng với hàm Green cục bộ tại một nút mạng ban đầu

$$G(i\omega_n) \equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G(\mathbf{k}, i\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \rho(\varepsilon) G(\varepsilon, i\omega). \quad (1.70)$$

Năng lượng riêng của hàm Green (1.70) được xác định thông qua phương trình Dyson

$$\Sigma(i\omega_n) = \mathcal{G}_0^{-1}(i\omega_n) - G^{-1}(i\omega_n) \quad (1.71)$$

Hệ phương trình tự hợp trong lý thuyết trường trung bình động thông thường được giải bằng phương pháp lặp. Chúng ta xuất phát từ một năng lượng riêng ban đầu. Hàm năng lượng riêng này có thể lựa chọn bất kỳ, nhưng để quá trình tự hợp nhanh hơn, đỡ mất thời gian tính toán hơn, chúng ta có thể xuất phát từ năng lượng riêng ở vùng nhiệt độ cao, hay ở vùng tương quan điện tử yếu hay ở vùng tương quan điện tử mạnh tùy theo từng vấn đề nghiên cứu. Sau đó tính hàm Green toàn phần theo phương trình (1.70) cũng như hàm Green tại một nút mạng. Sau đó sử dụng phương trình Dyson (1.71) tính hàm Green hiệu dụng. Biết được hàm Green hiệu dụng chúng ta giải bài toán một nút với hàm tác động (1.69) và thu được hàm Green tại nút mạng đó. Sau đó sử dụng tiếp phương trình Dyson tìm lại năng lượng riêng. Quá trình này cứ tiếp tục như vậy cho đến khi thu được nghiệm hội tụ. Quá trình hội tụ nghiệm của phương pháp lặp trong giải hệ phương trình tự hợp của DMFT có thể gặp phải vòng lặp tròn, và như vậy có thể không thu được nghiệm. Hiện tượng vòng lặp tròn như vậy có thể khắc phục bằng cách lấy tổ hợp tuyến tính các nghiệm ở các vòng lặp trước làm nghiệm khởi đầu cho vòng lặp sau, ví dụ như

$$G^{(i+1)} = \alpha G^{(i)} + (1 - \alpha) G^{(i-1)},$$

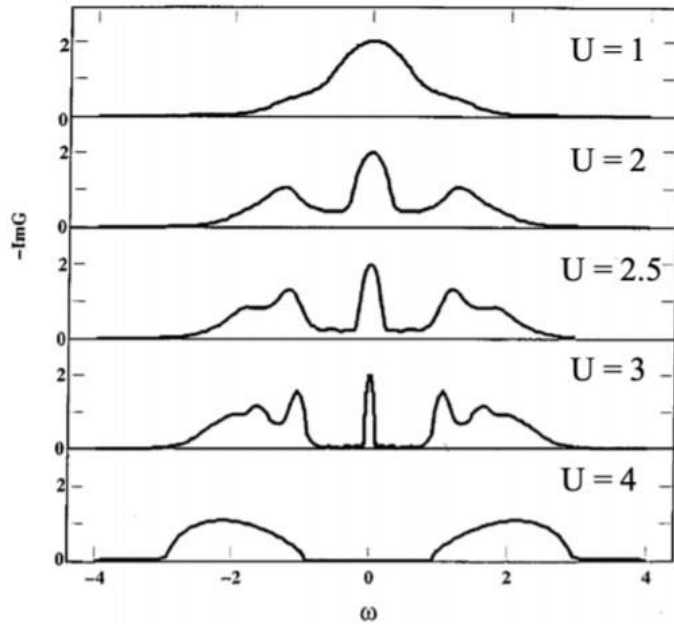
trong đó  $G^{(i)}$  là kết quả thu được ở vòng lặp thứ  $i$  [48].

Điểm mấu chốt để giải hệ phương trình khép kín tự hợp lý thuyết trường trung bình động là giải bài toán một nút. Về cơ bản bài toán một nút tương đương với bài toán một tạp ở trong một bể dẫn, có thể thể hiện qua mô hình Anderson hay mô hình Hubbard với phần hàm Green trần của fermion là hàm Green thể hiện trường hiệu dụng [48-50]. Do vậy những phương pháp giải mô hình Anderson hay mô hình Hubbard hiệu dụng đều có thể áp dụng để giải bài toán một tạp này trong

chuỗi phương trình của lý thuyết trường trung bình động. Có nhiều phương pháp khác nhau để giải bài toán một nút hiệu dụng, cả mô phỏng lẫn gần đúng như phương pháp Monte Carlo lượng tử, phương pháp chéo hóa chính xác, phương pháp nhóm tái chuẩn hóa số, phương pháp nhiễu loạn lặp, phương pháp hạt cầm tù... [48-50]

Trong một số mô hình, như mô hình Falicov – Kimball hay mô hình trao đổi kép, bài toán hiệu dụng 1 tạp có thể giải chính xác bằng giải tích. Nhờ vậy quá trình giải số hệ phương trình của lý thuyết trường trung bình động đơn giản đi rất nhiều [48].

Lý thuyết trường trung bình động có nhiều ứng dụng rất thành công trong nghiên cứu hệ tương quan điện tử [48-50]. Một trong những thành công nổi bật của lý thuyết trường trung bình động là nghiên cứu chuyển pha kim loại – điện môi Mott. Kết quả của nghiên cứu này có thể thấy sơ lược trên hình 1.9, thể hiện hàm mật độ trạng thái của electron trong mô hình Hubbard. Khi tương tác Coulomb  $U$  tăng, chúng ta thấy hàm mật độ trạng thái phát triển một đỉnh nằm giữa hai dải năng lượng con Hubbard. Đỉnh đó thể hiện trạng thái chuẩn hạt của kim loại. Tại giá trị xác định của  $U$ , đỉnh chuẩn hạt kim loại đó biến mất, và trạng thái của hệ trở thành điện môi. Thực nghiệm đã quan sát sự biến mất của đỉnh chuẩn hạt tại chuyển pha điện môi Mott [85]. Như vậy, sử dụng phương pháp lý thuyết trường trung bình động cho mô hình Hubbard cho kết quả phù hợp với thực nghiệm khi nghiên cứu sự chuyển pha kim loại điện môi Mott, điều mà lý thuyết trường trung bình tĩnh không thể hiện được. Tuy nhiên, lý thuyết trường trung bình động đã loại bỏ tương quan phi cục bộ và nó chỉ chính xác khi số chiều không gian là vô hạn. Khi số chiều không gian là hữu hạn lý thuyết trường trung bình động chỉ là gần đúng.



Hình 1.9. Mật độ trạng thái của mô hình Hubbard tại  $T = 0$  [84]

### 1.10. Kết luận phần II

Trong phần này chúng tôi trình bày lý thuyết trường trung bình tĩnh, và khi áp dụng cho mô hình Ising cho kết quả chính xác trong không gian vô hạn chiều. Khắc phục hạn chế đó, chúng tôi giới thiệu lý thuyết trường trung bình động được ứng dụng hiệu quả trong nghiên cứu các hệ tương quan điện tử và các vật liệu tương quan điện tử. Đây là phương pháp nghiên cứu lý thuyết được sử dụng chủ yếu trong luận án.

## CHƯƠNG 2. HIỆU ỨNG TƯƠNG QUAN ĐIỆN TỬ TRONG CHẤT ĐIỆN MÔI TÔ PÔ CHERN

Trong chương này, chúng tôi nghiên cứu hiệu ứng tương quan điện tử trong chất điện môi tô pô Chern. Chất điện môi tô pô Chern được mô hình hóa bằng mô hình Haldane, còn tương quan điện tử xuất hiện nhờ tương tác Coulomb cục bộ giữa fermion linh động và fermion định xứ được đưa vào trong mô hình. Hiệu ứng tương quan điện tử được nghiên cứu trong khuôn khổ lý thuyết trường trung bình động. Các kết quả nghiên cứu chính đã được công bố trên tạp chí Physical Review B [86] và được một số nghiên cứu trên thế giới tham khảo [56,57,87-89].

### 2.1. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu

Như chúng ta đã thấy ở chương 1, dự đoán lý thuyết và khám phá thực nghiệm về điện môi tô pô đã thu hút rất nhiều quan tâm nghiên cứu trong vật lý các chất cô đặc. Các pha tô pô nằm ngoài lý thuyết phân loại vùng Landau và chúng được đặc trưng bởi bất biến tô pô không tầm thường. Chất điện môi tô pô có khe năng lượng ở khối nhưng có trạng thái biên không khe khiến cho biên chất điện môi tô pô có khả năng dẫn điện.

Trước khi khám phá ra điện môi tô pô, các trạng thái Hall lượng tử đã được biết là pha tô pô. Chúng thể hiện độ dẫn Hall được lượng tử hóa. Tuy vậy, các trạng thái Hall lượng tử không có đối xứng nghịch đảo thời gian cũng như đối xứng tịnh tiến mạng, như chất điện môi tô pô  $Z_2$ . Hơn nữa, các trạng thái Hall lượng tử cần từ trường ngoài tạo ra các mức năng lượng Landau. Năm 1988, Haldane đề xuất một mô hình lý thuyết có mạng tinh thể và cũng cho một độ dẫn Hall lượng tử nguyên mà không có mặt từ trường ngoài trên toàn mạng cũng như mức năng lượng Landau [77]. Người ta nhận thấy rằng độ dẫn Hall lượng tử nguyên đó thực chất chỉ là bất biến tô pô Chern [8]. Các trạng thái tô pô như vậy thường được gọi là điện môi Chern. Mô hình do Haldane đề xuất là mô hình lý thuyết thuần túy, do vậy, có những đề xuất để hiện thực hóa pha tô pô Chern theo ý tưởng của Haldane, bao gồm đề xuất mô phỏng lượng tử mô hình Haldane qua mạng quang học của các nguyên tử cực lạnh [90-92]. Gần đây, mô phỏng lượng tử mô hình Haldane đã được tiến hành thành công [79].

Lý thuyết về điện môi tô pô  $Z_2$  và điện môi tô pô Chern dựa trên lý thuyết dải năng lượng, trong đó tương quan điện tử được bỏ qua. Do vậy, hiệu ứng tương quan

điện tử trong pha tô pô thu hút rất nhiều sự quan tâm nghiên cứu. Chúng ta có thể mong đợi rằng tương quan điện tử yếu không làm thay đổi tính chất tô pô của điện môi tô pô [34]. Tuy nhiên, tương quan điện tử mạnh có thể tạo ra sự thay đổi về bản chất các tính chất của chúng. Hầu hết các nghiên cứu tập trung nghiên cứu hiệu ứng tương quan trong điện môi tô pô  $Z_2$ . Tương quan điện tử có thể làm chuyển pha điện môi tô pô sang pha điện môi Mott hay Slater. Chuyển pha Slater xuất hiện cùng với trật tự tầm xa, trong khi đó chuyển pha Mott, không có phá vỡ đối xứng tự phát [93]. Trên thực tế, khi tương tác Coulomb cục bộ được đưa vào trong mô hình Kane-Mele của điện môi tô pô  $Z_2$  [17], nó có thể chuyển trạng thái điện môi tô pô sang trạng thái sóng mật độ spin, ở đó đối xứng nghịch đảo thời gian bị phá vỡ [94-98]. Phụ thuộc vào các thông số mô hình, chuyển pha như thế có thể trải qua pha spin lỏng [94-98]. Tuy nhiên, đến nay vẫn còn có những bất đồng về sự tồn tại của trạng thái spin lỏng [34].

Trái với điện môi tô pô  $Z_2$ , hiệu ứng tương quan điện tử trong điện môi Chern ít được quan tâm chú ý. Có thể nói, nghiên cứu của chúng tôi là một trong những nghiên cứu tiên phong về hiệu ứng tương quan điện tử trong điện môi tô pô Chern. Ban đầu, mô hình Haldane mô tả điện môi tô pô Chern là mô hình fermion không spin. Hầu hết các nghiên cứu đã đưa tương tác Coulomb lân cận gần nhất phi cục bộ vào mô hình Haldane và khảo sát ảnh hưởng của chúng đến các tính chất tô pô [99,100]. Tương tác lân cận gần nhất chuyển hệ sang pha điện môi trật tự điện tích. Pha trật tự điện tích có tô pô tầm thường và sự chuyển pha là bậc một [99,100]. Trong khi đối xứng nghịch đảo thời gian bị phá vỡ trong cả pha điện môi tô pô Chern và pha trật tự điện tích, đối xứng nghịch đảo không gian được bảo toàn trong pha điện môi tô pô Chern bị mất đi trong pha trật tự điện tích. Tình huống này tương tự như sự chuyển pha Slater trong điện môi tô pô  $Z_2$ , khi sự chuyển pha đi kèm theo với sự phá vỡ đối xứng tự phát. Tuy nhiên, vẫn không rõ điều gì sẽ xảy ra với chuyển pha Mott khi không có bất cứ sự phá vỡ đối xứng nào trong điện môi tô pô được diễn ra.

Vì vậy, chúng tôi nghiên cứu ảnh hưởng của tương quan điện tử trong điện môi tô pô Chern, được mô tả bằng mô hình Haldane. Trái với nghiên cứu trước đây [99-101], chúng tôi kết hợp tương tác Coulomb cục bộ vào mô hình Haldane. Tương tác cục bộ này là tương tác Coulomb tầm ngắn giữa các fermion linh động



và fermion không spin định xứ tại các nút mạng tinh thể được đưa vào trong mô hình. Đó chính là loại tương tác cục bộ trong mô hình Falicov-Kimball [102]. Mô hình Haldane với tương tác Falicov-Kimball cũng có thể được xem như là một phiên bản bất đối xứng của mô hình Kane-Mele-Hubbard, khi các điện tử có thành phần spin cố định bị đóng băng không di chuyển trong mạng tinh thể. Đối xứng nghịch đảo thời gian vốn được bảo toàn trong mô hình Kane-Mele-Hubbard nhưng bị phá vỡ trong mô hình Haldane-Falicov-Kimball. Chúng ta biết rằng mô hình Falicov-Kimball mô tả tốt sự chuyển pha do tương quan điện tử có và không có sự phá vỡ đối xứng nghịch đảo không gian [102-105]. Chúng ta có thể kỳ vọng rằng với tương tác Coulomb cục bộ, mô hình chúng tôi đề xuất phù hợp cho nghiên cứu về chuyển pha tô pô do tương quan điện tử có và không có sự phá vỡ đối xứng nghịch đảo không gian trong điện môi Chern. Chúng tôi sử dụng lý thuyết trường trung bình động để nghiên cứu chuyển pha. Phương pháp này đã được trình bày trong chương 1. Lý thuyết trường trung bình động được sử dụng rộng rãi và rất thành công trong nghiên cứu tương quan điện tử [47,48]. Trên thực tế, mô hình Falicov-Kimball được nghiên cứu rất nhiều bằng lý thuyết trường trung bình động [106-109].

Mặc dù có thể xem như là một phiên bản giản lược của mô hình Hubbard, mô hình Falicov-Kimball có nhiều ưu điểm trong nghiên cứu vấn đề về tương quan điện tử. Mô hình Falicov-Kimball khiến bài toán hiệu dụng một tạp trong lý thuyết trường trung bình động trở nên đơn giản và có thể giải giải tích chính xác. Ưu điểm này làm cho thời gian tính toán giải số hệ phương trình trong lý thuyết trường trung bình động giảm đi đáng kể. Ưu điểm khác của mô hình Falicov-Kimball là nó có giản đồ rất phong phú, có khả năng mô tả các hiện tượng vật lý khác nhau, đặc biệt là các pha kỳ lạ rất được quan tâm nghiên cứu.

## **2.2. Mô hình Haldane - Falicov – Kimball**

Mô hình Haldane mô tả quá trình di động của các fermion không spin, không tương tác, trong mạng tinh thể tổ ong, có thông lượng (từ trường) toàn phần bằng không [77]. Bên cạnh fermion linh động còn có fermion không spin định xứ. Khi không có tương tác, fermion định xứ không ảnh hưởng đến tính chất tô pô của các fermion linh động. Tương quan điện tử được đưa vào thông qua tương tác Coulomb

cục bộ giữa các fermion linh động và fermion định xứ. Mô hình tổng thể được mô tả bằng Hamiltonian sau:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle} c_i^\dagger c_j + it_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} v_{ij} c_i^\dagger c_j + H.c. + E_f \sum_i f_i^\dagger f_i + U \sum_i c_i^\dagger c_i f_i^\dagger f_i, \quad (2.1)$$

trong đó  $c_i$  ( $f_i$ ) là toán tử hủy fermion không spin linh động (định xứ) ở nút mạng  $i$  của mạng tổ ong.  $t$  là thông số nhảy nút lân cận gần nhất và  $t_2$  là thông số nhảy nút lân cận gần thứ hai cho fermion linh động.  $v_{ij} = \pm 1$  đối với nhảy nút lân cận thứ hai thuận chiều kim đồng hồ (ngược chiều kim đồng hồ).  $E_f$  là mức năng lượng của fermion định xứ.  $U$  là cường độ của tương tác cục bộ giữa fermion linh động và fermion định xứ. Khi  $U = 0$ , Hamiltonian trong biểu thức (2.1) mô tả mô hình Haldane với pha Peierls  $\varphi = \pi/2$  [78]. Ở Chương 1, chúng ta đã thấy trạng thái cơ bản có tính chất tô pô với bất biến tô pô, số Chern  $C = \pm 1$  phụ thuộc vào dấu của  $t_2$  [77]. Khi  $t_2 = 0$ , Hamiltonian trong biểu thức (2.1) là mô hình Falicov-Kimball thông thường trong một mạng tinh thể lưỡng phân [102]. Chúng ta biết rằng mô hình Falicov-Kimball trong mạng lưỡng phân cho thấy có chuyển pha kim loại – điện môi đối với các trạng thái đồng nhất, khi đối xứng nghịch đảo không gian không bị phá vỡ [102-109]. Trong giới hạn khác, khi  $t = 0$ , mô hình đề xuất tương đương với hai mạng tam giác độc lập của mô hình Falicov-Kimball. Mạng tam giác có tính chất vấp (frustration) hình học, do đó trật tự điện tích thông thường như trong mạng tinh thể vuông không xảy ra ở nhiệt độ thấp [110-113]. Thay vào đó, pha liên kết được tạo thành [110-113]. Tuy nhiên, chúng ta có thể cho rằng nhảy nút lân cận gần thứ hai  $t_2$  luôn luôn nhỏ hơn nhảy nút lân cận gần nhất  $t$  và đối với các giá trị nhỏ của  $t_2$ , phá vỡ mạng con đơn lẻ không làm phá vỡ cấu trúc lưỡng phân của toàn bộ mạng tổ ong. Do vậy, chúng tôi chỉ xét trường hợp  $t_2 < t$ . Mô hình được đưa ra trong biểu thức (2.1) cũng có thể được xem như là một phiên bản bất đối xứng của mô hình Kane-Mele-Hubbard [34], khi các electron với thành phần spin cố định bị đóng băng không di chuyển trong mạng. Tính bất đối xứng như vậy có thể xảy ra như là hệ quả của sự mất cân bằng khối lượng của hai thành phần spin. Các electron với thành phần spin cố định cực kỳ nặng và trở nên khó linh động và định xứ.

### 2.3. Áp dụng lý thuyết trường trung bình động

Chúng tôi sử dụng lý thuyết trường trung bình động để khảo sát sự chuyển pha do tương quan điện tử trong mô hình được đề xuất ở biểu thức (2.1). Trong lý thuyết trường trung bình động, năng lượng riêng chỉ phụ thuộc vào tần số. Lý thuyết trường trung bình động trở nên chính xác khi số chiều không gian là vô hạn. Tuy nhiên, trong hệ hai chiều, lý thuyết trường trung bình động là một gần đúng. Gần đúng này bỏ qua tương quan phi cục bộ, nhưng vẫn giữ được tương quan động lực học cục bộ. Bởi vì mạng tổ ong là mạng lưỡng phân, để thuận tiện cho nghiên cứu, chúng tôi chia mạng thành hai mạng con cài vào nhau, A và B giống như lý thuyết trường trung bình động cho mô hình Falicov – Kimball trong mạng siêu lập phương [106-109]. Trong không gian động lượng, phần linh động của Hamiltonian trong biểu thức (2.1) được viết thành một ma trận  $2 \times 2$  trong không gian của hai mạng con.

$$\hat{h}_0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} t_2 f_2(\mathbf{k}) & -t f_1(\mathbf{k}) \\ -t f_1^*(\mathbf{k}) & -t_2 f_2(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

trong đó

$$f_1(\mathbf{k}) = e^{i\frac{1}{2}k_x} \cos\left(\frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right) + e^{-ik_x},$$

$$f_2(\mathbf{k}) = 2 \sin\left(\frac{3}{2}k_x + \frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right) - 2 \sin\left(\frac{3}{2}k_x - \frac{\sqrt{3}}{2}k_y\right) - 2 \sin(\sqrt{3}k_y).$$

Trong lý thuyết trường trung bình động, hàm Green của fermion linh động có thể được viết thông qua phương trình Dyson

$$\hat{G}(\mathbf{k}, z) = [z + \mu - \hat{h}_0(\mathbf{k}) - \hat{\Sigma}(z)]^{-1}, \quad (2.3)$$

trong đó  $\mu$  là thế hóa và

$$\hat{\Sigma}(z) = \begin{pmatrix} \Sigma_A(z) & 0 \\ 0 & \Sigma_B(z) \end{pmatrix},$$

là năng lượng riêng. Ở đây các phần tử không chéo của năng lượng riêng triệt tiêu do lý thuyết trường trung bình động loại bỏ tương quan phi cục bộ giữa mạng con A và B. Năng lượng riêng được xác định từ một nút hiệu dụng trong một trường trung bình hiệu dụng mà thể hiện tương tác của tất cả các nút giữa chúng với nhau và với nút đã chọn. Hàm tác động của nút hiệu dụng có dạng

$$S_\alpha = \int d\tau d\tau' c_\alpha^\dagger(\tau) \mathcal{G}_\alpha^{-1}(\tau - \tau') c_\alpha(\tau') + (E_f - \mu) f_\alpha^\dagger f_\alpha + U c_\alpha^\dagger c_\alpha f_\alpha^\dagger f_\alpha \quad (2.4)$$

trong đó  $\alpha = A, B$  là chỉ số mạng con,  $\mathcal{G}_\alpha(\tau)$  là hàm Green biểu diễn trường trung bình hiệu dụng. Chúng ta có thể viết lại  $\mathcal{G}_\alpha^{-1}(z) = z + \mu - \lambda_\alpha(z)$  trong đó  $\lambda_\alpha(z)$  có thể xem là trường trung bình Weiss động lực. Năng lượng riêng của nút hiệu dụng thỏa mãn phương trình Dyson

$$G_\alpha^{-1}(z) = z + \mu - \lambda_\alpha(z) - \Sigma_\alpha(z). \quad (2.5)$$

Điều kiện tự hợp yêu cầu hàm Green thu được từ bài toán một nút hiệu dụng và hàm Green của mạng là đồng nhất, có nghĩa là

$$G_\alpha(z) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \hat{G}_{\alpha\alpha}(\mathbf{k}, z), \quad (2.6)$$

trong đó  $N$  là số nút mạng con.

Hàm tác động hiệu dụng trong biểu thức (2.4) có thể giải được bằng giải tích, bởi vì  $f^\dagger f$  là một số lượng tử chuẩn. Chúng ta thu được tổng thống kê của bài toán hiệu dụng một nút

$$\begin{aligned} Z_\alpha = \text{Tr}_f \int D[c^\dagger, c] e^{-S_\alpha[c^\dagger, c, f^\dagger, f]} &= 2 \exp \sum_n \ln \frac{i\omega_n + \mu - \lambda_\alpha i\omega_n}{i\omega_n} \\ &+ e^{-\beta(E_f - \mu)} \times 2 \exp \sum_n \ln \frac{i\omega_n + \mu - \lambda_\alpha i\omega_n - U}{i\omega_n}, \end{aligned} \quad (2.7)$$

trong đó  $\omega_n = (2n + 1)\pi T$  là tần số Matsubara. Từ tổng thống kê trong biểu thức (2.7) chúng ta thu được hàm Green cục bộ

$$G_\alpha(z) = \frac{1 - n_{f\alpha}}{z + \mu - \lambda_\alpha(z)} + \frac{n_{f\alpha}}{z + \mu - \lambda_\alpha(z) - U}, \quad (2.8)$$

trong đó

$$n_{f\alpha} = \frac{1}{1 + \exp[\beta(\tilde{E}_{f\alpha} - \mu)]}$$

$$\tilde{E}_{f\alpha} = E_f + T \sum_n \ln \frac{i\omega_n + \mu - \lambda_\alpha i\omega_n}{i\omega_n + \mu - \lambda_\alpha i\omega_n - U} \quad (2.9)$$

Chúng ta có thể thấy  $n_{f\alpha}$  chính xác là giá trị trung bình số các fermion định xứ trong mạng con  $\alpha$ . Khi  $n_{fA} = n_{fB}$ , hai mạng con là tương đương và đối xứng nghịch đảo không gian được bảo toàn. Từ công thức (2.9) chúng ta có thể thấy rằng ở nhiệt độ không độ tuyệt đối,  $n_{f\alpha}$  chỉ có thể nhận một trong ba giá trị: 0, 1/2 và 1. Đối với trường hợp lấp đầy một nửa, có hai khả năng không tương đương có thể xảy ra: (i)  $n_{fA} = n_{fB} = \frac{1}{2}$ ; (ii)  $n_{fA} = 1, n_{fB} = 0$  (hoặc  $n_{fA} = 0, n_{fB} = 1$ ). Trong trường hợp đầu, mức năng lượng tái chuẩn hóa  $\tilde{E}_{f\alpha}$  của fermion định xứ bị ghim ở mức năng lượng Fermi ( $\tilde{E}_{f\alpha} = \mu$ ) [114], trong khi đó trong trường hợp thứ hai, nó thấp hơn ( $\tilde{E}_{f\alpha} < \mu$ ) hoặc cao hơn mức năng lượng Fermi ( $\tilde{E}_{f\alpha} > \mu$ ). Chúng tôi giải số hệ phương trình tự hợp của lý thuyết trường trung bình động trong cả hai tần số thực và ảo bằng phương pháp lặp. Ở nhiệt độ không tuyệt đối, tần số ảo được hiểu là tần số Matsubara với nhiệt độ tương đương là độ gián đoạn của tần số liên tục.

#### 2.4. Kết quả tính số

Để xác định pha điện môi hay kim loại, chúng tôi khảo sát đặc tính của hàm mật độ trạng thái quanh mức năng lượng Fermi. Nếu mật độ trạng thái  $\rho(\omega)$  quanh mức năng lượng Fermi ( $\omega=0$ ) triệt tiêu thì pha thu được là điện môi. Nếu mật độ trạng thái hữu hạn tại mức năng lượng Fermi thì pha thu được là kim loại.

Pha điện môi có thể là pha điện môi dải năng lượng, pha điện môi Mott, pha điện môi Slater. Pha điện môi dải năng lượng là pha điện môi mà khối lượng hiệu dụng của hạt tải hữu hạn. Pha điện môi Mott là pha điện môi mà khối lượng hiệu dụng của hạt tải trở lên lớn vô cùng theo cơ chế Brinkman-Rice cho pha điện môi Mott. Khối lượng hiệu dụng của hạt tải tỷ lệ nghịch với hệ số tái chuẩn hóa. Do vậy, nếu hệ số tái chuẩn hóa hữu hạn, pha thu được là pha điện môi dải năng lượng, còn nếu hệ số tái chuẩn hóa triệt tiêu, pha thu được là pha điện môi Mott. Pha điện môi Slater là pha điện môi đi kèm với phá vỡ đối xứng tự phát. Các pha điện môi trật tự điện tích, phản sắt từ hay sắt từ là các ví dụ về pha điện môi Slater. Pha điện môi có tính chất tô pô không tầm thường khi số Chern là một số nguyên khác 0. Do vậy, để xác định tính chất tô pô của pha điện môi, chúng tôi sẽ tính số Chern. Như nhận xét ở mục trước, mô hình đề xuất tại trường hợp lấp đầy một nửa cho hai loại nghiệm

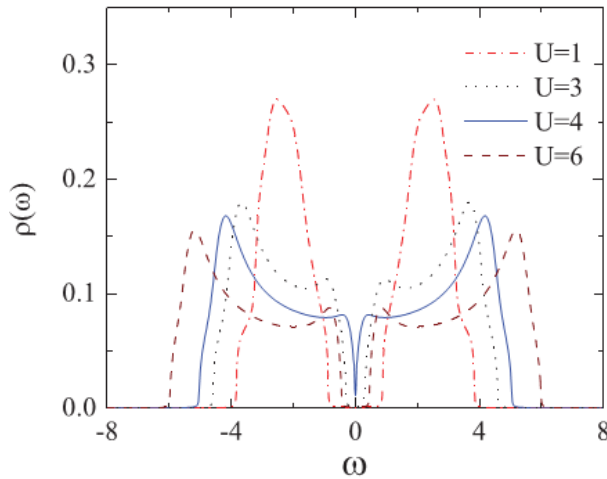
không tầm thường không tương đương nhau. Chúng ta sẽ nghiên cứu từng trường hợp một.

### 2.4.1. Chuyển pha Mott

Chúng ta xét trường hợp lấp đầy một nửa. Đó là trường hợp thể hóa học  $\mu = U/2$ . Khi  $n_{fA} = n_{fB} = 1/2$  chuyển pha Mott sẽ xảy ra. Trong hình 2.1, chúng tôi trình bày mật độ trạng thái (DOS) của fermion linh động

$$\rho(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im} G_{\alpha}(\omega + i0^+),$$

đối với các giá trị của  $U$  khác nhau.



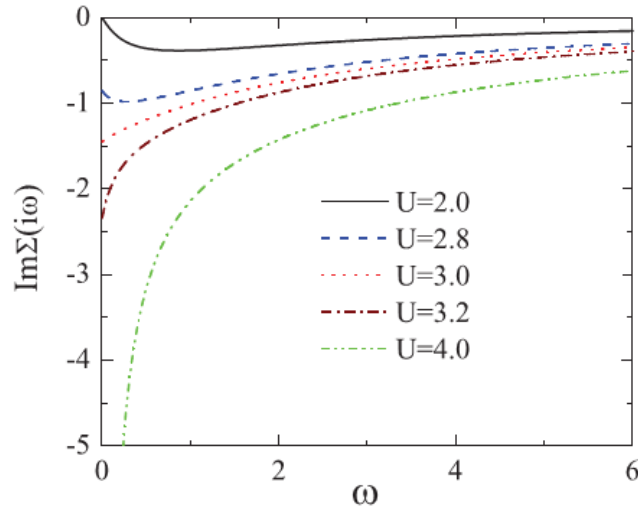
Hình 2.1. Mật độ trạng thái của fermion linh động đối với các giá trị khác nhau của  $U$  ( $t = 1, t_2 = 0,5$ )

Hình 2.1 cho thấy với khi  $U$  tăng, mật độ trạng thái đầu tiên thể hiện một khe năng lượng, sau đó khe đó đóng lại và cuối cùng nó mở ra trở lại. Tính chất này cho thấy có sự chuyển pha từ pha điện môi sang pha kim loại và sau đó lại sang pha điện môi. Bởi vì khi  $U = 0$ , hệ là điện môi Chern, và miền các giá trị nhỏ của  $U$  liên kết đoạn nhiệt với  $U = 0$ , chúng ta có thể cho rằng pha điện môi đầu tiên là điện môi tô pô Chern. Trong miền giá trị này, DOS cho thấy rõ ràng hai dải năng lượng con phân biệt. Sự tách biệt dải năng lượng con tăng lên theo giá trị của  $U$ . Tuy nhiên, khe năng lượng thực tế, nơi DOS triệt tiêu, giảm theo  $U$  tăng. Trong khi, tương quan điện tử cố gắng tách hai dải năng lượng con, chúng thực sự làm giảm khe năng lượng của điện môi tô pô Chern. Ở giá trị tới hạn  $U_{c1}$ , khe đóng lại, và hệ trở thành kim loại. Chúng tôi xác nhận tô pô của pha điện môi đầu tiên bằng cách

tính toán trực tiếp số Chern. Trong trường hợp tương tác, số Chern  $C$  có thể được tính thông qua hàm Green ở tần số không [115-117]:

$$C = \frac{1}{2\pi} \int d^2k F_{xy}, \quad (2.10)$$

trong đó  $F_{ij} = \partial_i A_j - \partial_j A_i$ ,  $A_i = -i \sum_{\mathbf{v}} \langle \mathbf{k}\mathbf{v} | \partial_{k_i} | \mathbf{k}\mathbf{v} \rangle$  và tổng được lấy trên tất cả các trạng thái riêng trực giao chuẩn hóa  $|\mathbf{k}\mathbf{v}\rangle$  của ma trận  $\hat{G}^{-1}(\mathbf{k}, i0)$  với các trị riêng dương. Trong tính số, chúng tôi sử dụng phương pháp gián đoạn hóa vùng Brillouin để tính toán số Chern một cách hiệu quả trong công thức (2.10) [118]. Đặc biệt, chúng tôi sử dụng mạng lưới  $128 \times 128$  điểm đối với ô nguyên tố của mạng đảo. Kết quả, chúng tôi thu được  $C = 1$  khi  $U < U_{c1}$ . Như vậy, chuyển pha điện môi – kim loại đầu tiên là chuyển pha tô pô. Khe đóng lại tại cùng một điểm nơi số Chern không còn là số nguyên nữa. Pha kim loại, nơi DOS hữu hạn quanh mức năng lượng Fermi, xảy ra khi  $U$  chạy từ  $U_{c1}$  tới  $U_{c2}$ . Tại giá trị  $U_{c2}$  khe năng lượng mở lại. Mặc dù khe năng lượng thực tế đã đóng trong pha kim loại, DOS rõ ràng cho thấy đó là một khe năng lượng giả vì có một khe hẹp tồn tại xung quanh  $\omega = 0$ . Pha điện môi cuối cùng xảy ra đối với tương quan mạnh  $U > U_{c2}$ , và tất nhiên đó là pha điện môi Mott. Chúng ta cũng có thể phân biệt các pha bằng việc xét tính chất của năng lượng riêng ở các tần số thấp. Hình 2.2 trình bày phần ảo của năng lượng riêng  $\text{Im}\Sigma(i\omega)$  đối với các giá trị khác nhau của  $U$ .



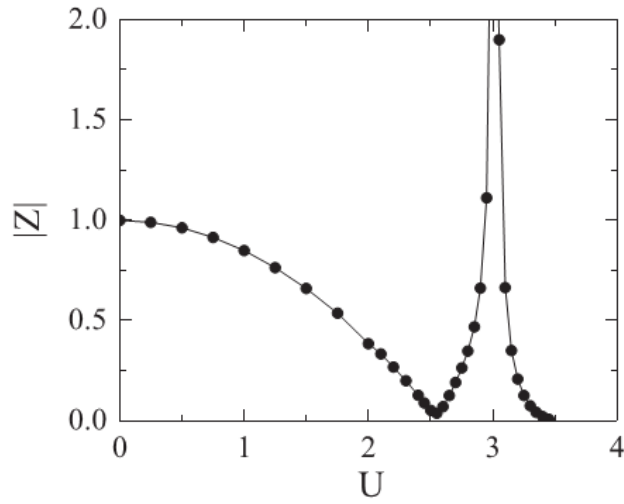
Hình 2.2. Phần ảo của năng lượng riêng  $\text{Im}\Sigma(i\omega)$  đối với các giá trị khác nhau của  $U$  ( $t = 1$ ,  $t_2 = 0,1$ )

Trong pha điện môi Chern, phần ảo của năng lượng riêng triệt tiêu,  $\text{Im}\Sigma(i0) = 0$ , mà dẫn đến DOS cũng triệt tiêu ở  $\omega = 0$ . Trong pha kim loại,

$\text{Im}\Sigma(i0)$  hữu hạn. Nó cho thấy rằng pha kim loại không phải là chất lỏng Fermi. Độ dốc của  $\text{Im}\Sigma(i\omega)$  khi  $\omega \rightarrow 0$  đồng nhất với độ dốc của  $\text{Re}\Sigma(\omega + i0^+)$  khi  $\omega \rightarrow 0$ . Do đó chúng ta có thể sử dụng độ dốc của  $\text{Im}\Sigma(i\omega)$  khi  $\omega \rightarrow 0$  để xác định hệ số tái chuẩn hóa.

$$Z = \left[ 1 - \frac{\partial \text{Re}\Sigma(\omega + i0^+)}{\partial \omega} \right]_{\omega=0}^{-1} \quad (2.11)$$

Trong hình 2.3, chúng tôi trình bày giá trị tuyệt đối của hệ số tái chuẩn hóa  $|Z|$  như một hàm số của  $U$ . Nó cho thấy rằng trong pha kim loại, hệ số tái chuẩn hóa phân kì khi  $\frac{\partial \text{Im}\Sigma(i\omega)}{\partial \omega} = 1$  tại  $\omega \rightarrow 0$ .



Hình 2.3. Giá trị tuyệt đối của hệ số tái chuẩn hóa  $|Z|$  là hàm của  $U$  ( $t = 1$ ;  $t_2 = 0,1$ )

Ngoài điểm phân kì,  $|Z|$  giảm và triệt tiêu ở cả  $U_{c1}$  và  $U_{c2}$ . Tuy nhiên, khi  $U < U_{c1}$ , hệ số tái chuẩn hóa vẫn hữu hạn. Điều này cho thấy rằng pha điện môi Chern vẫn là điện môi dải năng lượng như trong trường hợp không tương tác. Hình 2.3 cho thấy hệ số tái chuẩn hóa luôn triệt tiêu khi  $U > U_{c2}$ . Theo cơ chế Brinkman-Rice, điều đó thể hiện chuyển pha Mott [119]. Đặc điểm lõm xuống của mật độ trạng thái xung quanh mức năng lượng Fermi trong pha kim loại là do tính chất đặc biệt của mạng tổ ong. Khi  $t_2 = 0$  và  $U = 0$ , ở các góc của vùng Brillouin, các electron trở thành fermion Weyl với hệ thức tán sắc tuyến tính  $\varepsilon_k = vk$ , dẫn đến mật độ trạng thái triệt tiêu tuyến tính khi  $\omega=0$  [78]. Với thông số nhảy nút  $t_2$  hữu hạn, các fermion nhận được khối lượng hữu hạn ở các góc của vùng Brillouin thứ nhất. Chúng cũng có thời gian sống hữu hạn khi tương quan điện tử có tác dụng. Như vậy, tương quan điện tử tái chuẩn hóa cả khối lượng lẫn vận tốc của fermion



tại các góc của vùng Brillouin thứ nhất thông qua hệ số tái chuẩn hóa  $Z$ . Do đó, DOS cho thấy sự lõm xuống xung quanh mức Fermi, nhưng giá trị của nó luôn luôn hữu hạn. Trong pha điện môi Mott, phần ảo của năng lượng riêng  $\text{Im}\Sigma(i\omega)$  phân kỳ như  $1/\omega$ . Do sự phân kỳ này, chúng ta không thể sử dụng công thức (2.10) để tính số Chern trong pha điện môi Mott. Tuy nhiên, do tính chất định xứ của năng lượng riêng, số Chern có thể được xác định thông qua số vòng quấn miền tần số (FDWN) [120], có nghĩa là số Chern trong pha điện môi Mott bằng:

$$C = \gamma C_o, \quad C_o = \int \frac{d^2k}{4\pi} \varepsilon_{abc} \bar{h}_k^a \partial_{k_x} \bar{h}_k^b \partial_{k_y} \bar{h}_k^c, \quad (2.12)$$

trong đó  $\varepsilon_{abc}$  là tensor phản đối xứng toàn phần,  $\bar{h}_k^a$  là ba thành phần chuẩn hóa của Hamiltonian không tương tác trong cơ sở không gian do các ma trận Pauli tạo ra, có nghĩa là  $\hat{h}_o(k) = \sum_a h_k^a \sigma_a$  và  $\sigma_a$  là các ma trận Pauli,

$$\bar{h}_k^a = \frac{h_k^a}{|h_k|}, \quad |h_k|^2 = \sum_a |h_k^a|^2,$$

$\gamma$  cũng gọi là số vòng quấn miền tần số. Nó mô tả số vòng quấn của hàm Green nguyên tử

$$G_{at}^{-1}(i\omega) = i\omega + \mu - \Sigma(i\omega),$$

trên mặt phẳng phức.  $C_o$  thực chất là số Chern của Hamiltonian không tương tác [115]. Khi năng lượng riêng chỉ phụ thuộc vào tần số, tất cả ảnh hưởng của tương quan điện tử lên số Chern được mã hóa trong số vòng quấn miền tần số  $\gamma$ . Chúng ta chú ý rằng trong pha điện môi Chern,  $\text{Im} G_{at}^{-1}(i\omega)$  cắt trục  $\omega$  một lần, trong khi đó ở pha điện môi Mott, nó không bao giờ cắt, kết quả dẫn đến  $\gamma = 1$  trong pha điện môi Chern và  $\gamma = 0$  trong điện môi Mott [120]. Do đó, điện môi Mott tầm thường về mặt tô pô. Chú ý rằng tính chất  $\text{Im}\Sigma(i\omega) \sim 1/\omega$  đối với tần số nhỏ trong pha điện môi Mott chỉ là trường hợp đặc biệt của hệ có không gian vô hạn chiều [121]. Đối với hệ có không gian hữu hạn chiều, lý thuyết trường trung bình động chỉ là một gần đúng và nó làm mất tương quan phi cục bộ. Những tương quan phi cục bộ làm giảm tính kỳ dị của năng lượng riêng ở tần số nhỏ. Tuy vậy, tương quan phi cục bộ cũng làm giảm giá trị của  $U_{c1}$  và  $U_{c2}$ , nhưng pha kim loại luôn luôn tồn tại giữa hai pha điện môi. Chú ý rằng gần đúng trường trung bình Hartree – Fock không thể mô tả chuyển pha Mott, bởi vì nó làm mất đi thăng giáng động lực cục bộ. Lý thuyết trường trung bình động có lẽ là gần đúng đơn giản nhất mà có thể mô tả cả chuyển

pha Mott và bất biến tô pô, ít nhất trong mô hình Haldane được đề xuất với tương tác cục bộ.

Trong lý thuyết trường trung bình động, chúng ta có thể rút ra các phương trình tường minh để xác định giá trị tới hạn  $U_{c1}$  và  $U_{c2}$ . Các phương trình đó có thể dẫn ra dựa trên phương pháp tuyến tính hóa lý thuyết trường trung bình động [122]. Do đối xứng hạt – lỗ trống tại lấp đầy một nửa, hàm Green là một số ảo thuần túy  $G(i0^+) = -i\pi\rho(0)$  ở mức năng lượng Fermi, bởi vì theo hệ thức Kramer-Kronig chúng ta có [73]

$$\text{Re}G(\omega) = -\mathcal{P} \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{dz}{\pi} \frac{\text{Im}G(\varepsilon)}{z - \varepsilon}$$

Do đối xứng hạt – lỗ trống nên  $\text{Im}G(\varepsilon) = \text{Im}G(-\varepsilon)$ , dẫn đến  $\text{Re}G(\omega=i0^+) = 0$ .

Ở mức  $U = U_{c1}$ , năng lượng riêng là một số thực thuần túy và  $\Delta\Sigma(\omega + i0^+) \equiv \Sigma(\omega + i0^+) - U/2$  trở nên nhỏ có thể bỏ qua tại  $\omega \rightarrow 0$ , bởi vì

$$G(i0^+) = -\frac{1}{N} \sum_k \frac{\Delta\Sigma(i0^+)}{[\Delta\Sigma(i0^+)]^2 - t_2^2 f_2^2(k) - t^2 |f_1(k)|^2} \quad (2.13)$$

tiến tới không. Từ các phương trình (3.5) và (3.8) chúng ta thu được

$$G(i0^+) = -\frac{\Delta\Sigma(i0^+)U^2/4}{[\Delta\Sigma(i0^+)]^2 U^2/4 - (U^2/4)^2}. \quad (2.14)$$

Ở mức  $U = U_{c1}$ ,  $\Delta\Sigma(i0^+)$  triệt tiêu, do đó từ các phương trình (2.13), (2.14), chúng ta thu được phương trình để xác định  $U_{c1}$

$$\frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{t_2^2 f_2^2(k) + t^2 |f_1(k)|^2} = \frac{4}{U_{c1}^2}. \quad (2.15)$$

Ở mức  $U = U_{c2}$ , năng lượng riêng  $\Delta\Sigma(i0^+)$  phân kì, tuy nhiên trường trung bình Weiss  $\lambda(i0^+)$  triệt tiêu, từ phương trình (2.5) và (2.8), ta có thể chỉ ra rằng

$$\Delta\Sigma(i0^+) = -\frac{U^2/\lambda(i0^+)}{4}.$$

Cùng với phương trình (2.6) chúng ta thu được

$$G(i0^+) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{\frac{\lambda(i0^+)U^2}{4}}{\left(\frac{U^2}{4}\right)^2 - \lambda^2(i0^+) [t_2^2 f_2^2(k) + t^2 |f_1(k)|^2]} \quad (2.16)$$

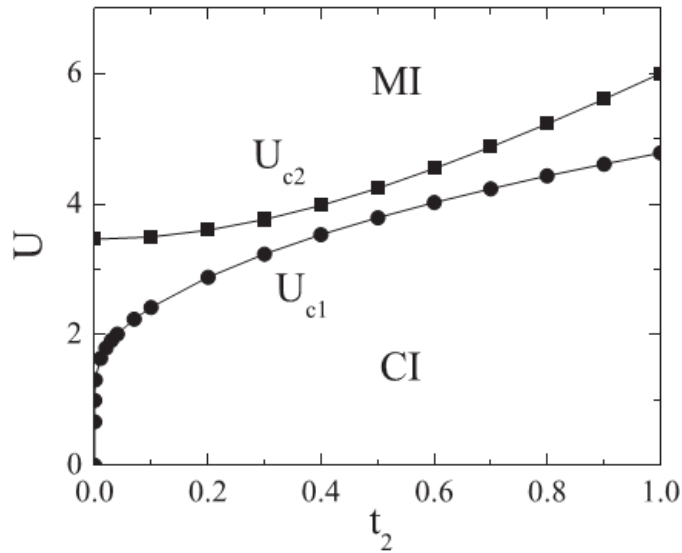
Mặt khác, từ phương trình (2.8), hàm Green cục bộ tại năng lượng không bằng

$$G(i0^+) = \frac{\lambda(i0^+)}{\frac{U^2}{4} - \lambda^2(i0^+)} \quad (2.17)$$

Tại  $U = U_{c2}$ ,  $\lambda(i0^+)$  triệt tiêu, do đó từ phương trình (2.16) và (2.17) ta thu được phương trình để xác định  $U_{c2}$ :

$$\frac{1}{N} \sum_k [t_2^2 f_2^2(k) + t^2 |f_1(k)|^2] = \frac{U_{c2}^2}{4} \quad (2.18)$$

Trong hình 2.4, chúng tôi trình bày các giá trị tới hạn  $U_{c1}$  và  $U_{c2}$  như là hàm số của  $t_2$ . Chúng ta luôn thu được  $U_{c1} < U_{c2}$ . Do đó, giữa các pha điện môi Chern và Mott, có một miền hữu hạn pha kim loại khe giả.



Hình 2.4. Giản đồ pha của các trạng thái đối xứng nghịch đảo không gian khi lấp đầy một nửa. CI kí hiệu pha điện môi Chern, và MI kí hiệu pha điện môi Mott.

Pha kim loại khe giả tồn tại giữa hai pha ( $t = 1$ ).

Không có sự chuyển pha trực tiếp từ điện môi tô pô Chern sang điện môi Mott có tô pô tầm thường. Chúng ta có thể thấy rằng sự chuyển pha từ điện môi Chern sang điện môi Mott thông qua pha kim loại khe giả không làm thay đổi đối xứng của hệ. Tất cả các pha đều bảo toàn đối xứng nghịch đảo không gian.

#### 2.4.2. Trật tự điện tích

Ở mục trước, chúng tôi đã nghiên cứu sự chuyển pha do tương quan điện tử của pha đồng nhất, ở đó đối xứng nghịch đảo không gian được bảo toàn. Tuy nhiên,

những pha này không bền vững đối với trật tự điện tích ở nhiệt độ thấp. Chúng chỉ bền vững ở nhiệt độ cao, ở đó trật tự điện tích tầm xa biến mất.

Ngoài nghiệm đồng nhất lấp đầy một nửa, còn có một nghiệm khác  $n_{fA} = 1$ ,  $n_{fB} = 0$  (hoặc  $n_{fA} = 0$ ,  $n_{fB} = 1$ ). Nghiệm này bền vững ở nhiệt độ không tuyệt đối. Đó chính là pha trật tự điện tích xảy ra với bất kì giá trị hữu hạn nào của  $U$ . Trật tự điện tích phá vỡ đối xứng nghịch đảo không gian. Pha trật tự điện tích này khi lấp đầy một nửa tương tự như trong mô hình Falicov-Kimball trong mạng lưỡng phân [106-108]. Từ phương trình (2.9) chúng ta được

$$G_A(z) = \frac{1}{G_A^{-1}(z) + \Sigma_A(z) - U} \quad (2.21)$$

$$G_B(z) = \frac{1}{G_B^{-1}(z) + \Sigma_B(z)}. \quad (2.22)$$

Hai phương trình này cho nghiệm  $\Sigma_A(z) = U$  và  $\Sigma_B(z) = 0$ . Nghiệm này chính xác là nghiệm trong gần đúng trường trung bình Hartree. Trong không gian vô hạn chiều, trường trung bình Hartree trở nên chính xác đối với loại tương tác Falicov-Kimball và ở nhiệt độ không. Ở nhiệt độ hữu hạn, năng lượng riêng không phải là trường trung bình Hartree nữa và chúng thực sự phụ thuộc vào tần số và nghiệm chính xác trên không thu được. Với  $\Sigma_A(z) = U$  và  $\Sigma_B(z) = 0$ , ma trận  $-\hat{G}^{-1}(i0)$  chính là Hamiltonian Haldane với mức năng lượng dịch chuyển của hệ mạng con  $m = U/2$  [77]. Do vậy, ở đó có một sự chuyển pha tô pô từ điện môi tô pô sang điện môi có tô pô tầm thường tại  $m_c = 3\sqrt{3}t_2$  [77]. Do đó, khi  $U < 6\sqrt{3}t_2$  trạng thái trật tự điện tích là tô pô với số Chern  $C = 1$  và khi  $U > 6\sqrt{3}t_2$  nó có tính tô pô tầm thường với  $C = 0$ . Tại  $U = 6\sqrt{3}t_2$ , trạng thái cơ bản có đối xứng chiral, ở đó các fermion ở các góc của vùng Brillouin là fermion Weyl. Chúng tôi muốn nhấn mạnh rằng cả hai pha điện môi tô pô và điện môi tô pô tầm thường đều có trật tự tầm xa do tương quan điện tử. Cả hai pha đều là trật tự điện tích nhưng khác nhau về tô pô. Cả hai pha đều phá vỡ đối xứng nghịch đảo không gian. Tại  $U = 0$  chúng ta có pha điện môi Chern, tuy nhiên nó bảo toàn đối xứng nghịch đảo không gian. Do đó pha trật tự điện tích tô pô không kết nối đoạn nhiệt với pha điện môi Chern tại  $U = 0$ . Trong pha trật tự điện tích tô pô, cả bất biến tô pô và trật tự tầm xa điện tích cũng đồng tồn tại [100,102].

## 2.5. Kết luận

Trong chương này, chúng tôi đã nghiên cứu về sự chuyển pha do tương quan điện tử trong mô hình Haldane với tương tác Coulomb cục bộ trong trường hợp lấp đầy một nửa bằng phương pháp trường trung bình động. Tính chất chuyển pha phụ thuộc vào đối xứng nghịch đảo không gian. Với sự bảo toàn đối xứng nghịch đảo không gian, tương quan điện tử đưa hệ từ pha điện môi Chern tô pô sang pha kim loại khe giả và sau đó sang pha điện môi Mott tô pô tầm thường. Kim loại khe giả không phải là chất lỏng Fermi với khối lượng và vận tốc tái chuẩn hóa của fermion Weyl. Pha kim loại này luôn luôn tồn tại giữa hai pha điện môi. Khi đối xứng nghịch đảo bị phá vỡ, tương quan điện tử tạo ra trật tự điện tích tầm xa và mở ra khe ở năng lượng Fermi. Chúng đưa hệ từ trạng thái trật tự điện tích tô pô sang trạng thái trật tự điện tích tô pô tầm thường. Bất biến tô pô và trật tự điện tích tầm xa có thể đồng tồn tại do ảnh hưởng của tương quan điện tử trong điện môi Chern.

### CHƯƠNG 3. ĐIỆN MÔI TỪ PÔ TỪ TÍNH TRONG MÔ HÌNH TRAO ĐỔI KÉP VỚI LIÊN KẾT SPIN – QUỸ ĐẠO

Trong chương này chúng tôi nghiên cứu về điều kiện tồn tại và tính chất của các pha điện môi từ tính có tính chất tô pô không tầm thường. Nghiên cứu của chúng tôi dựa trên mô hình hóa các chất điện môi từ tính quan sát thấy trong thực nghiệm. Mô hình lý thuyết tối thiểu được đề xuất trong chương này là mô hình trao đổi kép kết hợp với liên kết spin – quỹ đạo. Chúng tôi sử dụng lý thuyết trường trung bình động để nghiên cứu mô hình đề xuất. Các kết quả nghiên cứu đã được công bố trên tạp chí Physical Review B [123] và được một số nghiên cứu trên thế giới tham khảo [124,125].

#### 3.1. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu

Bên cạnh hiệu ứng Hall, hiệu ứng Hall dị thường cũng đã được khám phá từ một thế kỷ trước. Nhưng khác với hiệu ứng Hall lượng tử, hiệu ứng Hall dị thường lượng tử mới được quan sát thấy gần đây [37,38,126].

Nghiên cứu chất điện môi tô pô pha tạp từ trong những năm qua người ta quan sát thấy hiệu ứng Hall dị thường lượng tử (QAHE). Khám phá này thu hút được nhiều quan tâm nghiên cứu. Pha từ tính có thể được mô tả bởi lý thuyết Landau, nhưng các trạng thái tô pô thì không thể. Trạng thái tô pô là một khái niệm pha mới được đặc trưng bởi bất biến tô pô không tầm thường [1,2,12]. Trạng thái này được tìm thấy lần đầu tiên trong hiệu ứng Hall lượng tử (QHE) [7,8,29]. Tuy nhiên, trạng thái này đòi hỏi có từ trường ngoài để tạo ra các mức năng lượng Landau. Trạng thái tô pô cũng có thể tồn tại trong hệ không có mức năng lượng Landau. Haldane là người đầu tiên đề xuất mô hình lý thuyết mô tả hiệu ứng Hall lượng tử trong mạng tinh thể tuần hoàn [18]. Gần đây, mô hình Haldane được hiện thực hóa bằng thực nghiệm mô phỏng lượng tử khi đưa các nguyên tử cực lạnh vào mạng quang học [79]. Từ ý tưởng của Haldane, một lớp mới các trạng thái tô pô, điện môi tô pô, đã được khám phá [12,13]. Bất biến tô pô của chúng trong hệ hai chiều được thể hiện trong hiệu ứng Hall spin lượng tử (QSHE). Tính chất tô pô của chúng được tạo ra do liên kết spin – quỹ đạo (SOC) và nói chung được mô tả bởi số bất biến tô pô  $Z_2$  [1,2,12,13]. Ngược lại, độ từ hóa tự phát được mô tả bằng thông số trật tự của lý thuyết Landau. Độ từ hóa đó có thể tác động bên trong khối vật liệu như một từ trường ngoài và do đó có thể tạo ra hiệu ứng Hall dị thường [127]. Phiên

bản lượng tử của hiệu ứng Hall dị thường là một vấn đề thách thức từ lâu cho đến quan sát gần đây trong điện môi tô pô pha tạp từ [37,38,126]. Trong các vật liệu này, độ từ hóa tự phát xảy ra do sự trao đổi spin (SE) giữa electron và tạp từ [37,38,126]. SOC cùng với SE dẫn đến lượng tử hóa hiệu ứng Hall dị thường [37,38,126]. Do đó, chúng tôi muốn nghiên cứu ảnh hưởng tương hỗ qua lại giữa SOC và SE cũng như khả năng dẫn đến QSHE và QAHE do sự tương hỗ đó.

Để thực hiện mục tiêu nghiên cứu như vậy, chúng tôi đề xuất một mô hình lý thuyết tối thiểu có khả năng mô tả cả tính chất tô pô và tính chất từ. SOC là thành phần thiết yếu cho tính chất tô pô, bởi vì nó vừa tạo ra khe năng lượng vừa dẫn đến một bất biến tô pô không tầm thường [1,2,12,13]. Tuy nhiên, độ từ hóa tự phát có thể được tạo ra bởi các cơ chế khác nhau, ví dụ, SE, tương tác Coulomb hoặc siêu trao đổi. QAHE quan sát thấy trong vật liệu pha tạp từ và SE giữa electron và tạp từ là nguồn gốc tự nhiên của nó [37,38,126]. Hơn nữa, dường như tương tác Coulomb giữa các electron khó có thể tạo ra trạng thái tô pô với trật tự từ tầm xa [34,95,128]. Do đó, trong mô hình này, SE là thành phần thiết yếu khác cho trật tự từ tầm xa, mà có thể đồng tồn tại với bất biến tô pô. Một mô hình dải năng lượng thực với SE đã được đề xuất về mặt lý thuyết để tìm kiếm QAHE trong chất điện môi tô pô [38]. Nó được nghiên cứu bằng việc kết hợp tính toán từ nguyên lý đầu để xác định cấu trúc dải năng lượng và xấp xỉ trường trung bình để xử lý SE [38]. Kết quả thu được QAHE trong trạng thái sắt từ (FM) [38]. Tuy nhiên, trong gần đúng trường trung bình, chỉ thông số trật tự sắt từ đồng nhất được tính tới, và nó chỉ được coi như là thông số đưa vào trong việc xác định bất biến tô pô. Khác với nghiên cứu đó, chúng tôi nghiên cứu sự tương hỗ qua lại giữa SOC và SE một cách tự hợp mà có thể dẫn đến các trạng thái tô pô từ ổn định. Chúng tôi sử dụng lý thuyết trường trung bình động (DMFT) [47] để tính toán bất biến tô pô và momen từ. Trái với nghiên cứu trường trung bình trước đây, trong nghiên cứu của chúng tôi, độ từ hóa tự phát được xác định tự hợp mà không có giả thiết tiên quyết nào.

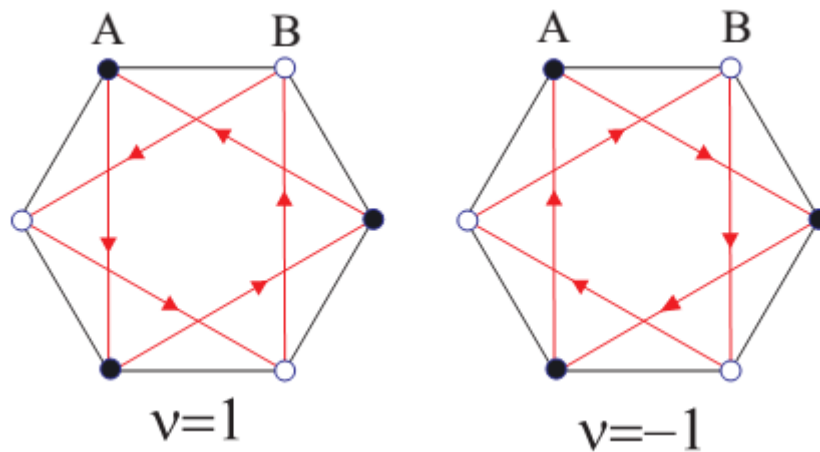
### **3.2. Mô hình trao đổi kép và liên kết spin – quỹ đạo**

Một mô hình tối thiểu mà chúng tôi đã đề xuất có thể mô tả điện môi tô pô từ bao gồm ba số hạng. Số hạng thứ nhất mô tả dải năng lượng của electron. Số hạng thứ hai có thể tạo ra tính chất tô pô là SOC. Số hạng cuối cùng là SE giữa electron và momen từ. Để đơn giản, tương tác từ giữa các momen từ được loại ra khỏi mô

hình. Thực chất, chúng có mặt không tường minh trong mô hình thông qua SE. Hamiltonian của mô hình có dạng

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + i\lambda \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, s, s'} v_{ij} c_{is}^\dagger \sigma_{ss'}^z c_{js'} - J \sum_{i, ss'} S_i c_{is}^\dagger \sigma_{ss'} c_{is'} \quad (3.1)$$

trong đó  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) là toán tử sinh (hủy) electron có spin  $\sigma$  ở vị trí  $i$ .  $\langle i, j \rangle$  và  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$  lần lượt kí hiệu lân cận gần nhất và lân cận gần nhất thứ hai trong mạng tinh thể.  $t$  là thông số nhảy nút cho vị trí lân cận gần nhất.  $\lambda$  là SOC bao gồm nhảy nút phụ thuộc vào spin và hướng giữa các vị trí lân cận gần nhất thứ hai. Dấu  $v_{ij} = \pm 1$  phụ thuộc vào hướng nhảy nút như được chỉ ra trên Hình 3.1.



Hình 3.1. Cấu trúc dấu  $v_{ij}$  của số hạng SOC trong mạng tinh thể tổ ong.

Mạng tinh thể tổ ong được chọn vì SOC trong mạng này tạo ra trạng thái điện môi tô pô [18].  $S_i$  là spin của tạp tử ở nút mạng  $i$ , và  $\sigma$  là ma trận Pauli.  $J$  là SE giữa electron và tạp tử. Khi tạp tử được pha vào vật liệu, chúng tôi giả sử rằng tạp tử chiếm tất cả các nút mạng tinh thể. Trường hợp tạp tử được pha ngẫu nhiên và không trộn vện được nghiên cứu trong một công trình khác. Chúng tôi cũng xét spin của tạp tử tính theo kiểu cổ điển, như được sử dụng rộng rãi trong nghiên cứu vật liệu pha tạp từ [129-134]. Giới hạn nghiên cứu này loại trừ bất kì khả năng nào có thể xảy ra của hiệu ứng Kondo [135-138]. Thực ra, chúng tôi sẽ chỉ xét SE kiểu sắt từ, và do vậy hiệu ứng Kondo không xảy ra như kết quả nghiên cứu bởi mô phỏng Monte Carlo lượng tử [139]. Khi không có SE ( $J = 0$ ), mô hình được đề xuất là mô hình Kane-Mele [17]. Bên cạnh đối xứng nghịch đảo thời gian, mô hình này có đối xứng  $U(1)$  bảo toàn thành phần  $z$  của spin. Điều này cho phép chúng ta phân loại bất biến tô pô của trạng thái điện môi bởi số Chern spin [18]. Mô hình Kane-Mele



có thể được xem như hai bản sao của mô hình Haldane, trong đó trạng thái điện môi có thành phần z của spin trái dấu và số Chern trái dấu [18]. Điều này dẫn đến số Chern điện tích triệt tiêu nhưng số Chern spin lại là một số nguyên, và do đó tạo ra QSHE. Trong giới hạn khác,  $\lambda = 0$ , Hamiltonian trong phương trình (3.1) là mô hình trao đổi kép [132]. Nó mô tả chuyển pha từ tính bởi SE [129-132]. Mô hình trao đổi kép trong mạng vấp hình học như mạng kagome hay mạng tam giác cũng có thể tạo ra QHE [140,141]. Khi cả SOC và SE có mặt, tương hỗ qua lại giữa chúng có thể dẫn đến sự xuất hiện các tính chất từ và tô pô đồng tồn tại và do đó QSHE và QAHE có thể xảy ra.

Trước khi áp dụng DMFT, chúng tôi phân tích cấu trúc từ của mô hình được đề xuất ở giới hạn  $J \gg t, \lambda$ . Spin cổ điển của tạp từ có thể được diễn đạt thông qua góc phương vị  $\phi_i$  và góc cực  $\theta_i$ :

$$\begin{aligned} S_i^x &= S \cos \phi_i \sin \theta_i, \\ S_i^y &= S \sin \phi_i \sin \theta_i, \\ S_i^z &= S \cos \theta_i. \end{aligned}$$

Số hạng SE trong Hamiltonian trong biểu thức (3.1) có thể được chéo hóa bằng cách sử dụng biến đổi unitar

$$\begin{pmatrix} d_{i\uparrow} \\ d_{i\downarrow} \end{pmatrix} = U_i^\dagger \begin{pmatrix} c_{i\uparrow} \\ c_{i\downarrow} \end{pmatrix},$$

trong đó

$$U_i^\dagger = \begin{pmatrix} \cos \frac{\theta_i}{2} & -\sin \frac{\theta_i}{2} e^{-i\phi_i} \\ \sin \frac{\theta_i}{2} e^{i\phi_i} & \cos \frac{\theta_i}{2} \end{pmatrix},$$

là một ma trận unitar. Chúng ta thu được số hạng SE

$$H_{SE} = -J \sum_{i,ss'} S_i c_{is}^\dagger \sigma_{ss'} c_{is'} = -JS \sum_{i,\sigma} \sigma d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma},$$

trong đó  $\sigma = \pm 1$ . Số hạng SE gây ra độ từ hóa tự phát, nhất là trong điều kiện  $J \gg t, \lambda$ . Trong trường hợp này, chỉ  $d_{i\uparrow}$  có liên quan tới trạng thái cơ bản. Hamiltonian hiệu dụng mô tả số hạng nhảy nút và SOC trong trạng thái cơ bản này là [131]

$$H_{eff} = -t \sum_{\langle i,j \rangle} \Omega_{ij} d_{i\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} + i\lambda \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} v_{ij} \tilde{\Omega}_{ij} d_{i\uparrow}^\dagger d_{j\uparrow} + H.c, \quad (3.2)$$

trong đó

$$\Omega_{ij} = \cos \frac{\theta_i}{2} \cos \frac{\theta_j}{2} + \sin \frac{\theta_i}{2} \sin \frac{\theta_j}{2} e^{-i(\phi_i - \phi_j)},$$

$$\tilde{\Omega}_{ij} = \cos \frac{\theta_i}{2} \cos \frac{\theta_j}{2} - \sin \frac{\theta_i}{2} \sin \frac{\theta_j}{2} e^{-i(\phi_i - \phi_j)},$$

đôi khi được gọi là pha Berry. Để đơn giản, chúng tôi sẽ chỉ xét trạng thái cơ bản đồng nhất, trong đó góc phương vị và góc cực của spin không thay đổi trong hai mạng con lồng vào nhau. Thực ra, với sự vắng mặt của SOC, mô phỏng Monte Carlo cho thấy tính đồng nhất của trạng thái cơ bản trong mạng tổ ong [98]. Đối với trạng thái cơ bản đồng nhất, độ lớn nhảy nút sẽ cực đại khi  $\theta_i - \theta_j = 0$  hoặc  $\pm\pi$  tại các vị trí lân cận gần nhất. Các điều kiện này có nghĩa là spin ở các vị trí lân cận gần nhất hoặc song song hoặc đối song, tạo ra cơ chế trao đổi kép [131,132]. Mặt khác, độ lớn SOC cực đại khi  $\theta_i = 0$  hoặc  $\pi$ , hoặc tương đương, spin hướng theo phương z. Có thể thấy rằng số hạng SOC triệt tiêu khi  $\theta_i = \pi/2$ , có nghĩa là khi đó spin hướng trong mặt phẳng xy. Trái với mạng vấp hình học [140,141], cả số hạng nhảy nút và SOC trong mạng tổ ong không tạo ra bất kỳ hiện tượng vấp nào. Từ quan sát đó, chúng tôi kết luận rằng năng lượng trạng thái cơ bản nhỏ nhất khi spin song song với phương z. Điều này cho thấy trạng thái cơ bản có đối xứng U(1) bảo toàn thành phần z của spin.

Chúng tôi chia mạng tổ ong thành hai mạng con lồng vào nhau A và B như được chỉ ra trên Hình 3.1. Sau đó, chúng tôi kí hiệu  $a_{i\sigma}$  ( $b_{i\sigma}$ ) là toán tử hủy của electron tại vị trí i thuộc mạng con A (B). Chúng tôi đưa ra một spinor bốn thành phần

$$\psi_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} a_{\mathbf{k}\uparrow} \\ b_{\mathbf{k}\uparrow} \\ a_{\mathbf{k}\downarrow} \\ b_{\mathbf{k}\downarrow} \end{pmatrix},$$

trong đó  $a_{\mathbf{k}\sigma}$  và  $b_{\mathbf{k}\sigma}$  là biến đổi Fourier của  $a_{i\sigma}$  và  $b_{i\sigma}$  tương ứng. Các tính chất từ và tính chất tô pô sẽ được xác định từ hàm Green một hạt:

$$G(\mathbf{k}, z) = \ll \psi_{\mathbf{k}} | \psi_{\mathbf{k}}^\dagger \gg_z.$$

Độ từ hóa tự phát của mạng con A và B được xác định là

$$m_A = \frac{1}{2N} \sum_{i,\sigma} \sigma \langle a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} \rangle,$$

$$m_B = \frac{1}{2N} \sum_{i,\sigma} \sigma \langle b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma} \rangle,$$

trong đó  $N$  là số nút mạng con. Khi  $m_A = \pm m_B \neq 0$  thì trạng thái cơ bản là FM hoặc AFM. Ở đây, chúng tôi chỉ xét độ từ hóa tự phát theo phương  $z$  bởi vì trạng thái cơ bản có đối xứng  $U(1)$  của thành phần  $z$  của spin như chúng tôi đã phân tích ở trên.

Tính chất tô pô có thể được xác định thông qua số Chern được tính bằng:

$$C_v = \frac{1}{2\pi} \int d^2k F_{xy}^v, \quad (3.3)$$

trong đó  $F_{ij}^v = \partial_i A_j^v - \partial_j A_i^v$ ,  $A_i^v = -i \langle \mathbf{k}v | \partial_{k_i} | \mathbf{k}v \rangle$ , và  $|\mathbf{k}v\rangle$  là trạng thái riêng trực giao chuẩn hóa của ma trận  $G^{-1}(\mathbf{k}, i0)$  tương ứng với trị riêng  $E_v(\mathbf{k})$  [117]. Số Chern điện tích  $C_c = \sum_v C_v$ , trong đó tổng này được lấy trên  $v$  với các trị riêng dương  $E_v(\mathbf{k}) > 0$ . Số Chern spin  $C_s = \sum_v \sigma_v C_v$  trong đó  $\sigma_v$  là spin của trạng thái riêng  $|\mathbf{k}v\rangle$ . Chú ý rằng các số Chern này chỉ được xác định trong trạng thái điện môi bởi vì nó cần khe năng lượng giữa các giá trị riêng dương và âm để tích phân trong công thức (3.3) không bị phân kỳ. Trong tính toán số, chúng ta có thể sử dụng phương pháp gián đoạn hóa vùng Brillouin để tính số Chern trong công thức (3.3) [118]. Trong điện môi tô pô, độ dẫn Hall spin là  $e^2 C_s / h$ . Khi không có tương tác SE,  $G^{-1}(\mathbf{k}, i0) = -H_o(\mathbf{k})$ , trong đó

$$H_o(k) = \begin{pmatrix} h_\uparrow(\mathbf{k}) & 0 \\ 0 & h_\downarrow(\mathbf{k}) \end{pmatrix}, \quad (3.4)$$

là Hamiltonian Bloch không tương tác, và

$$h_\sigma(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} \sigma \lambda \xi_{\mathbf{k}} & -t \gamma_{\mathbf{k}} \\ -t \gamma_{\mathbf{k}}^* & -\sigma \lambda \xi_{\mathbf{k}} \end{pmatrix}.$$

Ở đây, chúng tôi đã sử dụng kí hiệu  $\gamma_{\mathbf{k}} = \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}r_{\delta}}$ ,  $\xi_{\mathbf{k}} = i \sum_{\eta} v_{\eta} e^{i\mathbf{k}r_{\eta}}$ , trong đó  $\delta$  và  $\eta$  lần lượt kí hiệu vị trí lân cận gần nhất và gần thứ hai của vị trí đã cho trong mạng tổ ong. Hamiltonian Bloch không tương tác có hai dải năng lượng suy biến bậc hai. SOC mở ra một khe năng lượng và tạo ra số Chern spin nguyên khi mạng lấp đầy một nửa [6]. Chúng ta có thể hình dung  $-G^{-1}(k, i0)$  là một Hamiltonian Bloch hiệu dụng để xác định số Chern cho trường hợp tương tác.

### 3.3. Áp dụng lý thuyết trường trung bình động

Mô hình được đề xuất trong biểu thức (3.1) có thể giải được bằng các phương pháp khác nhau bao gồm cả gần đúng trường trung bình và gần đúng trường trung bình động, cũng như chéo hóa chính xác và mô phỏng Monte Carlo. Phương

pháp chéo hóa chính xác và mô phỏng Monte Carlo cho kết quả chính xác nhưng chúng chỉ có thể áp dụng cho các mạng có kích thước nhỏ và phải chấp nhận hiệu ứng kích thước hữu hạn. Gần đúng trường trung bình và trường trung bình động làm việc tốt trong giới hạn nhiệt động lực học. Trái với gần đúng trường trung bình, DMFT xử lý tương quan cục bộ một cách chính xác [48]. Khi không có SOC ( $\lambda = 0$ ), giản đồ pha thu được bằng DMFT phù hợp với giản đồ pha thu được bằng mô phỏng Monte Carlo [130,132]. Gần đúng trường trung bình đôi khi tạo ra kết quả giả, ví dụ như trạng thái giả được Gennes tìm thấy bằng gần đúng trường trung bình không tìm thấy được bằng mô phỏng Monte Carlo [130,142]. DMFT có thể đóng vai trò như phương pháp bổ sung cho tính toán kích thước hữu hạn như mô phỏng Monte Carlo. Trong DMFT, năng lượng riêng chỉ phụ thuộc vào tần số. Nó chính xác trong giới hạn không gian vô hạn chiều nhưng trong hệ hai chiều, nó chỉ là một gần đúng. Gần đúng này bỏ qua tương quan phi cục bộ. Trong DMFT, phương trình Dyson cho hàm Green có dạng:

$$G(\mathbf{k}, z) = [z - H_o(\mathbf{k}) - \Sigma(z)]^{-1}, \quad (3.5)$$

trong đó  $\Sigma(z)$  là năng lượng riêng. Thực ra  $\Sigma(z)$  là một ma trận chéo  $4 \times 4$ . Gần đúng cục bộ của năng lượng riêng không trộn hai khối spin của Hamiltonian Bloch hiệu dụng  $-G^{-1}(\mathbf{k}, i0)$ . Đối với bất biến tô pô, năng lượng riêng chỉ dịch chuyển dải năng lượng của Hamiltonian Bloch hiệu dụng dẫn đến biến đổi tô pô. Năng lượng riêng có thể được xác định bằng cách giải bài toán hiệu dụng một nút trong một trường trung bình động lực. Trường trung bình động lực có thể được biểu diễn bởi hàm Green, đóng vai trò như hàm Green trần của nút hiệu dụng. Nó kết nối với hàm Green cục bộ và năng lượng riêng thông qua phương trình Dyson của nút mạng hiệu dụng

$$G_{a\sigma}^{-1}(z) = G_{a\sigma}^{-1}(z) + \Sigma_{a\sigma}(z), \quad (3.6)$$

trong đó  $a$  kí hiệu nút mạng của mạng con A hay B.

$$G_{a\sigma}(z) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G_{a\sigma}(\mathbf{k}, z),$$

là hàm Green cục bộ. Hàm tác động của nút mạng hiệu dụng của mạng con  $a = A, B$  là

$$S_\alpha = -\sum_s \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \psi_{as}^\dagger(\tau) \mathcal{G}_{as}^{-1}(\tau - \tau') \psi_{as}(\tau') - J \sum_{ass'} \int_0^\beta d\tau S^\alpha(\tau) \psi_{as}^\dagger(\tau) \sigma_{ss'}^\alpha \psi_{as'}(\tau) \quad (3.7)$$

Đối với spin tạp cổ điển  $S$ , chúng ta có thể tính gần chính xác các bậc hiệu dụng 1 nút. Chúng ta có thể thấy tổng thống kê bằng:

$$Z_a = \int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{-S_a(\phi, \theta)}, \quad (3.8)$$

trong đó  $S_a(\phi, \theta) = -\sum_n \ln \left\{ \prod_s [\mathcal{G}_{as}^{-1}(i\omega_n) + sJS \cos \theta] - (JS)^2 \sin^2 \theta \right\}$ , và  $\omega_n$  là tần số Matsubara. Hàm Green các nút mạng hiệu dụng có thể được tính toán từ tổng thống kê

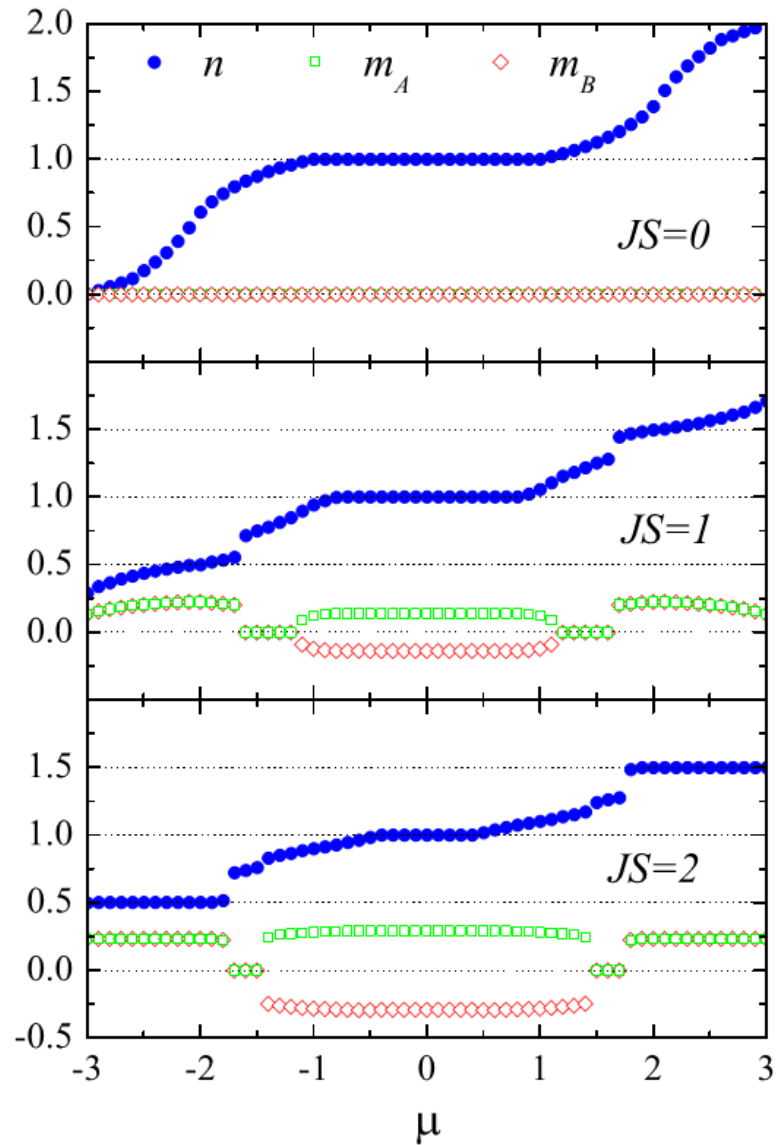
$$\begin{aligned} \langle \langle \psi_{a\sigma} | \psi_{a\sigma}^\dagger \rangle \rangle_{i\omega_n} &= \frac{1}{Z_a} \frac{\delta Z_a}{\delta \mathcal{G}_{a\sigma}^{-1}(i\omega_n)} = \\ &= \frac{1}{Z_a} \frac{\int_0^{2\pi} d\phi \int_0^\pi d\theta \sin \theta e^{-S(\phi, \theta)} [\mathcal{G}_{a, -\sigma}^{-1}(i\omega_n) - \sigma JS \cos \theta]}{\prod_s [\mathcal{G}_{as}^{-1}(i\omega_n) + sJS \cos \theta] - (JS)^2 \sin^2 \theta} \end{aligned} \quad (3.9)$$

Tiếp tục sử dụng phương trình Dyson (3.6) chúng ta có thể xác định năng lượng riêng, từ hàm Green trong công thức (3.9). Như vậy, chúng ta đã thu được hệ phương trình khép kín để xác định năng lượng riêng và hàm Green. Hệ các phương trình DMFT này có thể giải số bằng phương pháp lặp.

### 3.4. Kết quả tính số

Trong tính số, chúng tôi lấy  $t = 1$  làm đơn vị năng lượng. Ở nhiệt độ 0 tuyệt đối, chúng tôi sử dụng một lưới các tần số gián đoạn với độ gián đoạn đóng vai trò như nhiệt độ tương trưng cho tần số Matsubara. Thực tế, chúng tôi lấy kích thước gián đoạn của lưới bằng  $2\pi T$  với  $T = 0,01$  trong tính số. Đầu tiên, chúng tôi tìm điều kiện tồn tại các trạng thái điện môi, bởi vì trong mô hình đang xét, chỉ điện môi mới thể hiện tính chất tô pô. Trong Hình 3.2, chúng tôi trình bày mật độ điện tử  $n$  và độ từ hóa mạng con  $m_A, m_B$  biến thiên theo thế hóa  $\mu$  đối với các giá trị SE tăng dần khi SOC cố định. Khi SE,  $JS = 0$ , trạng thái cơ bản là điện môi khi lấp đầy một nửa

$n = 1$ . Bởi vì  $m_A = m_B = 0$ , điện môi này là thuận từ (PM). SE nhỏ không làm thay đổi trạng thái cơ bản. Tuy nhiên, khi SE lớn hơn một giá trị nhất định, độ từ hóa tự phát xảy ra,  $m_A = m_B \neq 0$  khi lấp đầy một nửa và nó cho thấy đó là trạng thái điện môi AFM. Khi tiếp tục tăng SE, các trạng thái điện môi xuất hiện bổ sung khi lấp đầy một phần tư ( $n = 0,5$ ) và ba phần tư ( $n = 1,5$ ). Các trạng thái điện môi này là FM do  $m_A = m_B \neq 0$ .



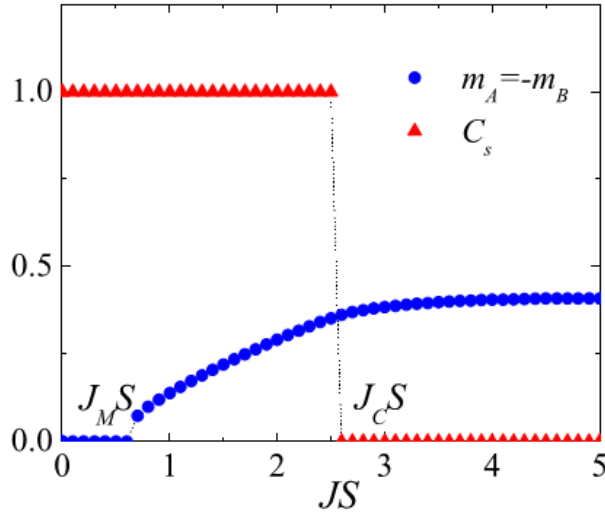
Hình 3.2: Mật độ điện tử  $n$  và độ từ hóa mạng con  $m_A$ ,  $m_B$  thông qua thế hóa  $\mu$  đối với các giá trị khác nhau của SE và SOC cố định  $\lambda = 0,5$ . Các đường chấm chấm nằm ngang cho thấy mật độ điện tử  $n = 0,5$ ; 1 và 1,5.

Như vậy, chúng ta chỉ quan sát thấy trạng thái điện môi khi lấp đầy một nửa, một phần tư và ba phần tư. Đối với các trường hợp lấp đầy khác, trạng thái cơ bản là kim loại hoặc phân tách pha. Trạng thái phân tách pha xảy ra khi  $n(\mu)$  gián đoạn.

Trạng thái phân tách pha xảy ra giữa pha PM và FM (hoặc AFM). Khi lấp đầy một nửa, SE chuyển trạng thái cơ bản từ điện môi PM sang điện môi AFM, trái lại khi lấp đầy một phần tư hoặc ba phần tư, nó chuyển trạng thái cơ bản từ kim loại PM sang kim loại FM, và sau đó thành điện môi FM như chỉ ra trong Hình 3.2. Trong vật liệu pha tạp từ tính như vật liệu từ trở khổng lồ hoặc bán dẫn từ pha loãng, độ từ hóa tự phát được tạo ra bởi SE thông qua cơ chế trao đổi kép [131,132]. Tuy nhiên, trong điện môi không có các electron linh động trung gian, do đó sự trao đổi kép không thực sự xảy ra. Thực ra, độ từ hóa tự phát trong các trạng thái điện môi cũng có thể được tạo ra bằng cách kết hợp trực tiếp giữa momen từ và spin electron thông qua cơ chế van Vleck [38]. Sự kết hợp trực tiếp như vậy là khả dĩ bởi vì SOC có thể kết nối dải dẫn và dải hóa trị [38]. Khi không có SOC, độ từ hóa tự phát hầu như không tồn tại trong trạng thái điện môi. SOC là một nguồn quan trọng để duy trì độ từ hóa tự phát trong trạng thái điện môi. Do có SOC mà tô pô và độ từ hóa của hệ xuất hiện. Trái với gần đúng trường trung bình [38], độ từ hóa tự phát trong DMFT được xác định tự hợp và nó có thể là PM, AFM hoặc FM. Bởi vì trong mô hình đang xét, bất biến tô pô không tầm thường chỉ có thể tồn tại trong trạng thái điện môi, do vậy chúng tôi sẽ chỉ xét trường hợp lấp đầy một nửa, một phần tư và ba phần tư.

### 3.4.1. Điện môi tô pô phản sắt từ

Trong mục này, chúng tôi xét chi tiết trường hợp lấp đầy một nửa. Trong hình 3.3, chúng tôi trình bày độ từ hóa mạng con  $m_A$ ,  $m_B$  và số Chern spin  $C_s$  với giá trị SOC ổn định. Chúng tôi luôn thu được  $m_A = -m_B$  khi lấp đầy một nửa. Đối với SE yếu, trạng thái cơ bản là PM. Nó trở thành AFM khi SE lớn hơn một giá trị nhất định  $J_M$ . Trái với điện môi Mott, năng lượng riêng  $\Sigma(i\omega)$  khi lấp đầy một nửa không phân kỳ trong giới hạn  $\omega \rightarrow 0$ , và chúng ta có thể tính số Chern bằng công thức (3.3). Số Chern điện tích luôn luôn triệt tiêu khi lấp đầy một nửa. Hình 3.3 cũng cho thấy rằng số Chern spin  $C_s = 1$  đến một giá trị nhất định  $J_C$  của SE. Điều này có nghĩa rằng bất biến tô pô không tầm thường khi  $J < J_C$ . Chúng tôi luôn thu được  $J_M < J_C$ . Do đó, khi  $J_M < J < J_C$ , trạng thái cơ bản là AFM và nó có  $C_s = 1$ . Đó chính là trạng thái điện môi tô pô từ. Thực ra, Hamiltonian Bloch hiệu dụng  $-G^{-1}(\mathbf{k}, i0)$  xác định số Chern cho trường hợp tương tác có thể xem như là hai bản sao của mô hình Haldane với pha ngược nhau [18].



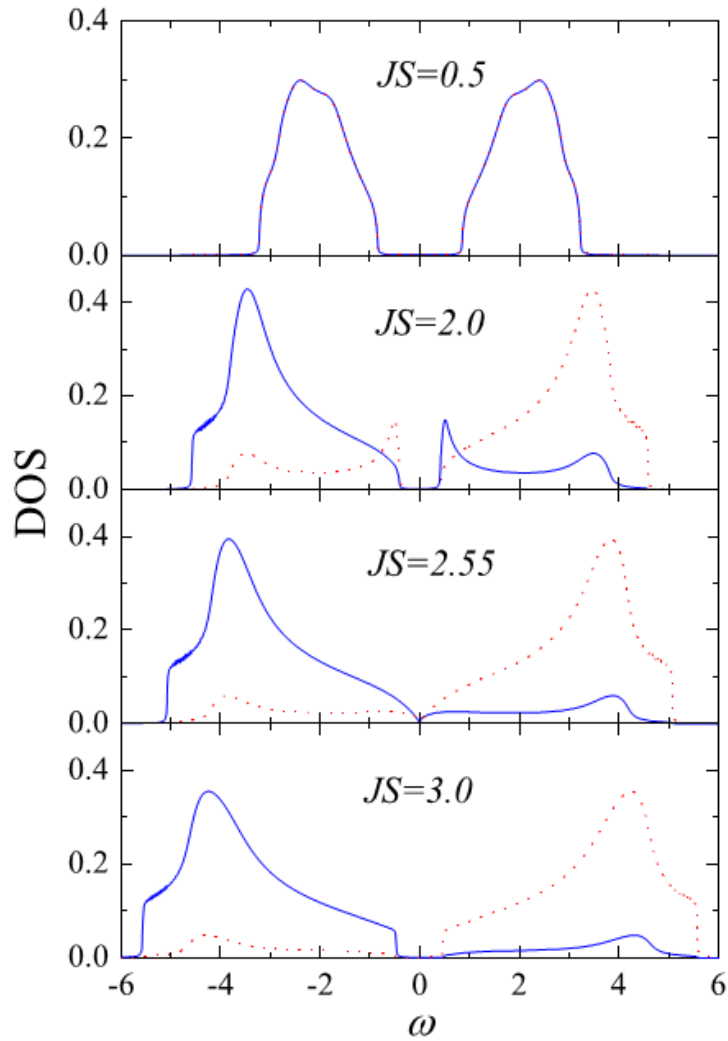
Hình 3.3. Độ từ hóa mạng con  $m_A = -m_B$  và số Chern spin  $C_s$  khi lấp đầy một nửa và SOC  $\lambda = 0,5$ .

Khi hai dải năng lượng thấp nhất với spin ngược chiều được lấp đầy, có nghĩa là các trị riêng âm của  $-G^{-1}(\mathbf{k}, i0)$ , chúng có số Chern ngược chiều, do đó số Chern điện tích triệt tiêu, trong khi số Chern spin bằng 1. Trái lại, SE tạo ra độ từ hóa AFM tự phát. Độ từ hóa AFM này có thể đóng vai trò là một từ trường phân tử bổ sung tác động ngược trở lại electron. Tác động của độ từ hóa AFM tương tự như mức tách năng lượng ion trong mô hình Haldane [18]. Khi SE tăng, độ từ hóa AFM cũng tăng. Kết quả là, khi  $J > J_C$ , số Chern của mô hình Haldane tương ứng triệt tiêu bởi vì mức tách năng lượng ion lớn hơn khe năng lượng tạo ra bởi SOC [18]. Điều này dẫn đến trạng thái cơ bản có tô pô tầm thường. Tuy nhiên, số Chern spin có thể là số nguyên hữu hạn, khi mức tách năng lượng ion nhỏ hơn giá trị ngưỡng. Số Chern spin  $C_s = 1$  chính là QSHE.

Trong hình 3.4, chúng tôi vẽ mật độ trạng thái (DOS) cho mỗi thành phần spin electron trong trường hợp lấp đầy một nửa. Khi lấp đầy một nửa, DOS rõ ràng cho thấy một khe năng lượng ở mức năng lượng fermi, ngoại trừ ở biên giữa pha điện môi AFM tô pô và điện môi AFM tô pô tầm thường. Ở biên giữa hai pha, DOS cho thấy tính chất bán kim. Biểu hiện của DOS cho thấy một khe năng lượng khép lại khi hệ trải qua chuyển pha từ pha điện môi AFM tô pô sang điện môi AFM tô pô tầm thường. Thực chất, tính chất này là kết quả của các trạng thái biên không khe xuất hiện ở biên của hai trạng thái điện môi với các bất biến tô pô khác nhau [1,2]. Trong trạng thái điện môi tô pô, trong khi SOC duy trì khe năng lượng, độ từ hóa



AFM tự phát làm giảm bề rộng của khe năng lượng (xem hình 3.2). Khi hai khuynh hướng này cân bằng, khe năng lượng triệt tiêu và tạo ra sự chuyển pha từ pha điện môi AFM tô pô sang pha điện môi tô pô tầm thường.

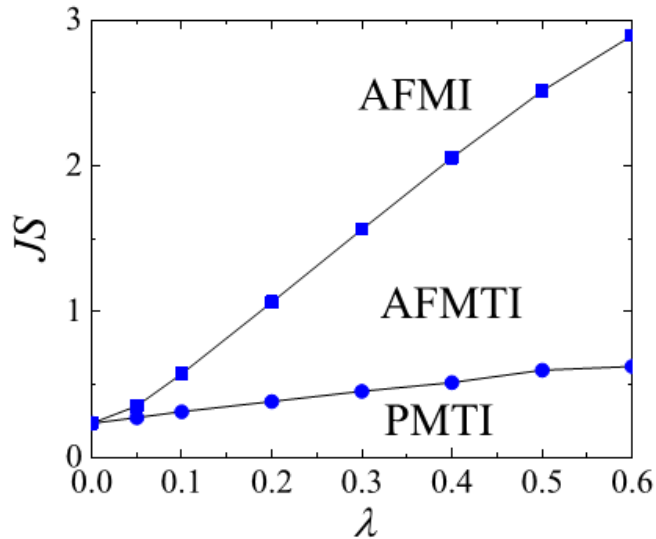


Hình 3.4. DOS mạng con đối với thành phần spin lên (đường liền nét màu xanh) và spin xuống (đường đứt nét màu đỏ) khi lấp đầy một nửa và SOC  $\lambda = 0,5$ .

Trong điện môi AFM tô pô tầm thường, cả SOC và độ từ hóa AFM tự phát làm tăng bề rộng của khe năng lượng. Trái với độ từ hóa FM trong QAHE, độ từ hóa AFM không tạo ra QSHE bởi vì QSHE đã xảy ra trong trạng thái tô pô PM. Thực ra nó phá hủy QSHE. Tuy vậy, trật tự tầm xa AFM có thể đồng tồn tại với QSHE, miễn là nó không đủ mạnh.

Chúng tôi tổng kết các kết quả tìm được trong trường hợp lấp đầy một nửa trong giản đồ pha được vẽ trên hình 3.5. Điện môi tô pô AFM xảy ra trong vùng pha giữa điện môi tô pô PM và điện môi AFM tô pô tầm thường. Nó thể hiện QSHE. Thực ra, QSHE cũng đã có mặt trong trạng thái điện môi tô pô PM. Chú ý rằng, khi

$\lambda = 0$ , trạng thái cơ bản là kim loại và độ từ hóa AFM xảy ra do cơ chế trao đổi kép [131,132].

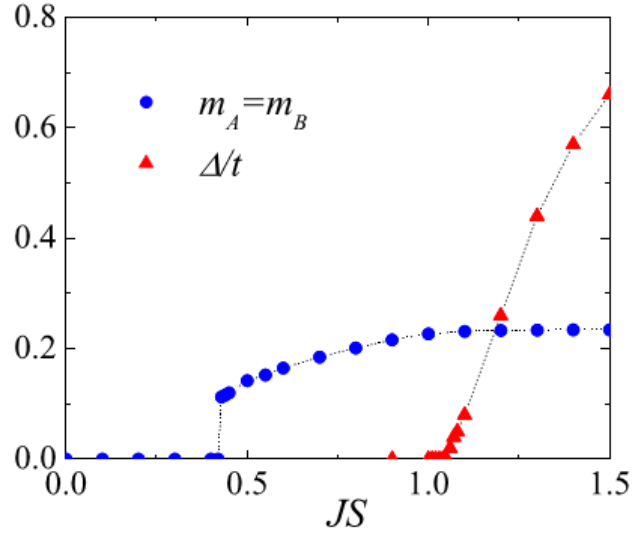


Hình 3.5. Giản đồ pha của trường hợp lấp đầy một nửa. Các chữ viết tắt AFMI, AFMTI, và PMTI lần lượt kí hiệu cho pha điện môi AFM tô pô tầm thường, điện môi tô pô AFM và điện môi tô pô PM.

### 3.4.2. Điện môi tô pô sắt từ

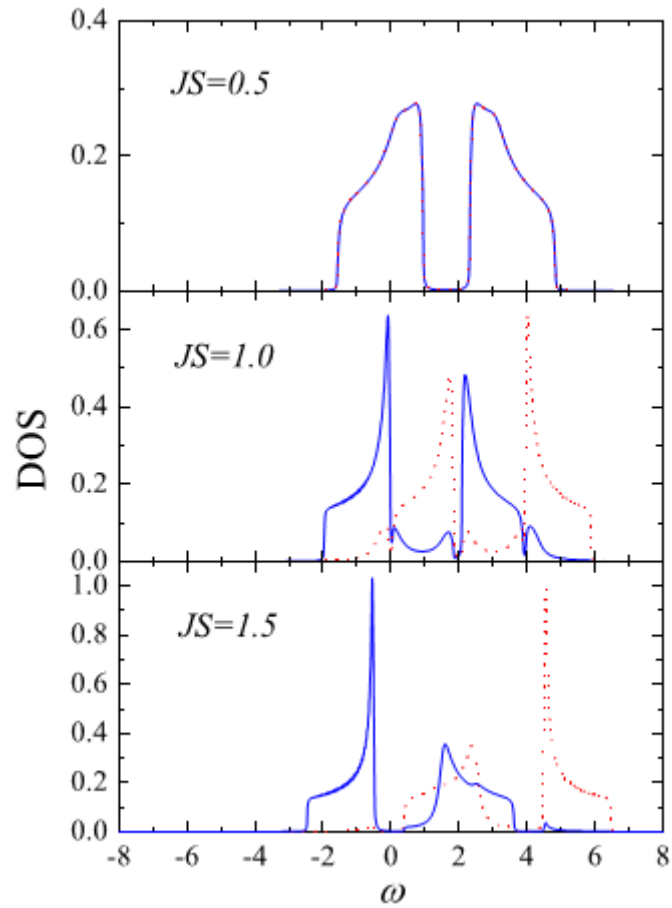
Bởi vì trường hợp lấp đầy một phần tư và ba phần tư tương đương nhau do có đối xứng hạt – lỗ trống, cho nên chúng tôi chỉ xét trường hợp lấp đầy một phần tư. Như đã thảo luận trước đây, khi lấp đầy một phần tư, SE chuyển trạng thái cơ bản từ PM sang kim loại FM và sau đó sang điện môi FM. Các chuyển pha này có thể thấy qua xem xét sự phụ thuộc của độ từ hóa mạng con và khe năng lượng vào cường độ SE. Trong hình 3.6, chúng tôi trình bày độ từ hóa mạng con và khe năng lượng phụ thuộc vào SE khi SOC cố định. Khe năng lượng được xác định bằng bề rộng của đoạn trống nằm ngang xảy ra trong đồ thị đường  $n(\mu)$  (xem hình 3.2). Khi lấp đầy một phần tư, chúng tôi luôn thu được  $m_A = m_B$ . Trạng thái FM xảy ra khi SE lớn hơn một giá trị nhất định. Khe năng lượng chỉ xuất hiện khi SE đủ lớn. Do đó, trạng thái điện môi FM chỉ xuất hiện khi SE đủ lớn. Trong hình 3.7, chúng tôi trình bày DOS cho mỗi thành phần spin trong trường hợp lấp đầy một phần tư và SOC cố định. Hình này cho thấy sự thay đổi của DOS khi SE tăng. Trái với trường hợp lấp đầy một nửa, khi lấp đầy một phần tư thế hóa không nằm trong khe năng lượng mà nằm ở dải năng lượng thấp hơn. Do đó, đối với SE nhỏ trạng thái cơ bản là kim loại. SE làm dịch chuyển DOS của thành phần spin xuống gây ra độ từ hóa

tự phát sắt từ. Khi SE tăng lên, một khe năng lượng được mở ra ở vị trí thế hóa và nó phân tách dải năng lượng bị lấp đầy thấp nhất. Đây thực sự là trạng thái điện môi FM. Bởi vì số Chern được xác định rõ ràng trong trạng thái điện môi nên chúng tôi chỉ tính nó trong trạng thái điện môi FM.



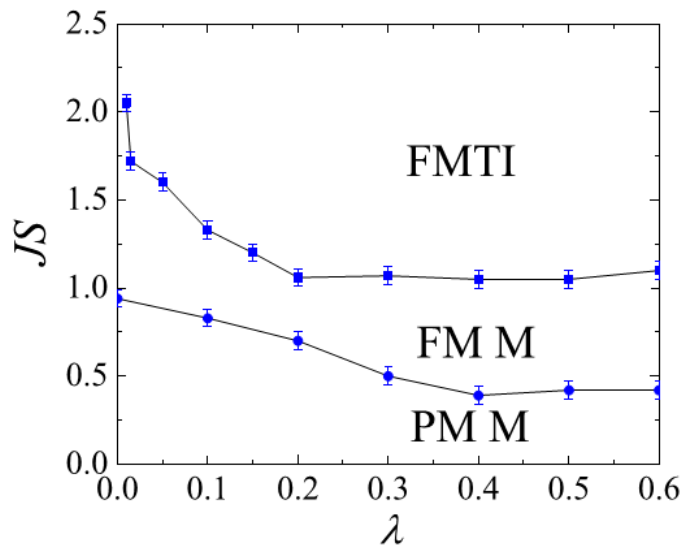
Hình 3.6. Độ từ hóa mạng con  $m_A = m_B$  và khe năng lượng  $\Delta$  trong trường hợp lấp đầy một phần tư và SOC  $\lambda = 0,5$ .

Thành ra chỉ dải năng lượng thấp nhất của Hamiltonian Bloch hiệu dụng  $-G^{-1}(\mathbf{k}, i0)$  bị lấp đầy, có nghĩa là trị riêng âm nhỏ nhất của  $-G^{-1}(\mathbf{k}, i0)$ , và nó có số Chern  $C_c = 1$ . Điều này cho thấy rằng điện môi FM là tô pô và nó thể hiện QAHE. Thực ra, chúng ta có thể hình dung độ từ hóa sắt từ là một từ trường ngoài tác dụng ngược trở lại electron. Nghiên cứu tô pô trong mô hình Kane-Mele khi có mặt của một từ trường đều cho thấy QSHE xuất hiện đối với từ trường yếu và QAHE mất luôn khi từ trường mạnh [143]. QAHE tìm được cho trường hợp lấp đầy một phần tư phù hợp với nghiên cứu này. Tuy nhiên, chúng tôi không quan sát thấy bất cứ QSHE nào đối với SE nhỏ trong trường hợp lấp đầy một phần tư. Điều này xảy ra vì SE nhỏ không đủ mạnh để mở ra một khe năng lượng ở vị trí thế hóa. QAHE rõ ràng là hệ quả của tương hỗ qua lại giữa SOC và SE. Trái với trường hợp lấp đầy một nửa, độ từ hóa sắt từ trong trường hợp lấp đầy một phần tư duy trì QAHE. Không có nó, QAHE không thể tồn tại.



Hình 3.7. DOS mạng con đối với spin lên (đường liền nét màu xanh) và spin xuống (đường đứt nét màu đỏ) trong trường hợp lấp đầy một phần tư và SOC  $\lambda = 0,5$ .

Chúng tôi tổng kết các kết quả tìm được trong trường hợp lấp đầy một phần tư thành giản đồ pha được vẽ trong hình 4.8. Điện môi tô pô sắt từ cho thấy QAHE chỉ xảy ra trong miền SE đủ lớn. Khi SOC vắng mặt (có nghĩa là  $\lambda = 0$ ), không có trạng thái điện môi khi lấp đầy một phần tư.



Hình 3.8. Giản đồ pha của trường hợp lấp đầy một phân tử. Các chữ viết tắt FMTI, FM M và PM M lần lượt kí hiệu điện môi tô pô FM, kim loại FM, kim loại PM.

### 3.5. Kết luận

Trong chương này, chúng tôi đã nghiên cứu sự xuất hiện của các trạng thái tô pô trong mô hình Kane-Mele khi có mặt tạp từ. Trạng thái tô pô xuất hiện là kết quả của sự tương hỗ qua lại giữa SOC và SE. Các trạng thái điện môi chỉ tồn tại khi mật độ electron bằng 1, 1/4 và 3/4. SOC duy trì độ từ hóa tự phát trong trạng thái điện môi. Nó cũng thúc đẩy độ từ hóa tự phát theo phương z, mà trạng thái cơ bản bảo toàn đối xứng U(1) của thành phần z của spin. Khi lấp đầy một nửa, SE điều khiển trạng thái cơ bản từ pha điện môi tô pô PM sang pha điện môi tô pô AFM và sau đó sang AFM tô pô tầm thường. Cả điện môi tô pô PM và AFM đều thể hiện QSHE. Điện môi tô pô AFM là ví dụ khác bên cạnh siêu dẫn tô pô, trong đó cả trật tự tầm xa và bất biến tô pô đồng tồn tại. Chúng ta chú ý rằng các nghiên cứu về mô hình Kane – Mele với tương tác Coulomb cục bộ không phát hiện đồng tồn tại của trật tự tầm xa AFM và bất biến tô pô [36,94,128]. Khi mật độ electron lấp đầy một phân tử và ba phân tử, điện môi tô pô FM cho thấy QAHE xảy ra khi SE đủ lớn.

## CHƯƠNG 4. PHA ĐIỆN MÔI TÔ PÔ TRONG MẠNG TINH THỂ LIEB SẮT TỪ

Chương này có hai phần chính. Trong phần thứ nhất, chúng tôi xây dựng lý thuyết trường trung bình động cho mạng tinh thể có cấu trúc dải năng lượng phẳng và nghiên cứu pha từ tính tồn tại trong mạng tinh thể Lieb. Phần thứ hai, chúng tôi nghiên cứu các pha điện môi tô pô có khả năng tồn tại trong mạng tinh thể Lieb khi có liên kết spin – quỹ đạo. Các kết quả nghiên cứu chính đã được công bố trên tạp chí Physical Review B [144] và Communications in Physics [145] và được một số nghiên cứu trên thế giới tham khảo [88,146-148].

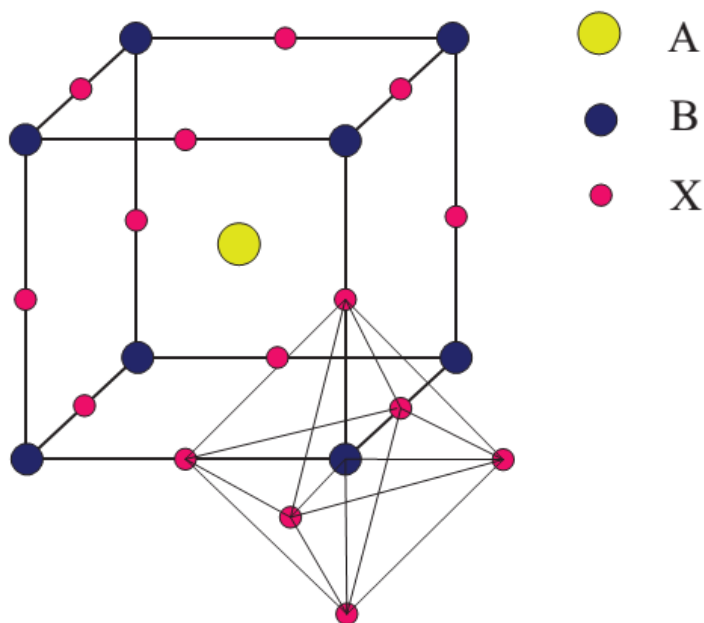
### **Phần I: Lý thuyết trường trung bình động cho mạng tinh thể có cấu trúc dải năng lượng phẳng**

#### ***4.1. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu***

Hệ có cấu trúc dải năng lượng phẳng nhận được rất nhiều quan tâm nghiên cứu do sự xuất hiện của tương quan điện tử trong suy biến vĩ mô. Bất kỳ tương tác Coulomb, mạnh hay yếu, đều dẫn đến hiện tượng tương quan mạnh [149]. Trong các hệ có cấu trúc dải năng lượng phẳng, hàm sóng electron định xứ trong không gian thực, và định xứ này làm mất động năng, khiến cho tương tác Coulomb giữa các electron chiếm ưu thế. Kết quả là các electron có xu hướng phân cực spin để cực tiểu hóa năng lượng tương tác. Quá trình này tạo ra trạng thái sắt từ của dải năng lượng phẳng [41,150]. Thực ra, có thể xem đó là hệ quả của tiêu chí Stoner về sắt từ, bởi vì mật độ trạng thái của dải năng lượng phẳng trở nên vô hạn [151]. Sắt từ dải năng lượng phẳng có thể được xem là trường hợp bổ sung cho sắt từ Nagaoka, khi tiêu chí Stoner thỏa mãn do tương tác Coulomb vô hạn [152]. Một vài bằng chứng thực nghiệm cho sắt từ dải năng lượng phẳng trong dây lượng tử, chấm lượng tử và hệ fermion cực lạnh đã được đề xuất [153-156].

Về mặt lý thuyết, dải năng lượng phẳng không tầm thường xuất hiện khi nhảy nút electron duy trì hữu hạn nhưng trên toàn mạng thì triệt tiêu. Sự giao thoa triệt tiêu này có thể hiện thực hóa bằng phương pháp thiết kế ô mạng (cell construction) [41,150], đồ thị đường (line graph) [157-159] hoặc lọc chọn quỹ đạo (orbit selection) [160,161]. Một trong những mô hình dải năng lượng phẳng đơn giản nhất là mô hình liên kết chặt trong mạng Lieb hoặc mạng vuông tâm cạnh. Nó thuộc họ

thiết kế ô mạng [41,149]. Mạng Lieb thu hút nhiều quan tâm nghiên cứu, do nó là cấu trúc phân lớp của chất siêu dẫn nhiệt độ cao, và gần đây nó cũng được hiện thực hóa bằng mô phỏng lượng tử thực nghiệm [162]. Mạng lập phương tâm cạnh cũng thấy trong cấu trúc perovskite [163]. Trong hợp chất perovskite  $ABX_3$ , yếu tố cấu trúc quan trọng của chúng là bát diện chung đỉnh  $BX_6$  tạo ra mạng lập phương tâm cạnh (xem hình 4.1).



Hình 4.1. Cấu trúc lý tưởng của hợp chất perovskite  $ABX_3$ . Bát diện chung đỉnh  $BX_6$  tạo ra mạng lập phương tâm cạnh.

Đôi khi mạng lập phương tâm cạnh được gọi là mạng perovskite [42]. Gần đây, trạng thái sắt từ được tìm thấy trong một số perovskite trên cơ sở oxit kim loại chuyển tiếp [164-169]. Nghiên cứu hiệu ứng tương quan trong mạng perovskite sẽ cho thấy bản chất của trật tự từ. Chúng tôi coi mạng lập phương tâm cạnh như là một mạng siêu perovskite.

Tương quan điện tử trong mạng siêu perovskite có thể dẫn đến nhiều tính chất vật lý khác nhau như từ tính, siêu lỏng, pha tô pô [41,42,156,170]. Mô hình đơn giản nhất cho tương quan điện tử là mô hình Hubbard. Ban đầu, mô hình Hubbard được đề xuất chính là để khám phá nguồn gốc của sắt từ [33,81,82]. Tuy nhiên, đối với hầu hết các mạng thông thường, tính bền vững của sắt từ trong mô hình Hubbard rất hạn chế [83,152]. Thực chất, mô hình Hubbard là mô hình tổng quát cho phản sắt từ chứ không phải sắt từ. Tuy nhiên, trong mạng có dải năng lượng phẳng, tính bền vững sắt từ có thể xảy ra trong miền thông số rộng, bởi vì tiêu chí

Stoner cho sắt từ được thỏa mãn [41]. Hơn nữa, trong mạng siêu perovskite sắt từ hoặc feri từ được ưu tiên hơn so với phản sắt từ do số nút mạng tinh thể con không bằng nhau [171].

Nói chung, nghiên cứu sắt từ trong mô hình Hubbard đòi hỏi cách tiếp cận không nhiễu loạn [83]. Lí thuyết trường trung bình động (DMFT) là một phương pháp không nhiễu loạn và nó được áp dụng rất thành công để nghiên cứu các hiệu ứng tương quan điện tử [47,48]. DMFT chính xác khi số chiều không gian vô hạn. Tính bền vững của sắt từ trong mô hình Hubbard trong mạng siêu perovskite hai chiều cũng đã được nghiên cứu bằng DMFT [156]. Tuy nhiên, do tính chất của dải năng lượng phẳng, trường trung bình động phải được xem xét một cách thích hợp trong thang năng lượng cực nhỏ. Đến nay, chỉ có phương pháp nhóm tái chuẩn hóa tính số (NRG) có thể tính được thang năng lượng cực nhỏ [154]. Phương pháp chéo hóa chính xác (ED) có lẽ thất bại khi tái tạo trường trung bình động từ tập hợp hữu hạn các quỹ đạo [48,172]. Tuy nhiên, xem xét DMFT cho mạng perovskite trong giới hạn không gian vô hạn chiều, chúng ta có thể thấy rằng các phương trình tự hợp của DMFT có thể giải được chính xác. Điều này cho phép chúng ta xây dựng một mô hình tạp hiệu dụng, tính được thang năng lượng cực nhỏ trong không gian vô hạn chiều. Nghiệm chính xác của mô hình Hubbard trong mạng siêu perovskite vô hạn chiều cho thông tin chính xác về trạng thái cơ bản trật tự từ và nguồn gốc từ trong hệ dải năng lượng phẳng. Bên cạnh trường hợp một chiều, mạng siêu perovskite vô hạn chiều là trường hợp độc đáo khác mà ở đó mô hình Hubbard được giải chính xác. Hơn nữa, dựa trên phân tích DMFT ở giới hạn không gian vô hạn chiều, chúng tôi đề xuất một sơ đồ ED cải biên cho DMFT trong mạng perovskite hữu hạn chiều. Trái với ED thông thường [48,172], ED cải biên khôi phục được các kết quả tính bằng NRG. Nó cũng có thể được sử dụng như một phương pháp giải bài toán một tạp hiệu dụng thay thế cho NRG đối với DMFT trong mạng perovskite hữu hạn chiều. ED cải biên có thể được bổ sung vào lí thuyết hàm mật độ (DFT) cộng với DMFT cho tính toán cấu trúc điện tử các vật liệu thực có dải năng lượng phẳng hay cực hẹp [49,50].

#### ***4.2. Mô hình Hubbard trong mạng siêu perovskite và nghiệm lý thuyết trường trung bình động***

Chúng ta xét mô hình Hubbard trong mạng siêu perovskite d chiều:



$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow}, \quad (4.1)$$

trong đó  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) là toán tử sinh (hủy) electron với spin  $\sigma$  ở vị trí  $i$ .  $t$  là thông số nhảy và chúng ta chỉ xét nhảy nút giữa các vị trí lân cận gần nhất.  $U$  là tương tác Coulomb cục bộ. Mạng siêu perovskite  $d$  chiều bao gồm mạng lập phương  $d$  chiều và các vị trí bổ sung ở giữa cạnh của hình lập phương. Trong không gian hai chiều, mạng siêu perovskite gọi là mạng Lieb [149]. Mạng perovskite ba chiều có thể thấy trong hợp chất perovskite [163]. Mạng siêu perovskite là mạng lưỡng phân. Kí hiệu các mạng con là C và A, trong đó C là mạng lập phương và A là mạng con của các vị trí giữa cạnh. Ô đơn vị của mạng siêu perovskite là ô đơn vị của mạng lập phương và chúng bao gồm một vị trí của mạng lập phương C và  $d$  vị trí lân cận gần nhất nó của mạng con A. Kí hiệu số nút của mạng lập phương C là  $N_C$ . Hamiltonian trong biểu thức (4.1) có thể viết lại là:

$$H = -t \sum_{I,l,\sigma} c_{I\sigma}^\dagger a_{Il\sigma} + H.c. + \sum_{I\sigma} (\varepsilon_c - \mu_\sigma) c_{I\sigma}^\dagger c_{I\sigma} - \sum_{Il\sigma} \mu_\sigma a_{Il\sigma}^\dagger a_{Il\sigma} + U \sum_I n_{I\uparrow}^c n_{I\downarrow}^c + U \sum_{Il} n_{Il\uparrow}^a n_{Il\downarrow}^a, \quad (4.2)$$

trong đó  $c$  và  $a$  kí hiệu toán tử electron cho mạng con C và A. Chỉ số vị trí  $I$  chạy trên các vị trí của mạng lập phương C.  $l = 1, 2, \dots, d$  là chỉ số vị trí của vị trí lân cận gần nhất của mạng con A xung quanh vị trí  $I$  của mạng lập phương C.  $n_{Il\sigma}^a = a_{Il\sigma}^\dagger a_{Il\sigma}$ ,  $n_{I\sigma}^c = c_{I\sigma}^\dagger c_{I\sigma}$  là các toán tử số hạt của electron trong mạng con A và C.  $\mu_\sigma = \mu + \sigma h$ . Ở đây, chúng tôi đưa ra thế hóa  $\mu$  và từ trường ngoài  $h$ .  $\varepsilon_c$  là mức năng lượng cho electron trong mạng lập phương C. Chúng tôi cũng lấy hằng số mạng của mạng lập phương làm đơn vị chiều dài.

#### 4.2.1. Fermion tự do trong mạng siêu perovskite vô hạn chiều

Đầu tiên, chúng ta xét trường hợp không tương tác ( $U = 0$ ). Chúng ta ký hiệu

$$\psi_{I\sigma} = \begin{pmatrix} c_{I\sigma} \\ a_{I1\sigma} \\ \vdots \\ a_{Id\sigma} \end{pmatrix}, \quad (4.3)$$

và biến đổi Fourier của nó trong không gian động lượng là  $\psi_{k\sigma}$ . Hàm Green không tương tác của electron trong không gian  $d$  chiều có thể viết là

$$\hat{g}_\sigma^d(\mathbf{k}, \omega) = \langle\langle \psi_{\mathbf{k}\sigma} | \psi_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_\omega \Big|_{U=0}$$

$$= \left( \begin{array}{cccc} \omega - \varepsilon_c + \mu_\sigma & 2t \cos \frac{k_1}{2} & \cdots & 2t \cos \frac{k_d}{2} \\ 2t \cos \frac{k_1}{2} & \omega + \mu_\sigma & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 2t \cos \frac{k_d}{2} & 0 & \cdots & \omega + \mu_\sigma \end{array} \right)^{-1}. \quad (4.4)$$

Ma trận này có thể nghịch đảo tường minh. Chúng ta tính được định thức của nó bằng

$$\det\{[\hat{g}_\sigma^d(\mathbf{k}, \omega)]^{-1}\}$$

$$= (\omega + \mu_\sigma)^{d-1} \left[ (\omega + \mu_\sigma)(\omega + \mu_\sigma - \varepsilon_c) - 4t^2 \sum_{i=1}^d \cos^2 \frac{k_i}{2} \right]. \quad (4.5)$$

Các không điểm của định thức cho thấy phổ năng lượng của Hamiltonian trong biểu thức (5.2). Có  $(d-1)$  phổ bằng không và hai phổ tán sắc khác thỏa mãn phương trình đặc trưng

$$\varepsilon_{k\nu}(\varepsilon_{k\nu} - \varepsilon_c) - 4t^2 \sum_{i=1}^d \cos^2 \frac{k_i}{2} = 0. \quad (4.6)$$

Phổ tán sắc  $\varepsilon_{k\nu}$  phụ thuộc vào động lượng thông qua đại lượng  $4t^2 \sum_{i=1}^d \cos^2 \frac{k_i}{2}$ . Ta có hàm mật độ trạng thái trần (tức là hàm mật độ trạng thái không tương tác) (DOS)

$$N_d(\varepsilon) = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{k}} |\varepsilon| \delta \left( \varepsilon^2 - 4t^2 \sum_{i=1}^d \cos^2 \frac{k_i}{2} \right) = |\varepsilon| \rho_d(\varepsilon^2), \quad (4.7)$$

trong đó  $\rho_d(x) = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{k}} \delta(x - 2t^2 d - 2t^2 \sum_{i=1}^d \cos k_i)$ .

Ở đây, chúng ta không đưa mức năng lượng  $\varepsilon_c$  vào trong DOS trần này, bởi vì chúng ta chỉ sử dụng DOS này để tính tổng theo động lượng trong miền Brillouin. DOS trần có thể được xác định bằng việc sử dụng biến đổi Fourier [176]

$$\Phi_d(s) = \int_{-\infty}^{\infty} dx e^{isx} \rho_d(x) = \exp\{is2t^2 d + d \ln[J_0(2t^2 s)]\}, \quad (4.8)$$

trong đó  $J_0(x)$  là hàm Bessel bậc không. Bằng việc khai triển hàm mũ trong công thức (5.8) theo lũy thừa của  $s$ , chúng ta thu được

$$\Phi_d(s) = \exp \left\{ is2t^2d - d \frac{(2t^2s)^2}{4} - \frac{d}{4} \left[ \frac{(2t^2s)^2}{4} \right]^2 + O[d(t^2s)^6] \right\}. \quad (4.9)$$

Trong giới hạn  $d \rightarrow \infty$ ,  $\Phi_d(s)$  là hữu hạn và  $\rho_d(x)$  không triệt tiêu khi và chỉ khi  $t$  tỉ lệ với  $1/\sqrt{d}$ . Thang tỷ lệ này cũng là thang tỷ lệ trong mạng lập phương [47,48,174]. Chúng ta đặt

$$t = \frac{t^*}{\sqrt{2d}},$$

trong đó  $t^*$  là một hằng số. Do đó trong giới hạn không gian vô hạn chiều, DOS trần trở thành

$$N(\epsilon) = \lim_{d \rightarrow \infty} N_d(\epsilon) = \frac{1}{2} [\delta(\epsilon - t^*) + \delta(\epsilon + t^*)]. \quad (4.10)$$

Trong không gian vô hạn chiều, DOS trần có một dạng rất đơn giản. Nó chỉ là tổng của hai hàm delta ở  $\pm t^*$ . DOS trần thực đối với hai dải năng lượng tán sắc trong giới hạn không gian vô hạn chiều là

$$\tilde{N}(\epsilon) = \lim_{d \rightarrow \infty} \frac{1}{2N_c} \sum_{k,v} \delta(\epsilon - \epsilon_{kv}) = \frac{1}{2} [\delta(\epsilon - \epsilon_+) + \delta(\epsilon - \epsilon_-)], \quad (4.11)$$

trong đó  $\epsilon_{\pm} = \frac{\epsilon_c}{2} \pm \left[ \frac{\epsilon_c^2}{4} + (t^*)^2 \right]^{\frac{1}{2}}$ . Như chúng ta đã nhận xét, mô hình liên kết chặt trong mạng siêu perovskite  $d$  chiều có hai dải năng lượng tán sắc và  $(d-1)$  dải phẳng suy biến ở mức năng lượng không. Ở giới hạn không gian vô hạn chiều, hai dải năng lượng tán sắc cũng trở nên phẳng và ở mức năng lượng  $\epsilon_{\pm}$ .

Nghịch đảo ma trận trong công thức (4.4), chúng ta thu được hàm Green không tương tác của các electron  $c$  và  $a$  trong không gian  $d$  chiều

$$g_{c\sigma}^d(\mathbf{k}, \omega) = \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_{\omega} \Big|_{U=0} = \frac{\omega + \mu_{\sigma}}{(\omega - \epsilon_c + \mu_{\sigma})(\omega + \mu_{\sigma}) - 4t^2 \sum_{i=1}^d \cos^2 \frac{k_i}{2}}$$

$$\begin{aligned} g_{a\sigma}^d(\mathbf{k}, \omega) &= \langle\langle a_{\mathbf{k}\sigma} | a_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger \rangle\rangle_{\omega} \Big|_{U=0} \\ &= \frac{1}{\omega + \mu_{\sigma}} \left[ 1 + \frac{4t^2 \cos^2 \frac{k_l}{2}}{(\omega - \epsilon_c + \mu_{\sigma})(\omega + \mu_{\sigma}) - 4t^2 \sum_{i=1}^d \cos^2 \frac{k_i}{2}} \right] \end{aligned}$$

$$g_{cal\sigma}^d(\mathbf{k}, \omega) = \langle\langle c_{\mathbf{k}\sigma} | a_{\mathbf{k}l\sigma}^\dagger \rangle\rangle_{\omega} \Big|_{U=0} = 2 \frac{2t \cos \frac{k_l}{2}}{(\omega - \varepsilon_c + \mu_\sigma)(\omega + \mu_\sigma) - 4t^2 \sum_{i=1}^d \cos^2 \frac{k_i}{2}}$$

$$\begin{aligned} g_{aall'\sigma}^d(\mathbf{k}, \omega) &= \langle\langle a_{\mathbf{k}l\sigma} | a_{\mathbf{k}l'\sigma}^\dagger \rangle\rangle_{\omega} \Big|_{U=0} \\ &= \frac{1}{\omega + \mu_\sigma} \frac{4t^2 \cos \frac{k_l}{2} \cos \frac{k_{l'}}{2}}{(\omega - \varepsilon_c + \mu_\sigma)(\omega + \mu_\sigma) - 4t^2 \sum_{i=1}^d \cos^2 \frac{k_i}{2}} \end{aligned}$$

trong đó  $l, l' = 1, \dots, d$  và  $l \neq l'$ . Trong không gian thực trong ô đơn vị, hàm Green không tương tác bằng

$$g_{c\sigma}^d(\omega) = \langle\langle c_{l\sigma} | c_{l\sigma}^\dagger \rangle\rangle_{\omega} \Big|_{U=0} = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{k}} g_{c\sigma}^d(k, \omega)$$

$$g_{al\sigma}^d(\omega) = \langle\langle a_{ll\sigma} | a_{ll\sigma}^\dagger \rangle\rangle_{\omega} \Big|_{U=0} = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{k}} g_{al\sigma}^d(k, \omega)$$

$$g_{cal\sigma}^d(\omega) = \langle\langle c_{l\sigma} | a_{ll\sigma}^\dagger \rangle\rangle_{\omega} \Big|_{U=0} = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{k}} g_{cal\sigma}^d(k, \omega) e^{-\frac{ik_l}{2}}$$

$$g_{aall'\sigma}^d(\omega) = \langle\langle a_{ll\sigma} | a_{l'l'\sigma}^\dagger \rangle\rangle_{\omega} \Big|_{U=0} = \frac{1}{N_c} \sum_{\mathbf{k}} g_{aall'\sigma}^d(k, \omega) e^{\frac{i(k_l - k_{l'})}{2}}$$

Khi số chiều không gian lớn  $t \sim \frac{1}{\sqrt{d}}$ , hàm Green chéo  $g_{c\sigma}^d(\omega)$ ,  $g_{al\sigma}^d \sim \frac{1}{d^0}$ ,

trong khi đó hàm Green không chéo

$$g_{cal\sigma}^d(\omega) = - \int_{-\infty}^{\infty} d \in$$

$$N_{d-1}(\varepsilon) \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_l}{2\pi} \frac{2t \cos \frac{k_l}{2} e^{-\frac{ik_l}{2}}}{(\omega - \varepsilon_c + \mu_\sigma)(\omega + \mu_\sigma) - \varepsilon - 4t^2 \cos^2 \frac{k_l}{2}} \sim \frac{1}{\sqrt{d}}$$

$$g_{aall'\sigma}^d(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu_\sigma} \int_{-\infty}^{\infty} d \in$$

$$N_{d-2}(\varepsilon) \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_l}{2\pi} \frac{4t^2 \cos \frac{k_l}{2} \cos \frac{k_{l'}}{2} e^{\frac{i(k_l - k_{l'})}{2}}}{(\omega - \varepsilon_c + \mu_\sigma)(\omega + \mu_\sigma) - \varepsilon - 4t^2 \cos^2 \frac{k_l}{2} - 4t^2 \cos^2 \frac{k_{l'}}{2}} \sim \frac{1}{d}$$

Do đó, trong giới hạn  $d \rightarrow \infty$ , chỉ hàm Green chéo,  $g_{c\sigma}^d(\omega)$  và  $g_{a\sigma}^d(\omega)$  là hữu hạn, trong khi đó hàm không chéo  $g_{cal\sigma}^d(\omega)$  và  $g_{aal'\sigma}^d(\omega)$  triệt tiêu. Các đặc tính này làm đơn giản hóa đáng kể DMFT.

#### 4.2.2. Lí thuyết trường trung bình động

DMFT được xây dựng dựa trên giới hạn không gian vô hạn chiều. Trong giới hạn này, năng lượng riêng là một hàm cục bộ của tần số. Hàm Green toàn phần thỏa mãn phương trình Dyson

$$\hat{G}_\sigma(\mathbf{k}, \omega) = \{[\hat{g}_\sigma^d(\mathbf{k}, \omega)]^{-1} - \hat{\Sigma}_\sigma(\omega)\}^{-1}, \quad (4.12)$$

trong đó  $\hat{\Sigma}_\sigma(\omega)$  là năng lượng riêng. Năng lượng riêng có thể được biểu diễn bằng chuỗi nhiễu loạn của hàm Green không tương tác. Trong giới hạn  $d \rightarrow \infty$ , các hàm Green không tương tác  $g_{cal\sigma}^d(\omega)$  và  $g_{aal'\sigma}^d(\omega)$  triệt tiêu và các phần tử ngoài đường chéo của năng lượng riêng  $\hat{\Sigma}_\sigma(\omega)$  cũng phải triệt tiêu. Do đó, năng lượng riêng  $\hat{\Sigma}_\sigma(\omega)$  là một ma trận chéo với các phần tử  $(\Sigma_{c\sigma}(\omega), \Sigma_{a\sigma}(\omega), \dots, \Sigma_{a\sigma}(\omega))$ . Ma trận trong phương trình (4.12) có thể nghịch đảo tường minh. Chúng ta thu được hàm Green cục bộ

$$G_{a\sigma}^d(\omega) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} G_{al\sigma}^d(\mathbf{k}, \omega) = \frac{1}{\omega + \mu_\sigma - \Sigma_{a\sigma}(\omega)} + \frac{1}{\omega + \mu_\sigma - \Sigma_{a\sigma}(\omega)} \int_{-\pi}^{\pi} \frac{dk_l}{2\pi} \\ \times \int d \in N_{d-1}(\epsilon) \frac{4t^2 \cos^2 \frac{k_l}{2}}{[\omega + \mu_\sigma - \epsilon_c - \Sigma_{c\sigma}(\omega)][\omega + \mu_\sigma - \Sigma_{c\sigma}(\omega)] - 4t^2 \cos^2 \frac{k_l}{2} - \epsilon^2}. \quad (4.13)$$

Trong giới hạn  $d \rightarrow \infty$ , số hạng cuối cùng trong biểu thức (4.13) triệt tiêu, bởi vì  $t \sim \frac{1}{\sqrt{d}}$  và  $\lim_{d \rightarrow \infty} N_{d-1}(\epsilon) = N(\epsilon)$ . Do đó, hàm Green cục bộ của electron a ở vô hạn chiều bằng

$$G_{a\sigma}(\omega) = \lim_{d \rightarrow \infty} G_{a\sigma}^d(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu_\sigma - \Sigma_{a\sigma}(\omega)}. \quad (4.14)$$

Hàm Green cục bộ này có dạng rất đơn giản. Trông nó giống như hàm Green toàn phần với một mức năng lượng  $\mu_\sigma$ . Hơn nữa, hàm Green cục bộ của electron a độc lập với động lực học của electron c. Trong DMFT, năng lượng riêng  $\Sigma_{a\sigma}(\omega)$  được xác định từ động lực học của một nút mạng nhúng trong một môi trường hiệu

dụng. Động lực học này tương đương với động lực học của mô hình Anderson mô tả một tạp trong một bể dẫn [48]

$$H_{d \rightarrow \infty}^a = - \sum_{\sigma} \mu_{\sigma} a_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma} + U n_{\uparrow}^a n_{\downarrow}^a + \sum_{m, \sigma} V_{m\sigma}^a b_{m\sigma}^{\dagger} a_{\sigma} + H.c. + \sum_{m, \sigma} E_{m\sigma}^a b_{m\sigma}^{\dagger} b_{m\sigma}, \quad (4.15)$$

trong đó  $b_{m\sigma}^{\dagger}$ ,  $b_{m\sigma}$  là các toán tử sinh và hủy biểu diễn bể dẫn. Các thông số bể dẫn  $E_{m\sigma}^a$  và  $V_{m\sigma}^a$  được xác định bởi phương trình tự hợp

$$\Delta_{a\sigma}(\omega) = \sum_m \frac{|V_{m\sigma}^a|^2}{\omega - E_{m\sigma}^a}, \quad (4.16)$$

trong đó  $\Delta_{a\sigma}(\omega) = \omega + \mu_{\sigma} - \Sigma_{a\sigma}(\omega) - G_{a\sigma}^{-1}(\omega)$  [48]. Đối với hầu hết các mạng thông thường, phương trình tự hợp không thể giải trực tiếp. Các thông số được xác định gần đúng bằng cực tiểu hóa khoảng cách giữa  $\Delta_{a\sigma}(\omega)$  và hình chiếu của nó vào một tập hợp hữu hạn các quỹ đạo [48]. Ngược lại, đối với mạng siêu perovskite vô hạn chiều, phương trình tự hợp có thể giải chính xác. Thực ra, sử dụng phương trình (4.14), chúng ta thu được ngay  $\Delta_{a\sigma}(\omega) = 0$ , dẫn đến  $V_{m\sigma}^a = 0$ . Do đó, Hamiltonian một nút hiệu dụng có dạng

$$H_{d \rightarrow \infty}^a = - \sum_{\sigma} \mu_{\sigma} a_{\sigma}^{\dagger} a_{\sigma} + U n_{\uparrow}^a n_{\downarrow}^a. \quad (4.17)$$

Chúng ta có thể kiểm tra Hamiltonian hiệu dụng này tạo ra phương trình Dyson (4.14). Thực chất nó chỉ là mô hình Hubbard một nút, hay còn gọi là mô hình Hubbard nguyên tử. Ta thu được năng lượng riêng và hàm Green [33]

$$\Sigma_{a\sigma}(\omega) = U \langle n_{-\sigma}^a \rangle + \frac{U^2 \langle n_{-\sigma}^a \rangle (1 - \langle n_{-\sigma}^a \rangle)}{\omega + \mu_{\sigma} - U(1 - \langle n_{-\sigma}^a \rangle)}, \quad (4.18)$$

$$G_{a\sigma}(\omega) = \frac{1 - \langle n_{-\sigma}^a \rangle}{\omega + \mu_{\sigma}} + \frac{\langle n_{-\sigma}^a \rangle}{\omega + \mu_{\sigma} - U}, \quad (4.19)$$

trong đó  $\langle n_{\sigma}^a \rangle$  là mật độ electron ở mạng con A. Nó có thể tính được từ hàm Green. Từ công thức (4.19) chúng ta thu được

$$\langle n_{\sigma}^a \rangle = (1 - \langle n_{-\sigma}^a \rangle) f(-\mu_{\sigma}) + \langle n_{-\sigma}^a \rangle f(U - \mu_{\sigma}), \quad (4.20)$$

trong đó  $f(x) = 1/(\exp \frac{x}{T} + 1)$  là hàm phân bố Fermi-Dirac ở nhiệt độ T. Ở nhiệt độ hữu hạn ( $T > 0$ ), chúng ta luôn thu được  $\lim_{h \rightarrow 0} (\langle n_{\uparrow}^a \rangle - \langle n_{\downarrow}^a \rangle) = 0$ . Do đó, mạng con A luôn ở trạng thái thuận từ ở nhiệt độ hữu hạn khi không có từ trường ngoài.

Tuy nhiên, ở nhiệt độ không tuyệt đối, nghiệm sắt từ tồn tại. Khi  $0 < \mu < U$  và trong giới hạn  $h \rightarrow 0^+$  chúng ta thu được  $\langle n_{\uparrow}^a \rangle = 1$  và  $\langle n_{\downarrow}^a \rangle = 0$ . Từ trường  $h \geq 0$  cố định chiều của độ từ hóa. Trạng thái từ hóa tự phát hoàn toàn bão hòa. Sắt từ ở trường hợp lấp đầy một nửa là do tính chất phẳng của dải năng lượng điện tử của electron a. Các electron có xu hướng phân cực spin để cực tiểu hóa năng lượng tương tác Coulomb mà không làm mất động năng.

Đối với electron c, chúng ta thu được hàm Green cục bộ

$$G_{c\sigma}^d(\omega) = \int \frac{d^d k}{(2\pi)^d} G_{c\sigma}^d(\mathbf{k}, \omega),$$

trong đó

$$G_{c\sigma}^d(\mathbf{k}, \omega) = \left[ \omega - \varepsilon_c + \mu_{\sigma} - \Sigma_{c\sigma}^d(\omega) - \frac{4t^2 \sum_{i=1}^d \cos^2 \frac{k_i}{2}}{\omega + \mu_{\sigma} - \Sigma_{c\sigma}^d(\omega)} \right]^{-1}.$$

Trong giới hạn không gian vô hạn chiều, chúng ta thu được

$$G_{c\sigma}(\omega) = \lim_{d \rightarrow \infty} G_{c\sigma}^d(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu_{\sigma} - \varepsilon_c - \Sigma_{c\sigma}^d(\omega) - t^{*2} G_{\sigma}^a(\omega)}. \quad (4.21)$$

Trong DMFT, năng lượng riêng  $\Sigma_{c\sigma}^d(\omega)$  được xác định từ động lực học của một tạp liên kết với một bể dẫn hiệu dụng. Hamiltonian hiệu dụng có dạng

$$\begin{aligned} H_{eff}^c = & \sum_{\sigma} (\varepsilon_c - \mu_{\sigma}) c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + U n_{\uparrow}^c n_{\downarrow}^c + \sum_{m,\sigma} V_{m\sigma}^c d_{m\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} \\ & + H.c. + \sum_{m,\sigma} E_{m\sigma}^c d_{m\sigma}^{\dagger} d_{m\sigma}, \end{aligned} \quad (4.22)$$

trong đó  $d_{m\sigma}^{\dagger}$ ,  $d_{m\sigma}$  là các toán tử sinh, hủy biểu diễn bể dẫn. Các thông số bể dẫn  $E_{m\sigma}^c$  và  $V_{m\sigma}^c$  lại được xác định bằng phương trình tự hợp [48]

$$\Delta_{c\sigma}(\omega) = \sum_m \frac{|V_{m\sigma}^c|^2}{\omega - E_{m\sigma}^c} = \frac{t^{*2}(1 - \langle n_{-\sigma}^a \rangle)}{\omega + \mu_{\sigma}} + \frac{t^{*2} \langle n_{-\sigma}^a \rangle}{\omega + \mu_{\sigma} - U}. \quad (4.23)$$

Phương trình này cho  $V_{1\sigma}^c = t^* \sqrt{1 - \langle n_{-\sigma}^a \rangle}$ ,  $E_{1\sigma}^c = -\mu_{\sigma}$  và  $V_{2\sigma}^c = t^* \sqrt{\langle n_{-\sigma}^a \rangle}$ ,  $E_{2\sigma}^c = U - \mu_{\sigma}$ . Do đó, Hamiltonian hiệu dụng xác định năng lượng riêng của electron c có dạng

$$\begin{aligned} H_{d \rightarrow \infty}^c = & \sum_{\sigma} (\varepsilon_c - \mu_{\sigma}) c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + U n_{\uparrow}^c n_{\downarrow}^c + t^* \sum_{\sigma} (\varepsilon_c - \mu_{\sigma}) c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + U n_{\uparrow}^c n_{\downarrow}^c - \\ & - \sum_{\sigma} \mu_{\sigma} d_{1\sigma}^{\dagger} d_{1\sigma} + t^* \sum_{\sigma} \sqrt{\langle n_{-\sigma}^a \rangle} (c_{\sigma}^{\dagger} d_{2\sigma} + H.c.) + \sum_{\sigma} (U - \mu_{\sigma}) d_{2\sigma}^{\dagger} d_{2\sigma}. \end{aligned} \quad (4.24)$$

Chúng ta có thể kiểm tra rằng Hamiltonian hiệu dụng trên dẫn đến phương trình Dyson (4.21). Nó cũng cho thấy có sự lai hóa giữa các dải năng lượng phẳng suy biến vĩ mô với các dải năng lượng tán sắc. Trái với mạng lập phương [166,167,174], phương trình tự hợp của DMFT cho mạng siêu perovskite vô hạn chiều có thể giải giải tích. Điều đó cho phép chúng ta xây dựng Hamiltonian tạp hiệu dụng như trong phương trình (4.17) và (4.24). Cho đến nay, mạng siêu perovskite vô hạn chiều là một cấu trúc mạng độc đáo, ở đó các phương trình tự hợp của DMFT có thể giải chính xác. Bởi vì DMFT chính xác trong giới hạn vô hạn chiều, cho nên mô hình Hubbard của mạng siêu perovskite vô hạn chiều cũng có thể giải chính xác.

Ở nhiệt độ không tuyệt đối và  $0 < \mu < U$ ,  $\langle n_{\uparrow}^a \rangle = 1$ ,  $\langle n_{\downarrow}^a \rangle = 0$ , chúng ta thu được

$$\begin{aligned}
H_{d \rightarrow \infty}^c = & \sum_{\sigma} (\varepsilon_c - \mu - \sigma h) c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + U n_{\uparrow}^c n_{\downarrow}^c + t^* (c_{\uparrow}^{\dagger} d_{1\uparrow} + d_{1\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow}) \\
& - (\mu + h) d_{1\uparrow}^{\dagger} d_{1\uparrow} + \\
& + t^* (c_{\downarrow}^{\dagger} d_{2\downarrow} + d_{2\downarrow}^{\dagger} c_{\downarrow}) + (U - \mu + h) d_{2\downarrow}^{\dagger} d_{2\downarrow}.
\end{aligned} \tag{4.25}$$

Hamiltonian hiệu dụng này mô tả một tạp liên kết với hai mức của một bể nhiệt với mức năng lượng trần khác nhau. Tuy nhiên, mỗi thành phần spin của tạp chỉ liên kết với một mức năng lượng. Do đó, việc tách mức năng lượng có thể dẫn đến mất cân bằng số spin, tạo ra tính sắt từ của mạng lập phương C. Trạng thái sắt từ xuất hiện do sắt từ của dải năng lượng phẳng của mạng con A, bất kể tương tác Coulomb của các electron c mạnh hay yếu. Khi mạng con A là thuận từ, cơ chế sắt từ này không đúng nữa, bởi vì cả hai thành phần spin của electron c được kết hợp cân bằng với mức năng lượng bể dẫn. Trái với trường hợp mạng con A, Hamiltonian hiệu dụng trong biểu thức (4.25) có thể không dẫn đến công thức giải tích cuối cùng đối với hàm Green tạp. Tuy nhiên, chúng ta có thể tính toán hàm Green tạp bằng phương pháp chéo hóa chính xác. Trong giới hạn  $h \rightarrow 0$ , chúng ta cũng có thể tính mật độ số hạt và độ từ hóa của các electron c.

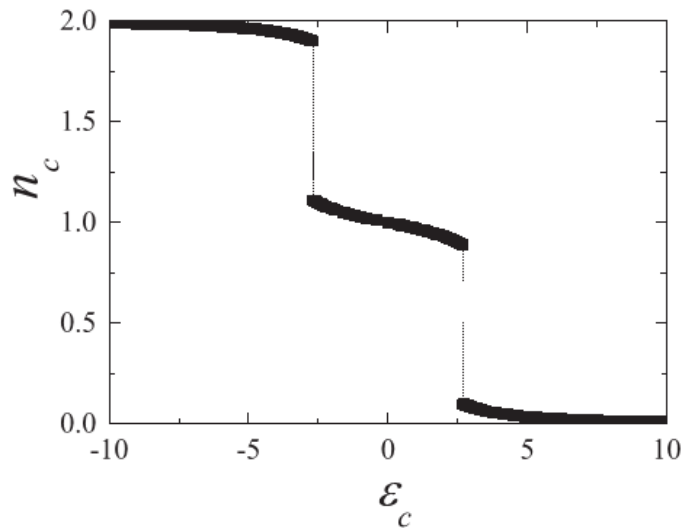
$$n_c = \sum_{\sigma} \langle n_{\sigma}^c \rangle, \tag{4.26}$$



$$m_c = \begin{cases} \frac{1}{2} \frac{\langle n_{\uparrow}^c \rangle - \langle n_{\downarrow}^c \rangle}{n_c}, & \text{nếu } n_c \leq 1 \\ \frac{1}{2} \frac{\langle n_{\uparrow}^c \rangle - \langle n_{\downarrow}^c \rangle}{2 - n_c}, & \text{nếu } n_c > 1 \end{cases} \quad (4.27)$$

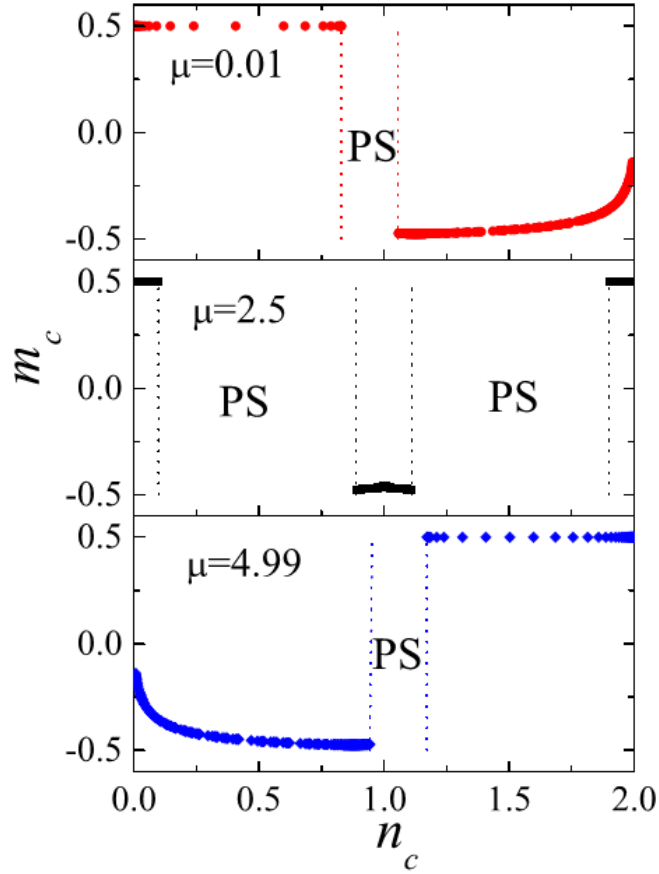
Ở đây, khi  $n_c > 1$  chúng ta đã định nghĩa độ từ hóa của các lỗ trống. Khi  $m_c = 0$ , trạng thái cơ bản của lập phương C là thuận từ. Khi  $0 < |m_c| < 1/2$ , trạng thái cơ bản của lập phương C là sắt từ và không bão hòa, và khi  $|m_c| = 1/2$ , trạng thái cơ bản vẫn là sắt từ nhưng bão hòa hoàn toàn. Nếu  $m_c > 0$ , spin của electron trong lập phương C song song với spin của electron trong mạng con A. Trong trường hợp này, cả mạng là sắt từ. Nếu  $m_c < 0$ , độ từ hóa của lập phương C ngược chiều với độ từ hóa của mạng con A. Trong trường hợp này, cả mạng là feri từ.

Chúng tôi tính năng lượng riêng  $\Sigma_{c\sigma}(\omega)$  từ Hamiltonian hiệu dụng trong biểu thức (4.25) bằng phương pháp chéo hóa chính xác ở nhiệt độ không tuyệt đối. Chúng tôi quan tâm đến miền giá trị  $0 < \mu < U$ , ở đó các electron trong mạng con A tạo nên trạng thái cơ bản sắt từ bão hòa hoàn toàn. Trong hình 4.2, chúng tôi trình bày mật độ electron  $n_c$  như là hàm số của mức năng lượng trần  $\varepsilon_c$ . Bởi vì chúng tôi chọn  $\mu = U/2$  nên hệ có đối xứng điện tử – lỗ trống. Trong hình 4.2, chúng ta có thể thấy rằng mật độ số hạt  $n_c$  được xác định duy nhất trong ba miền khác nhau:  $n_c$  xung quanh 0 (lấp đầy electron), 1 (lấp đầy một nửa), và 2 (lấp đầy lỗ trống). Ở các giá trị nhất định của  $\varepsilon_c/t^*$ , mật độ số hạt  $n_c$  thay đổi đột ngột và giá trị của nó trở nên bất định. Đặc điểm này cho thấy ở  $t^*$  có sự phân tách pha.



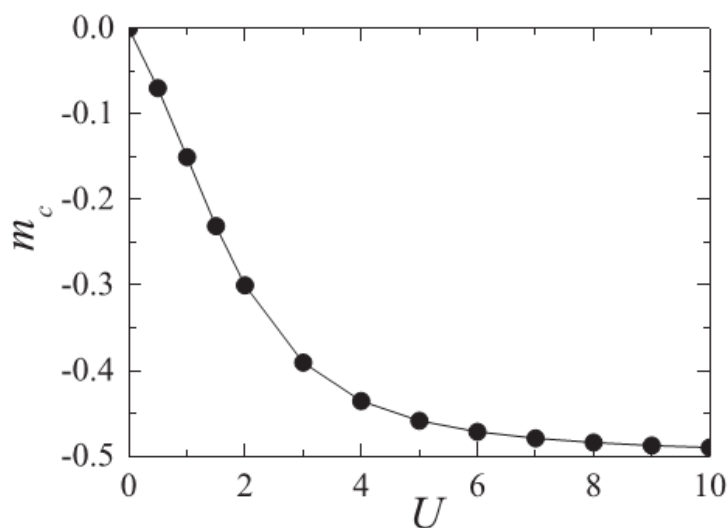
Hình 4.2. Mật độ số hạt  $n_c$  của các electron  $c$  là hàm của mức năng lượng  $\varepsilon_c$  tại  $U = 5$  và  $\mu = U/2$  ( $t^* = 1$ ).

Trong hình 4.3, chúng tôi trình bày sự phụ thuộc của độ từ hóa  $m_c$  vào mật độ điện tích  $n_c$  đối với các giá trị khác nhau của thế hóa  $\mu$ . Chúng tôi sử dụng mức năng lượng  $\varepsilon_c$  để thay đổi mật độ  $n_c$ . Phân tách pha xảy ra ở miền giá trị mà mật độ  $n_c$  trở nên bất định. Khi  $\mu \ll U/2$ , phân tách pha xảy ra xung quanh độ lấp đầy một nửa. Ngoài miền phân tách pha, đối với mật độ  $n_c < 1$ ,  $m_c = 1/2$ , do đó mạng lập phương C là sắt từ bão hòa hoàn toàn, ngược lại trong miền  $1 < n_c < 2$ ,  $-1/2 < m_c < 0$ , do đó mạng lập phương C vẫn là sắt từ, nhưng độ từ hóa của nó không bão hòa. Đối với mạng toàn phần, khi  $n_c < 1$  trạng thái cơ bản là sắt từ bão hòa hoàn toàn, trong khi đó khi  $1 < n_c < 2$ , trạng thái cơ bản là feri từ bởi vì độ từ hóa của mạng lập phương  $m_c$  là âm. Trái với trường hợp hai chiều, ở đó sự chuyển pha từ sắt từ sang feri từ do tương tác Coulomb, chúng ta thấy phân tách pha giữa pha sắt từ và feri từ do mức năng lượng phân tách. Thực ra, trong giới hạn không gian vô hạn chiều, tất cả các dải năng lượng trở nên phẳng và bất cứ giá trị hữu hạn nào của tương tác Coulomb đều sẽ chiếm ưu thế và không thể dẫn đến bất cứ sự chuyển pha nào. Thay vì tương tác Coulomb, các mức năng lượng bị phân tách dẫn đến mất cân bằng về mật độ số hạt theo spin mà dẫn đến chuyển pha sắt từ - feri từ qua miền phân tách pha. Khi thế hóa  $\mu$  tăng, phân tách pha dịch chuyển đến miền mật độ điện tích nhỏ hơn, và miền phân tách pha bổ sung xảy ra trong miền mật độ  $n_c > 1$ . Khi  $\mu = U/2$ , hai miền phân tách pha này chia miền mật độ  $n_c$  thành ba miền. Khi lấp đầy điện tử hoặc lỗ trống, mạng lập phương C là sắt từ bão hòa hoàn toàn, trong khi đó gần miền lấp đầy một nửa, nó là sắt từ không bão hòa. Khi  $\mu > U/2$ , tính huống được phân tích ở trên vẫn xảy ra với các hạt được thay thế bằng lỗ trống. Chú ý rằng đối với tất cả các giá trị của thế hóa trong khoảng  $0 < \mu < U$ , mật độ electron trong mạng con A luôn luôn là  $n_a = 1$ . Trạng thái cơ bản được xác định duy nhất bằng các thông số của mô hình  $\mu$  và  $\varepsilon_c$  chứ không phải bằng  $\varepsilon_c$  và mật độ toàn phần  $n = n_a + n_c$ . Với mật độ toàn phần cố định  $n$ , nhiều giá trị của thế hóa có thể thu được và các trạng thái cơ bản khác nhau có thể được thiết lập.

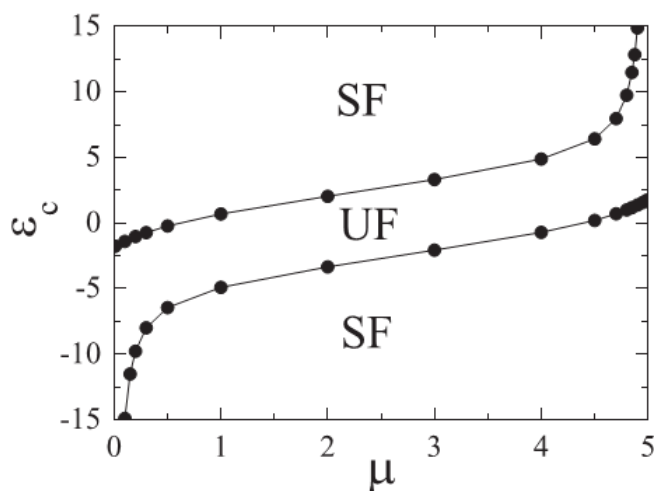


Hình 4.3. Độ từ hóa  $m_c$  phụ thuộc vào mật độ điện tích  $n_c$  của các electron  $c$  đối với các giá trị khác nhau của thế hóa  $\mu$ . PS kí hiệu pha phân tách pha,  $U = 5$ ,  $t^* = 1$ .

Trong hình 4.4, chúng tôi trình bày độ từ hóa  $m_c$  của mạng lập phương C như là hàm số của tương tác Coulomb  $U$  khi lấp đầy một nửa  $\mu = U/2$  và  $\varepsilon_c = 0$ . Chúng ta thấy rằng  $m_c$  tiến tới giá trị  $-1/2$  chỉ khi  $U \rightarrow \infty$ . Với các giá trị hữu hạn của tương tác Coulomb, trạng thái cơ bản sắt từ của mạng lập phương C không bão hòa khi lấp đầy một nửa. Tuy nhiên, gần miền lấp đầy một nửa, độ phân cực spin sắt từ của mạng lập phương C trái với phân cực của mạng con A. Kết quả là, trạng thái cơ bản của toàn mạng là feri từ. Điều này phù hợp với lí thuyết Lieb, bởi vì mạng con C và A có số nút mạng không bằng nhau. Chú ý trong mạng Lieb hai chiều, DMFT cũng cho trạng thái cơ bản là feri từ, tuy nhiên, chỉ trong trạng thái kết hợp mạnh. Feri từ trong mạng Lieb hai chiều là do trao đổi Heisenberg phân sắt từ trong miền kết hợp mạnh, trong khi đó trong mạng perovskite vô hạn chiều, feri từ xuất hiện từ dải năng lượng phẳng và sự lai hóa giữa dải năng lượng phẳng suy biến vĩ mô và dải năng lượng tán sắc.



Hình 4.4. Độ từ hóa  $m_c$  của mạng lập phương C như là hàm của tương tác Coulomb  $U$  khi lấp đầy một nửa,  $\mu = U/2$ , và  $\varepsilon_c = 0$ ,  $t^* = 1$ .



Hình 4.5. Giản đồ pha từ của mạng lập phương C. SF (UF) kí hiệu cho sắt từ bão hòa (không bão hòa). Sự tách pha xảy ra ở biên pha  $U = 5$ ,  $t^* = 1$ .

Cuối cùng, giản đồ pha được trình bày trong hình 4.5. Giản đồ pha phân biệt ba miền, hai miền là sắt từ bão hòa ( $m_c = 1/2$ ) phân tách với miền sắt từ không bão hòa ( $-1/2 < m_c < 0$ ). Biên giới pha thực ra là phân tách pha, ở đó mật độ điện tích  $n_c$  trở nên bất định. Đối với toàn mạng, miền sắt từ bão hòa tương ứng với sắt từ hoàn toàn, trong khi đó miền không bão hòa tương ứng với feri từ. Khi lấp đầy một nửa  $\mu = U/2$  và  $\varepsilon_c = 0$ , trạng thái cơ bản là feri từ.

#### 4.2.3. Áp dụng vào mạng perovskite hữu hạn chiều

Mô hình một tạp hiệu dụng được xác định trong biểu thức (4.17) và (4.24) cho động lực học cục bộ của các electron trong mạng perovskite một cách chính

xác, tuy nhiên, chỉ trong giới hạn không gian vô hạn chiều. Chúng ta có thể thấy rằng mô hình một tạp hiệu dụng của các electron a trong biểu thức (4.17) sẽ tạo ra hai dải năng lượng con Hubbard ở vị trí  $-\mu$  và  $U - \mu$ . Trong trường hợp hai chiều, điều này phù hợp với các kết quả NRG trong miền kết hợp mạnh. Trong mạng perovskite hữu hạn chiều, trường trung bình động  $\delta\Delta_{a\sigma}(\omega) \equiv \Delta_{a\sigma}(\omega)$  và  $\delta\Delta_{c\sigma}(\omega) \equiv [\Delta_{c\sigma}(\omega) - (t^*)^2 G_{a\sigma}(\omega)]$  không triệt tiêu nữa. Do đó, các bề dẫn trong mô hình một tạp hiệu dụng trong các biểu thức (4.17) và (4.24) không tạo ra trường trung bình động. Để xét các giá trị hữu hạn của  $\delta\Delta_{a\sigma}(\omega)$  và  $\delta\Delta_{c\sigma}(\omega)$  trong mạng hữu hạn chiều, chúng ta biểu diễn chúng thành tổ hợp hữu hạn các quỹ đạo

$$\delta\Delta_{a\sigma}(\omega) = \sum_{m=1}^{n_s^a} \frac{|V_{m\sigma}^a|^2}{\omega - E_{m\sigma}^a}, \quad (4.28)$$

$$\delta\Delta_{c\sigma}(\omega) = \sum_{m=1}^{n_s^c} \frac{|V_{m\sigma}^c|^2}{\omega - E_{m\sigma}^c}. \quad (4.29)$$

Biểu diễn này tương tự như phương pháp ED thông thường, ngoại trừ số hạng  $(t^*)^2 G_{a\sigma}(\omega)$  trong  $\delta\Delta_{c\sigma}(\omega)$ , là tính chất của nghiệm chính xác khi giới hạn không gian vô hạn chiều. Sau đây chúng ta sẽ thấy số hạng này là quan trọng, không có nó, ED có thể tạo ra các kết quả giả. Trường trung bình động  $\delta\Delta_{a\sigma}(\omega)$  và  $\delta\Delta_{c\sigma}(\omega)$  biểu diễn độ lệch từ giới hạn không gian vô hạn chiều. Mô hình một tạp hiệu dụng tương ứng trở thành

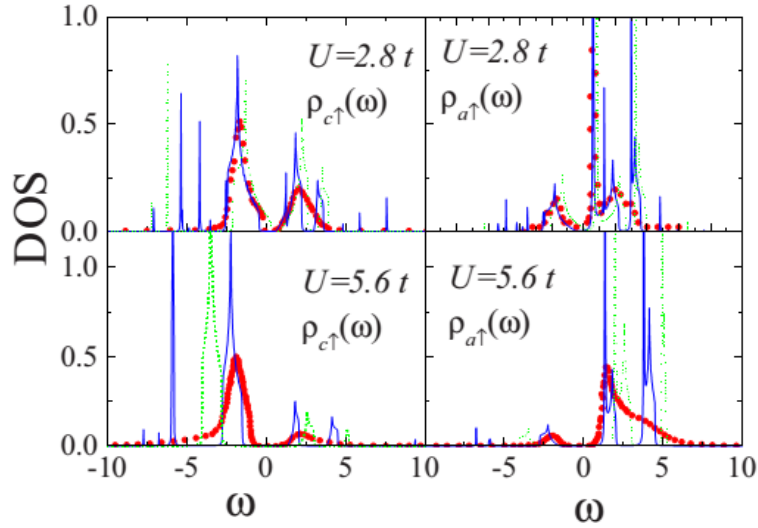
$$H^\alpha = H_{d \rightarrow \infty}^\alpha + \sum_{m,\sigma} V_{m\sigma}^\alpha f_{m\sigma}^\dagger \alpha_\sigma + H.c. + \sum_{m,\sigma} E_{m\sigma}^\alpha f_{m\sigma}^\dagger f_{m\sigma},$$

trong đó  $\alpha$  ký hiệu các electron a hoặc c.  $H_{d \rightarrow \infty}^a$  và  $H_{d \rightarrow \infty}^c$  đã được định nghĩa trong các biểu thức (4.17) và (4.24). Như trong ED thông thường, các thông số bề dẫn  $V_{m\sigma}^\alpha$  và  $E_{m\sigma}^\alpha$  được xác định bằng cách cực tiểu hóa khoảng cách

$$r = \frac{1}{M} \sum_{n=1}^M \omega_n^{-k} \left| \delta\Delta_{\alpha\sigma}(i\omega_n) - \sum_{m=1}^{n_s^\alpha} \frac{|V_{m\sigma}^\alpha|^2}{i\omega_n - E_{m\sigma}^\alpha} \right|^2. \quad (4.30)$$

trong đó  $\omega_n = (2n - 1)\pi T$  là tần số Matsubara, M là số tần số chặn trên, và k là thông số được đưa vào để làm khớp tần số thấp tốt hơn [175]. Đặc biệt, trong tính số, chúng tôi chọn  $k = 3$ . Chúng tôi giải số DMFT với ED cải biên để giải bài toán

một tạp cho mạng perovskite hai chiều (có nghĩa là mạng Lieb) khi lấp đầy một nửa ( $\mu = \frac{U}{2}$ ,  $\varepsilon_c = 0$ ).

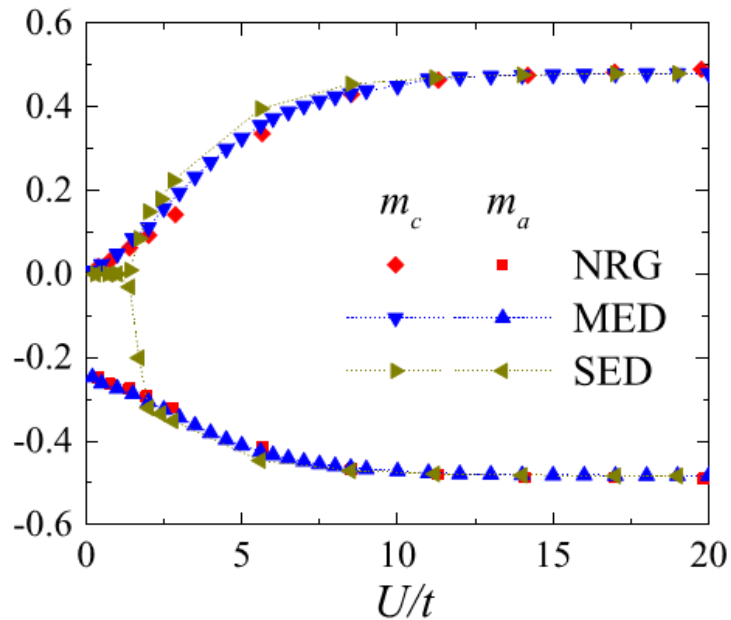


Hình 4.6. Mật độ trạng thái (DOS) của các electron của mạng con C và A khi lấp đầy một nửa ( $\mu = \frac{U}{2}$ ,  $\varepsilon_c = 0$ ) trong mạng Lieb hai chiều. Đường liền nét màu lam, đường chấm chấm màu lục, và hình tròn đặc màu đỏ là DOS tính bằng DMFT với ED cải biên ( $n_s^a = n_s^c = 3$ ), ED thông thường ( $n_s^a = n_s^c = 4$ ) và NRG. Các kết quả NRG được lấy từ tài liệu [156].

Để tính tích phân trong không gian động lượng, ta lấy mạng vuông  $128 \times 128$  điểm. Tần số Matsubara được gián đoạn hóa với nhiệt độ tương đương  $T = 0,01t$ . ED được thực hiện với số quỹ đạo bẻ dẫn  $n_s^a = n_s^c = 3$ . Chúng tôi cũng kiểm tra các kết quả với  $n_s^a = n_s^c = 4$ . Chúng tôi tính DOS  $\rho_{\alpha\sigma}(\omega) = \frac{\text{Im} G_{\alpha\sigma}(\omega - i\eta)}{\pi}$  với bề rộng hàm delta  $\eta = 0,01t$ . Trong hình 4.6, chúng tôi trình bày DOS thu được bằng DMFT với ED cải biên và so sánh chúng với DOS thu được bởi DMFT với NRG và bằng DMFT với ED thông thường [48,156,172]. ED thông thường được thực hiện với số quỹ đạo bẻ dẫn  $n_s^a = n_s^c = 5$ .

Cả ED thông thường và ED cải biên đều có cùng tổng số quỹ đạo liên kết với tạp c trong ED. Giống như ED, DOS thu được bằng ED cải biên cho thấy đỉnh gián đoạn. Tuy nhiên, cấu trúc các đỉnh chính phù hợp với các kết quả NRG như chỉ ra trên hình 4.6. Trái lại, DOS thu được bằng ED thông thường cho thấy chúng có tính chất khác nhau đáng kể. Ví dụ, đối với  $U = 2,8t$ , DOS thu được bằng ED thông thường cho thấy trạng thái kim loại, trong khi đó cả NRG và ED cải biên đều cho

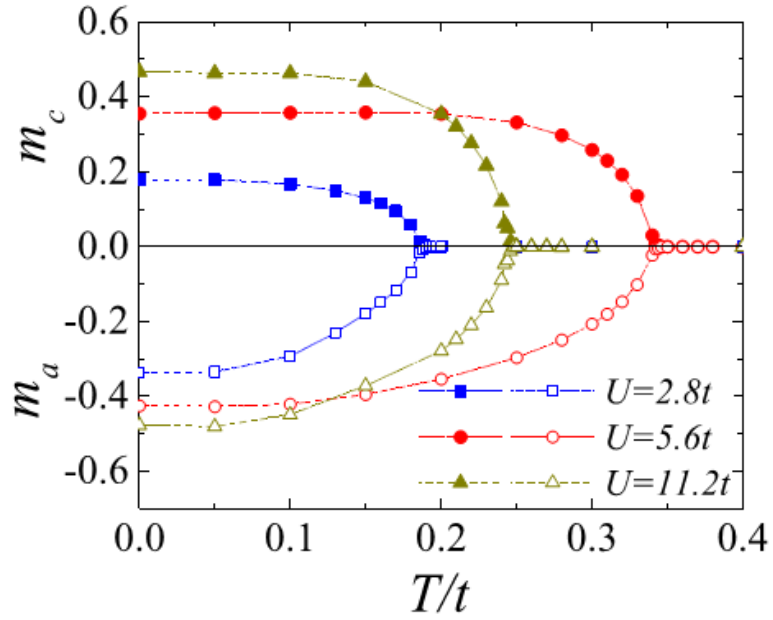
nghiệm là trạng thái điện môi. Đối với tương tác mạnh ( $U = 5,6t$ ), các đỉnh chính trong DOS thu được bằng ED thông thường dịch từ DOS thu được bằng NRG và ED cải biên. Các kết quả này cho thấy rằng quy trình cực tiểu hóa khoảng cách giữa trường trung bình động và bề nhiệt hữu hạn có thể tạo ra cho các dải năng lượng phẳng. ED cải biên xét tính chất dải năng lượng phẳng một cách rõ ràng qua số hạng  $(t^*)^2 G_{a\sigma}(\omega)$ . Trong hình 4.7, chúng tôi vẽ độ từ hóa mạng con phụ thuộc vào tương tác. Hình 4.7 cho thấy sự phù hợp giữa ED cải biên và các kết quả NRG cho toàn khoảng tương tác, trong khi đó ED thông thường chỉ cho độ từ hóa mạng con không tốt khi tương tác yếu. Thực ra, độ từ hóa tự phát của mạng con A không triệt tiêu khi tương tác  $U \rightarrow 0$  [156]. Nó chỉ triệt tiêu ở  $U = 0$ . Tính chất này cũng xảy ra với nghiệm chính xác trong giới hạn không gian vô hạn chiều. Do tính phẳng của dải năng lượng, bất cứ tương tác giá trị hữu hạn nào cũng sẽ trở nên chiếm ưu thế và nó dẫn hệ đến trạng thái trật tự từ. Chúng ta cũng có thể thấy rằng đối với tương tác yếu DOS cục bộ  $\rho_{a\sigma}(\omega)$  cho thấy một đỉnh rất hẹp do tính phẳng của dải năng lượng [156]. Kết quả là, quá trình cực tiểu hóa trong ED thông thường không giữ được tính phẳng của dải năng lượng và điều này tạo ra kết quả giả.



Hình 4.7. Sự phụ thuộc vào tương tác của độ từ hóa mạng con tính bằng DMFT với NRG, ED cải biên (MED) ( $n_s^a = n_s^c = 3$ ), và ED thông thường (SED) ( $n_s^a = n_s^c = 5$ ) khi lấp đầy một nửa ( $\mu = U/2$ ,  $\varepsilon_c = 0$ ) trong mạng Lieb hai chiều. Các kết quả NRG được lấy từ tài liệu [156].

Phương pháp NRG đối với bài toán một tạp hiệu dụng có thể mở rộng cho nhiệt độ hữu hạn [176]. Tuy nhiên, trong phương pháp NRG, nhiệt độ khó thay đổi liên tục. Trái lại, phương pháp ED cải biên làm việc tốt với DMFT ở nhiệt độ bất kỳ [176]. Nó cũng tính được hàm Green với các tần số thực và ảo. Các tính chất này là ưu điểm của phương pháp ED. Trong hình 4.8, chúng tôi vẽ sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa mạng con thu được bằng DMFT với ED cải biên. Độ từ hóa cả hai mạng con đều triệt tiêu ở cùng một nhiệt độ tới hạn. Điều này cho thấy rằng trật tự từ phải xảy ra đồng thời trong cả hai mạng con. Bởi vì ED cải biên làm việc tốt đối với mạng perovskite hai chiều, nó cũng có thể sử dụng để giải bài toán tạp hiệu dụng thay thế cho mạng perovskite ba chiều. ED cải biên có thể sử dụng cho DFT+DMFT đối với tính toán cấu trúc điện tử [49,50]. Gần đây, trạng thái sắt từ trong một số hợp chất perovskite  $ABO_3$  trên cơ sở oxit kim loại chuyển tiếp đã thu hút nhiều quan tâm nghiên cứu [164-169]. Đặc biệt, perovskite trên nền tảng osmate cho thấy có tính chất của dải năng lượng phẳng [169]. Hầu hết các nghiên cứu lí thuyết tập trung vào quỹ đạo điện tử d trong ion kim loại chuyển tiếp và bỏ qua sự lai hóa của chúng với quỹ đạo p của ion oxi xung quanh [168]. Sự lai hóa trong bát diện chung góc  $BO_6$  tạo ra mạng perovskite ba chiều. Chúng ta hy vọng rằng DFT+DMFT với ED cải biên có thể được áp dụng cho tính toán cấu trúc điện tử của các vật liệu này.





Hình 4.8. Sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ từ hóa mạng con tính toán bằng DMFT với ED cải biên ( $n_s^a = n_s^c = 3$ ) khi lấp đầy một nửa ( $\mu = \frac{U}{2}$ ,  $\varepsilon_c = 0$ ) trong mạng Lieb hai chiều.

### 4.3. Kết luận phần I

Ở phần này, chúng tôi đã xây dựng lý thuyết trường trung bình động cho hệ có cấu trúc dải năng lượng phẳng trong không gian vô hạn chiều và hữu hạn chiều. Trong không gian vô hạn chiều, chúng tôi thu được nghiệm chính xác cho mạng siêu perovskite. Đối với không gian hữu hạn chiều, chúng tôi đưa ra phương pháp chéo hóa chính xác cải biên để lưu giữ được đặc tính dải năng lượng phẳng trong quá trình giải số hệ phương trình của lý thuyết trường trung bình động. Phương pháp chéo hóa chính xác cải biên giải bài toán một tạp hiệu dụng trong lý thuyết trường trung bình động hiệu quả hơn nhiều so với phương pháp chéo hóa chính xác thông thường. So với phương pháp nhóm tái chuẩn hóa tính số, phương pháp chéo hóa chính xác cải biên có thể áp dụng cả nhiệt độ hữu hạn cũng như nhiệt độ không tuyệt đối. Ngoài ra bằng phương pháp chéo hóa chính xác cải biên, chúng ta đều có thể tính hàm Green theo tần số thực hay ảo. Đó là những ưu điểm của phương pháp chéo hóa chính xác cải biên trong giải bài toán một tạp hiệu dụng của lý thuyết trường trung bình động. Áp dụng lý thuyết trường trung bình động vừa xây dựng được, chúng tôi nghiên cứu tính chất từ tính trong mô hình Hubbard trên siêu mạng perovskite vô hạn chiều và mạng Lieb hai chiều.

Kết quả chúng tôi thu được chuyển pha sắt từ - feri từ do sự phân tách mức năng lượng và phân tách pha giữa sắt từ và feri từ. Cả pha sắt từ và feri từ đều xuất hiện do tính phẳng của dải năng lượng và sự lai hóa giữa các dải năng lượng phẳng suy biến vĩ mô và dải năng lượng tán sắc. Phát hiện của chúng tôi cho thấy pha sắt từ và feri từ bền vững trong miền không gian thông số rộng của mô hình Hubbard. Chúng tôi cũng đã nghiên cứu mô hình Hubbard trong mạng Lieb hai chiều và so sánh các kết quả thu được với các kết quả tính bằng DMFT+NRG. Kết quả cho thấy có phù hợp rất tốt giữa phương pháp ED cải biên và NRG.

## **Phần II. Các trạng thái điện môi tô pô trong mạng tinh thể Lieb khi có liên kết spin – quỹ đạo và từ trường**

### ***4.4. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu***

Ở phần I, chúng tôi đã xây dựng lý thuyết trường trung bình động cho mạng tinh thể có cấu trúc dải năng lượng phẳng. Nghiên cứu mô hình Hubbard trong mạng tinh thể Lieb bằng DMFT có thấy trạng thái cơ bản có tính chất feri từ, mà độ từ hóa trong hai mạng con khác nhau. Do vậy, vai trò của tương quan điện tử trong mạng tinh thể Lieb thể hiện qua độ từ hóa của các mạng con. Các độ từ hóa này có thể xem như là một từ trường hiệu dụng tác động lên điện tử. Cách tiếp cận này tương tự như trong gần đúng trường trung bình tĩnh. Trong phần này, để đơn giản cho nghiên cứu, chúng tôi xét tương quan điện tử trong mạng Lieb như các từ trường ngoài tác động hiệu dụng lên điện tử và coi các từ trường ngoài này như các thông số đầu vào. Cách tiếp cận này không tự hợp, và chỉ là bước đầu tiên trong nghiên cứu vai trò của tương quan điện tử trong hệ có cấu trúc dải năng lượng phẳng và tương hỗ của chúng với liên kết spin – quỹ đạo lên điều kiện tồn tại và tính chất của các điện môi tô pô.

Ảnh hưởng lẫn nhau giữa SOC và từ trường có thể làm xuất hiện các trạng thái kỳ lạ, như trạng thái điện môi bán tô pô, có nghĩa là trạng thái một thành phần spin của electron là điện môi tô pô, trong khi đó thành phần spin kia có tính tô pô tầm thường hoặc kim loại.

Điện môi tô pô có thể thấy trong một số hệ dải năng lượng phẳng, ví dụ trong mạng Lieb có cấu trúc vật liệu perovskite khi có SOC.

#### 4.5. Mô hình

Chúng tôi nghiên cứu tác dụng tương hỗ giữa SOC, và từ trường trong mô hình liên kết chặt, được xác định trong mạng Lieb. Hamiltonian của mô hình có dạng

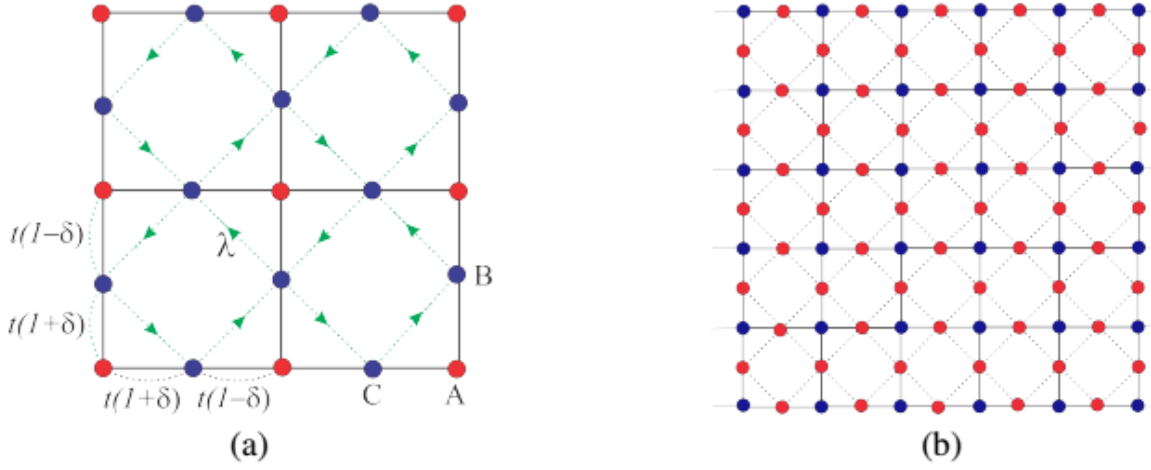
$$H = \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + i\lambda \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle, \sigma} v_{ij} c_{i\sigma}^\dagger \sigma c_{j\sigma} - \sum_i h_i c_{i\sigma}^\dagger \sigma c_{i\sigma}, \quad (4.31)$$

trong đó  $c_{i\sigma}^\dagger$  ( $c_{i\sigma}$ ) là toán tử sinh (hủy) electron có spin  $\sigma$  ở vị trí mạng  $i$ . Biến spin  $\sigma = \pm 1$  kí hiệu spin lên và spin xuống theo phương  $z$ .  $t_{ij}$  là thông số nhảy nút giữa vị trí  $i$  và  $j$ .  $\langle i, j \rangle$  và  $\langle\langle i, j \rangle\rangle$  kí hiệu vị trí lân cận gần nhất và lân cận gần thứ hai trong mạng tinh thể.  $\lambda$  là thông số SOC được xác định thông qua spin và bước nhảy phụ thuộc chiều giữa các vị trí lân cận gần nhất tiếp theo [42,43]. Dấu  $v_{ij} = \pm 1$  phụ thuộc vào chiều của nhảy nút và chúng tôi ấn định dấu của nó như hình 4.9 [42,43].  $h_i$  là cường độ từ trường, khi trật tự từ tầm xa có mặt, ví dụ như độ từ hóa tự phát xuất hiện do tương quan điện tử như nghiên cứu ở phần I, và trường trung bình thu được có thể đóng vai trò như từ trường [133-135,177,178]. Tuy nhiên, ở đây chúng tôi xét từ trường nói chung như các biến số ngoài.

Hằng số mạng được đặt  $a = 1$  cho đơn vị chiều dài. Nhảy nút giữa các vị trí lân cận gần nhất được điều khiển dọc theo trục  $x$  và  $y$ :

$$t_{ij} = -t(1 \pm \delta), \quad (4.32)$$

trong đó  $\delta$  là thông số điều biến. Điều biến nhảy nút cũng được chỉ ra trên hình 4.9 [179]. Tuy nhiên, trong nghiên cứu ở đây chúng tôi chỉ xét trường hợp  $\delta = 0$ , bởi vì ở phần I chúng tôi cũng chỉ xét trường hợp  $\delta = 0$ . Trường hợp điều biến  $\delta \neq 0$  được công bố trong bài báo. Chúng ta chỉ xét trường hợp khi từ trường áp dụng như nhau với các electron ở các vị trí B và C của mạng, có nghĩa là  $h_B = h_C$ . Sau đây  $t = 1$  được sử dụng như đơn vị năng lượng.



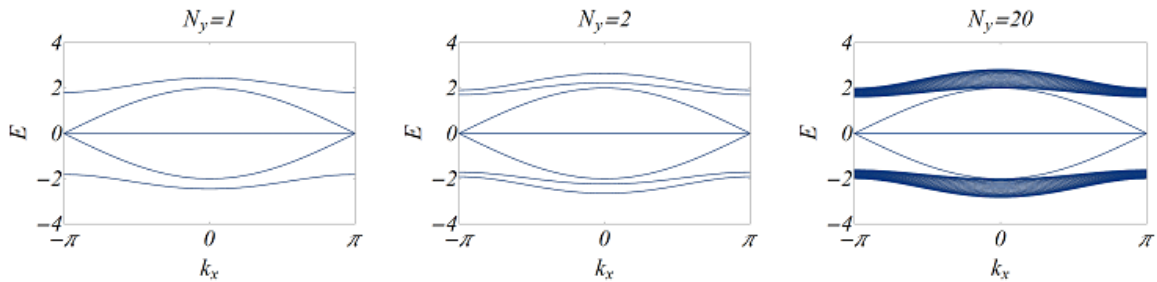
Hình 4.9. (a) Cấu trúc mạng Lieb với SOC và điều biến mạng. Các mũi tên cho thấy dấu  $v_{ij} = 1$  của SOC. Trong chiều ngược lại  $v_{ij} = -1$ . (b) Một băng nano với biên mở thẳng trong trục y và biên tuần hoàn theo trục x.

Các băng nano được xây dựng bằng cách cho phép biên tuần hoàn theo trục x và biên mở theo trục y. Biên mở của băng nano có ba loại: biên thẳng-thẳng, biên thẳng-zigzag và biên zigzag-zigzag [180]. Các mode có thể phụ thuộc vào loại biên mở [180]. Tuy nhiên, điều kiện biên không làm thay đổi đáng kể tính chất tô pô của trạng thái cơ bản [180]. Ở phần này, chúng tôi chỉ xét biên mở thẳng-thẳng theo trục y như được chỉ ra trong hình 4.9. Kết quả các biên mở khác có thể xem trong tài liệu. Bởi vì băng nano tuần hoàn theo trục x, chúng ta có thể thực hiện biến đổi Fourier của không gian mạng theo trục x

$$c_{j_y\sigma}(k_x) = \frac{1}{\sqrt{N_x}} \sum_{j_x} c_{j_x j_y \sigma} e^{ik_x R_{j_x}}, \quad (4.33)$$

trong đó  $j_x, j_y$  là chỉ số ô mạng j theo trục x và y,  $R_{j_x}$  là vị trí của ô j theo trục x, và  $N_x$  là số ô mạng theo trục x. Sau khi thực hiện biến đổi Fourier, Hamiltonian trong biểu thức (4.31) có thể chéo hóa chính xác cho một số hữu hạn  $N_y$  các ô mạng tinh thể theo trục y. Phổ năng lượng thu được do chéo hóa chính xác là dải năng lượng và mode biên của băng nano. Tô pô của trạng thái cơ bản được xác định bằng cách đếm số mode biên cắt mức năng lượng Fermi. Mode biên không khe chỉ xuất hiện khi mode biên cắt mức năng lượng Fermi và được kết nối với dải năng lượng dẫn và hóa trị. Số mode biên không khe tương ứng với topo của trạng thái cơ bản khỏi do nguyên lý tương ứng khối-biên [1,2,181]. Chú ý rằng các đặc điểm chính của cấu trúc dải băng nano không phụ thuộc vào  $N_y$ . Thực ra, số  $N_y$  chỉ ảnh hưởng đến số

mức năng lượng và khoảng cách giữa các mức năng lượng. Số mức năng lượng trên mỗi thành phần spin trong dải nano với biên thẳng-thẳng luôn bằng  $3N_y + 2$  không phụ thuộc vào các thông số mô hình. Trong số các mức năng lượng này có hai mức năng lượng do các biên tạo ra và mỗi  $N_y$  mức năng lượng tạo ra dải năng lượng tán sắc trên và dưới và dải năng lượng phẳng. Ví dụ về cấu trúc dải năng lượng được chỉ ra trên hình 4.10, trong đó các mức năng lượng đối với các giá trị khác nhau của  $N_y$  được trình bày. Trong hình 4.10, dải năng lượng phẳng suy biến và độ suy biến của nó chính xác bằng  $N_y$ . Khi  $N_y$  lớn, khoảng cách giữa các mức năng lượng trở nên nhỏ và chúng ta có thể dễ dàng phân biệt được dải năng lượng khỏi với mode biên. Trong kết quả tính số, chúng tôi sử dụng  $N_y = 20$  bởi vì với giá trị này của  $N_y$ , mode biên có thể phân biệt được một cách rõ ràng, như thấy trên hình 4.10.

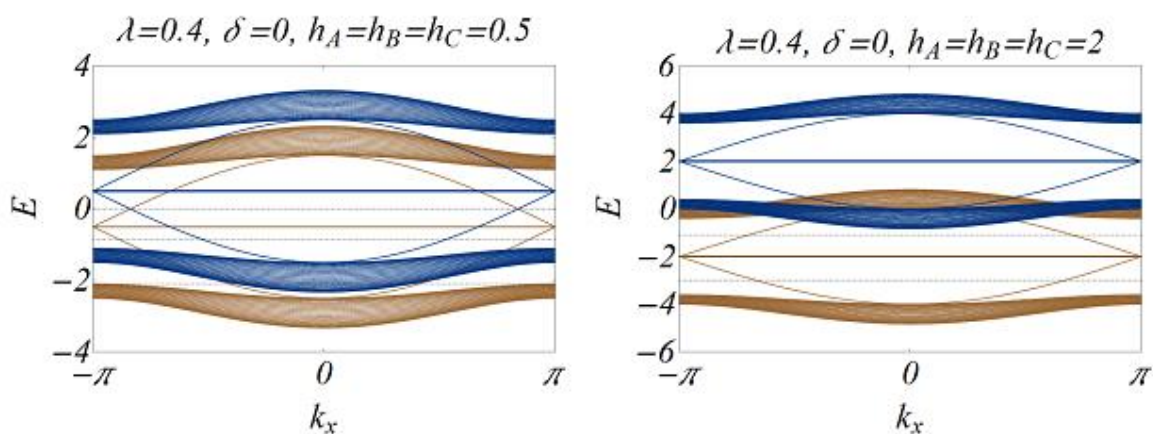


Hình 4.10. Tiến hóa của cấu trúc dải năng lượng với  $N_y$  tăng. Thông số của mô hình  $\lambda = 0,4$ ;  $\delta = 0$ ;  $h_A = h_B = h_C = 0$  được lựa chọn như một ví dụ.

#### 4.6. Kết quả tính số

Khi không có SOC và từ trường, mô hình liên kết chặt trong mạng Lieb cho dải năng lượng phẳng giữa hai dải tán sắc. Ba dải năng lượng này cắt tuyến tính ở các điểm  $M = (\pm\pi, \pm\pi)$  của vùng Brillouin [41,181-185]. SOC mạng tạo ra khe năng lượng trong cấu trúc dải năng lượng và cô lập dải năng lượng phẳng khỏi hai dải năng lượng tán sắc [185]. Kết quả là, khi lấp đầy một nửa, hệ được mô tả bằng dải năng lượng phẳng, và khi lấp đầy một phần ba hoặc hai phần ba, trạng thái cơ bản là điện môi [185]. Khi lấp đầy một phần ba hoặc hai phần ba, SOC tạo ra trạng thái tô pô không tầm thường. Khi từ trường có mặt, nó tác động tương hỗ lẫn nhau với SOC và kết quả là các trạng thái kỳ lạ khác nhau có thể xuất hiện.

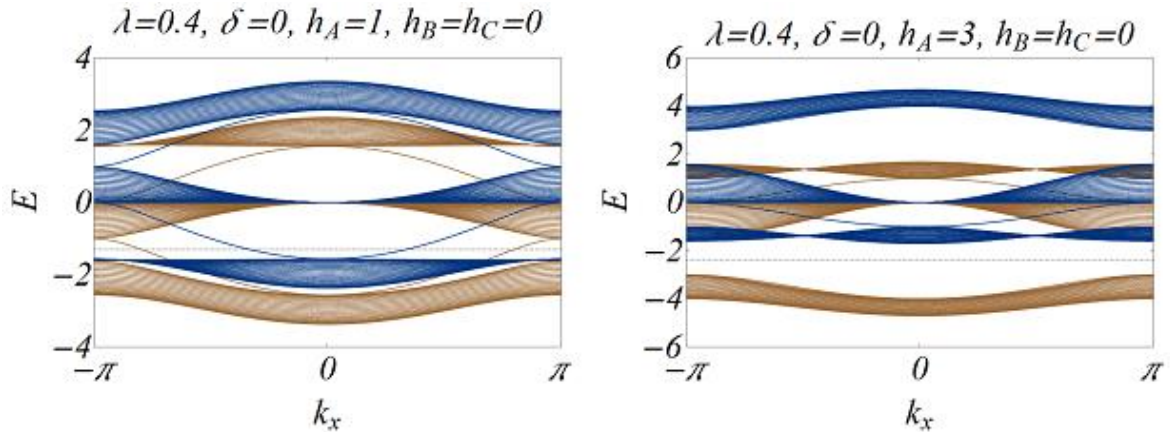
Do cường độ và hướng của từ trường có thể thay đổi ở các vị trí mạng A, B, và C, nên chúng tôi sẽ xem xét riêng biệt các trường hợp khác nhau của từ trường.



Hình 4.11. Cấu trúc dải năng lượng với các từ trường khác nhau và SOC ấn định. Màu nâu (xanh) biểu diễn cấu trúc dải năng lượng đối với thành phần spin lên (xuống). Đường chấm chấm cho thấy vị trí của thế hóa khi lấp đầy một nửa, một phần ba và một phần sáu.

Trước hết, chúng ta xét từ trường đều  $h_A = h_B = h_C \equiv h$ . Trong trường hợp này, từ trường dịch chuyển dải năng lượng của các spin ngược nhau theo các hướng ngược chiều nhau như chỉ ra trên hình 4.11. Thực ra, dải năng lượng phẳng và tán sắc của mỗi thành phần spin dịch chuyển chính xác một lượng  $\pm h$ . Đây thuần túy là hiệu ứng Zeeman. Kết quả dẫn đến khe năng lượng xuất hiện khi lấp đầy một nửa, một phần ba (hoặc hai phần ba), một phần sáu (hoặc năm phần sáu). Đối với từ trường yếu, trạng thái cơ bản khi lấp đầy một nửa là sắt từ. Có một mode biên trên mỗi spin cắt mức năng lượng Fermi hai lần. Bởi vì băng nano đang xét có hai cạnh biên trên trục y, do đó số mode biên không khe cho mỗi biên và spin bằng 1. Dựa trên nguyên lý tương ứng khối-biên, điều này phản ánh rằng trạng thái cách điện sắt từ có tính chất tô pô không tầm thường. Các mode biên là đặc tính đặc biệt của chất điện môi tô pô. Do ở biên bất biến tô pô thay đổi nên mode biên mang tính dẫn như điện tử Dirac, có nghĩa là hệ thức tán sắc của mode biên ở lân cận mức năng lượng Fermi tỷ lệ tuyến tính với động lượng. Sự tồn tại của mode biên không khe như vậy phản ánh tính chất tô pô không tầm thường của hệ. Đối với chất điện môi tô pô tầm thường, mode biên không khe xuất hiện. Do vậy mode biên không khe có thể sử dụng để xác định hệ có phải là tô pô hay không. Ngoài ra mode biên không khe còn có đặc tính không bị tiêu tán năng lượng khi chuyển động. Do vậy mode biên không khe có kỳ vọng ứng dụng cao trong chế tạo linh kiện điện tử thế hệ mới. Khi từ trường tăng, dải năng lượng trên cùng và dưới cùng của các spin ngược nhau sẽ giao

nhau (xem hình 4.11) và kết quả là khi lấp đầy một nửa trạng thái cơ bản là kim loại. Khi từ trường tăng tiếp, các dải năng lượng có spin lên hoàn toàn bị lấp đầy, trong khi đó các dải năng lượng có spin xuống hoàn toàn trống khi lấp đầy một nửa. Điều này dẫn đến trạng thái sắt từ bão hòa hoàn toàn. Trạng thái cơ bản trong trường hợp này là điện môi. Đối với từ trường yếu, khi lấp đầy một phần ba (hoặc hai phần ba), trạng thái cơ bản là thuận từ. Nó cũng có tính chất tô pô vì có mode biên trên mỗi spin cắt mức Fermi hai lần.



Hình 4.12. Cấu trúc dải năng lượng với các từ trường khác nhau  $h_A \neq 0$ ,  $h_B = h_C = 0$  với SOC ấn định. Màu nâu (xanh) biểu diễn cấu trúc dải năng lượng đối với thành phần spin lên (xuống). Đường chấm chấm cho thấy vị trí của thế hóa học khi lấp đầy một phần ba (bên trái) và lấp đầy một phần sáu (bên phải).

Tuy nhiên, khi từ trường tăng, trạng thái cơ bản khi lấp đầy một nửa trở thành sắt từ bão hòa hoàn toàn, như được chỉ ra trên hình 4.11. Nó vẫn có tính chất tô pô không tầm thường do hai lần cắt mức năng lượng Fermi của mode biên. Khi lấp đầy một phần sáu (hoặc năm phần sáu), trạng thái cơ bản là sắt từ bão hòa hoàn toàn đối với từ trường mạnh. Nó vẫn có tính tô pô không tầm thường do sự có mặt của mode biên mà cắt mức năng lượng Fermi hai lần. Tuy nhiên, khi từ trường yếu, và lấp đầy một phần sáu (hoặc lớn hơn một phần sáu một chút), trạng thái cơ bản là nửa kim loại bởi vì thành phần spin lên là điện môi trong khi thành phần spin xuống là kim loại. Thành phần spin lên là tô pô do mode biên cắt mức năng lượng Fermi hai lần.

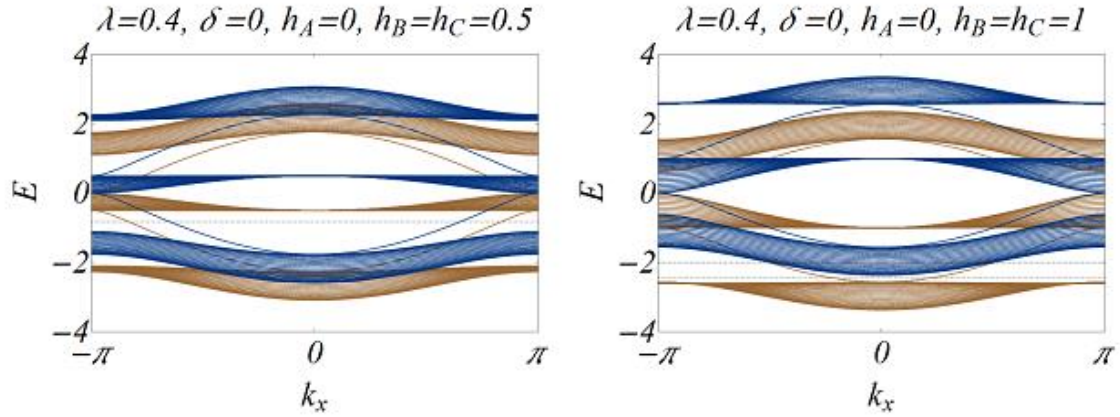
Khi từ trường không đều, dải năng lượng phẳng không tồn tại nữa. Một ví dụ của cấu trúc dải năng lượng được chỉ ra trên hình 4.12. Từ trường tạo ra hai hiệu ứng. Thứ nhất, nó mở bề rộng của dải năng lượng phẳng, thứ hai, nó dịch chuyển

dải năng lượng của spin ngược nhau theo các chiều ngược nhau giống như trong hiệu ứng Zeeman. Phụ thuộc vào thông số của từ trường, khi lấp đầy một nửa, trạng thái cơ bản có thể là kim loại hoặc điện môi, ngoại trừ khi từ trường rất mạnh, khi nó phân cực hoàn toàn trạng thái cơ bản. Bởi vì trạng thái kim loại không thể hiện tính chất tô pô, chúng tôi không xét các trường hợp này. Tuy nhiên, khe năng lượng cũng có thể mở ra ở mật độ số hạt khác. Trong trường hợp  $h_A \neq 0$ ,  $h_B = h_C = 0$ , có nghĩa là từ trường chỉ áp dụng cho các electron ở vị trí góc, nơi mật độ số hạt nhất định, trạng thái cơ bản có thể trở thành điện môi, miễn là từ trường không đủ mạnh. Các ví dụ được chỉ ra trên hình 4.12. Khi từ trường yếu, một khe năng lượng mở ra khi lấp đầy một phần ba (hoặc hai phần ba). Có một mode biên trên mỗi spin cắt mức năng lượng Fermi hai lần. Do đó, trạng thái cơ bản là điện môi tô pô. Mặc dù, từ trường có mặt, trạng thái cơ bản vẫn là thuận từ. Với từ trường mạnh, trạng thái cơ bản trở thành điện môi khi lấp đầy một phần sáu (hoặc năm phần sáu) như được chỉ ra trên hình 4.12. Tuy nhiên, trạng thái cơ bản này là sắt từ và tô pô tầm thường do không có mode biên cắt mức năng lượng Fermi. Trong trạng thái sắt từ này, dải năng lượng thấp nhất của thành phần spin lên bị lấp đầy hoàn toàn.

Trong trường hợp ngược lại  $h_A = 0$  và  $h_B = h_C \neq 0$ , dải năng lượng phẳng cũng được mở rộng do sự giao thoa giữa từ trường và SOC. Đối với từ trường yếu, trạng thái cơ bản là điện môi thuận từ khi lấp đầy một phần ba (hoặc hai phần ba) như được chỉ ra trên hình 4.13. Nó cũng có tính chất tô pô không tầm thường, bởi vì có một mode biên trên mỗi spin cắt mức Fermi hai lần. Khi từ trường tăng tiếp, trạng thái cơ bản trở thành điện môi ở mật độ một phần sáu (hoặc năm phần sáu), tương tự trường hợp trước  $h_A \neq 0$ ,  $h_B = h_C = 0$ . Ngược lại với trường hợp trước,  $h_A \neq 0$ ,  $h_B = h_C = 0$ , có một mode biên cắt mức năng lượng Fermi hai lần. Tuy nhiên, trong trường hợp này, chỉ có thành phần spin lên thể hiện mode biên cắt mức năng lượng Fermi. Điều này chỉ ra rằng thành phần spin lên có tính chất tô pô không tầm thường, trong khi các dải năng lượng của thành phần spin xuống hoàn toàn trống. Tuy nhiên, ở mật độ lớn hơn một phần sáu một chút, dải năng lượng có thành phần spin xuống bị lấp đầy một phần. Kết quả là, thành phần spin lên vẫn là điện môi tô pô, trong khi đó thành phần spin xuống là kim loại. Điều này phản ánh trạng thái cơ bản là nửa kim loại, nửa điện môi tô pô và sắt từ, tương tự trường hợp

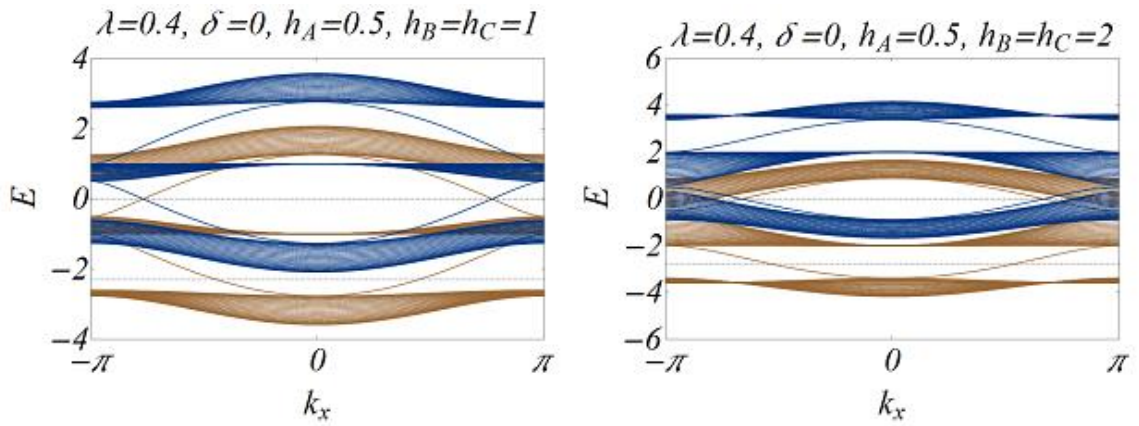


trước đây khi từ trường đều và yếu. Trạng thái kỳ lạ này là do tác dụng tương hỗ giữa SOC, từ trường và cấu trúc mạng.



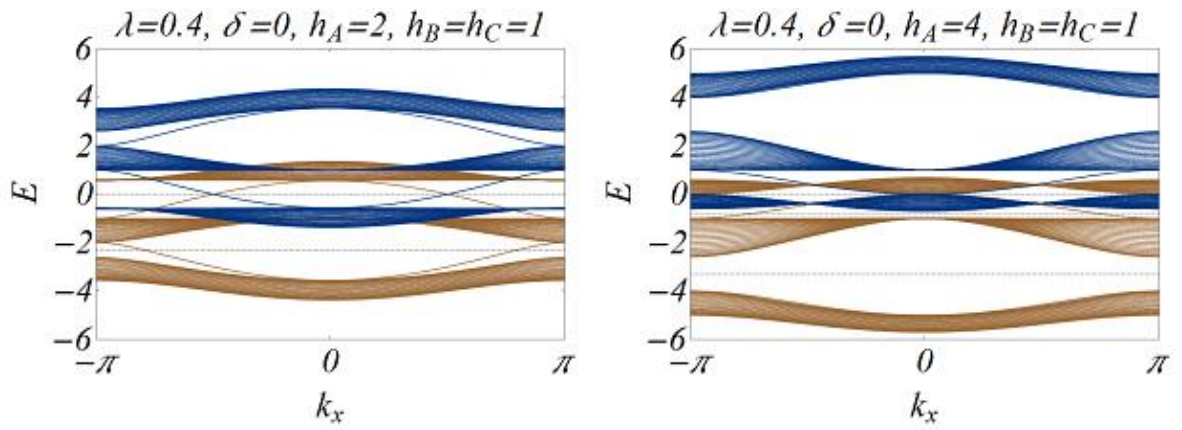
Hình 4.13. Cấu trúc dải năng lượng với các từ trường khác nhau  $h_A = 0$ ,  $h_B = h_C \neq 0$  với SOC ấn định. Màu nâu (xanh) thể hiện cấu trúc dải năng lượng đối với thành phần spin lên (xuống). Đường chấm chấm cho thấy vị trí của thể hóa ở độ lấp đầy một phần ba (bên trái) và ở mật độ một phần sáu và lớn hơn một phần sáu một chút (bên phải).

Tiếp theo, chúng ta xét trường hợp  $0 < h_A < h_B = h_C$ . Trong hình 4.14, chúng tôi trình bày cấu trúc dải năng lượng khi  $h_A$  cố định và  $h_B = h_C > h_A$ . Đối với từ trường yếu  $h_B = h_C > h_A$ , các khe năng lượng mở ra ở mật  $1/2$  và một phần sáu (hoặc năm phần sáu). Ở mật độ  $1/2$ , có một mode biên trên mỗi spin cắt mức năng lượng Fermi hai lần. Điều này cho thấy trạng thái cơ bản là điện môi tô pô. Nó cũng là trạng thái sắt từ. Ở mật độ một phần sáu, thành phần spin xuống hoàn toàn trống, trong khi đó dải năng lượng thấp nhất của thành phần spin lên được lấp đầy hoàn toàn. Trong trường hợp này, thành phần spin lên là điện môi tô pô. Khi dải năng lượng thấp nhất của thành phần spin xuống được lấp đầy một phần, thành phần spin xuống trở thành kim loại, trong khi đó thành phần spin lên vẫn là điện môi tô pô. Trường hợp này tương tự như trường hợp trước đây  $h_A \neq 0$ ,  $h_B = h_C = 0$ . Khi từ trường  $h_B = h_C$  tăng, khe năng lượng ở mật độ  $1/2$  đóng như được chỉ ra trên hình 4.14. Trong trường hợp này, trạng thái cơ bản trở thành kim loại. Tuy nhiên, ở mật độ một phần sáu, thành phần spin lên vẫn là điện môi tô pô, trong khi đó, thành phần spin xuống hoàn toàn trống.



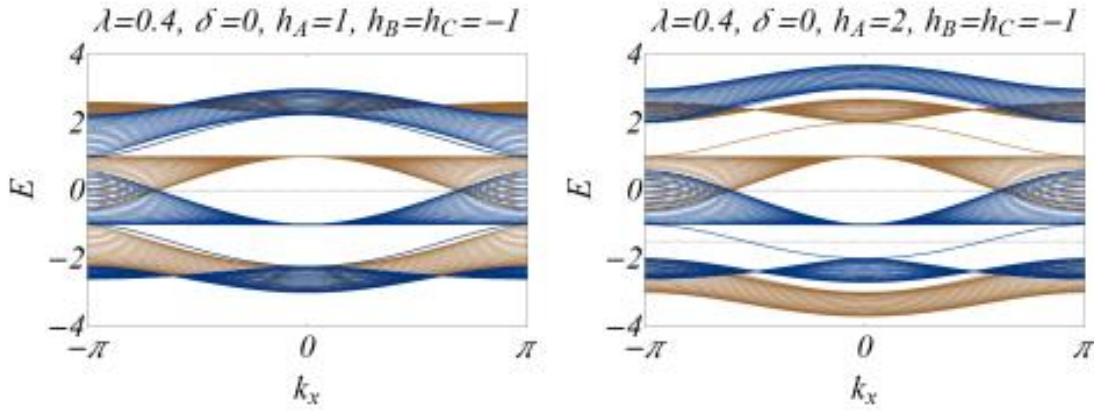
Hình 4.14. Cấu trúc dải năng lượng với các từ trường khác nhau  $0 < h_A < h_B = h_C$  với SOC ấn định. Màu nâu (xanh) biểu diễn cấu trúc dải năng lượng đối với thành phần spin lên (xuống). Đường chấm chấm cho thấy vị trí của thể hóa ở mật độ  $1/2$  và  $1/6$ .

Trong trường hợp ngược lại  $0 < h_B = h_C < h_A$ , trạng thái cơ bản có tính chất tương tự như trường hợp trước  $0 < h_A < h_B = h_C$ . Trong hình 4.15, chúng tôi trình bày cấu trúc dải năng lượng trong trường hợp này. Đối với các giá trị nhỏ của từ trường  $h_A$  nhưng  $h_A > h_B = h_C$ , khe năng lượng mở ra ở mật  $1/2$  và  $1/6$  (hoặc  $5/6$ ). Ở mật độ  $1/2$ , trạng thái cơ bản là điện môi tô pô thuận từ, trong khi đó ở mật độ  $1/5$  (hoặc  $5/6$ ), trạng thái cơ bản là điện môi tô pô sắt từ bão hòa. Tuy nhiên, khi từ trường  $h_A$  tăng, một khe năng lượng bổ sung mở ra ở mật độ  $1/3$  (hoặc  $2/3$ ) như khe năng lượng ở mật độ  $1/2$  có xu hướng đóng lại. Cả ở mật độ  $1/3$  và  $1/6$ , trạng thái cơ bản là sắt từ bão hòa. Tuy nhiên, nó là tô pô ở mật độ  $1/3$  và tô pô tầm thường ở mật độ  $1/6$  do mode biên như được chỉ ra trên hình 4.15. Đối với pha tạp nhẹ từ mật độ  $1/3$ , dải năng lượng thấp nhất của thành phần spin xuống bị lấp đầy một phần mà dẫn đến trạng thái cơ bản là nửa kim loại và nửa tô pô.



Hình 4.15. Cấu trúc dải năng lượng với các từ trường khác nhau  $0 < h_B = h_C < h_A$  với SOC ấn định. Màu nâu (xanh) thể hiện cấu trúc dải năng lượng đối với thành phần spin lên (xuống). Đường chấm chấm cho thấy vị trí của thế hóa ở mật độ  $1/2$  và  $1/6$ .

Khi từ trường có chiều ngược lại ở vị trí A và B, C, có nghĩa là  $h_B = h_C < 0 < h_A$ , hoặc  $h_A < 0 < h_B = h_C$ , khe năng lượng ở mật  $1/2$  đóng lại như được chỉ ra trên hình 4.16. Thực ra, trường hợp  $h_A < 0 < h_B = h_C$  tương đương với trường hợp  $-h_A > 0 > -h_B = -h_C$ , bởi vì hướng từ trường lên và xuống là tương đương nhau. Khi  $h_A$  lớn hơn một giá trị nhất định, một khe năng lượng ở mật độ  $1/3$  (hoặc  $2/3$ ) mở ra. Mặc dù có từ trường, trạng thái cơ bản ở mật độ  $1/3$  (hoặc  $2/3$ ) là thuận từ. Tuy nhiên, trong hình 4.16, chúng ta có thể thấy chỉ có một mode biên của thành phần spin xuống cắt mức Fermi hai lần, trong khi đó mode biên của thành phần spin lên hoàn toàn dưới mức năng lượng Fermi. Điều này cho thấy rằng thành phần spin xuống là điện môi tô pô, trong khi đó thành phần spin lên là điện môi dải. Mặc dù trạng thái cơ bản là thuận từ, đối xứng giữa các thành phần spin lên và spin xuống bị phá vỡ. Trạng thái cơ bản có tính chất nửa tô pô. Đặc biệt, trong trạng thái nửa tô pô cả hai thành phần spin đều là điện môi.



Hình 4.16. Cấu trúc dải năng lượng với các từ trường khác nhau  $h_B = h_C < 0 < h_A$  với SOC ấn định. Màu nâu (xanh) thể hiện cấu trúc dải năng lượng đối với thành phần spin lên (xuống). Đường chấm chấm cho thấy vị trí của thể hóa ở mật độ 1/2 và 1/3.

#### 4.7. Kết luận phần II

Trong phần II, chúng tôi nghiên cứu tác động của tương quan điện tử, thể hiện gián tiếp qua từ trường ngoài, lên điều kiện tồn tại và tính chất của các pha tô pô điện môi trong mạng tinh thể Lieb.

Tùy theo thông số của mô hình, các trạng thái điện môi tô pô kỳ lạ có thể xuất hiện. Đó là trạng thái mà tính chất tô pô của từng thành phần spin không đối xứng nhau, có nghĩa là một thành phần spin có tính tô pô không tầm thường, trong khi thành phần spin kia lại có tính tô pô tầm thường. Chúng tôi cũng tìm thấy trạng thái nửa kim loại tô pô, có nghĩa là một thành phần spin là kim loại, còn thành phần spin kia là điện môi tô pô.

Tuy vậy, chúng tôi vẫn chưa nghiên cứu được hiệu ứng trực tiếp của tương quan điện tử lên điều kiện tồn tại và tính chất của các pha điện môi tô pô trong mạng tinh thể có cấu trúc dải năng lượng phẳng. Vấn đề chúng tôi sẽ tiếp tục nghiên cứu.

## KẾT LUẬN

Trong luận án này chúng tôi nghiên cứu về điều kiện tồn tại và các tính chất chuyển pha tô pô do tương quan điện tử trong các hệ mô hình lý thuyết khác nhau và phương pháp lý thuyết trường trung bình động được sử dụng chủ yếu trong luận án này. Kết quả chính thu được cụ thể như sau.

Chúng tôi đã nghiên cứu hiệu ứng tương quan điện tử trong điện môi tô pô Chern bằng phương pháp lý thuyết trường trung bình động. Điện môi tô pô Chern được mô tả bởi mô hình Haldane, còn tương quan điện tử xuất hiện do tương tác Coulomb tầm ngắn giữa fermion linh động và fermion định xứ được đưa vào trong mô hình. Kết quả nghiên cứu cho thấy tính chất chuyển pha phụ thuộc vào đối xứng nghịch đảo không gian. Khi mạng tinh thể bảo toàn đối xứng nghịch đảo không gian, tương quan điện tử chuyển hệ từ điện môi Chern tô pô sang kim loại khe giả và sau đó sang điện môi Mott tô pô tầm thường. Khi đối xứng nghịch đảo không gian bị phá vỡ, tương quan điện tử tạo ra trật tự điện tích tầm xa và mở ra khe ở năng lượng Fermi. Chúng đưa hệ từ trạng thái trật tự điện tích tô pô sang trạng thái trật tự điện tích tô pô tầm thường. Bất biến tô pô và trật tự điện tích tầm xa có thể đồng tồn tại do ảnh hưởng của tương quan điện tử trong điện môi Chern.

Chúng tôi đã nghiên cứu về điện môi tô pô từ tính trong mô hình trao đổi kép với liên kết spin – quỹ đạo bằng lý thuyết trường trung bình động. Kết quả nghiên cứu cho thấy trạng thái tô pô xuất hiện là kết quả của sự tương hỗ qua lại giữa liên kết spin – quỹ đạo và trao đổi spin. Các trạng thái điện môi chỉ tồn tại khi mật độ electron bằng 1, 1/4 và 3/4. Trong trường hợp lấp đầy một nửa, điện môi tô pô phản sắt từ xảy ra trong vùng giữa điện môi tô pô thuận từ và điện môi tô pô phản sắt từ tầm thường. Nó thể hiện hiệu ứng Hall spin lượng tử. Trong trường hợp lấp đầy một phần tư (hoặc ba phần tư), điện môi tô pô sắt từ cho thấy hiệu ứng Hall dị thường lượng tử chỉ xảy ra trong miền trao đổi spin đủ lớn.

Để nghiên cứu hiệu ứng tương quan điện tử trong các hệ có dải năng lượng phẳng, chúng tôi đã xây dựng lý thuyết trường trung bình động cho hệ có cấu trúc dải năng lượng phẳng trong không gian vô hạn chiều và hữu hạn chiều. Đối với không gian vô hạn chiều, chúng tôi thu được nghiệm chính xác cho siêu mạng perovskite. Trong trường hợp không gian hữu hạn chiều, chúng tôi đưa ra phương pháp chéo hóa chính xác cải biên giải bài toán một tạp hiệu dụng trong lý thuyết

trường trung bình động hiệu quả hơn so với phương pháp chéo hóa chính xác thông thường. Chúng tôi cũng đã nghiên cứu mô hình Hubbard trong mạng Lieb hai chiều và so sánh các kết quả thu được với kết quả tính bằng lý thuyết trường trung bình động và nhóm tái chuẩn hóa tính số. Kết quả cho thấy có sự phù hợp rất tốt giữa phương pháp chéo hóa chính xác cải biên và nhóm tái chuẩn hóa tính số. Sau đó, chúng tôi đã nghiên cứu tác động tương quan điện tử, thể hiện gián tiếp thông qua từ trường ngoài, lên điều kiện tồn tại và tính chất của các pha tô pô điện môi trong mạng tinh thể Lieb. Khi thay đổi các thông số của mô hình, các trạng thái điện môi tô pô kỳ lạ có thể xuất hiện. Đó là trạng thái mà tính chất tô pô của từng thành phần spin không đối xứng nhau, có nghĩa là một thành phần spin có tính tô pô không tầm thường, trong khi thành phần spin kia lại có tính tô pô tầm thường. Chúng tôi cũng tìm thấy trạng thái nửa kim loại tô pô, có nghĩa là một thành phần spin là kim loại, còn thành phần spin kia là điện môi tô pô.

Tuy vậy, chúng tôi vẫn chưa nghiên cứu được hiệu ứng trực tiếp của tương quan điện tử lên điều kiện tồn tại và tính chất của các pha điện môi tô pô trong mạng tinh thể có cấu trúc dải năng lượng phẳng. Hướng nghiên cứu này chúng tôi sẽ tiếp tục theo đuổi.

## DANH MỤC CÔNG TRÌNH CỦA TÁC GIẢ

### I. Các công bố có kết quả sử dụng trong luận án

#### Tạp chí quốc tế:

1. Hong-Son Nguyen, Minh-Tien Tran, *Correlation-driven phase transition in a Chern insulator*, Physical Review B, 2013, 88, 165132.
2. Minh-Tien Tran, Hong-Son Nguyen, and Duc-Anh Le, *Emergence of magnetic topological states in topological insulators doped with magnetic impurities*, Physical Review B, 2016, 93, 155160.
3. Hong-Son Nguyen, Minh-Tien Tran, *Dynamical mean-field for flat-band ferromagnetism*, Physical Review B, 2016, 94, 125106.

#### Tạp chí quốc gia

1. Nguyen Duong Bo, Nguyen Hong Son, Tran Minh Tien, *Exotic states emerged by spin-orbit coupling, lattice modulation and magnetic field in Lieb nano-ribbons*, Communication in Physics, 2019, Vol. 29, No. 3SI, pp 293-304.

#### Các kết quả công bố ở trên cũng được báo cáo tại các hội nghị quốc gia

1. Hong-Son Nguyen, Duc-Anh Le, and Minh-Tien Tran, *Magnetic and topological transitions in an insulator with doped magnetic impurities*, The 41<sup>st</sup> Vietnam Conference on Theoretical Physics (VCTP-41), Nha Trang, 1-4 August, 2016.
2. Nguyen Hong-Son and Tran Minh-Tien, *Nonlocal correlations in a correlated Chern Insulator*, The 40<sup>th</sup> Vietnam Conference on Theoretical Physics (VCTP-40), Da Lat, 27-29 July, 2015.
3. Hong-Son Nguyen and Minh-Tien Tran, *Edge states in a correlated Chern insulator*, The 39<sup>th</sup> Vietnam Conference on Theoretical Physics (VCTP-39), Buon Ma Thuot, 28-31 July, 2014.

## **II. Các công bố có kết quả không sử dụng trong luận án**

1. Duong-Bo Nguyen, Hong-Son Nguyen and Minh-Tien Tran, *Competition between the soft gap the molecular Kondo singlets in flat-band lattices*, Communications in Physics, 2018, 28, 361-367.
2. Ta Van Binh, Nguyen Duong Bo, Nguyen Hong Son, and Tran Minh Tien, *Interplay between the spin-orbit coupling and lattice modulation on the Lieb lattice*, Journal of Physics: Conference Series, 2019, 1274, 012001.



## TÀI LIỆU THAM KHẢO

1. M. Z. Hasan & C. L. Kane, *Colloquium: Topological Insulators*, *Reviews of Modern Physics*, 2010, 82, 3045-3067.
2. X. L. Qi & S. C. Zhang, *Topological Insulators and Superconductors*, *Reviews of Modern Physics*, 2011, 83, 1057-1110.
3. Jing Wang and Shou Cheng Zhang, *Topological states of condensed matter*, *Nature Materials*, 2017, 16, 1062-1067.
4. B. Andrei Bernevig and Taylor L. Hughes, *Topological Insulators and Topological Superconductors*, STU - Student edition ed., Princeton University Press, Princeton; Oxford, 2013.
5. Dario Bercioux, Jérôme Cayssol, Maia G. Vergniory, M. Reyes Calvo, *Topological Matter: Lectures from the Topological Matter School 2017*, Springer Series in Solid-State Science 190, 2018.
6. L. D. Landau L. P. Pitaevskii and E. M. Lifschitz, *Electrodynamics of Continuous Media*, 2<sup>nd</sup> Ed., Butterworth-Heinemann, 1984.
7. K. v. Klitzing, G. Dorda & M. Pepper, *New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant based on Quantized Hall Resistance*. *Physical Review Letters*, 1980, 45(6), 494 - 497.
8. D. J. Thouless, M. Kohmoto, M. P. Nightingale and M. den Nijs, *Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential*, *Physical Review Letters*, 1982, 49(6), 405 - 408.
9. Mahito Kohmoto, *Topological Invariant and the Quantization of the Hall Conductance*, *Annals of Physics*, 1985, 160(2), 343 -354.
10. Mikio Nakahara, *Geometry, Topology and Physics*, 2nd edition, Institute of Physics Publishing, 2003.
11. John W. Milnor and James D. Stasheff, *Characteristic classes*, Princeton University Press, 1974.
12. B. Andrei Bernevig, Taylor L. Hughes, and Shou Cheng Zhang, *Quantum Spin Hall Effect and Topological Phase Transition in HgTe Quantum Wells*, *Science*, 2006, 314(5806), 1757-1761.
13. Markus König, Steffen Wiedmann, Christoph Brüne, Andreas Roth, Hartmut Buhmann, Laurens W Molenkamp, Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng

- Zhang, *Quantum Spin Hall Insulator State in HgTe Quantum Wells*, Science, 2007, 318(5851), 766 - 770.
14. Andreas Roth, Christoph Brüne, Hartmut Buhmann, Laurens W. Molenkamp, Joseph Maciejko, Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, *Nonlocal transport in the quantum spin Hall state*, Science, 2009, 325(5938), 294 - 297.
  15. B. I. Halperin, *Quantized Hall conductance, current-carrying edge states, and the existence of extended states in a two-dimensional disordered potential*, Physical Review B, 1982, 25, 2185.
  16. C. L. Kane & E. J. Mele,  *$Z_2$  topological order and the quantum spin Hall effect*, Physical Review Letters, 2005, 95, 146802.
  17. C.L. Kane & E. J. Mele, *Quantum spin Hall effect in graphene*, Physical Review Letters, 2005, 95, 226801.
  18. Liang Fu, C. L. Kane & E. J. Mele, *Topological insulators in three dimensions*. Physical Review Letters, 2007, 98, 106803.
  19. Zhong Wang, Xiao-Liang Qi, and Shou-Cheng Zhang, *Topological Order Parameters for Interacting Topological Insulators*, Physical Review Letters, 2010, 105, 256803.
  20. Zhong Wang, Xiao-Liang Qi, Shou-Cheng Zhang, *Topological invariants for interacting topological insulators with inversion symmetry*, Physical Review B, 2012, 85(16), 165126.
  21. Xiao-Liang Qi, Taylor L. Hughes and Shou-Cheng Zhang, *Topological field theory of time-reversal invariant insulators*, Physical. Review B, 2008, 78, 195424.
  22. D. Hsieh, D. Qian, L. Wray, Y. Xia, Y. S. Hor, R. J. Cava and M. Z. Hasan, *A topological Dirac insulator in a quantum spin Hall phase*, Nature, 2008, **452**, 970 - 974.
  23. Joel Moore, *The next generation*, Nature Physics, 2009, 5, 378 - 380.
  24. Y. Xia, D. Qian, D. Hsieh, L. Wray, A. Pal, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava and M. Z. Hasan, *Observation of a large-gap topological-insulator class with a single Dirac cone on the surface*, Nature Physics, 2009, 5, 398 - 402.

25. Zhang Haijun, Liu Chao-Xing, Qi Xiao-Liang, Dai Xi, Fang Zhong, Zhang Shou-Cheng, *Topological insulators in  $Bi_2Se_3$ ,  $Bi_2Te_3$  and  $Sb_2Te_3$  with a single Dirac cone on the surface*, Nature Physics, 2009, 5(6), 438 - 442.
26. D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, J. H. Dil, F. Meier, J. Osterwalder, L. Patthey, J.G. Checkelsky, N. P. Ong, A.V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y.S. Hor, R.J. Cava, and M.Z. Hasan, *A tunable topological insulator in the spin helical Dirac transport regime*, Nature, 2009, 460, 1101 - 1105.
27. D. Hsieh, Y. Xia, D. Qian, L. Wray, F. Meier, J. H. Dil, J. Osterwalder, L. Patthey, A. V. Fedorov, H. Lin, A. Bansil, D. Grauer, Y. S. Hor, R. J. Cava, and M. Z. Hasan, *Observation of Time-Reversal-Protected Single-Dirac-Cone Topological-Insulator States in  $Bi_2Te_3$  and  $Sb_2Te_3$* , Physical Review Letters, 2009, 103, 146401.
28. R. B. Laughlin, *Anomalous Quantum Hall Effect: An Incompressible Quantum Fluid with Fractionally Charged Excitations*, Physical Review Letters, 1983, 50, 1395.
29. D. C Tsui, H. L. Stoner, and A. C. Gossard, *Two-Dimensional Magnetotransport in the Extreme Quantum Limit*, Physical Review Letters, 1982, 48, 1559.
30. Florian Gebhard, *The Mott metal-insulator transition*, Springer Tracts in Modern Physics, 2010.
31. Phan Văn Nhâm, Nguyễn Toàn Thắng, *Vật lý các hệ điện tử tương quan mạnh*, NXB Giáo dục, 2020.
32. Daniel P. Arovas, Erez Berg, Steven Kivelson, Srinivas Raghu, *The Hubbard Model*, arXiv 2103, 12097 (2021).
33. J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*, Proceedings of the Royal Society London A, 1963, 276, 238 - 257.
34. M. Hohenadler and F. F. Assaad, *Correlation effects in two-dimensional topological insulators*, Journal of Physics: Condensed Matter, 2013, 25, 143201.
35. Stephan Rachel, *Interacting topological insulators: a review*, Reports on Progress in Physics, 2018, 81, 116501.

36. Maciej Lewenstein, Anna Sanpera, and Verònica Ahufinger, *Ultracold atoms in optical lattices: Simulating quantum many-body systems*, Oxford, 2012.
37. C. Z. Chang, J. Zhang, X. Feng, J. Chen, Z. Zhang, M. Guo, K. Li, Y. Ou, P. Wei, L.L. Wang, Z.Q. Ji, Y. Feng, S. Ji, X. Chen, J. Jia, X. Dai, Z. Fang, S.C. Zhang, K. He, Y. Wang, L. Lu, X.C. Ma, and Q.K. Xue, *Experimental observation of the quantum anomalous Hall effect in a magnetic topological insulator*, *Science*, 2013, 340, 167 - 170.
38. Rui Yu, Wei Zhang, Hai-Jun Zhang, Shou-Cheng Zhang, Xi Dai, Zhong Fang, *Quantized anomalous Hall effect in magnetic topological insulators*, *Science*, 2010, 329, 61 - 64.
39. Hongming Weng, Rui Yu, Xiao Hu, Xi Dai and Zhong Fang, *Quantum anomalous Hall effect and related topological electronic states*, *Advances in Physics*, 2015, 64, 227 - 282.
40. Tokura Yoshinori, Yasuda Kenji, Atsushi Tsukazaki, *Magnetic topological insulators*, *Nature Reviews Physics*, 2019, 1(2), 126 - 143.
41. Hal Tasaki, *From Nagaoka's ferromagnetism to flat-band ferromagnetism and beyond: an introduction to ferromagnetism in the Hubbard model*, *Progress of Theoretical Physics*, 1998, 99, 489 -549.
42. C. Weeks and M. Franz, *Topological insulators on the Lieb and perovskite lattices*, *Physical Review B*, 2010, 82, 085310.
43. C. Weeks and M. Franz, *Flat bands with nontrivial topology in three dimensions*, *Physical Review B*, 2012, 85, 041104.
44. Peter Fulde, *Electron correlations in molecules and solids*, Springer Series in Solid-State Sciences, 1995.
45. Kurt Binder, *The Monte Carlo method in condensed matter physics*, Springer: Topics in Applied Physics, 1995.
46. Y. L. Wang, Gilberto Fabbris, Mark P. M. Dean and Gabriel Kotliar, *EDRIXS: An open source toolkit for simulating spectra of resonant inelastic x-ray scattering*, *Computer Physics Communications*, 2019, 243, 151 - 165.
47. Walter Metzner and Dieter Vollhardt, *Correlated Lattice Fermions in  $d=\infty$  Dimensions*, *Physical Review Letters*, 1989, 62, 324.

48. Antoine Georges, Gabriel Kotliar, Werner Krauth, and Marcelo J. Rozenberg, *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions*, *Reviews of Modern Physics*, 1996, 68, 13.
49. G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, and C. A. Marianetti, *Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory*, *Reviews of Modern Physics*, 2006, 78, 865.
50. K. Held, *Electronic structure calculations using dynamical mean field theory*, *Advances in Physics*, 2007, 56, 829 - 926.
51. Jinwon Lee, Kyung-Hwan Jin, Andrei Catuneanu, Ara Go, Jiwon Jung, Choongjae Won, Sang-Wook Cheong, Jaeyoung Kim, Feng Liu, Hae-Young Kee, and Han Woong Yeom, *Honeycomb-Lattice Mott Insulator on Tantalum Disulphide*, *Physical Review Letters*, 2020, 125, 096403.
52. S. Mellaerts, R. Meng, V. Afanasiev, J. W. Seo, M. Houssa, and J. P. Locquet, *Quarter-filled Kane-Mele Hubbard model: Dirac half metals*, *Physical Review B*, 2021, 103, 155159.
53. J. M. Pizarro, S. Adler, K. Zantout, J. Mertz, P. Barone, R. Valenti, G. Sangionvanni, and T. O. Wehling, *Deconfinement of Mott localized electrons into topological and spin-orbit-coupled Dirac fermions*, *npj Quantum Materials*, 2020, 5, 79.
54. Can Shao, Eduardo V. Castro, Shijie Hu and Rubem Mondaini, *Interplay of local order and topology in the extended Haldane-Hubbard model*, *Physical Review B*, 2021 103, 035125.
55. Thomas Mertz, Karim Zantout, and Roser Valenti, *Statistical analysis of the Chern number in the interacting Haldane-Hubbard model*, *Physical Review B*, 2019, 100, 125111.
56. Miguel Goncalves, Pedro Ribeiro, Rubem Mondaini, and Eduardo V. Castro, *Temperature-Driven Gapless Topological Insulator*, *Physical Review Letters*, 2019, 122, 126601.
57. Tao Qin, Alexander Schnell, Klaus Sengstock, Christoph Weitenberg, André Eckardt, Walter Hofstetter, *Charge density wave and charge pump of*

- interacting fermions in circularly shaken hexagonal optical lattices*, Physical Review A, 2018, 98, 033601.
58. Jiaheng Li, Yang Li, Shiqiao Du, Zun Wang, Bing-Lin Gu, Shou-Cheng Zhang, Ke He, Wenhui Duan, Yong Xu, *Intrinsic magnetic topological insulators in van der Waals layered  $MnBi_2Te_4$ -family materials*, Science Advances, 2019, 5, eaaw5685.
59. Dongqin Zhang, Minji Shi, Tongshuai Zhu, Dingyu Xing, Haijun Zhang, and Jing Wang, *Topological Axion States in the Magnetic Insulator  $MnBi_2Te_4$  with the Quantized Magnetoelectric Effect*, Physical Review Letters, 2019, 122, 206401.
60. Pinyuan Wang, Jun Ge, Jiaheng Li, Yanzhao Liu, Yong Xu, Jian Wang, *Intrinsic magnetic topological insulators*, The Innovation, 2021, 2, 100098.
61. Wei Ning and Zhiqiang Mao, *Recent advancements in the study of intrinsic magnetic topological insulators and magnetic Weyl semimetals*, APL Materials, 2021, 8, 090701.
62. J. Teng, N. Liu, and Y. Li, *Mn-doped topological insulators: a review*, Journal of Semiconductors, 2019, 40, 081507.
63. Thanh Mai Thi Tran, Duc Anh Le, Tuan Minh Pham, Kim Thanh Thi Nguyen, and Minh-Tien Tran, *Impact of magnetic dopants on magnetic and topological phases in magnetic topological insulators*, Physical Review B, 2020, 102, 205124.
64. Thanh-Mai Thi Tran, Duong-Bo Nguyen, Hong-Son Nguyen, and Minh-Tien Tran, *Magnetic competition in topological kagome magnets*, 2021, Materials Research Express 8, 126101.
65. Minh-Tien Tran, Duong-Bo Nguyen, Hong-Son Nguyen, and Thanh Mai Thi Tran, *Topological Green function of interacting systems*, 2022, Physical Review B 105, 155112.
66. Chao Lei, Shu Chen, and Allan H. Macdonald, *Magnetized topological insulator multilayers*, Proceedings of the National Academy of Sciences of the USA, 2020, 117, 27224 - 27230.

67. Hiroshi Shinaoka, Junya Otsuki, Mitsuaki Kawamura, Nayuta Takemori, Kazuyoshi Yoshimi, *DCore: Integrated DMFT software for correlated electrons*, SciPost Physics, 2021, 10, 117.
68. Dieter Vollhardt, *Dynamical Mean-Field Theory of Strongly Correlated Electron Systems*, JPS Conference Proceedings, 2020, 30, 011001.
69. Arpita Paul and Turan Birol, *Applications of DFT + DMFT in Materials Science*, Annual Review of Materials Research: Computational Methods in Materials, 2019, 49, 31 - 52.
70. Eva Y. Andrei and Allan H. MacDonald, *Graphene bilayers with a twist*, Nature Materials, 2020, 19, 1265 - 1275.
71. Allan H. MacDonald, *Bilayer Graphene's Wicked, Twisted Road*, Physics, 2019, 12, 12.
72. Trần Minh Tiến, *Cơ sở Vật lý của các hệ nhiều hạt*, Nhà xuất bản Khoa học và Công nghệ, 2017.
73. Trần Minh Tiến, *Phương pháp hàm Green cho các hệ nhiều hạt*, Nhà xuất bản Khoa học và Công nghệ, 2020.
74. Gerald D. Mahan, *Many-Particle Physics*, 3<sup>rd</sup> Edition, Springer, 2000.
75. Steven M. Girvin and Kun Yang, *Modern condensed matter physics*, Cambridge University Press, 2019.
76. R. Jackiw, and C. Rebbi, *Solitons with fermion number  $\frac{1}{2}$* , Physical Review D, 1976, 13, 3398.
77. F. D. M. Haldane, *Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the "Parity Anomaly"*, Physical Review Letters, 1988, 61, 2015.
78. A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, *The electronic properties of graphene*, Review of Modern Physics, 2009, 81, 109.
79. Gregor Jotzu, Michael Messer, Rémi Desbuquois, Martin Lebrat, Thomas Uehlinger, Daniel Greif, Tilman Esslinger, *Experimental realization of the topological Haldane model with ultracold fermions*, Nature, 2014, 515, 237 - 240.

80. Alexander Altland and Martin R. Zirnbauer, *Nonstandard symmetry classes in mesoscopic normal-superconducting hybrid structures*, Physical Review B, 1997, 55, 1142.
81. Martin C. Gutzwiller, *Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals*, Physical Review Letters, 1963, 10, 159.
82. Junjiro Kanamori, *Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals*, *Progress of Theoretical Physics*, 1963, 30, 275 - 289.
83. D. Vollhardt, N. Blumer, K. Held, and M. Kollar, in Band Ferromagnetism, edited by K. Baberschke, M. Donath, and W. Nolting, *Band Ferromagnetism: Ground-State and Finite-Temperature Phenomena*, Series Lecture Notes in Physics, 2001, Vol. 580, Springer, Heidelberg.
84. X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg, and G. Kotliar, *Mott transition in the  $d=\infty$  Hubbard model at zero temperature*, Physical Review Letters, 1993, 70, 1666.
85. So Yeun Kim, Min-Cheol Lee, Garam Han, Marie Kratochvilova, Seokhwan Yun, Soon Jae Moon, Changhee Sohn, Je-Geun Park, Changyoung Kim, and Tae Won Noh, *Spectroscopic Studies on the Metal–Insulator Transition Mechanism in Correlated Materials*, *Advances Materials* 2018, 1704777, 2018.
86. Hong-Son Nguyen, Minh-Tien Tran, *Correlation-driven phase transition in a Chern insulator*, Physical Review B, 2013, 88, 165132.
87. Jingxiang Wu, Jean Paul Latyr Faye, David Sénéchal, and Joseph Maciejko, *Quantum cluster approach to the spinful Haldane-Hubbard model*, Physical Review B, 2016, 93, 075131.
88. Romuald Lemański, Konrad Jerzy Kapcia, and Stanisław Robaszkiewicz, *Extended Falicov-Kimball model: Exact solution for the ground state*, Physical Review B, 2017, 96, 205102.
89. Damian Zdulski and Krzysztof Byczuk, *Thermodynamic and topological phase diagrams of correlated topological insulators*, Physical Review B, 2015, 92 125102.



90. L. B. Shao, Shi-L. Zhu, L. Sheng, D. Y. Xing, and Z. D. Wang, *Realizing and Detecting the Quantum Hall Effect without Landau Levels by Using Ultracold Atoms*, Physical Review Letters, 2008, 101, 246810.
91. Tudor D. Stanescu, Victor Galitski, J. Y. Vaishnav, Charles W. Clark, and S. Das Sarma, *Topological insulators and metals in atomic optical lattices*, Physical Review A, 2009, 79, 053639.
92. Tudor D. Stanescu, Victor Galitski, and S. Das Sarma, *Topological states in two-dimensional optical lattices*, Physical Review A, 2010, 82, 013608.
93. Nevill Mott, *Metal-Insulator Transitions*, 2<sup>nd</sup> ed., Taylor & Francis, London, 1990.
94. Stephan Rachel and Karyn Le Hur, *Topological insulators and Mott physics from the Hubbard interaction*, Physical Review B, 2010, 82, 075106.
95. Wei Wu, Stephan Rachel, Wu-Ming Liu, and Karyn Le Hur, *Quantum spin Hall insulators with interactions and lattice anisotropy*, Physical Review B, 2012, 85, 205102.
96. Dong Zheng, Guang-Ming Zhang, and Congjun Wu, *Particle-hole symmetry and interaction effects in the Kane-Mele-Hubbard model*, Physical Review B, 2011, 84, 205121.
97. Z. Y. Meng, T. C. Lang, S. Wessel, F. F. Assaad, and A. Muramatsu, *Quantum spin-liquid emerging in two-dimensional correlated Dirac fermions*, Nature, London 2010, 464, 847.
98. Shun-Li Yu, X. C. Xie, and Jian-Xin Li, *Mott Physics and Topological Phase Transition in Correlated Dirac Fermions*, Physical Review Letters, 2011, 107, 010401.
99. S. Raghu, Xiao-Liang Qi, C. Honerkamp, and Shou-Cheng Zhang, *Topological Mott Insulators*, Physical Review Letters, 2008, 100, 156401.
100. Christopher N. Varney, Kai Sun, Marcos Rigol, and Victor Galitski, *Interaction effects and quantum phase transitions in topological insulators*, Physical Review B, 2010, 82, 115125.
101. Christopher N. Varney, Kai Sun, Marcos Rigol, and Victor Galitski, *Topological phase transitions for interacting finite systems*, Physical Review B, 2011, 84, 241105(R).

102. L. M. Falicov and J. C. Kimball, *Simple Model for Semiconductor-Metal Transitions:  $\text{SmB}_6$  and Transition-Metal Oxides*, Physical Review Letters, 1969, 22, 997.
103. Tom Kennedy, *Some rigorous results on the ground states of the Falicov-Kimball model*, Reviews in Mathematical Physics, 1994, 6(05a), 901 - 925.
104. C. Gruber, J. Iwanski, J. Jędrzejewski, and P. Lemberger, *Ground states of the spinless Falicov-Kimball model*, Physical Review B, 1990, 41, 2198.
105. C. Gruber, J. Jędrzejewski, and P. Lemberger, *Ground states of the spinless Falicov-Kimball model. II*, Journal of Statistical Physics, 1992, 66, 913 - 938.
106. U. Brandt and C. Mielsch, *Thermodynamics and correlation functions of the Falicov-Kimball model in large dimensions*, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 1989, 75, 365 - 370.
107. U. Brandt and C. Mielsch, *Thermodynamics of the Falicov-Kimball model in large dimensions II*, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 1990, 79, 295 - 299.
108. U. Brandt and C. Mielsch, *Free energy of the Falicov-Kimball model in large dimensions*, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 1991, 82, 37 - 41.
109. J. K. Freericks and V. Zlatic, *Exact dynamical mean-field theory of the Falicov-Kimball model*, Review Modern Physics, 2003, 75, 1333.
110. Christian Gruber, Nicolas Macris, Alain Messager, and Daniel Ueltschi, *Ground states and flux configurations of the two-dimensional Falicov-Kimball model*, Journal of Statistical Physics, 1997, 86, 57 - 108.
111. H. Cencarikova and P. Farkasovsky, *Formation of charge and spin ordering in strongly correlated electron systems*, Condensed Matter Physics, 2011, 14(4), 42701.
112. Hana Cencarikova and Pavol Farkasovsky, *Phase transitions in the two-dimensional Falicov-Kimball model on the triangular lattice*, Physica Status Solidi B, 2007, 244(6), 1900 - 1907.

113. U. K. Yadav, T. Maitra, and I. Singh, *Thermodynamics studies of the two dimensional Falicov-Kimball model on a triangular lattice*, The European Physical Journal B, 2011, 84, 365 - 370.
114. Qimiao Si, Gabriel Kotliar, and Antoine Georges, *Falicov-Kimball model and the breaking of Fermi-liquid theory in infinite dimensions*, Physical Review B, 1992, 46, 1261(R).
115. Grigory E. Volovik, *The Universe in a Helium Droplet*, Oxford University Press, Oxford, 2009.
116. V. Gurarie, *Single-particle Green's functions and interacting topological insulators*, Physical Review B, 2011, 83, 085426.
117. Zhong Wang and Shou-Cheng Zhang, *Simplified Topological Invariants for Interacting Insulators*, Physical Review X, 2012, 2, 031008.
118. Takahiro Fukui, Yasuhiro Hatsugai, and Hiroshi Suzuki, *Chern Numbers in Discretized Brillouin Zone: Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductances*, Journal of the Physical Society of Japan, 2005, 74, 1674 - 1677.
119. W. F. Brinkman and T. M. Rice, *Application of Gutzwiller's Variational Method to the Metal-Insulator Transition*, Physical Review B, 1970, 2, 4302.
120. Lei Wang, Xi Dai, XC Xie, *Frequency domain winding number and interaction effect on topological insulators*, Physical Review B, 2011, 84, 205116.
121. Antoine Georges and Gabriel Kotliar, *Hubbard model in infinite dimensions*, Physical Review B, 1992, 45, 6479.
122. R. Bulla and M. Potthoff, *"Linearized" dynamical mean-field theory for the Mott-Hubbard transition*, The European Physical Journal B, 2000, 13, 257 - 264.
123. Minh-Tien Tran, Hong-Son Nguyen, and Duc-Anh Le, *Emergence of magnetic topological states in topological insulators doped with magnetic impurities*, Physical Review B, 2016, 93, 155160.
124. M. F. Islam, C. M. Canali, A. Pertsova, A. Balatsky, S. K. Mahatha, C. Carbone, A. Barla, K. A. Kokh, O. E. Tereshchenko, E. Jiménez, N. B.

- Brookes, P. Gargiani, M. Valvidares, S. Schatz, T. R. F. Peixoto, H. Bentmann, F. Reinert, J. Jung, T. Bathon, K. Fauth, M. Bode, and P. Sessi, *Systematics of electronic and magnetic properties in the transition metal doped  $Sb_2Te_3$  quantum anomalous Hall platform*, Physical Review B, 2018, 97 (15), 155429.
125. Yurong Ruan, Yanmin Yang, Yabin Zhou, Lu Huang, Guigui Xu, Kehua Zhong, Zhigao Huang and Jian-Min Zhang, *Band-structure engineering of the magnetically Cr-doped topological insulator  $Sb_2Te_3$  under mechanical strain*, Journal of Physics: Condensed Matter, 2019, 31, 385501.
126. Ke He, Yayu Wang, and Qi-Kun Xue, *Quantum anomalous Hall effect*, National Science Review, 2014, 1(1), 38 - 48.
127. Naoto Nagaosa, Jairo Sinova, Shigeki Onoda, A. H. MacDonald, and N. P. Ong, *Anomalous Hall effect*, Review Modern Physics, 2010, 82, 1539.
128. M. Hohenadler, Z. Y. Meng, T. C. Lang, S. Wessel, A. Muramatsu, and F. F. Assaad, *Quantum phase transitions in the Kane-Mele-Hubbard model*, Physical Review B, 2012, 85, 115132.
129. Nobuo Furukawa, *Transport Properties of the Kondo Lattice Model in the Limit  $S=\infty$  and  $D=\infty$* , Journal of the Physical Society of Japan, 1994, 63(9), 3214 -3217.
130. S. Yunoki, J. Hu, A. L. Malvezzi, A. Moreo, N. Furukawa, and E. Dagotto, *Phase Separation in Electronic Models for Manganites*, Physical Review Letters, 1998, 80, 845.
131. E. Dagotto, *Nanoscale Phase Separation and Colossal Magnetoresistance*, Springer Series in Solid-State Sciences, 2003, Vol. 136, Springer, New York.
132. Clarence Zener, *Interaction between the d-Shell in the Transition Metals. II. Ferromagnetic Compounds of Manganese with Perovskite Structure*, Physical Review Journal Archive, 1951, 82, 403.
133. Tran Minh-Tien, *Charge ordered ferromagnetic phase in manganites*, Physical Review B, 2003, 67, 144404.

134. Van-Nham Phan and Minh-Tien Tran, *Doping change and distortion effect on double-exchange ferromagnetism*, Physical Review B, 2005, 72, 214418.
135. Xiao-Yong Feng, Jianhui Dai, Chung-Hou Chung, and Qimiao Si, *Competing Topological and Kondo Insulator Phases on a Honeycomb Lattice*, Physical Review Letters, 2013, 111, 016402.
136. Yin Zhong, Yu-Feng Wang, Han-Tao Lu, and Hong-Gang Luo, *Topological quantum phase transition in Kane-Mele-Kondo lattice model*, Physical Review B, 2013, 88, 235111.
137. Minh-Tien Tran and Ki-Seok Kim, *Probing surface states of topological insulators: Kondo effect and Friedel oscillations in a magnetic field*, Physical Review B, 2010, 82, 155142.
138. Minh-Tien Tran, Tetsuya Takimoto, and Ki-Seok Kim, *Phase diagram for a topological Kondo insulating system*, Physical Review B, 2012, 85, 125128.
139. S. Capponi and F. F. Assaad, *Spin and charge dynamics of the ferromagnetic and antiferromagnetic two-dimensional half-filled Kondo lattice model*, Physical Review B, 2001, 63, 155114.
140. Kenya Ohgushi, Shuichi Murakami, and Naoto Nagaosa, *Spin anisotropy and quantum Hall effect in the kagomé lattice: Chiral spin state based on a ferromagnet*, Physical Review B, 2000, 62, R6065(R).
141. Armin Rahmani, Rodrigo A Muniz, Ivar Martin, *Anyons in integer quantum Hall magnets*, Physical Review X, 2013, 3, 031008.
142. P. G. de Gennes, *Effects of Double Exchange in Magnetic Crystals*, Physical Review Journals Archive, 1960, 118, 141.
143. Yunyou Yang, Zhong Xu, L. Sheng, Baigeng Wang, D. Y. Xing, and D. N. Sheng, *Time-Reversal-Symmetry-Broken Quantum Spin Hall Effect*, Physical Review Letters, 2011, 107, 066602.
144. Hong-Son Nguyen, Minh-Tien Tran, *Dynamical mean-field for flat-band ferromagnetism*, Physical Review B, 2016, 94, 125106.
145. Nguyen Duong Bo, Nguyen Hong Son, Tran Minh Tien, *Exotic states emerged by spin-orbit coupling, lattice modulation and magnetic field in*

- Lieb nano-ribbons*, Communication in Physics, 2019, Vol. 29, No. 3SI, pp 293-304.
146. J. Faúndez, T. N. Jorge, and L. Craco, *Spin-selective electronic reconstruction in quantum ferromagnets: A view from the spin-asymmetric Hubbard model*, Physical Review B, 2018, 97, 115149.
  147. Na-Na Chang and Ju-Kui Xue, *Tunneling dynamics of bosons in the diamond lattice chain*, Chinese Physics B, 2018, 27 (10), 105203.
  148. Joo-Hyeok Jeong, Hyunjoon Park, Dongkyu Kim, and Dong-Hee Kim, *Magnetic Shell Structure of 2D-Trapped Fermi Gases in the Flat-Band Lieb Lattices*, Applied Sciences, 2019, 9 (3), 365.
  149. Liu Zheng, Liu Feng, and Wu Yong-Shi, *Exotic electronic states in the world of flat bands : From theory to material*, Chinese Physics B, 2014, 23(7), 077308.
  150. Hal Tasaki, *Ferromagnetism in the Hubbard models with degenerate single-electron ground states*, Physical Review Letters, 1992, 69, 1608.
  151. Edmund C. Stoner, *Ferromagnetism*, Reports on Progress in Physics, 1947, 11, 43.
  152. Yosuke Nagaoka, *Ferromagnetism in a Narrow, Almost Half-Filled s Band*, Physical Review Journals Archive, 1966, 147, 392.
  153. Ryotaro Arita, Kazuhiko Kuroki, Hideo Aoki, Akio Yajima, Masaru Tsukada, Satoshi Watanabe, Masahiko Ichimura, Toshiyuki Onogi, and Tomihiro Hashizume, *Ferromagnetism in a Hubbard model for an atomic quantum wire: A realization of flat-band magnetism from even-membered rings*, Physical Review B, 1998, 57, R6854(R).
  154. Hiroyuki Tamura, Kenji Shiraishi, Takashi Kimura, and Hideaki Takayanagi, *Flat-band ferromagnetism in quantum dot superlattices*, Physical Review B, 2002, 65, 085324.
  155. Shizhong Zhang, Hsiang-hsuan Hung, and Congjun Wu, *Proposed realization of itinerant ferromagnetism in optical lattices*, Physical Review A, 2010, 82, 053618.

156. Kazuto Noda, Akihisa Koga, Norio Kawakami, and Thomas Pruschke, *Ferromagnetism of cold fermions loaded into a decorated square lattice*, Physical Review A, 2009, 80, 063622.
157. A Mielke, *Ferromagnetic ground states for the Hubbard model on line graphs*, Journal of Physics A: Mathematical and General, 1991, 24, L73.
158. A Mielke, *Ferromagnetism in the Hubbard model on line graphs and further considerations*, Journal of Physics A: Mathematical and General, 1991, 24, 3311.
159. A. Mielke, *Exact ground states for the Hubbard model on the Kagome lattice*, Journal of Physics A: Mathematical and General, 1992, 25, 4335.
160. Congjun Wu, Doron Bergman, Leon Balents, and S. Das Sarma, *Flat Bands and Wigner Crystallization in the Honeycomb Optical Lattice*, Physical Review Letters, 2007, 99, 070401.
161. Congjun Wu and S. Das Sarma,  *$p_{x,y}$ -orbital counterpart of graphene: Cold atoms in the honeycomb optical lattice*, Physical Review B, 2008, 77, 235107.
162. Seababrata Mukherjee, Alexander Spracklen, Debaditya Choudhury, Nathan Goldman, Patrik Öhberg, Erika Andersson, and Robert R. Thomson, *Observation of a Localized Flat-Band State in a Photonic Lieb Lattice*, Physical Review Letters, 2015, 114, 245504.
163. K.-H. Hellwege and A. M. Hellwege, Landolt-Bornstein, *Magnetic and Other Properties of Oxides and Related Compounds*, Springer, Berlin, 1970, New Series, Group III, Vol. 4, p. 126.
164. C.-Q. Jin, J.-S. Zhou, J. B. Goodenough, Q. Q. Liu, J. G. Zhao, L. X. Yang, Y. Yu, R. C. Yu, T. Katsura, A. Shatskiy, and E. Ito, *High-pressure synthesis of the cubic perovskite  $BaRuO_3$  and evolution of ferromagnetism in  $ARuO_3$  ( $A = Ca, Sr, Ba$ ) ruthenates*, Proceedings of the National Academy of Science USA, 2008, 105, 7115.
165. J.-S. Zhou, K. Matsubayashi, Y. Uwatoko, C.-Q. Jin, J.-G. Cheng, J. B. Goodenough, Q. Q. Liu, T. Katsura, A. Shatskiy, and E. Ito, *Critical Behavior of the Ferromagnetic Perovskite  $BaRuO_3$* , Physical Review Letters, 2008, 101, 077206.

166. U. Lüders, W. C. Sheets, A. David, W. Prellier, and R. Frésard, *Room-temperature magnetism in LaVO<sub>3</sub>/SrVO<sub>3</sub> superlattices by geometrically confined doping*, Physical Review B, 2009, 80, 241102(R).
167. Hung T. Dang and Andrew J. Millis, *Theory of ferromagnetism in vanadium-oxide based perovskites*, Physical Review B, 2013, 87, 155127.
168. Qiang Han, Hung T. Dang, and Andrew J. Millis, *Ferromagnetism and correlation strength in cubic barium ruthenate in comparison to strontium and calcium ruthenate: A dynamical mean-field study*, Physical Review B, 2016, 93, 155103.
169. Myung Chul Jung and Kwan-Woo Lee, *Electronic structures, magnetism, and phonon spectra in the metallic cubic perovskite BaOsO<sub>3</sub>*, Physical Review B, 2014, 90, 045120.
170. N. Goldman, D. F. Urban, and D. Bercioux, *Topological phases for fermionic cold atoms on the Lieb lattice*, Physical Review A, 2011, 83, 063601.
171. Elliott H. Lieb, *Two theorems on the Hubbard model*, Physical Review Letters, 1989, 62, 1201.
172. Michel Caffarel and Werner Krauth, *Exact diagonalization approach to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition and superconductivity*, Physical Review Letters, 1994, 72, 1545.
173. E. Muller-Hartmann, *Correlated fermions on a lattice in high dimensions*, Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 1989, 74, 507 - 512.
174. G. Santoro, M. Airoldi, S. Sorella, and E. Tosatti, *Hubbard model on the infinite-dimensional diamond lattice*, Physical Review B, 1993, 47, 16216.
175. Ansgar Liebsch and Hiroshi Ishida, *Temperature and bath size in exact diagonalization dynamical mean field theory*, Journal of Physics: Condensed Matter, 2012, 24, 053201.
176. R. Bulla, T. A. Costi, and D. Vollhardt, *Finite-temperature numerical renormalization group study of the Mott transition*, Physical Review B, 2001, 64, 045103.



177. Phan Van-Nham and Tran Minh-Tien, *Transport properties in a simplified double-exchange model*, Modern Physics Letters B, 2003, 17, 39 - 47.
178. Van-Nham Phan, Quoc-Huy Ninh, and Minh-Tien Tran, *Metallic ferromagnetism-insulating charge order transition in doped manganites*, Physical Review B, 2016, 93, 165115.
179. Aleksi Julku, Sebastiano Peotta, Tuomas I. Vanhala, Dong-Hee Kim, and Päivi Törmä, *Geometric Origin of Superfluidity in the Lieb-Lattice Flat Band*, Physical Review Letters, 2016, 117, 045303.
180. Rui Chen and Bin Zhou, *Finite size effects on the helical edge states on the Lieb lattice*, Chinese Physics B, 2016, 25, 067204.
181. A. Bansil, Hsin Lin, and Tanmoy Das, *Colloquium: Topological band theory*, Reviews of Modern Physics, 2016, 88, 021004.
182. Minh-Tien Tran and Thuy Thi Nguyen, *Molecular Kondo effect in flat-band lattices*, Physical Review B, 2018, 97, 155125.
183. Duong-Bo Nguyen, Thanh-Mai Thi Tran, Thuy Thi Nguyen, and Minh-Tien Tran, *Selective Kondo strong coupling in magnetic impurity flat-band lattices*, Annals of Physics, 2019, 400, 9 - 20.
184. Nguyen Duong Bo, Nguyen Hong Son, and Tran Minh Tien, *Competition between the Soft Gap and the Molecular Kondo Singlets in Flat-band Lattices*, Communications in Physics, 2019, 28(4), 361 - 367.
185. Ta Van Binh, Nguyen Duong Bo, Nguyen Hong Son, and Tran Minh Tien, *Interplay between the spin-orbit coupling and lattice modulation on the Lieb lattice*, Journal of Physics: Conference Series, 2019, 1274, 012001.