

**BỘ GIÁO DỤC  
VÀ ĐÀO TẠO**

**VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC  
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM**

**HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ**



**Lâm Hữu Minh**

**CÁC PHA KIM LOẠI, ĐIỆN MÔI TOPO TRONG HỆ HAI MẠNG  
LỤC GIÁC XẾP LỚP**

Chuyên ngành: Vật lý chất rắn  
Mã số: 8440104

**LUẬN VĂN THẠC SĨ NGÀNH VẬT LÝ**

**NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC:  
PGS. TS. ĐỖ VĂN NAM**

A handwritten signature in blue ink, appearing to read "Đỗ Văn Nam", is written over the printed name of the supervisor.

**Hà Nội - 2023**

## MỤC LỤC

<b>LỜI CAM ĐOAN</b> .....	3
<b>LỜI CẢM ƠN</b> .....	4
<b>DANH MỤC TỪ VIẾT TẮT</b> .....	5
<b>DANH MỤC HÌNH ẢNH</b> .....	6
<b>MỞ ĐẦU</b> .....	12
<b>Chương 1. TỔNG QUAN NGHIÊN CỨU</b> .....	14
1.1 Tình hình nghiên cứu hiện nay .....	14
1.2 Tổng quan về đề tài luận văn .....	22
<b>Chương 2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU</b> .....	23
2.1 Mạng lục giác hai chiều vô hạn .....	23
2.1.1 Mạng đơn lớp .....	23
2.1.2 Mạng hai lớp .....	27
2.2 Dải nano mạng lục giác .....	33
2.3 Các đối xứng của hệ .....	37
2.3.1 Đối xứng hình học .....	37
2.3.2 Đối xứng của Hamiltonian .....	37
2.4 Mô hình Haldane .....	39
2.4.1 Hệ khối đơn lớp .....	39
2.4.2 Hệ khối hai lớp .....	45
2.4.3 Dải nano hai lớp .....	46
2.5 Đặc trưng topo của mô hình Haldane .....	47
2.5.1 Quá trình đoạn nhiệt .....	47
2.5.2 Pha Berry .....	48
2.5.3 Thông lượng Berry .....	50
2.5.4 Số Chern .....	51
2.5.5 Số Chern như một bất biến topo .....	53
2.6 Phương pháp nghiên cứu .....	54

2.6.1	Tham số khảo sát . . . . .	54
2.6.2	Quy trình tính số và khảo sát . . . . .	56
<b>Chương 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN.....</b>		<b>60</b>
3.1	Sự hình thành của các pha topo . . . . .	60
3.1.1	Giải đồ pha $M_0-\phi$ . . . . .	60
3.1.2	Giải đồ pha $\phi_1-\phi_2$ . . . . .	64
3.2	Tính chất điện tử của các pha topo và chuyển pha . . . . .	70
3.2.1	Phương pháp phân tích . . . . .	70
3.2.2	Kết quả tính toán . . . . .	73
<b>KẾT LUẬN.....</b>		<b>84</b>
<b>DANH MỤC TÀI LIỆU THAM KHẢO.....</b>		<b>86</b>
<b>PHỤ LỤC .....</b>		<b>89</b>

## LỜI CAM ĐOAN

*Tôi xin cam đoan đề tài nghiên cứu trong luận văn này là công trình nghiên cứu của tôi dựa trên những tài liệu, số liệu do chính tôi tự tìm hiểu và nghiên cứu dưới sự hướng dẫn của PGS. TS. Đỗ Văn Nam. Chính vì vậy, các kết quả nghiên cứu được đảm bảo trung thực và khách quan nhất. Đồng thời, kết quả này chưa từng xuất hiện trong bất cứ một nghiên cứu nào. Các số liệu, kết quả nêu trong luận văn là trung thực, nếu sai tôi hoàn chịu trách nhiệm trước pháp luật.*

**Tác giả luận văn**

## LỜI CẢM ƠN

Đầu tiên, tôi muốn gửi lời cảm ơn tới Học viện Khoa học và Công nghệ (GUST) đã giúp tôi trau dồi các kiến thức chuyên môn để hoàn thành luận văn này cũng như đi tiếp trong những nghiên cứu tiềm năng sau này. Tôi cũng xin gửi lời cảm ơn đến Viện nghiên cứu tiên tiến Phenikaa (PIAS) và Trường đại học Phenikaa đã giúp đỡ, tạo điều kiện và môi trường làm việc thuận lợi cho tôi trong suốt thời gian học tập và làm việc tại Hà Nội.

Tôi muốn gửi lời cảm ơn chân thành và sâu sắc nhất tới PGS. TS. Đỗ Văn Nam, người thầy đã trực tiếp hướng dẫn, tận tình giúp đỡ, quan tâm và chỉ dạy tôi trong suốt quá trình thực hiện đề tài luận văn này. Thầy đã định hướng công việc, giúp tôi trau dồi kiến thức chuyên môn cùng kỹ năng nghiên cứu và tạo điều kiện thuận lợi nhất để tôi hoàn thành luận văn với kết quả tốt nhất.

Tôi muốn gửi lời cảm ơn và tri ân tới gia đình, cùng lời cảm ơn tới bạn bè và những người đã luôn ở bên động viên, ủng hộ và giúp đỡ tôi trong quá trình thực hiện luận văn này.

Mặc dù tôi đã có cố gắng, nhưng do trong thời gian ngắn cùng lượng kiến thức chưa thực sự hoàn thiện của bản thân nên luận văn vẫn không tránh khỏi có những thiếu sót và hạn chế. Vì thế, tôi rất mong nhận được sự góp ý và chỉ dẫn từ các thầy, cô giáo và các bạn để luận văn được hoàn thiện hơn.

## DANH MỤC TỪ VIẾT TẮT

Từ viết tắt	Ý nghĩa
ANR	Armchair nanoribbon
BLG	Bilayer graphene
BLH	Bilayer hexagonal lattice
BZ	Brillouin zone
CB	Conduction band
HOTI	High-order topological insulator
KPT	Khoảng phân tách (năng lượng)
MLH	Monolayer hexagonal lattice
NR	Nanoribbon
QAH	Quantum anomalous Hall
QED	Quantum electrodynamics
QHE	Quantum Hall effect
QSHE	Quantum spin Hall effect
SBG	Sliding bilayer graphene
SBH	Sliding bilayer hexagonal lattice
SOC	Spin-orbit coupling
TB	Tight-binding
TBG	Twisting bilayer graphene
VB	Valence band
VBT	Total Chern number of valence bands
ZNR	Zigzag nanoribbon

## DANH MỤC HÌNH ẢNH

- 1.1 Một số ví dụ về các vật liệu có cấu trúc mạng lục giác [1, 2, 3, 4]. . . . . 14
- 2.1 a) Cấu trúc hình học của mạng lục giác (đỏ) đơn lớp trong không gian thực. Hai nút mạng đại diện thuộc hai phân mạng  $A$  và  $B$  được chỉ ra. Hai vector đơn vị  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  (hồng) cùng với hai đường đứt nét lập thành ô đơn vị hình thoi. Ba vector  $\mathbf{b}_j$  là các vector tunneling đến lân cận gần nhất trong cùng lớp. b) Vùng Brillouin (đỏ) của mạng lục giác trong không gian  $\mathbf{k}$ , với hai vector đơn vị  $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*$  (hồng). Hình thoi nét đứt với một cạnh là vector  $\mathbf{a}_1^*$  biểu thị một ô đơn vị khác được sử dụng trong luận văn này để hiển thị cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối và tính toán số Chern. Hướng được chọn để quan sát cấu trúc vùng năng lượng này được chỉ ra bởi hai mũi tên màu xanh da trời (đối với các cấu hình  $C_1, C_2$  và  $C_3$ ) và xanh lục (đối với các cấu hình  $C_4$  và  $C_5$ ). Các cặp đường nét đứt màu xanh da trời và xanh lục giới hạn các miền của vùng Brillouin (đỏ) trong đó các dải năng lượng khối được lượng tử hóa thành các dải của dải nano (xem mô tả chi tiết trong nội dung chính). c) Cấu trúc dải nano đơn lớp (đỏ) thu được bằng cách giới hạn một chiều của hệ hai chiều. Giới hạn theo chiều  $y$  thu được biên armchair có độ rộng  $W_A$  với  $N_d$  đường dimmed được chỉ ra bởi các đường nét đứt xanh da trời. Giới hạn theo chiều  $x$  thu được biên zigzag có độ rộng  $W_Z$  với  $N_z$  đường zigzag được chỉ ra bởi các đường nét đứt xanh lục. Các hình chữ nhật cùng màu tương ứng xác định các ô đơn vị của dải nano. . . . . 24
- 2.2 a) Cấu trúc hình học của mạng lục giác hai lớp trượt trong không gian thực. Lớp dưới (đỏ) và lớp trên (xanh da trời) lần lượt đóng góp hai nút mạng vào ô đơn vị (hình thoi màu hồng). Vector trượt tương đối giữa hai lớp  $\boldsymbol{\tau}$  (đen) có thể được biểu diễn thông qua hai vector trượt thành phần  $\boldsymbol{\tau}_1$  và  $\boldsymbol{\tau}_2$  (xanh lục). b) và c) lần lượt mô tả cấu hình xếp AA ( $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{0}$ ) và xếp AB ( $\boldsymbol{\tau} = \boldsymbol{\tau}_1$ ), trong đó các đường nét đứt với màu sắc khác nhau mô tả ba quá trình tunneling khác nhau: in-plane hopping ( $t_1$ , đen), vertical hopping ( $t_\perp$ , xanh lục) và skew hopping ( $t_d$ , hồng). . . . . 27
- 2.3 Các tham số tunneling phức trong số hạng Haldane. Màu hồng và vàng nhằm phân biệt các quá trình tunneling trong phân mạng tương ứng  $A$  và  $B$ . Ba mũi tên có viền đen là ba vector  $\mathbf{R}_j$  trong (2.49). . . . . 39

2.4	Giản đồ pha topo của hệ graphene đơn lớp trong nghiên cứu của Haldane [17] với 6 điểm pha $\lambda_j$ ( $j = 1, 2, \dots, 6$ ). Ở đây $t_1 = t_{\parallel} = -2,7 \text{ eV}$ , $t_2 = 0,1 t_1 $ . . . . .	41
2.5	Cấu trúc vùng năng lượng của hệ hai chiều trong mô hình Haldane đơn lớp ứng với 6 điểm pha được chọn trên Hình. 2.4. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0,1$ . Hướng quan sát ở đây là mũi tên xanh da trời trên Hình. 2.1b. Đường nét đứt biểu thị mức Fermi. . . . .	43
2.6	Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) biên armchair trong mô hình Haldane đơn lớp ứng với 6 điểm pha được chọn trên Hình. 2.4. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0,1$ . . . . .	43
2.7	Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) biên zigzag trong mô hình Haldane đơn lớp ứng với 6 điểm pha được chọn trên Hình. 2.4. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0,1$ . . . . .	44
2.8	Pha Berry và thông lượng Berry cho một tập rời rạc các trạng thái lượng tử. [40] (a) Pha Berry $\gamma_L$ cho một lộ trình $L$ đóng gồm 3 trạng thái được tính thông qua các pha tương đối $\gamma_{12}$ , $\gamma_{23}$ và $\gamma_{31}$ . (b) Pha Berry của một lộ trình đóng bao quanh một mạng vuông các trạng thái bằng tổng của các pha Berry (hay thông lượng Berry) $F_{1,1}$ và $F_{2,1}$ của các mảnh được bao bên trong lộ trình. . . . .	49
2.9	Cấu trúc hình học của 5 cấu hình mạng SBH được khảo sát trong luận văn. Ý nghĩa của các ký hiệu và màu sắc giống như trong Hình. 2.2a. . . . .	55
3.1	Giản đồ pha $M_0$ - $\phi$ của hệ mạng lục giác hai lớp trượt. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0,1$ , $t_{12} = 0,3t_0/t_{\perp}$ . . . . .	62
3.2	Giản đồ pha $M_0$ - $\phi$ ứng với dải VB2 của hệ mạng lục giác hai lớp trượt. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0,1$ . Đối với hai cấu hình $C_1$ và $C_5$ , áp dụng $(\phi_1, \phi_2) = (\phi, \phi - \epsilon_{\phi})$ với giá trị lần lượt là $\epsilon_{\phi} = 10^{-5}$ và $\epsilon_{\phi} = 10^{-1}$ (Radian). Với các cấu hình còn lại, $\phi_1 = \phi_2 = \phi$ . . . . .	63
3.3	Giản đồ pha $\phi_1$ - $\phi_2$ cho dải VB1 của hệ mạng lục giác hai lớp trượt. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0,1$ , $M_0 = 0$ . . . . .	66
3.4	Giản đồ pha $\phi_1$ - $\phi_2$ cho dải VB2 của hệ mạng lục giác hai lớp trượt. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0,1$ , $M_0 = 0$ . . . . .	67
3.5	Giản đồ pha $\phi_1$ - $\phi_2$ tổng cộng của hai dải hóa trị (VBT) của hệ mạng lục giác hai lớp trượt. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0,1$ , $M_0 = 0$ . . . . .	68



3.6	Giản đồ pha $\phi_1$ - $\phi_2$ cho dải VB2 và tổng hai dải hóa trị (VBT) của cấu hình $C_3$ (xếp AB). $u_k = w_k = 0$ ứng với quá trình tunneling giữa hai lớp chỉ bao gồm số hạng lớn nhất (vertical hopping $v_k$ ) và $u_k, w_k \neq 0$ ứng với quá trình tunneling hai lớp tính đến skew hopping ( $u_k, w_k$ ). Tham số chung ở đây là $t_2 = 0, 1, M_0 = 0$ . . . . .	69
3.7	Giản đồ pha $\phi_1$ - $\phi_2$ ứng với dải VB1 (trái) và VB2 (phải) của cấu hình $C_1$ (xếp AA) với 7 điểm pha $\chi_j$ ( $j = 1, 2, \dots, 7$ ). Tham số chung ở đây là $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 3t_0/t_\perp$ và $M_0 = 0$ . Lưu ý: chú thích màu ở trên không dành cho các đường chuyển pha (xem mô tả chi tiết trong phần nội dung chính). . . . .	89
3.8	Cấu trúc vùng năng lượng của hệ hai chiều với cấu hình $C_1$ (xếp AA) ứng với 7 điểm pha được chọn trên Hình. 3.7. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 3t_0/t_\perp$ và $M_0 = 0$ . Hướng quan sát ở đây là mũi tên xanh da trời trên Hình. 2.1b. Đường nét đứt biểu thị mức Fermi. . . . .	90
3.9	Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình $C_1$ (xếp AA) và biên armchair ứng với 7 điểm pha được chọn trên Hình. 3.7. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 3t_0/t_\perp$ và $M_0 = 0$ . . . . .	90
3.10	Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình $C_1$ (xếp AA) và biên zigzag ứng với 7 điểm pha được chọn trên Hình. 3.7. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 3t_0/t_\perp$ và $M_0 = 0$ . . . . .	91
3.11	Giản đồ pha $\phi_1$ - $\phi_2$ ứng với dải VB1 (trái) và VB2 (phải) của cấu hình $C_2$ với 17 điểm pha $\gamma_j$ ( $j = 1, 2, \dots, 17$ ). Tham số chung ở đây là $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_\perp$ và $M_0 = 0$ . Lưu ý: chú thích màu ở trên không dành cho các đường chuyển pha, các đường chuyển pha cùng màu trên hai giản đồ không mang cùng ý nghĩa (xem mô tả chi tiết trong phần nội dung chính). . . . .	91
3.12	Cấu trúc vùng năng lượng của hệ hai chiều với cấu hình $C_2$ ứng với 17 điểm pha được chọn trên Hình. 3.11. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_\perp$ và $M_0 = 0$ . Hướng quan sát ở đây là mũi tên xanh da trời trên Hình. 2.1b. Đường nét đứt biểu thị mức Fermi. . . . .	92
3.13	Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình $C_2$ và hai biên zigzag và armchair ứng với 17 điểm pha được chọn trên Hình. 3.11. Tham số chung ở đây là $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_\perp$ và $M_0 = 0$ . Lưu ý rằng chỉ có một điểm pha của cấu hình armchair được đưa ra ở đây, đó là $\gamma_{16}$ (dưới cùng). . . . .	93

- 3.14 Giản đồ pha  $\phi_1$ - $\phi_2$  ứng với dải VB1 (trái) và VB2 (phải) của cấu hình  $C_3$  (xếp AB) với 20 điểm pha  $\alpha_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 20$ ). Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Lưu ý: chú thích màu ở trên không dành cho các đường chuyển pha, các đường chuyển pha cùng màu trên hai giản đồ không mang cùng ý nghĩa (xem mô tả chi tiết trong phần nội dung chính). . . . . 94
- 3.15 Cấu trúc vùng năng lượng của hệ hai chiều với cấu hình  $C_3$  (xếp AB) ứng với 20 điểm pha được chọn trên Hình. 3.14. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Hướng quan sát ở đây là mũi tên xanh da trời trên Hình. 2.1b. Đường nét đứt biểu thị mức Fermi. . . . . 95
- 3.16 Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_3$  (xếp AB) và biên armchair ứng với 20 điểm pha được chọn trên Hình. 3.14. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Đối với hai điểm  $\alpha_2$  và  $\alpha_3$ , chúng tôi phóng to cấu trúc vùng năng lượng bên trong các miền hình vuông nét đứt trên Hình. 3.18 để giúp đánh giá chính xác các trạng thái biên. . . . . 96
- 3.17 Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_3$  (xếp AB) và biên zigzag ứng với 20 điểm pha được chọn trên Hình. 3.14. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Đối với hai điểm  $\alpha_3$  và  $\alpha_{10}$ , chúng tôi phóng to cấu trúc vùng năng lượng bên trong các miền hình vuông nét đứt trên Hình. 3.18 để giúp đánh giá chính xác các trạng thái biên. . . . . 97
- 3.18 Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_3$  (xếp AB) và biên armchair hoặc zigzag của 3 điểm pha  $\alpha_2, \alpha_3$  và  $\alpha_{10}$  trong các miền nét đứt đánh dấu trên Hình. 3.16 và 3.17. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . . . . . 98
- 3.19 Giản đồ pha  $\phi_1$ - $\phi_2$  ứng với dải VB1 (trái) và VB2 (phải) của cấu hình  $C_4$  với 10 điểm pha  $\nu_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 10$ ). Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Lưu ý: chú thích màu ở trên không dành cho các đường chuyển pha, các đường chuyển pha cùng màu trên hai giản đồ không mang cùng ý nghĩa (xem mô tả chi tiết trong phần nội dung chính). . . . . 99

- 3.20 Cấu trúc vùng năng lượng của hệ hai chiều với cấu hình  $C_4$  ứng với 10 điểm pha được chọn trên Hình. 3.19. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Hướng quan sát ở đây là mũi tên xanh lục trên Hình. 2.1b. Đường nét đứt biểu thị mức Fermi. . . . . 100
- 3.21 Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_4$  và biên armchair ứng với 10 điểm pha được chọn trên Hình. 3.19. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . . . . . 101
- 3.22 Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_4$  và biên zigzag ứng với 10 điểm pha được chọn trên Hình. 3.19. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Đối với 3 điểm  $v_2, v_4$  và  $v_9$ , chúng tôi phóng to cấu trúc vùng năng lượng bên trong các miền hình vuông nét đứt trên Hình. 3.23 để giúp đánh giá chính xác các trạng thái biên. . . . . 102
- 3.23 Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_4$  và biên zigzag tại 3 điểm pha  $v_2, v_4$  và  $v_9$  trong các miền nét đứt đánh dấu trên Hình. 3.22. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . . . . . 103
- 3.24 Giản đồ pha  $\phi_1$ - $\phi_2$  ứng với dải VB1 (trái) và VB2 (phải) của cấu hình  $C_5$  với 11 điểm pha  $\eta_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 11$ ). Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Lưu ý: chú thích màu ở trên không dành cho các đường chuyển pha, các đường chuyển pha cùng màu trên hai giản đồ không mang cùng ý nghĩa (xem mô tả chi tiết trong phần nội dung chính). . . . . 104
- 3.25 Cấu trúc vùng năng lượng của hệ hai chiều với cấu hình  $C_5$  ứng với 11 điểm pha được chọn trên Hình. 3.24. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Hướng quan sát ở đây là mũi tên xanh lục trên Hình. 2.1b. Đường nét đứt biểu thị mức Fermi. . . . . 105
- 3.26 Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_5$  và biên armchair ứng với 11 điểm pha được chọn trên Hình. 3.24. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Đối với 3 điểm  $\eta_5, \eta_6$  và  $\eta_9$ , chúng tôi phóng to cấu trúc vùng năng lượng bên trong các miền hình vuông nét đứt trên Hình. 3.27 để giúp đánh giá chính xác các trạng thái biên. . . . . 106

- 3.27 Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_5$  và biên arm-chair tại 3 điểm pha  $\eta_5$ ,  $\eta_6$  và  $\eta_9$  trong các miền nét đứt đánh dấu trên Hình. 3.26. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_\perp$  và  $M_0 = 0$ . . . . . 106
- 3.28 Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_5$  và biên zigzag ứng với 11 điểm pha được chọn trên Hình. 3.24. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_\perp$  và  $M_0 = 0$ . . . . . 107

## MỞ ĐẦU

Lấy cảm hứng từ các tính chất cơ bản của graphene và các nghiên cứu mở rộng về các pha điện tử thường và topo trong mạng nguyên tử lục giác, chúng tôi muốn khảo sát sự tồn tại của các pha điện tử và các tính chất topo của chúng trong hệ gồm hai lớp graphene xếp chồng lên nhau với viễn cảnh cho rằng liên kết giữa hai lớp sẽ thiết lập các điều kiện đặc biệt cho sự hình thành các pha điện tử.

Mô hình hệ vật lý gồm hai mạng lục giác kết hợp với nhau không phải là mô hình thuần túy lý thuyết. Thực tế, hệ vật liệu nano gồm hai lớp graphene xếp chồng lên nhau (BLG) là sự hiện thực hoá của mô hình mạng này. BLG là một cấu trúc gồm hai lớp Graphene xếp chồng, mà sự kết dính giữa chúng được thực hiện nhờ các lực liên kết van der Waals. Đây là hệ vật liệu tiêu biểu của một lớp các hệ vật liệu hai chiều (2D) đa lớp gọi là "dị cấu trúc van der Waals". Về mặt cấu trúc nguyên tử, graphene là một tập hợp các nguyên tử carbon được liên kết với nhau theo các lai hoá orbital  $sp^2$ , do đó tạo thành một mạng hai chiều hình tổ ong trong đó mỗi nguyên tử carbon là một nút mạng và kết nối với 3 nguyên tử carbon khác gần nhất. Liên kết giữa các orbital  $sp^2$  là rất mạnh nên làm cho mạng lục giác này rất bền vững với hằng số mạng là  $a = a_{CC}\sqrt{3}$  trong đó  $a_{CC} \approx 0,142$  nm là khoảng cách giữa hai nguyên tử carbon gần nhất. Trong hệ BLG, mặc dù hai lớp graphene là đồng nhất về thành phần hoá học và các tham số hình học của mạng, việc xếp chồng hai lớp lên nhau vẫn có một sự tùy ý được mô tả bởi hai tham số: một góc xoay  $\theta$  mô tả sự xoay tương đối và một vector trượt  $\tau$  song song với mặt phẳng lớp graphene mô tả sự trượt tương đối giữa hai lớp. Ứng với mỗi bộ giá trị của hai tham số này ta sẽ có một cấu hình mạng BLG cụ thể. Bằng phương pháp bóc tách cơ học (*Scotch tape*) sử dụng các mẫu than chì chất lượng cao, bên cạnh graphene đơn lớp, người ta dễ dàng thu được các lớp vảy than chì (*graphite flake*) gồm hai lớp graphene xếp theo cấu hình AB, ứng với  $\theta = 60^\circ$ . Nói cách khác, cấu hình AB được xem là một cấu hình tự nhiên của hệ BLG. Ngày nay, các mạng graphene đơn lớp kích thước lớn và chất lượng cao đã được tạo ra bởi nhiều phương pháp và kỹ thuật tiên tiến. Kỹ thuật "transfer" lớp graphene này lên lớp graphene khác cho phép dễ dàng tạo ra không chỉ các hệ BLG mà còn cả các hệ gồm nhiều lớp graphene. Các kỹ thuật xếp chồng các lớp vật liệu hai chiều lên với

nhau được gọi chung là các phương pháp dựa theo nguyên lý xếp hình lego. Trên cơ sở đó, các nghiên cứu về các cấu hình BLG khác nhau đã được thực hiện và cho thấy vật lý của hệ BLG rất phong phú. Cụ thể, các tính chất của hệ BLG phụ thuộc vào các tham số  $\theta$  và  $\tau$  vì chúng thực chất xác định quy luật liên kết giữa các trạng thái điện tử giữa hai lớp mạng thành phần với nhau.

Mục tiêu nghiên cứu của luận văn này là áp dụng mô hình Haldane vào hệ mạng lục giác hai lớp xếp chồng để nghiên cứu sự tồn tại của các pha điện tử mà hệ hai lớp này có thể chứa đựng cũng như khảo sát tính chất topo của chúng. Cụ thể, chúng tôi muốn xem xét liệu có thể tồn tại các pha điện môi thường và điện môi topo, cũng như các pha kim loại thường và pha kim loại topo, khi thay đổi các thông số động lực của mô hình. Chúng tôi cũng khảo sát ảnh hưởng của các thông số hình học của mạng, bởi các cấu hình xếp chồng khác nhau, lên sự hình thành của các pha điện tử này. Mục tiêu nghiên cứu đạt được về mặt lý thuyết bằng cách sử dụng mô hình tight-binding và thực hiện các tính toán và phân tích dựa trên cấu trúc vùng năng lượng và các trạng thái riêng tương ứng của hệ.

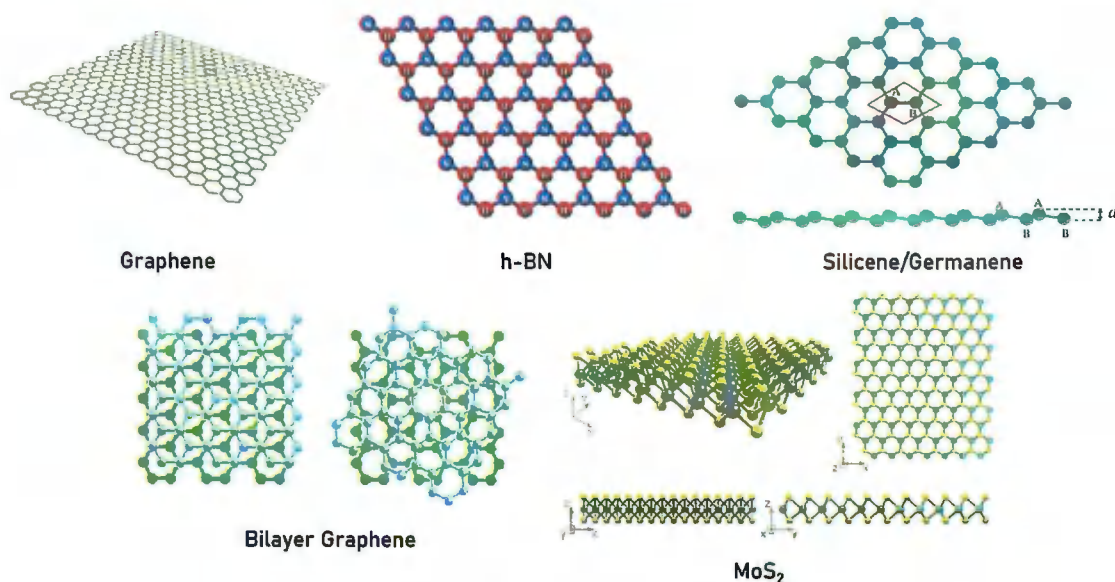
Theo đó, nội dung của luận văn được chia thành bốn phần chính như sau:

1. Tổng quan nghiên cứu: trình bày hiểu biết về các chủ đề và xu hướng nghiên cứu đã và đang được tiến hành trên thế giới liên quan đến hệ vật liệu và mô hình mà chúng tôi lựa chọn, và tổng quan về toàn bộ nghiên cứu của chúng tôi trong luận văn này.
2. Đối tượng và phương pháp nghiên cứu: trình bày chi tiết về đặc điểm và các mô hình được xây dựng cho hệ vật liệu mà chúng tôi chọn, những tính chất và đại lượng mà chúng tôi quan tâm khảo sát, cùng với các phương pháp tính toán và phân tích.
3. Kết quả và thảo luận: nêu ra kế hoạch khảo sát, sau đó trình bày và phân tích kết quả tính toán thu được theo kế hoạch đó và rút ra các kết luận nhất định.
4. Kết luận: đưa ra kết luận chung của chúng tôi về những kết quả đã đạt được sau khi làm luận văn, và ý nghĩa của luận văn này đối với toàn bộ quá trình học tập đã trải qua cũng như con đường học thuật trong tương lai.

# Chương 1. TỔNG QUAN NGHIÊN CỨU

## 1.1. Tình hình nghiên cứu hiện nay

Nguồn cảm hứng với graphene đã và đang tăng rất mạnh trong những năm gần đây, và vật lý của các hệ dựa trên các mạng vật liệu hình lục giác hiện đang trở thành một trong những chủ đề thú vị nhất cũng như tiến triển nhanh nhất trong Vật lý chất đặc. Giải Nobel vật lý được trao cho A. Geim và K. Novoselov năm 2010 đã tạo động lực lớn cho chủ đề này. Mặc dù chủ đề này vẫn còn ở giai đoạn sơ khai, nhưng tiềm năng khoa học và công nghệ của loại vật liệu này dường như là vô hạn. Sự hiểu biết và kiểm soát các tính chất của loại vật liệu này sẽ mở ra cánh cửa cho một vùng đất mới trong lĩnh vực điện tử.



Hình 1.1: Một số ví dụ về các vật liệu có cấu trúc mạng lục giác [1, 2, 3, 4].

Trong số các hệ vật liệu có cấu trúc mạng tổ ong, graphene - một dạng thù hình hai chiều của cacbon - là đại diện nổi tiếng nhất và đóng vai trò quan trọng như là cơ sở để hiểu các tính chất trong các dạng thù hình khác của cacbon thuần túy, cũng như trong các vật liệu mạng lục giác khác như Silicene, Germanene hay Boron nitride, v.v. (Hình. 1.1). Các hệ vật liệu dựa trên mạng lục giác thể hiện vô số cấu trúc khác nhau với nhiều tính chất vật lý phong phú. Những tính chất này có liên quan mạnh mẽ đến số chiều của cấu trúc mạng của các hệ vật liệu này.

P. R. Wallace [5] là người đầu tiên đưa ra nghiên cứu lý thuyết về cấu trúc

vùng năng lượng của graphene, sử dụng xấp xỉ đơn giản nhất của mô hình tight-binding (*TB*) ở lân cận gần nhất, cho thấy nó là một bán kim loại với các kích thích điện tử theo đường cong tán sắc tuyến tính bất thường ở vùng năng lượng thấp tại các điểm **K** của vùng Brillouin, hay còn gọi là các "điểm Dirac". Đây là một trong những khía cạnh thú vị của graphene. Ở vùng năng lượng này, hành xử của điện tử trong graphene giống như các fermion Dirac không khối lượng, có tính *chiral*, do đó chúng được gọi là điện tử Dirac. Sự tuyến tính của đường cong tán sắc trong vùng này thể hiện vật lý của Điện động lực học lượng tử cho các fermion không khối lượng, trừ thực tế rằng trong graphene, các điện tử Dirac có vận tốc Fermi  $v_F \approx 10^6$  m/s, nhỏ hơn khoảng 300 lần so với vận tốc ánh sáng trong chân không. Do đó, nhiều tính chất đặc biệt trong QED có thể xuất hiện trong graphene nhưng ở vận tốc nhỏ hơn nhiều [6, 7, 8]. Các điện tử Dirac hành xử theo những cách khác thường so với các điện tử thông thường dưới tác dụng của từ trường, dẫn đến các hiện tượng vật lý mới như hiệu ứng Hall lượng tử nguyên (*IQHE*) dị thường [9] đã được phát hiện trong thực nghiệm [10], hay độ dẫn cực tiểu khác không khi mật độ hạt tải điện tiến về không [11]. Ngoài ra, các điện tử Dirac thể hiện tính trơ (*insensitivity*) đối với các thế năng tĩnh điện bên ngoài, cái được gọi là nghịch lý Klein.

Người ta đã phát hiện ra rằng graphene cũng thể hiện các hiệu ứng bất thường ở kích thước meso [12, 13]. Những hiệu ứng này bắt nguồn từ các điều kiện biên áp lên hàm sóng trong các mẫu meso với nhiều hình dạng biên khác nhau mà mạng lục giác có thể có, chẳng hạn như các dải nano một chiều. Hai loại biên được nghiên cứu nhiều nhất, zigzag và armchair, thể hiện các tính chất điện tử rất khác nhau. Các biên zigzag có thể duy trì các trạng thái biên và các cộng hưởng vốn không có mặt trong trường hợp biên armchair. Các điều kiện biên của graphene ảnh hưởng mạnh đến độ dẫn của nó. Ngoài ra, tính *chiral* của các điện tử Dirac trong graphene có thể được khai thác cho các ứng dụng trong đó người ta kiểm soát thay đổi "valley" của các điện tử, bên cạnh điện tích của nó - một lĩnh vực mới nổi được gọi là "Valleytronics" [14]. Hơn nữa, khi các đầu siêu dẫn được gắn vào graphene, dòng siêu dẫn phát triển cùng với các quá trình Andreev đặc trưng của hiệu ứng tiệm cận siêu dẫn [15].

Bên cạnh graphene đơn lớp, graphene hai lớp xếp chồng (*BLG*) cũng đang mang đến nhiều chủ đề nghiên cứu phong phú và thú vị. Xếp chồng hai hay nhiều lớp



mạng lục giác cho ta một số vô hạn các cấu hình mới của hệ kết hợp vì các lớp có thể được xếp tương đối với nhau theo vô số cách. Hai kiểu xếp chồng đặc biệt điển hình có đối xứng cao nhất của hệ BLG là xếp AA (*AA-stacked graphene*) và xếp AB (*AB-stacked graphene*) hay còn gọi là cấu hình "Bernal". Nhìn chung, việc xếp chồng hai hay nhiều lớp mạng vật liệu có thể phân vào hai kiểu chính, đó là "xoắn" (*twisting*) và "trượt" (*sliding*). Các cấu hình graphene hai lớp xoắn (*TBG*), trong đó hai lớp được xoay tương đối với nhau một góc  $\theta$  quanh một trục vuông góc với mặt phẳng lớp, cũng có thể đạt được mức độ đối xứng cao như cấu hình xếp AA hoặc AB, tùy thuộc vào giá trị góc xoắn. Các cấu hình graphene hai lớp trượt (*SBG*), được đặc trưng bởi một vectơ trượt tương đối  $\tau$  giữa hai lớp, đảm bảo các đường zigzag và armchair của mỗi lớp luôn song song với nhau. Trong các cấu hình SBG, mặc dù đối xứng tịnh tiến luôn được bảo toàn, nhưng hầu như tất cả các đối xứng xoay quanh trục vuông góc với mặt phẳng mạng đều bị phá vỡ, trừ một số trục xoay  $C_2$  nằm trong mặt phẳng mạng. Nhìn chung, việc thay đổi vị trí các lớp mạng một cách tương đối với nhau ảnh hưởng đến sự liên kết (*coupling*) giữa các lớp, cụ thể là làm thay đổi cấu trúc lai hóa giữa các orbital của từng lớp, dẫn đến biến đổi các tính chất vật lý và hóa học. Sự thay đổi này có thể được phân tích phần nào bằng cách xác định và phân loại các đối xứng không gian của hệ vật liệu. Chẳng hạn, một nghiên cứu của V. Nam Do [16] trên hệ SBG đã chứng minh sự xuất hiện của các điểm Dirac dựa trên phân tích các đối xứng của mạng, đồng thời chỉ ra các hiệu ứng biến dạng mặt năng lượng gần mức Fermi khi thay đổi vector trượt. Như vậy nhìn chung điều khiển sự xếp chồng giữa các lớp có thể cho phép kiểm soát và biến đổi các tính chất của hệ theo hướng mong muốn.

Trong một bài báo công bố năm 1988 [17], Duncan Haldane đã thêm vào xấp xỉ TB ở lân cận gần nhất của mạng lục giác đơn lớp một số hạng mô tả các quá trình tunneling (*hopping*) của điện tử tới các lân cận gần thứ hai (*next-nearest neighbor*) với tham số tunneling là số phức, tạo ra được trạng thái Hall lượng tử. Trước công trình của Haldane, hiệu ứng Hall lượng tử (*QHE*) trong vật liệu hai chiều đã gắn liền với sự có mặt của từ trường ngoài [18, 19, 20]. Vì vậy mô hình Haldane đánh dấu một bước ngoặt đáng chú ý, vì nó là mô hình đầu tiên về một lớp vật liệu điện môi topo mà QHE có thể được thể hiện như một đặc tính nội tại của cấu trúc vùng năng lượng thay vì từ ảnh hưởng của từ trường ngoài, và được gọi là vật liệu điện môi Hall lượng

tử dị thường (*QAH*). Mô hình mô tả một hệ hai dải năng lượng có các đặc tính topo không tầm thường được đặc trưng bởi một bất biến topo, số Chern (ký hiệu là  $C$ ), tỷ lệ thuận với độ dẫn của các trạng thái biên, vì vậy còn được gọi là vật liệu điện môi Chern. Nghiên cứu của Haldane là ví dụ đơn giản nhất của vật liệu điện môi Chern có mạng lục giác. Giảm dần pha của mô hình thu hút nhiều mối quan tâm nghiên cứu bởi đặc điểm nổi bật là sự chuyển tiếp giữa các pha điện môi tầm thường và điện môi topo phụ thuộc vào giá trị pha  $\phi$  của tham số tunneling tới lân cận gần thứ hai. Sự đưa vào pha từ  $\phi$  mô phỏng một từ trường định xứ phá vỡ đối xứng nghịch đảo thời gian, hay đối xứng  $T$ , sao cho từ thông tổng cộng qua một ô đơn vị bằng không (do đó bảo toàn đối xứng tịnh tiến của mạng). Dựa trên kết quả của Thouless và cộng sự [21, 22], Haldane đã chứng minh rằng sự tồn tại của trạng thái Hall lượng tử không hoàn toàn phụ thuộc vào sự hiện diện của từ trường ngoài, mà phụ thuộc vào các đối xứng của hệ và các pha topo của nó.

Lấy cảm hứng từ ý tưởng của Haldane, trong hơn một thập kỷ qua nhiều nghiên cứu mở rộng về các pha topo và QHE dựa trên mô hình Haldane và các hệ mạng lục giác một hay nhiều lớp đã được thực hiện. Có thể kể ra một số ví dụ về các hướng nghiên cứu khác nhau đã và đang được quan tâm liên quan đến mô hình Haldane.

Đầu tiên, có thể thấy nhiều nghiên cứu hướng đến khám phá ảnh hưởng của các đối xứng không gian khác đến các đặc tính topo của hệ vật liệu, ngoài đối xứng nghịch đảo thời gian bị phá vỡ về bản chất. Chẳng hạn, Wang và cộng sự [23] đã xem xét các đặc tính topo của mô hình Haldane cho hệ đơn lớp với đối xứng xoay  $C_3$  của mạng bị phá vỡ bằng cách điều chỉnh cường độ của một trong ba tham số tunneling tới lân cận gần nhất ( $t_1$ ), và hai trong sáu tham số tunneling tới lân cận gần thứ hai ( $t_2$ , trong số hạng Haldane). Kết quả là xuất hiện một sự chuyển tiếp từ pha điện môi QAH sang một pha điện môi topo bậc cao (*HOTI*), được bảo vệ bởi đối xứng nghịch đảo không gian, ở một tỷ lệ thích hợp giữa các cường độ tunneling. Mô hình này cũng cho thấy một trạng thái góc trong cấu hình chấm lượng tử, và có thể được chuyển về trạng thái điện môi tầm thường khi phá vỡ đối xứng nghịch đảo không gian mà không cần trải qua quá trình đóng và mở lại vùng cấm. Trên tinh thần tương tự, Mondal và cộng sự [24] đã nghiên cứu mô hình Haldane cho hệ lục giác hai lớp với cấu hình xếp AB trong đó đối xứng  $C_3$  bị phá vỡ bằng cách điều chỉnh một trong ba tham số

tunneling trong phạm vi lân cận gần nhất ( $t_1$ ). Nghiên cứu này chỉ ra cái gọi là "giới hạn semi-Dirac" xuất hiện trong mạng lục giác khi chưa thêm vào số hạng Haldane, thu được khi tham số cường độ được điều chỉnh ( $t'_1$ ) đạt giá trị gấp đôi hai tham số còn lại ( $t'_1 = 2t_1$ ). Khi thêm số hạng Haldane, các tác giả cho thấy sự hình thành và các quá trình chuyển tiếp khác nhau giữa các pha topo không tầm thường có số Chern cao  $C = \pm 2$  trên các dải năng lượng gần mức Fermi, bên cạnh các pha  $C = \pm 1$  được hỗ trợ trên các dải nằm xa hơn. Sự chuyển pha được thể hiện bởi sự xuất hiện hoặc biến mất của các trạng thái biên chiral trong cấu hình dải nano và sự biến mất của các "plateau" trong độ dẫn Hall dị thường.

Một nghiên cứu khác của Bhattacharjee và cộng sự [25] cũng đã được thực hiện cho cấu hình xếp AA, chỉ ra rằng số Chern vẫn xác định ngay cả khi xuất hiện một số hữu hạn các điểm suy biến giữa các dải hóa trị, miễn là các dải này luôn được phân tách khỏi các dải dẫn bởi các vùng cấm. Dựa trên giản đồ pha của hệ, các tác giả đã đưa ra một thủ tục để chuyển pha của hai hệ đơn lớp được xếp chồng kiểu AA từ trạng thái topo này sang trạng thái topo khác theo một quá trình biến đổi chậm (quá trình đoạn nhiệt) bằng cách tăng và giảm cường độ coupling giữa chúng.

Trong khi đó, có những nỗ lực để khám phá các điều kiện cho sự hình thành các pha topo không tầm thường với số Chern lớn ( $|C| \geq 2$ ) trong hệ mạng lục giác một cách tổng quát hơn. Về cơ bản, khi xem xét các quá trình tunneling trong phạm vi ngắn, xếp chồng  $N$  lớp vật liệu  $|C| = 1$  với nhau có thể hỗ trợ các pha với tối đa  $|C| = N$  trong hệ kết hợp, bên cạnh việc cho phép tạo ra các dải năng lượng phẳng với độ phẳng (*flatness*) cao tùy ý [26, 27]. Bên cạnh đó, trong bài báo năm 2012 [28], Sticlet và cộng sự đã phát triển một phương pháp để tính số Chern cho các hệ vật liệu điện môi Chern hai chiều có hai dải năng lượng, chẳng hạn như mô hình Haldane gốc, từ đó đi đến một quy tắc để thu được các mô hình cho phép sự tồn tại của các pha có số Chern lớn mà không cần tăng số dải năng lượng. Theo đó, điều kiện cần thiết đầu tiên để có thể thu được số Chern bằng  $\pm N$  là Hamiltonian phải chứa ít nhất  $2N$  điểm Dirac, hay còn gọi là các điểm "satellite-Dirac". Trên cơ sở này, trong một nghiên cứu khác [29] Sticlet và Piéchon đã đưa ra một số ví dụ về các mô hình Hamiltonian hai dải năng lượng của mạng lục giác đơn lớp có khả năng cho số Chern lên đến  $\pm 10$ , bằng cách xét thêm các số hạng mô tả các quá trình tunneling tới các lân cận ở các

phạm vi xa hơn. Điều này đạt được là do số điểm satellite-Dirac xung quanh mỗi valley  $K_+$  và  $K_-$  tăng lên khi thêm vào Hamiltonian các lân cận xa hơn.

Bên cạnh đó, nhiều nghiên cứu đã đào sâu hơn vào bản chất vật lý của mô hình Haldane. Chẳng hạn, một công trình năm 2008 của Hao và cộng sự [30] đã xem xét lại các trạng thái biên topo và hiệu ứng Hall lượng tử trong mô hình Haldane ứng với cấu hình dải nano mạng lục giác đơn lớp có biên zigzag hoặc armchair, rút ra phương trình Harper cho năng lượng của các trạng thái này và biểu diễn độ dẫn Hall bị lượng tử hóa của vật liệu qua các số "winding" của chúng. Năm 2022, Xi Wu và cộng sự [31] đã nghiên cứu một mô hình Haldane đa lớp, trong đó mỗi lớp được mô tả bởi mô hình Haldane gốc và coupling giữa các lớp được xem xét đơn giản nhất (tunneling vuông góc), nhằm tính toán các bất biến topo chịu trách nhiệm cho độ dẫn điện trong hiệu ứng Hall lượng tử nội tại. Cường độ coupling giữa các lớp được thay đổi từ giới hạn bằng không đến rất lớn để rút ra rằng giá trị của bất biến topo cho hệ kết hợp bằng tích giữa số lớp và giá trị bất biến topo đó cho mô hình đơn lớp. Đáng chú ý là công trình của Ibanez-Azpiroz và cộng sự [32]. Bài báo này áp dụng phương pháp "ab initio", đi từ một mô hình Hamiltonian liên tục với thế năng  $V_L(\mathbf{r})$  của mạng lục giác đến mô hình Haldane, tái hiện lại giản đồ pha của mô hình nổi tiếng này. Kết luận nổi bật nhất, như các tác giả đã chỉ ra, là chỉ một phần nhỏ của giản đồ pha trong mô hình Haldane gốc thực sự có thể đạt được. Điều này là do Haldane đã đề xuất mô hình dựa trên cái gọi là phép thế Peierls, mà các tác giả đã chỉ ra là không hợp lý khi áp dụng cho Hamiltonian chứa thế vector  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  có cùng chu kỳ tuần hoàn với hình học của mạng vật liệu [33]. Nói cách khác, phép thế Peierls chỉ có hiệu lực khi  $\mathbf{A}(\mathbf{r})$  biến đổi chậm so với kích thước của mạng, điều kiện mà mô hình Haldane không thỏa mãn. Do đó, thực tế khoảng giá trị có thể của pha phức  $\phi$  không phải là toàn bộ  $[-\pi, \pi]$  mà bị giới hạn phụ thuộc vào cường độ của  $V_L(\mathbf{r})$ . Ngoài ra, sự đóng vùng cấm năng lượng trên đường chuyển pha của mô hình Haldane không thực sự xảy ra tại chính xác các điểm  $K$  của vùng Brillouin, mà tại một vị trí khác ở gần, bởi vì khi đối xứng phân mạng bị phá vỡ (bằng tính toán tự hợp), cường độ của các tham số tunneling phức trong số hạng Haldane trở nên khác nhau giữa hai phân mạng  $A$  và  $B$ , trái với giả sử của mô hình Haldane. Các tác giả cũng tìm thấy rằng miền pha của các pha topo không tầm thường ( $C = \pm 1$ ) thu hẹp nhanh chóng khi tăng cường độ của  $V_L(\mathbf{r})$ , từ

đó đưa ra một cách khác để biểu thị giản đồ pha.

Lấy cảm hứng từ mô hình Haldane, nhiều nhóm nghiên cứu đã đề xuất những mô hình khác dựa trên hình thức tương tự chứa những đặc tính topo mong muốn. Chẳng hạn, mô hình Haldane sửa đổi của Colomés và Franz [34] cho phép sự hình thành của các trạng thái biên "antichiral". Đây là những trạng thái điện tử lan truyền theo cùng một hướng dọc theo hai biên của dải nano mạng lục giác, được bù bởi dòng lan truyền theo hướng ngược lại trong phần khối của dải, trái ngược với trạng thái biên "chiral" lan truyền theo hai hướng ngược nhau trên hai biên trong vật liệu điện môi Haldane hay Hall lượng tử, hay các trạng thái biên "helical" trong hiệu ứng Hall lượng tử spin (*QSHE*) [35]. Tính bền vững của những trạng thái "antichiral" này đã được chứng minh thông qua tính toán độ dẫn của dải nano với biên zigzag dưới ảnh hưởng của tạp ở các nồng độ khác nhau. Các tác giả cũng khẳng định rằng mô hình sửa đổi của họ có thể được thực nghiệm bằng cách sử dụng các nguyên tử siêu lạnh như đã được thực hiện cho mô hình gốc [36], hoặc thông qua một con đường khác dựa trên hiệu ứng "spin-orbit coupling" (*SOC*), được phát triển bởi nghiên cứu mở rộng của Kane và Mele [35]. Các Hamiltonian với spin  $s_z = \pm 1$  vi phạm đối xứng nghịch đảo thời gian, do đó tương đương với mô hình Haldane khi không tính đến spin. Mặc dù hiệu ứng *SOC* trong graphene rất yếu, nhưng vẫn có thể quan sát được ở một nhiệt độ đủ thấp có thể đạt được trong thực nghiệm hiện nay. Điều này góp phần khẳng định tầm quan trọng của mô hình Haldane. Gần đây, các trạng thái biên "antichiral" cũng đã được khẳng định bởi Cheng và cộng sự [37] rằng có thể thu được từ mô hình Haldane gốc bằng cách kết hợp các hệ đơn lớp có tính chiral ngược nhau. Tính chất topo và tính bền vững của các trạng thái thu được đã được các tác giả kiểm tra bằng tính toán số Chern và truyền dẫn dưới tác động của tạp.

Về mặt thực nghiệm, thử thách lớn nhất trong việc hiện thực hóa mô hình Haldane là tạo ra được quá trình tunneling tới lân cận gần thứ hai với cường độ phức. Có thể kể đến nỗ lực của Rechtsman và cộng sự [38] trong một thí nghiệm sử dụng các ống dẫn sóng có hình xoắn ốc, được sắp xếp thành mạng tổ ong trong mặt phẳng *Oxy*, với chiều truyền sóng *Oz* đóng vai trò như trục thời gian. Hình dạng xoắn ốc của các ống dẫn sóng phá vỡ đối xứng dọc trục *Oz*, do đó mô phỏng sự phá vỡ đối xứng đảo ngược thời gian. Đây là một ví dụ của cái gọi là "vật liệu điện môi topo quang tử"

và không đòi hỏi từ trường ngoài. Thí nghiệm đã cho thấy những mode truyền sóng được bảo vệ về mặt topo của ánh sáng nhìn thấy trên các biên của mạng, và có thể xem như là sự hiện thực hóa của mô hình Haldane trong miền pha mà đối xứng phân mạng được bảo toàn. Sau đó, Jotzu và cộng sự [36] đã tiến thêm một bước nữa tới toàn bộ không gian tham số của mô hình Haldane gốc bằng cách sử dụng một tập hợp các nguyên tử Kali siêu lạnh được sắp xếp trong một mạng quang học hình tổ ong kiểm soát bởi laser. Sự phá vỡ đối xứng  $T$  đạt được bằng cách cho các nút mạng dao động tuần hoàn xung quanh một quỹ đạo hình elip trong không gian thực, trong khi đối xứng phân mạng được phá vỡ bằng cách làm biến dạng hình học của mạng. Các tác giả đã tái hiện chính xác giản đồ pha của mô hình Haldane với một tham số pha  $\theta$  đặc trưng cho quỹ đạo dao động của vị trí nút mạng thay vì đóng vai trò như pha phức  $\phi$  trong mô hình Haldane gốc, mặc dù chúng đều là nguồn gốc phá vỡ đối xứng  $T$ . Modugno và Pettini [39] sau đó đã đưa ra một phân tích lý thuyết dựa trên một mô hình hiệu dụng mô tả thí nghiệm của nhóm Jotzu, chỉ ra rằng hoàn toàn không có sự tương ứng chính thức nào giữa hai loại pha này. Kết quả tính toán của hai tác giả chỉ ra sự tương tự về mặt định tính giữa giản đồ pha của một mạng tổ ong trải qua dao động tuần hoàn (*shaken honeycomb lattice*) và giản đồ pha của mô hình Haldane. Các giản đồ pha này về bản chất đều bắt nguồn từ các cấu trúc định xứ xung quanh các điểm Dirac thay vì từ các chi tiết khác của mô hình. Do đó, một mô hình TB cho mạng lục giác với các pha topo được xác định bởi sự phá vỡ đối xứng phân mạng và đối xứng nghịch đảo thời gian không nhất thiết phải được mô tả bởi mô hình Haldane. Nói cách khác, giản đồ pha của Haldane thực tế xác định một lớp phổ quát các Hamiltonian có các đặc tính topo tương tự nhau.

Mặc dù thực tế là không thể được hiện thực hóa trực tiếp bởi các hệ vật liệu thông thường, mô hình Haldane vẫn có tầm quan trọng nền tảng vì đã mở ra một sân chơi cho những ý tưởng mà cuối cùng dẫn đến sự dự đoán và khám phá ra vật liệu điện môi topo  $\mathbb{Z}_2$ , và vẫn đang tiếp tục đặt cơ sở khái niệm cho nhiều nghiên cứu lý thuyết và thực nghiệm khám phá các vật liệu điện môi và siêu dẫn topo.

## 1.2. Tổng quan về đề tài luận văn

Trong luận văn này chúng tôi áp dụng mô hình Haldane vào hệ SBG với sự tổng quát hóa của các thông số động lực, tức là hệ mạng lục giác hai lớp trượt (*SBH*), để nghiên cứu các pha điện tử khác nhau có thể xuất hiện trong hệ này cũng như khảo sát các điều kiện cho khả năng tồn tại các pha điện môi thường và điện môi topo, cũng như các pha kim loại thường và kim loại topo, khi thay đổi các thông số động lực của mô hình và các thông số hình học của mạng. Chúng tôi đặt trọng tâm nghiên cứu vào ảnh hưởng của coupling giữa hai lớp lên sự hình thành của các pha này. Nghiên cứu do đó được tiến hành bằng cách xem xét các quá trình tunneling của điện tử giữa hai lớp một cách chi tiết hơn so với trường hợp đơn giản nhất (vuông góc) thường được chọn trong các nghiên cứu trước đó [26, 27, 25, 31, 24], cùng với việc mở rộng khảo sát tới các cấu hình trượt trung gian giữa hai lớp, bên cạnh hai cấu hình xếp AA và AB là hai trường hợp đặc biệt có đối xứng hình học cao nhất. SBH là một lớp các cấu hình mạng lục giác hai lớp trong đó đối xứng tịnh tiến được bảo toàn, mà chúng tôi chưa tìm thấy bất kỳ một khảo sát tổng quát nào trước đó về hệ vật liệu này trong lãnh địa của topo và QHE. Do đó, chúng tôi mong đợi có những khám phá thú vị khi lựa chọn đề tài này.

Nghiên cứu sẽ được thực hiện trên cơ sở tính toán và phân tích cấu trúc vùng năng lượng của các hệ 2D cũng như của các cấu hình dải nano 1D, thu được từ các mô hình Hamiltonian xây dựng cho từng cấu hình, để quan sát sự hình thành của các pha kim loại, điện môi và các trạng thái biên. Chúng tôi dựa vào một bất biến topo đặc trưng của các hệ vật liệu dựa trên mô hình Haldane, số Chern, và nguyên lý "tương ứng bulk-edge" để nhận diện các pha kim loại và điện môi tầm thường cũng như không tầm thường về mặt topo.

## Chương 2. ĐỐI TƯỢNG VÀ PHƯƠNG PHÁP NGHIÊN CỨU

### 2.1. Mạng lục giác hai chiều vô hạn

#### 2.1.1. Mạng đơn lớp

Xét một mạng lục giác đơn lớp (MLH) hai chiều vô hạn trong không gian thực, hay không gian vật lý,  $\Gamma$  được đặt song song với mặt phẳng  $Oxy$  của hệ tọa độ Descartes. Mạng này bao gồm hai phân mạng (hay mạng con) tam giác, ký hiệu  $A$  và  $B$ , lồng vào nhau (Hình. 2.1a). Lấy khoảng cách gần nhất giữa hai nguyên tử trong mạng lục giác là  $a_{CC} = 0,142$  nm như trong mạng graphene. Do đó, hằng số mạng có giá trị là  $a = \|\mathbf{a}_{1,2}\| = a_{CC}\sqrt{3} \approx 0,246$  nm, với  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  là hai vector đơn vị. Vị trí các nguyên tử của phân mạng  $A$  và  $B$  trong  $\Gamma$  lần lượt là  $\mathbf{R}_A = \mathbf{r}_A + \mathbf{R}$  và  $\mathbf{R}_B = \mathbf{r}_B + \mathbf{R} = (\mathbf{r}_A + \mathbf{b}_j) + \mathbf{R} = \mathbf{R}_A + \mathbf{b}_j$  ( $j \in \{1, 2, 3\}$ ), trong đó

$$\mathbf{b}_1 = -\frac{1}{3}\mathbf{a}_1 - \frac{1}{3}\mathbf{a}_2, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2}{3}\mathbf{a}_1 - \frac{1}{3}\mathbf{a}_2, \quad \mathbf{b}_3 = -\frac{1}{3}\mathbf{a}_1 + \frac{2}{3}\mathbf{a}_2 \quad (2.1)$$

và  $\mathbf{R} = c_R^1\mathbf{a}_1 + c_R^2\mathbf{a}_2$  ( $c_R^1, c_R^2 \in \mathbb{Z}$ ) là các vector mạng của mạng lục giác.

Vì mạng có đối xứng tịnh tiến nên mạng đảo của hệ tồn tại, với các vector mạng đảo được xác định qua mối quan hệ  $\mathbf{a}_j^* \cdot \mathbf{a}_k = 2\pi\delta_{jk}$  ( $j, k \in \{1, 2\}$ ). Vùng Brillouin, ô đơn vị của mạng đảo, thường được lấy là hình lục giác (Hình. 2.1), với 6 đỉnh được xác định như sau:

$$\mathbf{K}_1 = \frac{2}{3}\mathbf{a}_1^* + \frac{1}{3}\mathbf{a}_2^* = -\mathbf{K}_4, \quad \mathbf{K}_2 = \frac{1}{3}\mathbf{a}_1^* - \frac{1}{3}\mathbf{a}_2^* = -\mathbf{K}_5, \quad \mathbf{K}_6 = \frac{1}{3}\mathbf{a}_1^* + \frac{2}{3}\mathbf{a}_2^* = -\mathbf{K}_3 \quad (2.2)$$

6 điểm  $\mathbf{K}$  này được phân vào hai tập hợp, gọi là "valley", của mạng lục giác. Ở đây, ta quy ước ba điểm  $\mathbf{K}$  với chỉ số lẻ  $\{1, 3, 5\}$  thuộc valley lẻ  $\mathbf{K}_-$ , và ba điểm còn lại thuộc valley chẵn  $\mathbf{K}_+$ .

Hamiltonian của hệ MLH trong xấp xỉ TB ở lân cận gần nhất được biểu diễn như sau:

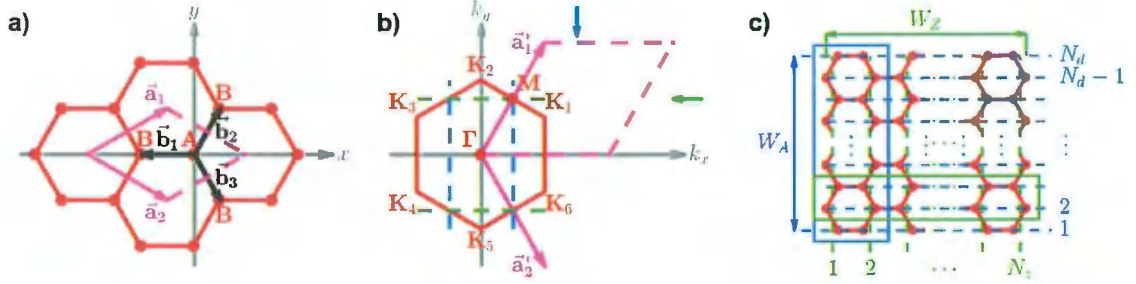
$$H_{ML}^0 = H_1 + h.c. + H_0 \quad (2.3)$$



trong đó

$$H_1 = t_1 \sum_{\mathbf{R}_A} \sum_{j=1}^3 |\mathbf{R}_A\rangle \langle \mathbf{R}_B^j| \quad (\mathbf{R}_B^j = \mathbf{R}_A + \mathbf{b}_j) \quad (2.4)$$

$$H_0 = \sum_{\nu} \sum_{\mathbf{R}_\nu} V_\nu |\mathbf{R}_\nu\rangle \langle \mathbf{R}_\nu| \quad (\nu \in \{A, B\})$$



Hình 2.1: a) Cấu trúc hình học của mạng lục giác (đỏ) đơn lớp trong không gian thực. Hai nút mạng đại diện thuộc hai phân mạng  $A$  và  $B$  được chỉ ra. Hai vector đơn vị  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2$  (hồng) cùng với hai đường đứt nét lập thành ô đơn vị hình thoi. Ba vector  $\mathbf{b}_j$  là các vector tunneling đến lân cận gần nhất trong cùng lớp. b) Vùng Brillouin (đỏ) của mạng lục giác trong không gian  $\mathbf{k}$ , với hai vector đơn vị  $\mathbf{a}_1^*, \mathbf{a}_2^*$  (hồng). Hình thoi nét đứt với một cạnh là vector  $\mathbf{a}_1^*$  biểu thị một ô đơn vị khác được sử dụng trong luận văn này để hiển thị cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối và tính toán số Chern. Hướng được chọn để quan sát cấu trúc vùng năng lượng này được chỉ ra bởi hai mũi tên màu xanh da trời (đối với các cấu hình  $C_1, C_2$  và  $C_3$ ) và xanh lục (đối với các cấu hình  $C_4$  và  $C_5$ ). Các cặp đường nét đứt màu xanh da trời và xanh lục giới hạn các miền của vùng Brillouin (đỏ) trong đó các dải năng lượng khối được lượng tử hóa thành các dải của dải nano (xem mô tả chi tiết trong nội dung chính). c) Cấu trúc dải nano đơn lớp (đỏ) thu được bằng cách giới hạn một chiều của hệ hai chiều. Giới hạn theo chiều  $y$  thu được biên armchair có độ rộng  $W_A$  với  $N_d$  đường dimmed được chỉ ra bởi các đường nét đứt xanh da trời. Giới hạn theo chiều  $x$  thu được biên zigzag có độ rộng  $W_Z$  với  $N_z$  đường zigzag được chỉ ra bởi các đường nét đứt xanh lục. Các hình chữ nhật cùng màu tương ứng xác định các ô đơn vị của dải nano.

Số hạng đầu tiên  $H_1$  mô tả quá trình chuyển trạng thái, hay tunneling trong không gian thực, của một electron từ  $|\mathbf{R}_B^j\rangle$  đến  $|\mathbf{R}_A\rangle$  với cường độ tunneling  $t_1$ ; "h.c." (*hermitian conjugate*) biểu thị liên hợp Hermit của  $H_1$ , tức quá trình tunneling từ  $|\mathbf{R}_A\rangle$  đến  $|\mathbf{R}_B^j\rangle$  với cùng cường độ; và số hạng thứ ba  $H_0$  là năng lượng thể năng nguyên tử, hay năng lượng "onsite", trên từng phân mạng  $A$  và  $B$  với cường độ tương ứng là  $V_A$  và  $V_B$ .

Tham số cường độ tunneling  $t_1$  được tính theo mô hình Slater-Koster với công

thức sau:

$$t(\mathbf{r}) = t_{\parallel} \exp\left(-\frac{r - a_{CC}}{r_0}\right) \left[1 - \left(\frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_z}{r}\right)^2\right] + t_{\perp} \exp\left(-\frac{r - d_{GG}}{r_0}\right) \left(\frac{\mathbf{r} \cdot \mathbf{e}_z}{r}\right)^2 \quad (2.5)$$

trong đó  $t_{\parallel} \approx -2,7$  eV và  $t_{\perp} \approx 0,48$  eV là các tham số Slater-Koster,  $r = \|\mathbf{r}\|$ ,  $\mathbf{e}_z$  là vector đơn vị của trục  $z$ ,  $d_{GG} = 0,335$  nm là khoảng cách giữa hai lớp liền kề trong trường hợp xem xét mạng có nhiều hơn một lớp, và  $r_0$  là một tham số thực nghiệm dùng để đặc trưng cho sự suy giảm theo khoảng cách trong không gian thực của cường độ tunneling. Ước tính xấp xỉ thường dùng của tham số này là  $r_0 \approx 0,184\sqrt{3}a_{CC}$ .

Như vậy theo mô hình Slater-Koster, cường độ tunneling của điện tử giữa hai vị trí bất kỳ trong không gian thực có thể được biểu diễn thông qua tổng của tham số *in-plane hopping*  $t_{\parallel}$  và tham số *vertical hopping*  $t_{\perp}$  nhân bởi các hệ số tương ứng được đặc trưng bởi vector khoảng cách  $\mathbf{r}$  giữa hai vị trí. Cụ thể,  $|t_{\parallel}|$  chính là cường độ tunneling tới lân cận gần nhất trong cùng lớp, trong khi  $|t_{\perp}|$  là cường độ lớn nhất trong số các quá trình tunneling giữa hai lớp, chỉ có thể đạt được khi điện tử tunneling theo hướng vuông góc với mặt phẳng lớp giữa hai nút mạng nằm chính xác đối diện trên hai lớp. Điều này sẽ được chỉ ra rõ hơn khi phân tích các hệ hai lớp xếp chồng kiểu AA và AB.

Để đơn giản, lấy  $\mathbf{r}_A = \mathbf{0} \Rightarrow \mathbf{R}_A = \mathbf{R}$  và ký hiệu  $|\mathbf{R}_A\rangle = |\mathbf{R}\rangle$  là vector trạng thái của điện tử định xứ trên phân mạng  $A$ . Vector trạng thái ứng với điện tử định xứ tại 3 nguyên tử lân cận gần nhất thuộc phân mạng  $B$  do đó là  $|\mathbf{R} + \mathbf{b}_j\rangle$  ( $j \in \{1, 2, 3\}$ ). Hamiltonian được viết lại như sau:

$$H_{\text{ML}}^0 = t_1 \sum_{\mathbf{R}} \sum_{j=1}^3 |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{b}_j| + h.c. \quad (2.6)$$

$$+ \sum_{\mathbf{R}} (V_A |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R}| + V_B |\mathbf{R} + \mathbf{b}_1\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{b}_1|)$$

Biểu diễn các vector trạng thái trong không gian thực thông qua các vector Bloch trong không gian mạng đảo (không gian  $\mathbf{k}$ ) sử dụng biến đổi Fourier, ta được:

$$|\mathbf{R}_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}_A}^{\text{BZ}} e^{-i\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{R}_A} |\mathbf{k}_A\rangle, \quad |\mathbf{R}_B\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}_B}^{\text{BZ}} e^{-i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{R}_B} |\mathbf{k}_B\rangle \quad (2.7)$$

trong đó  $N$  là số nguyên tử trong một phân mạng,  $i$  là đơn vị ảo,  $|\mathbf{k}_A\rangle$  và  $|\mathbf{k}_B\rangle$  là các vector trạng thái của electron định xứ trên từng phân mạng biểu diễn trong không gian  $\mathbf{k}$  và "BZ" chỉ vùng Brillouin, ô đơn vị của mạng đảo. Các biến đổi ngược của (2.7) được viết như sau

$$|\mathbf{k}_A\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_A}^{\Gamma} e^{i\mathbf{k}_A \cdot \mathbf{R}_A} |\mathbf{R}_A\rangle, \quad |\mathbf{k}_B\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{R}_B}^{\Gamma} e^{i\mathbf{k}_B \cdot \mathbf{R}_B} |\mathbf{R}_B\rangle \quad (2.8)$$

Trạng thái  $|\psi(\mathbf{k})\rangle$  của electron trong hệ lực giac cùng phổ năng lượng  $E(\mathbf{k})$  của nó thu được bằng cách giải phương trình Schrodinger

$$H_{\text{ML}}^0(\mathbf{k})|\psi(\mathbf{k})\rangle = E(\mathbf{k})|\psi(\mathbf{k})\rangle \quad (2.9)$$

trong đó  $H_{\text{ML}}^0(\mathbf{k})$  là Hamiltonian của hệ biểu diễn trong không gian  $\mathbf{k}$  và

$$|\psi(\mathbf{k})\rangle = c_A|\mathbf{k}_A\rangle + c_B|\mathbf{k}_B\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{\mathbf{R}}^{\Gamma} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}} (c_A|\mathbf{R}\rangle + c_B|\mathbf{R} + \mathbf{b}_1\rangle) \quad (2.10)$$

với  $c_A$  và  $c_B$  là các hệ số tổ hợp cần tìm bằng cách giải phương trình (2.9).

Tác động Hamiltonian (2.6) lên trạng thái (2.10) sau đó sử dụng các biểu diễn (2.7) và (2.8), phương trình (2.9) rút về dạng ma trận:

$$\begin{pmatrix} V_A & t_1\gamma(\mathbf{k}) \\ t_1\gamma^\dagger(\mathbf{k}) & V_B \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} = E(\mathbf{k}) \begin{pmatrix} c_A \\ c_B \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

và cho ta Hamiltonian ở dạng Bloch:

$$H_{\text{ML}}^0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} V_A & t_1\gamma(\mathbf{k}) \\ t_1\gamma^\dagger(\mathbf{k}) & V_B \end{pmatrix} \quad (2.12)$$

trong đó

$$\gamma(\mathbf{k}) = \sum_{j=1}^3 e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_j} \quad (2.13)$$

Ở đây, ta chọn năng lượng onsite ở dạng  $V_A = -V_B = M_0$ , khi đó Hamiltonian

có thể đưa về dạng sau:

$$H_{\text{ML}}^0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} M_0 & t_1 \gamma(\mathbf{k}) \\ t_1 \gamma^\dagger(\mathbf{k}) & -M_0 \end{pmatrix} = t_1 \sum_{j=1}^3 [\sigma_x \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_j) - \sigma_y \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_j)] + M_0 \sigma_z \quad (2.14)$$

trong đó  $\sigma_x$ ,  $\sigma_y$  và  $\sigma_z$  là các ma trận Pauli.

Phổ năng lượng của hệ đơn lớp dễ dàng thu được bằng cách chéo hóa (2.14):

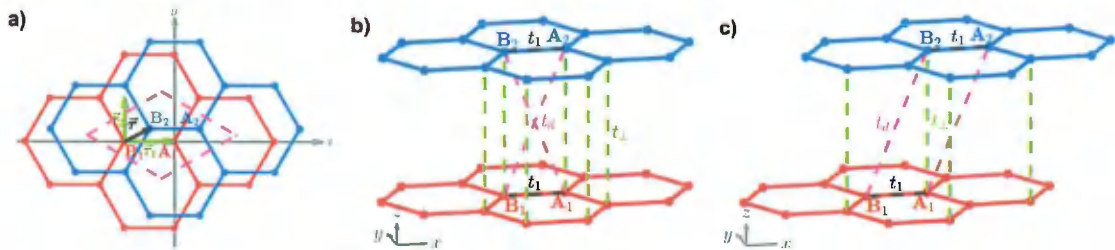
$$E(\mathbf{k}) = \pm \sqrt{t_1^2 |\gamma(\mathbf{k})|^2 + M_0^2} \quad (2.15)$$

### 2.1.2. Mạng hai lớp

Xếp chồng hai lớp mạng lục giác cho ta một số vô hạn các cấu hình mới của hệ vì hai lớp có thể được xếp tương đối với nhau theo vô số cách. Trong luận văn này, ta chỉ xét các cấu hình mạng lục giác hai lớp trượt (BLH), tức là hai lớp được dịch tương đối với nhau theo một vector trượt  $\tau$  xuất phát từ cấu hình xếp trùng khít ban đầu, hay cấu hình xếp AA (AA-stacking BLH). Ta phân biệt ra hai phương trượt riêng biệt vuông góc với nhau  $\tau_1$  và  $\tau_2$ ,

$$\tau_1 = \frac{1}{3}(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2), \quad \tau_2 = \frac{1}{2}(\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2) \quad (2.16)$$

và biểu diễn  $\tau = c_\tau^1 \tau_1 + c_\tau^2 \tau_2$ , sau đây sẽ được ký hiệu là  $\tau = (c_\tau^1, c_\tau^2)$ .



Hình 2.2: a) Cấu trúc hình học của mạng lục giác hai lớp trượt trong không gian thực. Lớp dưới (đỏ) và lớp trên (xanh da trời) lần lượt đóng góp hai nút mạng vào ô đơn vị (hình thoi màu hồng). Vector trượt tương đối giữa hai lớp  $\tau$  (đen) có thể được biểu diễn thông qua hai vector trượt thành phần  $\tau_1$  và  $\tau_2$  (xanh lục). b) và c) lần lượt mô tả cấu hình xếp AA ( $\tau = 0$ ) và xếp AB ( $\tau = \tau_1$ ), trong đó các đường nét đứt với màu sắc khác nhau mô tả ba quá trình tunneling khác nhau: in-plane hopping ( $t_1$ , đen), vertical hopping ( $t_\perp$ , xanh lục) và skew hopping ( $t_d$ , hồng).

Như vậy bằng cách thay đổi  $c_\tau^1, c_\tau^2 \in [0; 1]$ , ta thu được tất cả các cấu hình trượt có thể của hệ hai lớp (Hình. 2.2a). Trong luận văn này, ta chỉ xét các cấu hình trượt

theo hai phương  $\tau_1$  và  $\tau_2$  riêng biệt, tức là chỉ một trong hai hệ số  $c_\tau^1, c_\tau^2$  khác không, vì đây là hai phương cơ bản dẫn đến những cấu hình có đối xứng đặc biệt. Tính chất của các cấu hình tổ hợp khác ( $c_\tau^1, c_\tau^2 \neq 0$ ) có thể được suy ra dựa trên kết hợp hiểu biết về các cấu hình của hai phương cơ bản này.

Đối với hệ trượt, đối xứng tịnh tiến của hệ luôn được bảo toàn, và một ô đơn vị của mạng bao gồm 4 nguyên tử:  $A_1, B_1$  trên lớp thứ nhất và  $A_2, B_2$  trên lớp thứ hai. Vị trí các nguyên tử trong mạng hai lớp được mã hóa bởi vector  $\mathbf{R}_{\nu_l} = \mathbf{R} + \mathbf{d}_{\nu_l}$  trong không gian thực, trong đó  $\nu \in \{A, B\}$  là chỉ số phân mạng,  $l \in \{1, 2\}$  là chỉ số lớp. Vị trí tương đối của các nguyên tử trong một ô đơn vị được cho bởi:

$$\begin{aligned} \mathbf{d}_{A_1} &= \mathbf{0} \\ \mathbf{d}_{A_2} &= \boldsymbol{\tau} \\ \mathbf{d}_{B_1} &= \mathbf{b}_1 \\ \mathbf{d}_{B_2} &= \mathbf{b}_1 + \boldsymbol{\tau} \end{aligned} \quad (2.17)$$

Hamiltonian của hệ trong xấp xỉ TB ở lân cận gần nhất được biểu diễn như sau:

$$H_{\text{BL}}^0 = H_1 + H_{21} + H_{22} + H_{23} + h.c. \quad (2.18)$$

trong đó các số hạng, chưa xét đến năng lượng onsite, có dạng cụ thể là

$$\begin{aligned} H_1 &= \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}_j}^{\Gamma} t(\mathbf{d}_{A_1 B_1}^j) \sum_l |\mathbf{R} + \mathbf{d}_{A_l}\rangle \langle \mathbf{R}_j + \mathbf{d}_{B_l}| \\ H_{21} &= \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}_j}^{\Gamma} t(\mathbf{d}_{A_1 A_2}^j) \sum_{\nu} |\mathbf{R} + \mathbf{d}_{\nu_1}\rangle \langle \mathbf{R}_j + \mathbf{d}_{\nu_2}| \\ H_{22} &= \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}_j}^{\Gamma} t(\mathbf{d}_{A_1 B_2}^j) |\mathbf{R} + \mathbf{d}_{A_1}\rangle \langle \mathbf{R}_j + \mathbf{d}_{B_2}| \\ H_{23} &= \sum_{\mathbf{R}, \mathbf{R}_j}^{\Gamma} t(\mathbf{d}_{B_1 A_2}^j) |\mathbf{R} + \mathbf{d}_{B_1}\rangle \langle \mathbf{R}_j + \mathbf{d}_{A_2}| \end{aligned} \quad (2.19)$$

Ở đây,  $\mathbf{d}_{\alpha\beta}^j = (\mathbf{R}_j + \mathbf{d}_\beta) - (\mathbf{R} + \mathbf{d}_\alpha) = (\mathbf{d}_\beta - \mathbf{d}_\alpha) + \mathbf{d}\mathbf{R}_j \forall \alpha, \beta \in \{A_1, B_1, A_2, B_2\}$  là khoảng cách giữa hai nguyên tử trong mạng. Các tham số  $t(\mathbf{d}_{\alpha\beta}^j)$  được tính theo mô

hình Slater-Koster (2.5). Vì  $d\mathbf{R}_j = \mathbf{R}_j - \mathbf{R}$  là một vector mạng nên ta có thể lấy

$$\mathbf{d}_{\alpha\beta}^j = (\mathbf{d}_\beta - \mathbf{d}_\alpha) + \mathbf{R}_j \quad (2.20)$$

với  $\mathbf{R}_j$  là vector khoảng cách giữa hai ô cơ sở lân lượt chứa các nguyên tử  $\alpha$  và  $\beta$ . Như vậy, đối với một nguyên tử  $\alpha$  nhất định, các nguyên tử  $\beta$  lân cận của nó có thể được xác định bằng cách xác định một tập các vector  $\mathbf{R}_j$  tương ứng.

Như vậy, trong xấp xỉ (2.18), có thể phân biệt ra hai quá trình tunneling khác nhau của điện tử trong mạng nguyên tử (Hình. 2.2b, c). Quá trình tunneling trong một lớp được mô tả bởi  $H_1$ , tương tự như  $H_1$  trong (2.3), và quá trình tunneling giữa hai lớp bao gồm các số hạng  $H_{21}$ ,  $H_{22}$  và  $H_{23}$ . Rõ ràng, việc trượt hai lớp tương đối với nhau ảnh hưởng đến cường độ của quá trình tunneling giữa hai lớp, trong khi không ảnh hưởng đến quá trình tunneling trong một lớp.

Ta định nghĩa trạng thái Bloch của electron là tổ hợp tuyến tính của các trạng thái Bloch định xứ tại các nút nguyên tử:

$$|\psi(\mathbf{k})\rangle = \sum_{\alpha} c_{\alpha} |\psi_{\alpha}(\mathbf{k})\rangle = \frac{1}{\sqrt{4N}} \sum_{\mathbf{R}'} \sum_{\alpha} c_{\alpha} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}'} |\mathbf{R}' + \mathbf{d}_{\alpha}\rangle \quad (2.21)$$

trong đó các hệ số  $c_{\alpha}$  cần tìm bằng cách giải phương trình Schrodinger (2.9).

Tương tự như trường hợp đơn lớp, ta có thể thu được phương trình Schrodinger ở dạng ma trận như sau:

$$H_{\text{BL}}^0(\mathbf{k})C = E(\mathbf{k})C \quad (2.22)$$

trong đó Hamiltonian có dạng Bloch,

$$H_{\text{BL}}^0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} 0 & f_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ f_{\mathbf{k}}^{\dagger} & 0 & w_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \\ u_{\mathbf{k}}^{\dagger} & w_{\mathbf{k}}^{\dagger} & 0 & f_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}}^{\dagger} & u_{\mathbf{k}}^{\dagger} & f_{\mathbf{k}}^{\dagger} & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} c_{A_1} \\ c_{B_1} \\ c_{A_2} \\ c_{B_2} \end{pmatrix} \quad (2.23)$$

với các phần tử là

$$\begin{aligned}
f_{\mathbf{k}} &= \sum_j t(\mathbf{d}_{A_1 B_1}^j) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \\
u_{\mathbf{k}} &= \sum_j t(\mathbf{d}_{A_1 A_2}^j) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \\
v_{\mathbf{k}} &= \sum_j t(\mathbf{d}_{A_1 B_2}^j) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} \\
w_{\mathbf{k}} &= \sum_j t(\mathbf{d}_{B_1 A_2}^j) e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j}
\end{aligned} \tag{2.24}$$

trong đó  $\mathbf{R}_j$  là các vector mạng được định nghĩa trong (2.20). Lưu ý rằng các tổng trong (2.24) không nhất thiết phải lấy qua cùng một tập vector  $\mathbf{R}_j$ . Mỗi phần tử của ma trận Hamiltonian có thể có một tập  $\mathbf{R}_j$  riêng biệt tùy thuộc vào số lân cận cần dùng để xấp xỉ phần tử đó trong mô hình TB.

Vì  $f_{\mathbf{k}}$  không bị ảnh hưởng bởi  $\tau$ , nên trong xấp xỉ lân cận gần nhất, các vector của quá trình tunneling trong một lớp  $\mathbf{d}_{A_1 B_1}^j$  có thể luôn được cố định với tập vector  $\mathbf{R}_j \in \{\mathbf{0}, \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\}$ . Tức là ta luôn có

$$t(\mathbf{d}_{A_1 B_1}^j) = t(\mathbf{b}_1) = t_{\parallel} \implies f_{\mathbf{k}} = t_{\parallel} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_{A_1 B_1}^j} = t_{\parallel} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_j} = t_{\parallel} \gamma(\mathbf{k}) \tag{2.25}$$

theo (2.5) và (2.13).

Chọn năng lượng onsite ở dạng  $V_{A_1} = V_{A_2} = -V_{B_1} = -V_{B_2} = M_0$ , Hamiltonian được viết là

$$H_{\text{BL}}^0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} M_0 & f_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ f_{\mathbf{k}}^\dagger & -M_0 & w_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} \\ u_{\mathbf{k}}^\dagger & w_{\mathbf{k}}^\dagger & M_0 & f_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}}^\dagger & u_{\mathbf{k}}^\dagger & f_{\mathbf{k}}^\dagger & -M_0 \end{pmatrix} \tag{2.26}$$

Việc chéo hóa Hamiltonian của hệ hai lớp nhìn chung rất khó khăn về mặt giải tích, trừ hai cấu hình đặc biệt, đó là hai cấu hình xếp AA và AB (Hình. 2.2b, c).

- Cấu hình xếp AA ( $\tau = 0$ )

Đối với trường hợp hai lớp xếp trùng khít, các tập vector tunneling giữa hai lớp

cho từng phần tử Hamiltonian được chọn như sau:

$$\begin{aligned}
u_{\mathbf{k}} &: \quad \mathbf{R}_j \in \{\mathbf{0}\} \\
v_{\mathbf{k}} &: \quad \mathbf{R}_j \in \{\mathbf{0}, \mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2\} \\
w_{\mathbf{k}} &: \quad \mathbf{R}_j \in \{\mathbf{0}, -\mathbf{a}_1, -\mathbf{a}_2\}
\end{aligned} \tag{2.27}$$

Do đó ta có:

$$\begin{aligned}
t(\mathbf{d}_{A_1 A_2}^j) &= t(d_{GG} \mathbf{e}_z) = t_{\perp} \\
t(\mathbf{d}_{A_1 B_2}^j) &= t(\mathbf{d}_{B_1 A_2}^j) = t(\mathbf{b}_1 + d_{GG} \mathbf{e}_z) = t_d
\end{aligned} \tag{2.28}$$

Tức là

$$\begin{aligned}
u_{\mathbf{k}} &= t_{\perp} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_{A_1 A_2}^j} = t_{\perp} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{0}} = t_{\perp} \\
v_{\mathbf{k}} &= t_d \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_{A_1 B_2}^j} = t_d \sum_i e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_j} = t_d \gamma(\mathbf{k}) \\
w_{\mathbf{k}} &= t_d \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_{B_1 A_2}^j} = t_d \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_j} = t_d \gamma^{\dagger}(\mathbf{k})
\end{aligned} \tag{2.29}$$

Hamiltonian được rút gọn về

$$H_{AA}^0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} M_0 & f_{\mathbf{k}} & u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} \\ f_{\mathbf{k}}^{\dagger} & -M_0 & v_{\mathbf{k}}^{\dagger} & u_{\mathbf{k}} \\ u_{\mathbf{k}} & v_{\mathbf{k}} & M_0 & f_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}}^{\dagger} & u_{\mathbf{k}} & f_{\mathbf{k}}^{\dagger} & -M_0 \end{pmatrix} \tag{2.30}$$

Phổ năng lượng thu được khi chéo hóa (2.30) là:

$$\begin{aligned}
E_{12}(\mathbf{k}) &= \pm \sqrt{f_{\mathbf{k}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}}^{\dagger} v_{\mathbf{k}} - f_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}}^{\dagger} v_{\mathbf{k}} + M_0^2} - u_{\mathbf{k}} \\
E_{34}(\mathbf{k}) &= \pm \sqrt{f_{\mathbf{k}}^{\dagger} f_{\mathbf{k}} + f_{\mathbf{k}}^{\dagger} v_{\mathbf{k}} + f_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^{\dagger} + v_{\mathbf{k}}^{\dagger} v_{\mathbf{k}} + M_0^2} + u_{\mathbf{k}}
\end{aligned} \tag{2.31}$$

Có thể thấy các phần tử của quá trình tunneling giữa hai lớp trong (2.29) có thể được phân thành hai loại. Phần tử  $u_{\mathbf{k}}$  chính là vertical hopping vì cường độ của nó không phụ thuộc vào các quá trình tunneling trong một lớp được đặc trưng bởi  $\gamma(\mathbf{k})$ , trong khi hai phần tử còn lại được gọi là *skew hopping* vì cường độ của chúng liên quan đến  $\gamma(\mathbf{k})$ .

Nếu xem xét Hamiltonian tại các đỉnh của vùng Brillouin, tức các valley  $\mathbf{K}_+$



và  $\mathbf{K}_-$ , ta thấy

$$H_{AA}^0(\mathbf{K}_{\pm}) = \begin{pmatrix} M_0 & 0 & t_{\perp} & 0 \\ 0 & -M_0 & 0 & t_{\perp} \\ t_{\perp} & 0 & M_0 & 0 \\ 0 & t_{\perp} & 0 & -M_0 \end{pmatrix} \quad (2.32)$$

tức là phổ năng lượng tại các điểm này chỉ bị chi phối bởi một hằng số, đó là tham số vertical hopping  $t_{\perp}$ .

- Cấu hình xếp AB ( $\tau = \tau_1$ )

Đối với cấu hình này, ta có:

$$\begin{aligned} u_{\mathbf{k}} &= t_d \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_{A_1 A_2}^j} = t_d \gamma^{\dagger}(\mathbf{k}) \quad (\mathbf{R}_j \in \{\mathbf{0}, -\mathbf{a}_1, -\mathbf{a}_2\}) \\ v_{\mathbf{k}} &= t_d \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_{A_1 B_2}^j} = t_{\perp} \quad (\mathbf{R}_j \in \{\mathbf{0}\}) \\ w_{\mathbf{k}} &= t_{\perp} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{d}_{B_1 A_2}^j} = t_d \gamma(\mathbf{k}) \quad (\mathbf{R}_j \in \{-\mathbf{a}_1, -\mathbf{a}_2, -\mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2\}) \end{aligned} \quad (2.33)$$

Do đó

$$H_{AB}^0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} M_0 & f_{\mathbf{k}} & w_{\mathbf{k}}^{\dagger} & v_{\mathbf{k}} \\ f_{\mathbf{k}}^{\dagger} & -M_0 & w_{\mathbf{k}} & w_{\mathbf{k}}^{\dagger} \\ w_{\mathbf{k}} & w_{\mathbf{k}}^{\dagger} & M_0 & f_{\mathbf{k}} \\ v_{\mathbf{k}} & w_{\mathbf{k}} & f_{\mathbf{k}}^{\dagger} & -M_0 \end{pmatrix} \quad (2.34)$$

Đối với cấu hình này, các quá trình tunneling giữa hai lớp (2.33) cũng bao gồm in-plane hopping ( $v_{\mathbf{k}}$ ) và skew hopping ( $u_{\mathbf{k}}$  và  $w_{\mathbf{k}}$ ). Chỉ có hai cấu hình trượt AA và AB chứa những nút mạng nằm chính xác đối diện nhau trên hai lớp, tức là cường độ tunneling giữa hai lớp có thể đạt giá trị tối đa  $t_{\perp}$  tại vị trí hai nút mạng này.

Hamiltonian (2.34) không thể được chéo hóa dễ dàng về mặt giải tích. Tuy nhiên nếu ta đơn giản hóa các quá trình tunneling giữa hai lớp bằng cách chỉ giữ lại phần tử có cường độ lớn nhất, tức phần tử vertical hopping  $v_{\mathbf{k}}$ , hay là giả sử điện tử chỉ có thể tunneling sang lớp khác thông qua hai nguyên tử đối diện nhau trên hai lớp,

thì (2.34) được rút gọn về

$$H_{AB}^0(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} M_0 & f_{\mathbf{k}} & 0 & t_{\perp} \\ f_{\mathbf{k}}^{\dagger} & -M_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_0 & f_{\mathbf{k}} \\ t_{\perp} & 0 & f_{\mathbf{k}}^{\dagger} & -M_0 \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

Trong trường hợp này, công thức cho phổ năng lượng là có thể thu được:

$$E_{12}(\mathbf{k}) = -\frac{1}{2} \sqrt{\left( \sqrt{4f_{\mathbf{k}}^{\dagger}f_{\mathbf{k}} + t_{\perp}^2} \pm v_{\mathbf{k}} \right)^2 + 4M_0^2} \quad (2.36)$$

$$E_{34}(\mathbf{k}) = +\frac{1}{2} \sqrt{\left( \sqrt{4f_{\mathbf{k}}^{\dagger}f_{\mathbf{k}} + t_{\perp}^2} \pm v_{\mathbf{k}} \right)^2 + 4M_0^2}$$

Phổ năng lượng của hệ tại các valley  $\mathbf{K}_{\pm}$  cũng chỉ bị chi phối bởi  $t_{\perp}$ , như trong trường hợp xếp AA:

$$H_{AB}^0(\mathbf{K}_j) = \begin{pmatrix} M_0 & 0 & 0 & t_{\perp} \\ 0 & -M_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & M_0 & 0 \\ t_{\perp} & 0 & 0 & -M_0 \end{pmatrix} \quad (2.37)$$

## 2.2. Dải nano mạng lục giác

Dải nano (*NR*) là một cấu hình thu được bằng cách giới hạn một chiều của hệ hai chiều vô hạn xuống một độ rộng hữu hạn. Do đó, dải nano được xem như là hệ một chiều. Sự giới hạn kích thước này dẫn đến hai kết quả:

- Thứ nhất là sự lượng tử hóa các mức năng lượng của hệ hai chiều ban đầu, hay còn gọi là hệ khối, dọc theo chiều bị giới hạn, tạo thành các dải năng lượng của dải nano. Vì vậy, các dải năng lượng của dải nano tạo thành đo hiệu ứng lượng tử hóa phản ánh cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối, do đó có thể được gọi là các "dải khối".
- Thứ hai là sự xuất hiện của biên cho phép sự hình thành các trạng thái biên trong cấu trúc vùng năng lượng. Nguyên lý tương ứng bulk-edge cho biết rằng tính chất topo của hệ khối phải được phản ánh bởi các trạng thái biên của hệ hữu hạn tương

ứng. Ngược lại, các trạng thái biên của dải nano cho phép đánh giá định tính tính chất topo của hệ khối tương ứng.

Đối với mạng lục giác, có hai cấu hình biên của dải nano thường được quan tâm, đó là biên armchair (ANR) và biên zigzag (ZNR). Đối với hệ đơn lớp, biên armchair có thể thu được bằng cách xuất phát từ cấu hình mạng vô hạn hai chiều được định hướng như Hình. 2.1a, và giới hạn theo chiều  $y$  xuống một độ rộng hữu hạn  $W_A$  (Hình. 2.1c). Do đó, trục của cấu hình ANR được định hướng theo chiều  $x$ . Ngược lại, giới hạn theo chiều  $x$  cho ta biên zigzag với trục của dải nano định hướng theo chiều  $y$ . Như vậy, cấu hình ANR và ZNR lần lượt là tập hợp các đường dimmed hoặc zigzag được xếp song song dọc theo trục của dải nano (Hình. 2.1c). Đối với hệ hai lớp trượt, dải nano được xem xét ở đây được tạo thành bằng cách xếp trùng khít hai dải đơn lớp giống hệt nhau, mỗi lớp được thiết kế như trên, sau đó trượt các lớp tương đối với nhau bởi vector  $\tau$ . Trong luận văn này, các từ "ANR" và "ZNR" được sử dụng sau đây được hiểu là để chỉ các cấu hình dải nano hai lớp trượt với biên armchair hoặc zigzag.

Độ rộng của dải đơn lớp được tính theo số đường zigzag  $N_z$  hoặc dimmed  $N_d$  cụ thể như sau:

$$W_Z = (3N_z - 2)\frac{a_{CC}}{2}, \quad W_A = (N_d - 1)\frac{a_{CC}\sqrt{3}}{2} \quad (2.38)$$

trong đó  $N_z \geq 1$  và  $N_d \geq 2$ . Với hệ hai lớp, độ rộng này phải tính thêm vector trượt  $\tau$ .

Giả sử trục của dải nano được định hướng dọc theo  $e_x$ , khi đó hằng số mạng của hai cấu hình biên zigzag và armchair lần lượt là  $a_x = a$  và  $a_x = a\sqrt{3}$ , trong đó  $a$  là hằng số mạng của mạng lục giác hai chiều vô hạn. Như vậy hằng số mạng của mạng đảo tương ứng của dải nano là  $b_x = 2\pi/a_x$ . Do đó ta chọn vùng Brillouin là  $[-b_x/2, b_x/2]$ , cụ thể là  $\frac{\pi}{a} \times [-1, 1]$  cho biên zigzag và là  $\frac{\pi}{a\sqrt{3}} \times [-1, 1]$  cho biên armchair.

Như đề cập ở trên, các dải năng lượng hai chiều của hệ khối bị lượng tử hóa thành các dải một chiều của dải nano, với số dải tương ứng với số đường zigzag hoặc dimmed. Tuy nhiên, không phải toàn bộ vùng Brillouin của hệ hai chiều được

bảo toàn trong hệ một chiều. Cụ thể, với biên armchair, việc giới hạn độ rộng theo chiều  $y$  "chiều" các dải khối lên trục  $k_x$  trong miền  $k_x \in \frac{K_1^x}{2} \times [-1, 1]$ , trong đó  $K_1^x$  là tọa độ ứng với  $k_x$  của điểm  $\mathbf{K}_1$ . Miền này ứng với miền Brillouin của dải nano tương ứng. Trong khi đó, với biên zigzag, các dải khối được chiếu lên  $k_y$  trong miền  $k_y \in \frac{3K_2^y}{4} \times [-1, 1]$ , trong đó  $K_2^y$  là tọa độ ứng với  $k_y$  của điểm  $\mathbf{K}_2$ . Các miền chiếu này được giới hạn bởi các cặp đường nét đứt trên Hình. 2.1b, trong đó màu xanh da trời và xanh lục lần lượt ứng với cấu hình biên armchair và biên zigzag.

Vì số nguyên tử trong một ô cơ sở thay đổi tùy theo độ rộng của dải nên một cách tổng quát ta sẽ không phân tách Hamiltonian ra thành các số hạng riêng biệt cho từng cặp nguyên tử trong ô cơ sở như trường hợp mạng hai chiều (2.19), mặc dù vẫn có thể xác định hai phân mạng  $A$  và  $B$ . Thay vào đó, ta sẽ xác định mỗi nguyên tử trong mạng thực bằng hai chỉ số thứ tự, đầu tiên là chỉ số  $L$  của ô cơ sở chứa nguyên tử đó và thứ hai là chỉ số  $j$  của nguyên tử trong ô cơ sở đó,  $j = 1, 2, \dots, 2N$  với  $2N$  là số nguyên tử trong một ô cơ sở (mỗi lớp có  $N$  nguyên tử). Như vậy Hamiltonian tổng quát trong không gian thực cho dải nano có dạng sau:

$$H_{\text{NR}} = \sum_{j,L} \sum_{j',L'} t_{jL,j'L'} |\mathbf{R}_{jL}\rangle \langle \mathbf{R}_{j'L'}| + h.c. + \sum_{j=1}^{2N} V_j |\mathbf{R}_j\rangle \langle \mathbf{R}_j| \quad (2.39)$$

Số hạng thứ nhất trong Hamiltonian (2.39) mô tả quá trình tunneling của điện tử từ vị trí  $\mathbf{R}_{j'L'}$  đến vị trí  $\mathbf{R}_{jL}$  với cường độ tunneling  $t_{jL,j'L'} = t(\mathbf{d}_{jL,j'L'}) = t(\mathbf{R}_{jL} - \mathbf{R}_{j'L'})$  được tính theo mô hình (2.5). Số hạng thứ ba là năng lượng onsite.

Áp dụng tính tuần hoàn của mạng theo phương  $\mathbf{e}_x$ , ta khai triển Fourier:

$$|\mathbf{R}_{jL}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{k_j}^{\text{BZ}} e^{-ik_j La_x} |k_j\rangle \quad (2.40)$$

trong đó  $La_x$  là tọa độ  $x$  của ô cơ sở thứ  $L$  và  $k_j$  là vector trong không gian  $\mathbf{k}$ .

Do đó ta có:

$$\begin{aligned}
& \sum_{j,L} \sum_{j',L'} t_{jL,j'L'} |\mathbf{R}_{jL}\rangle \langle \mathbf{R}_{j'L'}| \\
&= \sum_{j,L} \sum_{j',L'} t_{jL,j'L'} \left( \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{k_j}^{\text{BZ}} e^{-ik_j L a_x} |k_j\rangle \right) \left( \frac{1}{\sqrt{2N}} \sum_{k_{j'}}^{\text{BZ}} e^{ik_{j'} L' a_x} \langle k_{j'}| \right) \\
&= \sum_{k_j, k_{j'}}^{\text{BZ}} \sum_{j, j'} \left( \frac{1}{2N} \sum_{L, L'} t_{jL,j'L'} e^{-ik_j L a_x} e^{ik_{j'} L' a_x} \right) |k_j\rangle \langle k_{j'}| \\
&= \sum_{k_j, k_{j'}}^{\text{BZ}} \sum_{j, j'} \left( \frac{1}{2N} \sum_L e^{-i(k_j - k_{j'}) L a_x} \sum_{L'} t_{jL,j'L'} e^{ik_{j'} (L' - L) a_x} \right) |k_j\rangle \langle k_{j'}| \\
&= \sum_{k_j, k_{j'}}^{\text{BZ}} \sum_{j, j'} \left( \delta_{k_j, k_{j'}} \sum_{L'} t_{jL,j'L'} e^{ik_{j'} (L' - L) a_x} \right) |k_j\rangle \langle k_{j'}| \\
&= \sum_{k_j}^{\text{BZ}} \sum_{j, j'} \left( \sum_{L'} t_{jL,j'L'} e^{ik_j (L' - L) a_x} \right) |k_j\rangle \langle k_j| \\
&= \sum_{k_j}^{\text{BZ}} \sum_{j, j'} h_{jj'}(k_j) |k_j\rangle \langle k_j| \\
&= \sum_{k_j}^{\text{BZ}} |k_j\rangle H_{\text{NR}}(k_j) \langle k_j|
\end{aligned} \tag{2.41}$$

Vậy các phần tử của ma trận Hamiltonian  $H_{\text{NR}}(k)$  cho dải nano ở dạng Bloch là

$$h_{jj'}(k) = \sum_{L'} t_{jL,j'L'} e^{ik(L' - L)a_x} \tag{2.42}$$

Vì ở đây ta chỉ xem xét quá trình tunneling tới lân cận gần nhất, nên tổng qua  $L'$  chỉ nhận ba giá trị:  $L' \in \{L - 1, L, L + 1\}$ . Tức là điện tử định xứ trên một nguyên tử thuộc ô cơ sở thứ  $L$  chỉ có thể tunneling sang các nguyên tử khác trong cùng ô cơ sở ( $L' = L$ ), hoặc sang ô cơ sở nằm liền trước ( $L' = L - 1$ ) hoặc liền sau ( $L' = L + 1$ ) ô cơ sở đó. Tuy nhiên, Hamiltonian (2.39) ở trên là tổng quát cho số lượng lớp xếp chồng bất kỳ của các mạng lục giác.

## 2.3. Các đối xứng của hệ

### 2.3.1. Đối xứng hình học

Mạng MLH vô hạn với năng lượng onsite đồng nhất trên tất cả các nút mạng thuộc nhóm đối xứng hình học  $D_{6h}$ , bao gồm:

- Một đối xứng quay  $C_6$  với trục chính đi qua tâm của hình lục giác và vuông góc với mặt phẳng mạng.
- 6 đối xứng quay  $C_2$  với các trục thuộc mặt phẳng mạng (vuông góc với trục chính), mỗi trục đi qua tâm của hình lục giác và một đỉnh của nó.
- Một đối xứng gương với mặt phẳng đối xứng ngang  $\sigma_h$  chính là mặt phẳng mạng.

Các phần tử đối xứng này định nghĩa một tâm đối xứng cho mạng lục giác đơn lớp, tức là đối xứng nghịch đảo không gian, đó là tâm của hình lục giác. Trong trường hợp này nó cũng chính là đối xứng phân mạng của hệ.

Đối với hệ BLH, đối xứng hình học thay đổi phụ thuộc vào cách xếp chồng hai lớp, ở đây là vector trượt  $\tau$ . Chẳng hạn, cấu hình xếp AA có cùng nhóm đối xứng  $D_{6h}$  như mạng đơn lớp, trong khi cấu hình AB thuộc nhóm thấp hơn  $D_{3d}$ . Các cấu hình trượt khác bên ngoài hai cấu hình đặc biệt này nhìn chung có đối xứng thấp hơn nhiều, chẳng hạn thuộc nhóm  $C_{2h}$ .

### 2.3.2. Đối xứng của Hamiltonian

Trong cơ học lượng tử, một Hamiltonian  $H_0$  có một đối xứng được biểu diễn bởi toán tử *unitary*  $U$  nếu  $H_0$  là bất biến dưới phép biến đổi được biểu diễn bởi  $U$ , tức là

$$UH_0U^\dagger = UH_0U^{-1} = H_0 \quad (2.43)$$

Do đó,  $U$  và  $H_0$  có thể được chéo hóa cùng nhau. Lúc này, nếu ta phân hoạch không gian Hilbert thành các không gian con khác nhau là các không gian riêng của  $U$ , mỗi không gian ứng với một giá trị riêng của nó, thì động lực của hệ được mô tả bởi  $H_0$  có thể được nghiên cứu hoàn toàn riêng biệt trong từng không gian riêng.

Chẳng hạn, nếu  $U$  là toán tử biểu diễn đối xứng nghịch đảo không gian, tác động của  $U$  lên các toán tử vị trí và xung lượng lần lượt sẽ là  $U\mathbf{r}U^\dagger = -\mathbf{r}$  và  $U\mathbf{p}U^\dagger =$

– $\mathbf{p}$ . Do đó, có thể thấy Hamiltonian (2.12) có đối xứng nghịch đảo bởi vì  $H_{\text{ML}}^0(-\mathbf{k}) = H_{\text{ML}}^0(\mathbf{k})$ . Đối xứng này khiến cho phổ năng lượng của mạng lục giác đối xứng qua trục đi qua điểm  $\Gamma$  của vùng Brillouin. Ngoài ra phổ năng lượng cũng đối xứng qua mức Fermi ( $E_F$ ) khi  $M_0 = 0$ . Đối xứng nghịch đảo không gian và nghịch đảo thời gian là nguồn gốc của điểm Dirac trong hệ các mạng lục giác.

• **Đối xứng phân mạng**

Như đã đề cập ở trên, mạng đơn lớp với  $M_0 = 0$  có một đối xứng khác gọi là đối xứng phân mạng, được định nghĩa bởi toán tử unitary  $U$  thỏa mãn

$$UH_0U^{-1} = -H_0 \quad (2.44)$$

mà trong trường hợp của mạng lục giác là  $\sigma_z H_{\text{ML}}^0(\mathbf{k}) \sigma_z = -H_{\text{ML}}^0(\mathbf{k})$  với  $H_{\text{ML}}^0(\mathbf{k})$  cho bởi (2.12) ( $V_A = V_B = 0$ ) và  $\sigma_z$  là một ma trận Pauli. Lưu ý rằng đối xứng này chỉ là kết quả của xấp xỉ ở lân cận gần nhất của mô hình TB. Đối xứng này cũng bảo vệ điểm Dirac và cần bị phá vỡ để mở vùng cấm trên phổ năng lượng.

• **Đối xứng nghịch đảo thời gian**

Đối xứng nghịch đảo thời gian, hay đối xứng  $T$ , là một đối xứng lý thuyết của các định luật vật lý dưới phép biến đổi đảo ngược dấu thời gian ( $t \mapsto -t$ ). Trong vật lý cổ điển, các đại lượng bất biến dưới phép đảo ngược thời gian bao gồm vị trí  $\mathbf{r}$ , gia tốc  $\mathbf{a}$ , lực  $\mathbf{F}$ , năng lượng  $E$ , v.v. trong khi các đại lượng bị đảo dấu khi nghịch đảo thời gian bao gồm chính thời gian  $t$ , vận tốc  $\mathbf{v}$ , xung lượng  $\mathbf{p}$ , v.v. Tương tự, trong cơ học lượng tử, dưới phép nghịch đảo thời gian ta cũng có  $\mathbf{r} \mapsto \mathbf{r}$ ,  $\mathbf{p} \mapsto -\mathbf{p}$ , v.v.

Trong cơ học lượng tử, toán tử của phép biến đổi nghịch đảo thời gian có thể được biểu diễn tổng quát là

$$T = UK \quad (2.45)$$

trong đó  $K$  là tác động lấy liên hợp phức và  $U$  là một toán tử unitary. Sự có mặt của  $K$  khiến cho  $T$  là một toán tử *anti-unitary*.

Đối xứng  $T$  được bảo toàn trong xấp xỉ TB ở lân cận gần nhất của mạng MLH. Đối với Hamiltonian (2.12), ta có

$$TH_{\text{ML}}^0(\mathbf{k})T^{-1} = H_{\text{ML}}^{0*}(-\mathbf{k}) = H_{\text{ML}}^0(\mathbf{k}) \quad (2.46)$$

Trong một số hệ nhất định, sự nghịch đảo thời gian liên quan đến các cặp điểm có đối xứng cao trong không gian  $\mathbf{k}$ , chẳng hạn ở đây là hai valley  $\mathbf{K}_+$  và  $\mathbf{K}_-$ . Chúng nằm ở các vị trí nghịch đảo của nhau trong không gian  $\mathbf{k}$  nên đối xứng  $T$  hoán đổi chúng với nhau, tức là hoán đổi hai nón Dirac.

• **Đối xứng electron-lỗ trống**

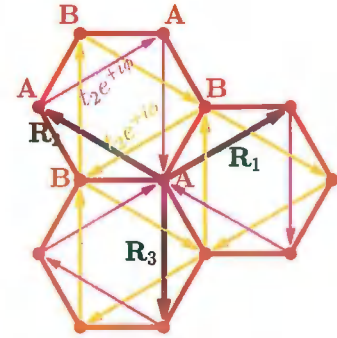
Tích của đối xứng phân mạng và đối xứng  $T$  là một đối xứng rời rạc khác mà Hamiltonian (2.12), với  $V_A = V_B = 0$ , sở hữu, gọi là đối xứng điện tử-lỗ trống, một trong số những đối xứng hạt-lỗ trống phổ biến:

$$\sigma_z H_{\text{ML}}^{0*}(-\mathbf{k})\sigma_z = -H_{\text{ML}}^0(\mathbf{k}) \quad (2.47)$$

**2.4. Mô hình Haldane**

**2.4.1. Hệ khối đơn lớp**

Mục tiêu của mô hình Haldane là đưa graphene vào trạng thái Hall lượng tử, với các trạng thái biên chiral. Bước cần thiết đầu tiên cho mục tiêu này là mở một vùng cấm trên phổ năng lượng của hệ khối, cụ thể là tại các điểm Dirac. Các điểm này được bảo vệ bởi cả đối xứng phân mạng và đối xứng nghịch đảo thời gian. Dễ dàng mở một vùng cấm khi đối xứng phân mạng bị phá vỡ bằng cách đặt một giá trị hữu hạn  $M_0 \neq 0$  trong (2.14). Kết quả được đưa ra trong công thức (2.15). Tuy nhiên,  $M_0 \neq 0$  không cho phép đạt được mục tiêu vì pha điện môi thu được theo cách này vẫn tầm thường về mặt topo, do đối xứng  $T$  vẫn được bảo toàn. Do đó, ý tưởng của mô hình Haldane là phá vỡ đối xứng  $T$  bằng cách thêm vào (2.3) một số hạng mô tả quá trình tunneling của điện tử tới các nguyên tử lân cận thứ hai với tham số phức:



Hình 2.3: Các tham số tunneling phức trong số hạng Haldane. Màu hồng và vàng nhằm phân biệt các quá trình tunneling trong phân mạng tương ứng A và B. Ba mũi tên có viền đen là ba vector  $\mathbf{R}_j$  trong (2.49).

$$H_2 = t_2 \sum_{\mathbf{R}_\nu} \sum_{\mathbf{R}_j}^{\Gamma} e^{-is_{\nu j}\phi} |\mathbf{R}_\nu\rangle \langle \mathbf{R}_\nu + \mathbf{R}_j| \quad (2.48)$$

trong đó  $j = 1, 2, \dots, 6$  và  $\mathbf{R}_j \in \{\mathbf{a}_1, -\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1, -\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_1 - \mathbf{a}_2\}$ .



Với 6 giá trị có thể của  $\mathbf{R}_j$  ở trên,  $\mathbf{R}_\nu$  và  $\mathbf{R}_\nu + \mathbf{R}_j$  thuộc cùng phân mạng  $\nu$ , do đó (2.48) mô tả các quá trình tunneling của điện tử trong cùng phân mạng, với tham số nhìn chung là một số phức  $t_2 e^{-is_{\nu j}\phi}$ , trong đó cường độ  $t_2$  có thể được tính theo công thức (2.5). Ở đây,  $s_{\nu j} \in \{-1, +1\}$  là dấu của pha phức  $\phi \in [-\pi, \pi]$ , được xác định phụ thuộc vào chỉ số phân mạng  $\nu$  và chỉ số  $j$  của một trong 6 lân cận, sao cho giá trị của  $s_{\nu j}$  là ngược nhau trên hai phân mạng đối với cùng một giá trị  $\mathbf{R}_j$  (Hình. 2.3). Cách quy ước dấu này đảm bảo tính hermitian của Hamiltonian của mô hình Haldane. Sử dụng quy ước  $\mathbf{R}_A = \mathbf{R}$  và  $\mathbf{R}_B = \mathbf{R}_A + \mathbf{b}_1$ , ta có thể khai triển (2.48) tường minh hơn như sau:

$$H_2 = t_2 \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{R}_j}^{\Gamma} (e^{+i\phi} |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{R}_j| + e^{-i\phi} |\mathbf{R}\rangle \langle \mathbf{R} - \mathbf{R}_j| + e^{-i\phi} |\mathbf{R} + \mathbf{b}_1\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{b}_1 + \mathbf{R}_j| + e^{+i\phi} |\mathbf{R} + \mathbf{b}_1\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{b}_1 - \mathbf{R}_j|) \quad (2.49)$$

ứng với việc quy ước lại  $j \in \{1, 2, 3\}$  và  $\mathbf{R}_j \in \{\mathbf{a}_1, -\mathbf{a}_2, \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1\}$ .

Lúc này Hamiltonian Bloch của mô hình Haldane có dạng sau:

$$H_{\text{ML}}^{\text{H}}(\mathbf{k}) = \begin{pmatrix} D_A(\mathbf{k}) & t_1 \gamma(\mathbf{k}) \\ t_1 \gamma^\dagger(\mathbf{k}) & D_B(\mathbf{k}) \end{pmatrix} \quad (2.50)$$

trong đó

$$D_A(\mathbf{k}) = 2t_2 \cos \phi \left[ \sum_{j=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \right] - 2t_2 \sin \phi \left[ \sum_{j=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \right] + M_0 \quad (2.51)$$

$$D_B(\mathbf{k}) = 2t_2 \cos \phi \left[ \sum_{j=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \right] + 2t_2 \sin \phi \left[ \sum_{j=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \right] - M_0$$

Ta cũng có thể biểu diễn (2.50) thông qua các ma trận Pauli:

$$H_{\text{ML}}^{\text{H}}(\mathbf{k}) = \sigma_0 \left[ 2t_2 \cos \phi \sum_{j=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \right] + \sigma_x \left[ t_1 \sum_{j=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_j) \right] - \sigma_y \left[ t_1 \sum_{j=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{b}_j) \right] + \sigma_z \left[ M_0 - 2t_2 \sin \phi \sum_{j=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \right] \quad (2.52)$$

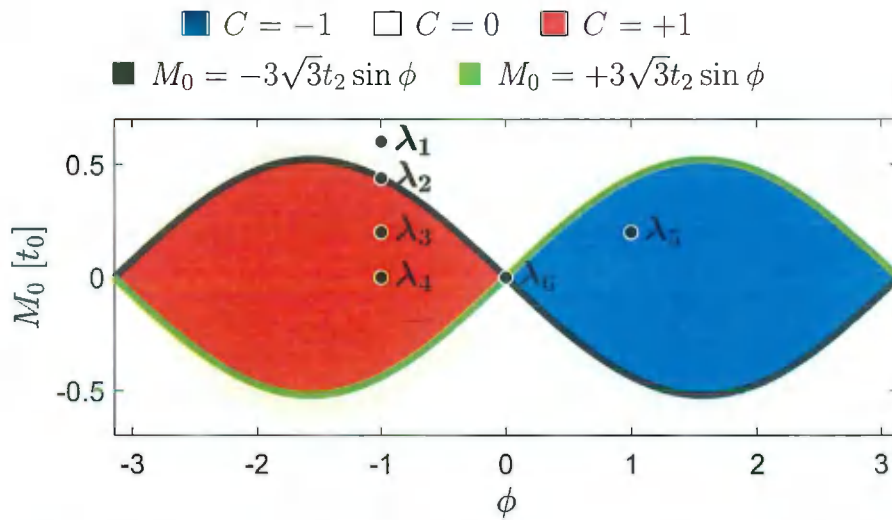
Phổ năng lượng có thể dễ dàng thu được bằng chéo hóa giải tích:

$$E_{12}(\mathbf{k}) = \frac{1}{2} \left[ D_A(\mathbf{k}) + D_B(\mathbf{k}) \pm \sqrt{4t_1^2 |\gamma(\mathbf{k})|^2 + [D_A(\mathbf{k}) - D_B(\mathbf{k})]^2} \right] \quad (2.53)$$

Có thể thấy (2.53) có đặc trưng sau:

$$E_{12}(\phi, \mathbf{k}) = E_{12}(-\phi, -\mathbf{k}) = -E_{21}(\pi - \phi, \mathbf{k}) = -E_{21}(\pi + \phi, -\mathbf{k}) \quad (2.54)$$

Trong bài báo năm 1988 [17], Haldane đã tính toán được giản đồ pha topo của hệ graphene đơn lớp (Hình. 2.4). Giản đồ cho thấy hệ có thể trải qua 3 pha điện môi với tính chất topo khác nhau khi thay đổi  $M_0$  và  $\phi$ , cụ thể là một pha topo tầm thường ứng với số Chern  $C = 0$  và hai pha topo không tầm thường ứng với  $C = \pm 1$ . Ranh giới chuyển tiếp giữa các pha này tạo thành hai đường hình sin, tại đó vật liệu là bán kim loại.



Hình 2.4: Giản đồ pha topo của hệ graphene đơn lớp trong nghiên cứu của Haldane [17] với 6 điểm pha  $\lambda_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 6$ ). Ở đây  $t_1 = t_{\parallel} = -2,7$  eV,  $t_2 = 0,1|t_1|$ .

Phương pháp tính toán số Chern sẽ được trình bày trong Phần 2.5 và 2.6, tuy nhiên có thể xác định được phương trình các đường bán kim loại, hay đường chuyển pha giữa các pha điện môi, bằng cách dựa vào thực tế rằng việc đóng mở vùng cấm năng lượng được kiểm soát bởi các phần tử trên đường chéo của Hamiltonian (2.50). Do đó, khi vùng cấm bị đóng lại trên các đường chuyển pha, ta có:

$$D_A(\mathbf{k}) - D_B(\mathbf{k}) = 0 \quad (2.55)$$

Thay các công thức (2.51) vào ta được:

$$M_0 = 2t_2 \sin \phi \left[ \sum_{j=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \right] \quad (2.56)$$

Với hệ đơn lớp, sự đóng mở vùng cấm trong mô hình Haldane xảy ra chính xác tại các điểm  $\mathbf{K}$ , do đó thay tọa độ các điểm  $\mathbf{K}$  (2.2) vào phương trình (2.56) cùng với các vector  $\mathbf{R}_j$  cho ở (2.49), ta thu được

$$M_0 = \xi 3\sqrt{3}t_2 \sin \phi \quad (2.57)$$

trong đó  $\xi \in \{-, +\}$  là chỉ số valley của các điểm  $\mathbf{K}$  cho ở (2.2).

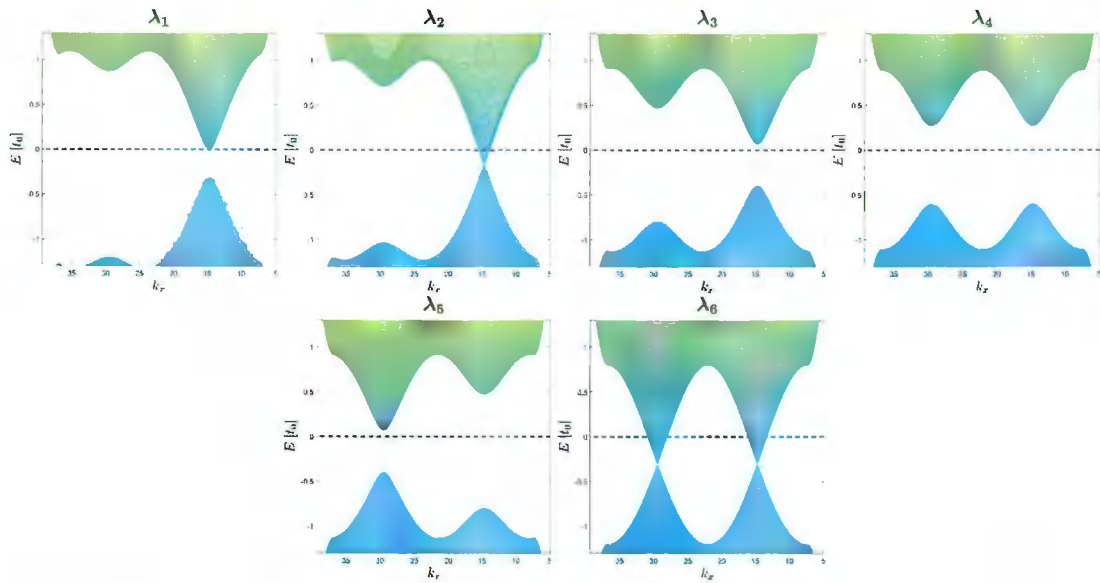
Phương trình (2.57) chính là phương trình các đường bán kim loại hình sin mà Haldane đã rút ra trong nghiên cứu của mình [17]. Việc (2.57) phụ thuộc vào  $\xi$  cho thấy tại pha bán kim loại, sự đóng vùng cấm chỉ xảy ra định xứ tại một valley, trong khi đó tại valley còn lại, một khoảng phân tách năng lượng địa phương được mở ra với độ rộng là  $\Delta_{\mathbf{K}} = 12\sqrt{3}t_2 |\sin \phi|$ .

Để chỉ rõ một cách định lượng hơn các đặc tính topo của điện tử trong mô hình Haldane đơn lớp, chúng tôi tính cấu trúc vùng năng lượng của hệ với các Hamiltonian ứng với 6 điểm pha khác nhau được chọn từ giản đồ pha, đó là 6 điểm  $\lambda_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 6$ ) được đánh dấu trên Hình. 2.4. Các giá trị tham số  $(\phi, M_0)$  tương ứng cụ thể như sau:

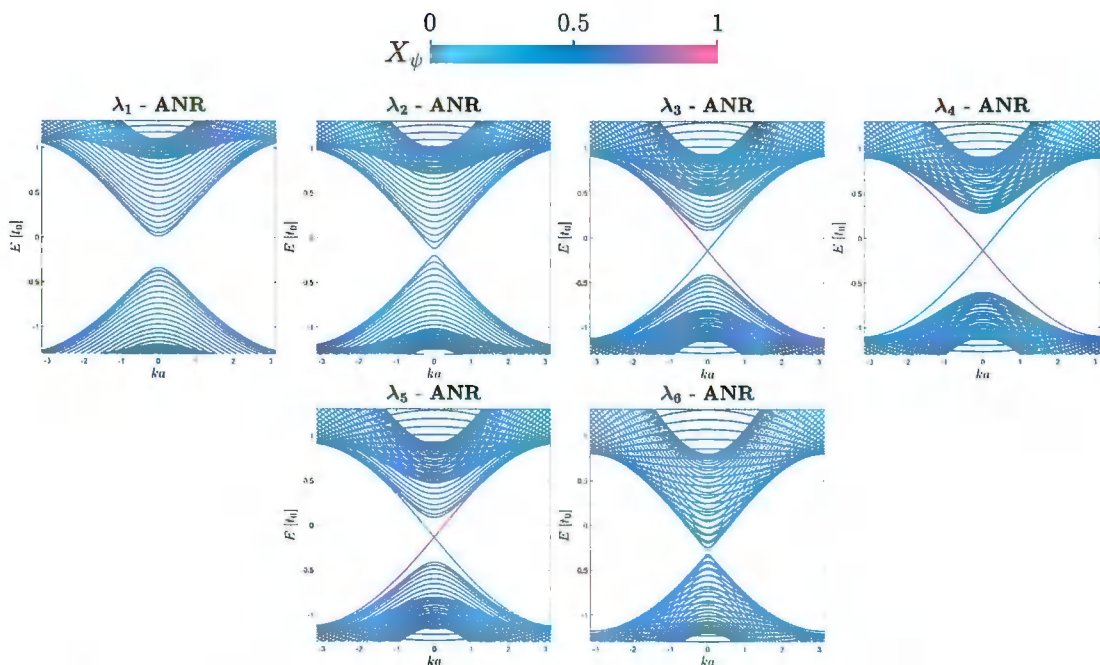
$$\begin{aligned} \lambda_1 &= (-1; 0, 6), \quad \lambda_2 = (-1; 3\sqrt{3}t_2 \sin(1)), \quad \lambda_3 = (-1; 0, 2), \\ \lambda_4 &= (-1; 0, 0), \quad \lambda_5 = (1; 0, 2), \quad \lambda_6 = (0; 0, 0) \end{aligned} \quad (2.58)$$

Kết quả tính cho hệ hai chiều vô hạn (hệ khối) được đưa ra trên Hình. 2.5, cho hệ một chiều (dải nano) được đưa ra trên Hình. 2.6 (biên armchair) và Hình. 2.7 (biên zigzag) với số đường zigzag hoặc armchair  $N_z = N_d = 70$ . Ngoài ra, để kiểm tra vị trí định xứ trung bình trong không gian của trạng thái điện tử ứng với mỗi điểm  $(ka, E)$  trên cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều, chúng tôi tính đại lượng  $X_\psi$  của trạng thái, được định nghĩa ở công thức (2.86), và biểu thị trực tiếp giá trị của  $X_\psi$  trên cấu trúc vùng bằng màu sắc.

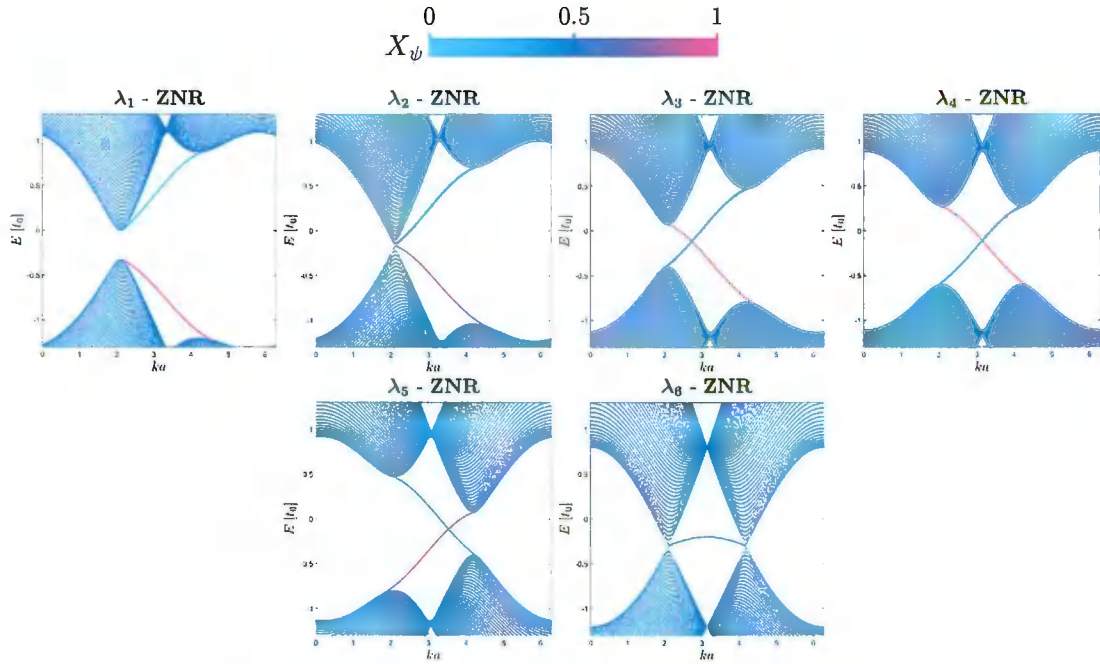
Cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối cho thấy sự hiện diện của pha điện môi



Hình 2.5: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ hai chiều trong mô hình Haldane đơn lớp ứng với 6 điểm pha được chọn trên Hình. 2.4. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ . Hướng quan sát ở đây là mũi tên xanh da trời trên Hình. 2.1b. Đường nét đứt biểu thị mức Fermi.



Hình 2.6: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dây nano) biên armchair trong mô hình Haldane đơn lớp ứng với 6 điểm pha được chọn trên Hình. 2.4. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ .



Hình 2.7: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) biên zigzag trong mô hình Haldane đơn lớp ứng với 6 điểm pha được chọn trên Hình. 2.4. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ .

hoặc bán kim loại, tuy nhiên đặc trưng topo của chúng chỉ có thể được phân biệt dựa vào cấu trúc vùng của hệ một chiều tương ứng. Khi giới hạn hệ khối bởi biên zigzag hoặc armchair, giá trị  $C = -1$  (điểm  $\lambda_5$ ) và  $C = +1$  (các điểm  $\lambda_3$  và  $\lambda_4$ ) của các pha topo không tầm thường được thể hiện bởi một cặp trạng thái biên không suy biến cắt qua miền năng lượng tương ứng với vùng cấm của hệ khối và đi từ vùng hóa trị đến vùng dẫn (Hình. 2.6 và 2.7). Các pha topo này cho ta vật liệu điện môi topo với đặc trưng của vật liệu điện môi thông thường trong phần khối và đặc trưng dẫn điện của kim loại tại biên với cặp trạng thái biên chiral. Màu sắc các dải năng lượng trên Hình. 2.6 và 2.7 cho thấy mỗi trạng thái trong các cặp này định xứ mạnh tại một biên khác nhau và dẫn ngược chiều nhau dọc theo trục của dải nano. Ngược lại, các trạng thái biên như vậy không tồn tại đối với pha điện môi tầm thường có  $C = 0$  (điểm  $\lambda_1$ ).

Ba điểm pha  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$  và  $\lambda_3$  cho thấy quá trình đóng và mở lại vùng cấm của hệ khối khi chuyển pha topo diễn ra. Bên cạnh đó, so sánh cấu trúc vùng năng lượng tại các điểm  $\lambda_2$  và  $\lambda_6$  cho thấy sự khác biệt giữa pha bán kim loại trong mô hình Haldane và pha bán kim loại của mạng lục giác trong mô hình TB truyền thống (ứng với mô hình Haldane khi  $\phi = 0$ ). Trong khi mô hình truyền thống cho thấy hai dải hóa trị và

dải dẫn tiếp xúc với nhau tại cả hai valley của vùng Brillouin, mô hình Haldane chỉ thể hiện sự tiếp xúc tại một trong hai valley, trong khi có một khoảng phân tách năng lượng ở valley còn lại.

Điểm  $\lambda_5$  được chọn đối xứng với  $\lambda_3$  qua  $\phi = 0$  để chỉ ra rằng đặc trưng năng lượng của hai valley của hệ khối được hoán đổi cho nhau khi pha  $\phi$  đổi dấu (đẳng thức đầu tiên trong 2.54). Ngoài ra, hai điểm này thuộc hai vùng có số Chern ngược dấu, do đó các cặp trạng thái biên topo tương ứng của chúng thể hiện sự hoán đổi về vị trí biên mà chúng định xứ, nói cách khác chiều dẫn điện của các trạng thái này tại hai điểm  $\lambda_3$  và  $\lambda_5$  là ngược nhau khi xem xét trên cùng một biên. Vì sự dẫn điện của các trạng thái biên là có thể xác định được trong thực nghiệm khi hệ khối có vùng cấm, đặc trưng trên có thể được sử dụng như một phương pháp để xác nhận hai miền pha có số Chern ngược dấu.

Cuối cùng cần lưu ý rằng mô hình Haldane chưa xem xét đến spin của điện tử, do đó các số Chern  $\pm 1$  thu được không liên quan đến spin. Các mô hình hai lớp được xem xét sau đây cũng bỏ qua spin. Ngoài ra, mô hình Haldane đơn lớp cũng chỉ là một xấp xỉ ở lân cận gần thứ hai. Một nghiên cứu [29] đã cho thấy khi đưa thêm vào mô hình TB những lân cận xa hơn, có thể thu được các giá trị số Chern cao hơn ( $|C| \geq 2$ ) ngay trên hệ đơn lớp.

#### 2.4.2. Hệ khối hai lớp

Mô hình Haldane hai lớp ở đây được xây dựng một cách đơn giản bằng cách thêm số hạng (2.48) vào từng lớp và cho phép giá trị của pha phức  $\phi$  có thể khác nhau tùy ý trên từng lớp. Nói cách khác, ta thêm vào Hamiltonian (2.18) số hạng sau cùng với liên hợp Hermit của nó:

$$H_{24} = t_2 \sum_{\nu, l} \sum_{\mathbf{R}_{\nu_l}} \sum_{\mathbf{R}_j}^{\Gamma} e^{-is_{\nu_j}\phi_l} |\mathbf{R}_{\nu_l}\rangle \langle \mathbf{R}_{\nu_l} + \mathbf{R}_j| \quad (2.59)$$

trong đó  $\phi_l \in [-\pi, \pi]$  là pha phức của lớp  $l$ ,  $\mathbf{R}_j$  là các vector mạng được định nghĩa trong (2.20),  $\mathbf{R}_{\nu_l} = \mathbf{R} + \mathbf{d}_{\nu_l}$  với  $\mathbf{d}_{\nu_l}$  được cho trong (2.17). (2.59) có thể được khai

triển tường minh hơn như sau:

$$\begin{aligned}
H_{24} = t_2 \sum_{\mathbf{R}} \sum_{\mathbf{R}_j} \sum_l^{\Gamma} & (e^{+i\phi} |\mathbf{R} + \mathbf{d}_{A_l}\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{d}_{A_l} + \mathbf{R}_j| + \\
& + e^{-i\phi} |\mathbf{R} + \mathbf{d}_{A_l}\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{d}_{A_l} - \mathbf{R}_j| + \\
& + e^{-i\phi} |\mathbf{R} + \mathbf{d}_{B_l}\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{d}_{B_l} + \mathbf{R}_j| + \\
& + e^{+i\phi} |\mathbf{R} + \mathbf{d}_{B_l}\rangle \langle \mathbf{R} + \mathbf{d}_{B_l} - \mathbf{R}_j|)
\end{aligned} \quad (2.60)$$

với tập vector  $\mathbf{R}_j$  được chọn như trong (2.49).

Từ đó, dạng Bloch của Hamiltonian trong mô hình Haldane hai lớp thu được như sau:

$$H_{\text{BL}}^{\text{H}}(\mathbf{k}) = H_{\text{BL}}^0(\mathbf{k}) + 2t_2 \left[ \sum_{j=1}^3 \cos(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \right] \gamma_{\text{cos}} - 2t_2 \left[ \sum_{j=1}^3 \sin(\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j) \right] \gamma_{\text{sin}} \quad (2.61)$$

với  $H_{\text{BL}}^0(\mathbf{k})$  được cho trong (2.26) và

$$\begin{aligned}
\gamma_{\text{cos}} &= \begin{pmatrix} \cos \phi_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \phi_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \cos \phi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \cos \phi_2 \end{pmatrix} \\
\gamma_{\text{sin}} &= \begin{pmatrix} \sin \phi_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\sin \phi_1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sin \phi_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\sin \phi_2 \end{pmatrix}
\end{aligned} \quad (2.62)$$

### 2.4.3. Dải nano hai lớp

Để xây dựng Hamiltonian cho dải nano hai lớp trong khuôn khổ mô hình Haldane, ta thêm vào (2.39) số hạng sau, tương tự như với các cấu hình hai chiều:

$$H_2 = t_2 \sum_{j,L} \sum_{j'} \exp \left[ (-1)^{j+j'} i\phi_l \right] |\mathbf{R}_{jL}\rangle \langle \mathbf{R}_{jL} + \mathbf{R}_{j'}| \quad (2.63)$$

trong đó quy ước chỉ số của các nguyên tử trong một ô cơ sở là  $j$  lẻ ứng với phân mạng  $A$  và  $j$  chẵn ứng với phân mạng  $B$ , và tập vector  $\mathbf{R}_{j'}$  ( $j' = 1, 2, \dots, 6$ ) có giá trị là

$$\mathbf{R}_1 = -\mathbf{R}_4 = \mathbf{a}_1, \quad \mathbf{R}_3 = -\mathbf{R}_6 = \mathbf{a}_2 - \mathbf{a}_1, \quad \mathbf{R}_5 = -\mathbf{R}_2 = -\mathbf{a}_2 \quad (2.64)$$

Như vậy dấu của pha phức trong (2.63) được xác định bởi phân mạng của nguyên tử thông qua  $j$  và bởi vị trí của lân cận gần nhất thứ hai thông qua  $j'$ . Chỉ số lớp  $l$  cũng được xác định bởi  $j$  bằng cách đánh chỉ số các nguyên tử trong một ô cơ sở theo thứ tự từng lớp, tức là các chỉ số  $1 \leq j \leq N$  thuộc lớp thứ nhất ( $l = 1$ ) và  $N + 1 \leq j \leq 2N$  thuộc lớp thứ hai ( $l = 2$ ).

## 2.5. Đặc trưng topo của mô hình Haldane

### 2.5.1. Quá trình đoạn nhiệt

Xét một hệ vật lý với Hamiltonian  $H(\mathbf{R}_t)$  tổng quát thay đổi theo thời gian thông qua một số tham số (chẳng hạn như từ trường, điện trường, từ thông hay ứng suất) được biểu thị bởi vector tham số  $\mathbf{R}_t = (R_1, R_2, R_3, \dots)$ , trong đó  $R_j = R_j(t)$ . Trong không gian trạng thái của hệ ở thời điểm  $t$  ta xác định được một tập các trạng thái riêng tức thời  $|n(\mathbf{R}_t)\rangle$  của  $H(\mathbf{R}_t)$ , cũng phụ thuộc vào  $t$  thông qua  $\mathbf{R}_t$ , bằng cách chéo hóa  $H(\mathbf{R}_t)$  tại điểm đó:

$$H(\mathbf{R}_t)|n(\mathbf{R}_t)\rangle = E_n(\mathbf{R}_t)|n(\mathbf{R}_t)\rangle \quad (2.65)$$

Giả sử hệ tiến hóa với các tham số  $\mathbf{R}_t$  thay đổi dọc theo một lộ trình  $C$  trong không gian tham số. Ở đây,  $C$  có thể là một lộ trình kín hoặc mở. Ta nói lộ trình  $C$  mà Hamiltonian  $H(\mathbf{R}_t)$  của một hệ điện môi trải qua là một "quá trình đoạn nhiệt" nếu trong quá trình đó [40]:

- Các tham số của Hamiltonian thay đổi một cách liên tục.
- Các đối xứng quan trọng của hệ được bảo toàn.
- Vùng cấm năng lượng của hệ khối được duy trì (không bị đóng lại tại bất kỳ điểm nào của quá trình).

Nhìn chung, quá trình đoạn nhiệt không nhất thiết phải diễn ra theo thời gian, tuy nhiên khi xem xét một quá trình biến đổi theo thời gian, Định lý đoạn nhiệt cho biết



rằng sau khi trải qua một quá trình biến đổi đủ chậm xuất phát từ một trạng thái riêng  $|n(\mathbf{R}_0)\rangle$  ban đầu, hệ sẽ kết thúc trong trạng thái riêng tức thời  $|n(\mathbf{R}_t)\rangle$  của  $H(\mathbf{R}_t)$ . Nói cách khác, trong suốt quá trình này, khoảng năng lượng phân tách  $|n(\mathbf{R}_t)\rangle$  khỏi các trạng thái riêng khác luôn được duy trì khác không. Từ đó, hai Hamiltonian điện môi được gọi là "tương đương đoạn nhiệt" với nhau nếu tồn tại một quá trình đoạn nhiệt kết nối chúng với nhau, hay một quá trình cho phép một trong hai Hamiltonian biến đổi sang cái kia, trong đó các đối xứng quan trọng của hệ luôn được bảo toàn [40].

### 2.5.2. Pha Berry

Quá trình hệ biến đổi từ trạng thái ban đầu  $|n(\mathbf{R}_0)\rangle$  tới trạng thái cuối  $|n(\mathbf{R}_t)\rangle$  ở trên có một bậc tự do là yếu tố pha của trạng thái. Ít nhất, hệ thu được một pha động học liên quan đến năng lượng của trạng thái riêng,  $\exp[-itE_n(\mathbf{R}_t)/\hbar]$ . Tuy nhiên, pha mà trạng thái thực tế có thể thu được là nhiều hơn so với pha động học đơn thuần. Cụ thể, ta còn có pha hình học (*geometric phase*).

Trong cơ học lượng tử và cổ điển, pha hình học là độ lệch pha thu được sau một lộ trình, khi một hệ trải qua các quá trình đoạn nhiệt tuần hoàn, có nguồn gốc từ các tính chất hình học của không gian tham số của Hamiltonian [40]. Điều này được phát hiện độc lập bởi S. Pancharatnam (1956) trong quang học cổ điển và bởi H. C. Longuet-Higgins (1958) trong vật lý phân tử, và sau đó được Michael Berry tổng quát hóa vào năm 1984. Do đó, pha này được gọi là pha Pancharatnam–Berry, hay pha Berry.

Trước hết ta định nghĩa pha tương đối  $\gamma_{12}$  giữa hai trạng thái không trực giao  $|\psi_1\rangle$  và  $|\psi_2\rangle$  như sau:

$$\gamma_{12} = -\arg\langle\psi_1|\psi_2\rangle \quad (2.66)$$

trong đó  $\arg(z) \in (-\pi, \pi]$  với  $z \in \mathbb{C}$ . Do đó, ta có:

$$e^{-i\gamma_{12}} = \frac{\langle\psi_1|\psi_2\rangle}{|\langle\psi_1|\psi_2\rangle|} \quad (2.67)$$

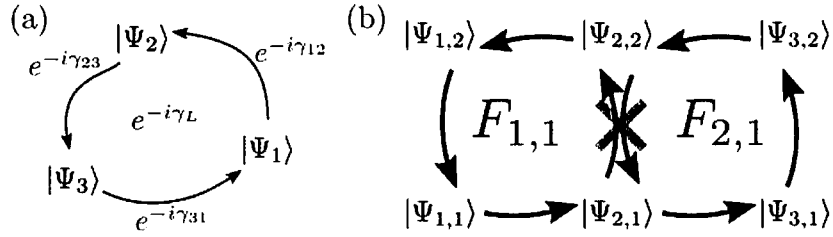
Tuy nhiên, pha tương đối không bất biến dưới phép biến đổi gauge định xứ:

$$|\psi_j\rangle \rightarrow e^{i\alpha_j}|\psi_j\rangle : \quad e^{-i\gamma_{12}} \rightarrow e^{-i\gamma_{12}+i(\alpha_2-\alpha_1)} \quad (2.68)$$

Xét  $N$  ( $N \geq 3$ ) vector trạng thái  $|\psi_j\rangle$  trong không gian Hilbert ( $j = 1, 2, \dots, N$ ) được sắp xếp trong một tập trạng thái  $\mathcal{C} = (1, 2, \dots, N)$  tạo thành một lộ trình đóng. Cho trạng thái của một hệ biến đổi qua tập này dọc theo một chiều của lộ trình. Pha Berry được định nghĩa là (Hình. 2.8):

$$\begin{aligned}
\gamma_{\mathcal{C}} &= \gamma_{12} + \gamma_{23} + \dots + \gamma_{N1} \\
&= -\arg e^{-i(\gamma_{12} + \gamma_{23} + \dots + \gamma_{N1})} \\
&= -\arg(\langle \psi_1 | \psi_2 \rangle \langle \psi_2 | \psi_3 \rangle \dots \langle \psi_N | \psi_1 \rangle) \\
&= -\arg \text{Tr}(|\psi_1\rangle \langle \psi_1| |\psi_2\rangle \langle \psi_2| \dots |\psi_N\rangle \langle \psi_N|)
\end{aligned} \tag{2.69}$$

Bằng cách biểu diễn pha Berry thông qua các toán tử chiếu, ta thấy pha Berry là bất biến gauge, vì các toán tử chiếu có bất biến gauge [40].



Hình 2.8: Pha Berry và thông lượng Berry cho một tập rời rạc các trạng thái lượng tử. [40] (a) Pha Berry  $\gamma_L$  cho một lộ trình  $L$  đóng gồm 3 trạng thái được tính thông qua các pha tương đối  $\gamma_{12}$ ,  $\gamma_{23}$  và  $\gamma_{31}$ . (b) Pha Berry của một lộ trình đóng bao quanh một mạng vuông các trạng thái bằng tổng của các pha Berry (hay thông lượng Berry)  $F_{1,1}$  và  $F_{2,1}$  của các mảnh được bao bên trong lộ trình.

Các đẳng thức (2.69) là phiên bản rời rạc của pha Berry. Khi trạng thái của hệ biến đổi liên tục dọc theo lộ trình  $\mathcal{C}$ , ta có phiên bản liên tục của pha Berry:

$$\gamma_{\mathcal{C}} = -\text{Im} \int_{\mathcal{C}} \langle n(\mathbf{R}_t) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}_t) \rangle d\mathbf{R}_t \tag{2.70}$$

trong đó  $|n(\mathbf{R}_t)\rangle$  được định nghĩa ở (2.65).

Pha Berry  $\gamma_{\mathcal{C}}$  là thực, vì  $\langle n(\mathbf{R}_t) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}_t) \rangle$  là một số thuần ảo. Đại lượng

$$\mathbf{A}(\mathbf{R}_t) = i \langle n(\mathbf{R}_t) | \nabla_{\mathbf{R}} | n(\mathbf{R}_t) \rangle \tag{2.71}$$

được gọi là kết nối Berry.

### 2.5.3. Thông lượng Berry

Xét một mạng vuông hai chiều hữu hạn nằm trong một không gian Hilbert các trạng thái lượng tử, với mỗi nút mạng được gán nhãn bởi  $n, m \in \mathbb{Z}$  ( $1 \leq n \leq N$  và  $1 \leq m \leq M$ ) ứng với một trạng thái lượng tử  $|\psi_{n,m}\rangle$ . Pha Berry thu được khi đi dọc theo lộ trình đóng  $C$  là đường bao xung quanh tập trạng thái này được tính như sau:

$$\gamma_C = -\arg \exp \left[ -i \left( \sum_{n=1}^{N-1} \gamma_{(n,1),(n+1,1)} + \sum_{m=1}^{M-1} \gamma_{(N,m),(N,m+1)} + \sum_{n=1}^{N-1} \gamma_{(n+1,M),(n,M)} + \sum_{m=1}^{M-1} \gamma_{(1,m+1),(1,m)} \right) \right] \quad (2.72)$$

Mặc dù pha Berry là một đại lượng bất biến gauge, nhưng việc tính toán nó theo công thức (2.72) liên quan đến việc nhân nhiều số phức không bất biến gauge với nhau, như chỉ ra ở (2.68). Một cách thay thế là tính thông qua phương trình (2.69), liên quan đến việc nhân các ma trận bất biến gauge, rồi lấy vết. Ngoài ra, có một cách khác để phân tích công thức (2.72) thành tích của các số phức không phụ thuộc gauge. Đó là, đối với mỗi mảnh hình vuông cơ bản trong mạng, được xác định tương ứng bởi hai chỉ số  $n, m$  của đỉnh phía dưới bên trái hình vuông, ta định nghĩa một thông lượng Berry  $F_{nm}$  đi qua mảnh đó bằng tổng của các pha tương đối dọc theo biên của nó:

$$\begin{aligned} F_{nm} &= -\arg \exp \left[ -i \left( \gamma_{(n,m),(n+1,m)} + \gamma_{(n+1,m),(n+1,m+1)} \right. \right. \\ &\quad \left. \left. + \gamma_{(n+1,m+1),(n,m+1)} + \gamma_{(n,m+1),(n,m)} \right) \right] \\ &= -\arg \left( \langle \psi_{n,m} | \psi_{n+1,m} \rangle \langle \psi_{n+1,m} | \psi_{n+1,m+1} \rangle \times \right. \\ &\quad \left. \times \langle \psi_{n+1,m+1} | \psi_{n,m+1} \rangle \langle \psi_{n,m+1} | \psi_{n,m} \rangle \right) \end{aligned} \quad (2.73)$$

với  $n = 1, 2, \dots, N$  và  $m = 1, 2, \dots, M$ . Rõ ràng  $F_{nm}$  bất biến gauge vì nó cũng là một pha Berry.

Bây giờ xét tích của tất cả các pha  $e^{-iF_{nm}}$  của tất cả các mảnh hình vuông trong

mạng:

$$\begin{aligned}
\prod_{n=1}^{N-1} \prod_{m=1}^{M-1} e^{-iF_{nm}} &= \exp \left( -i \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m=1}^{M-1} F_{nm} \right) \\
&= \exp \left[ -i \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m=1}^{M-1} \left( \gamma_{(n,m),(n+1,m)} + \gamma_{(n+1,m),(n+1,m+1)} + \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \gamma_{(n+1,m+1),(n,m+1)} + \gamma_{(n,m+1),(n,m)} \right) \right] \quad (2.74)
\end{aligned}$$

Vì mỗi cạnh nằm ở bên trong mạng thuộc về hai mảnh kề nhau, nên pha tương đối của mỗi cạnh đó xuất hiện hai lần trong tích. Tuy nhiên, vì ta di chuyển theo cùng một hướng dọc theo biên của tất cả các mảnh, nên hai pha tương đối của cùng một cạnh sẽ luôn là liên hợp phức của nhau và do đó triệt tiêu nhau (Hình. 2.8). Kết quả là số hạng mũ bên vế phải của (2.74) được rút gọn về số hạng mũ xuất hiện trong (2.72), hay

$$\exp \left( -i \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{m=1}^{M-1} F_{nm} \right) = e^{-i\gamma_C} \quad (2.75)$$

Phương trình (2.75) có phân tương tự như định lý Stokes liên hệ giữa tích phân mặt của curl của một trường vector trên một mặt cong và tích phân đường của trường vector đang xét dọc theo biên của mặt cong đó [40]. Cụ thể, trong (2.75), tổng của các pha tương đối, tức pha Berry  $\gamma_C$ , đóng vai trò là tích phân đường, trong khi tổng của các thông lượng Berry đóng vai trò tích phân mặt. Tuy nhiên, có một sự khác biệt quan trọng giữa (2.75) và định lý Stokes, đó là dấu bằng không phải lúc nào cũng được đảm bảo: phương trình (2.75) chỉ cho biết hai vế hoặc bằng nhau, hoặc hiệu của chúng bằng một số nguyên lần của  $2\pi$ .

#### 2.5.4. Số Chern

Xét một tập trạng thái trong không gian Hilbert thuộc mạng trên, và được xác định trên bề mặt của một vòng xuyên kín trong không gian tham số. Việc xem xét một vòng xuyên ở đây có ý nghĩa đặc biệt, đó là nhiều không gian tham số vật lý có topo giống như topo của vòng xuyên, do đó số Chern tương ứng của chúng có ý nghĩa vật lý [40]. Ví dụ gần gũi nhất là vùng Brillouin của các mạng vật liệu tuần hoàn trong hai chiều, chẳng hạn vùng Brillouin hình thoi trên Hình. 2.1b, trong đó các vector trong không gian  $\mathbf{k}$  ( $k_x, k_y$ ), ( $k_x + 2\pi, k_y$ ) và ( $k_x, k_y + 2\pi$ ) là tương đương với nhau.

Ta áp dụng định nghĩa tương tự cho thông lượng Berry qua mỗi mảnh như trong (2.73), nhưng  $n \bmod N + 1$  thay cho  $n + 1$  và  $m \bmod M + 1$  thay cho  $m + 1$ . Lúc này ta có:

$$\prod_{n=1}^N \prod_{m=1}^M e^{-iF_{nm}} = 1 \quad (2.76)$$

Bây giờ, trong phương trình (2.75), tất cả các cạnh đều thuộc về hai mảnh kề nhau, vì vậy tất cả các đóng góp trong tích đều triệt tiêu. Số Chern  $C$  liên quan đến cấu trúc vòng xuyên kín do đó được tính bằng tổng thông lượng Berry của tất cả các mảnh tạo thành bề mặt vòng xuyên:

$$C = \frac{1}{2\pi} \sum_{n,m} F_{nm} \quad (2.77)$$

Số Chern  $C$  được xác định thông qua các thông lượng Berry bất biến gauge, do đó bản thân  $C$  là bất biến gauge. Ngoài ra, lấy arg của (2.76) cho thấy số Chern là một số nguyên.

Công thức (2.77) là phiên bản rời rạc của số Chern. Bản chất của nó có thể được hiểu sâu hơn, trước hết bằng cách định nghĩa thông lượng Berry theo một cách khác [40]:

$$\tilde{F}_{nm} = \gamma_{(n,m),(n+1,m)} + \gamma_{(n+1,m),(n+1,m+1)} + \gamma_{(n+1,m+1),(n,m+1)} + \gamma_{(n,m+1),(n,m)} \quad (2.78)$$

Từ đó ta có:

$$\sum_{n=1}^N \sum_{m=1}^M \tilde{F}_{nm} = 0 \quad (2.79)$$

Sự khác biệt duy nhất giữa cách định nghĩa (2.78) so với (2.73) là  $\tilde{F}_{nm} = F_{nm}$  chỉ xảy ra nếu  $-\pi \leq \tilde{F}_{nm} < \pi$ , bởi vì giá trị của  $\tilde{F}_{nm}$  có thể nằm ngoài khoảng  $[-\pi, \pi)$ , trong khi  $F_{nm}$  chỉ nhận giá trị trong khoảng này do quy ước của phép lấy arg đưa ra ở (2.66). Nói cách khác, hiệu của  $F_{nm}$  và  $\tilde{F}_{nm}$  là một số nguyên lần của  $2\pi$ :

$$C_{nm} = \frac{F_{nm} - \tilde{F}_{nm}}{2\pi} \in \mathbb{Z} \quad (2.80)$$

Lúc này, ta nói rằng mảnh hình vuông ứng với chỉ số  $(n, m)$  chứa  $C_{nm}$  "xoáy".

Từ đó, số Chern  $C$  có thể được hiểu là tổng số lượng xoáy trên bề mặt mặt cong [40]:

$$C = \frac{1}{2\pi} \sum_{n,m} F_{nm} = \frac{1}{2\pi} \sum_{n,m} F_{nm} - \frac{1}{2\pi} \sum_{n,m} \tilde{F}_{nm} = \sum_{n,m} C_{nm} \in \mathbb{Z} \quad (2.81)$$

Trong giới hạn liên tục, ta định nghĩa độ cong Berry

$$B = \lim_{\Delta x, \Delta y \rightarrow 0} \frac{F_{nm}}{\Delta x \Delta y} \quad (2.82)$$

trong đó  $\Delta x$ ,  $\Delta y$  là độ lớn kích thước của các mảnh hình vuông trong không gian tham số  $\mathcal{P}$  hai chiều. Lúc này tổng thông lượng Berry trong (2.81) trở thành tích phân mặt của độ cong Berry qua toàn bộ không gian tham số:

$$C = \frac{1}{2\pi} \int_{\mathcal{P}} B dx dy \quad (2.83)$$

### 2.5.5. Số Chern như một bất biến topo

Một số nguyên đặc trưng cho một Hamiltonian của vật liệu điện môi được gọi là một "bất biến topo", hoặc một "bất biến đoạn nhiệt", nếu nó không thay đổi trong các quá trình đoạn nhiệt. Lưu ý rằng việc sử dụng các quá trình đoạn nhiệt hàm ý hai đặc trưng của bất biến topo: (1) nó chỉ được xác định rõ ràng trong giới hạn nhiệt động, và (2) nó phụ thuộc vào các đối xứng cần được bảo toàn [40]. Như vậy, hai Hamiltonian điện môi là không tương đương đoạn nhiệt nếu giá trị của các bất biến topo của chúng khác nhau.

Việc phân loại các vật liệu điện môi được thực hiện một cách đầy đủ bởi xác định các bất biến topo khác nhau. Đối với các hệ mà đối xứng nghịch đảo thời gian bị phá vỡ, như mô hình Haldane, số Chern là bất biến topo được sử dụng để đặc trưng cho tính chất topo của một dải cô lập. Trong những hệ này, số Chern có thể nhận các giá trị nguyên khác không, khi đó ta thu được vật liệu điện môi Chern. Khi đối xứng này được bảo toàn, mặc dù số Chern hoàn toàn bằng không, nhưng các bất biến topo khác có thể trở nên cần thiết, chẳng hạn như số  $\mathbb{Z}_2$  [41].

Số Chern của một dải năng lượng của một vật liệu điện môi là một bất biến topo theo nghĩa như sau. Xét một Hamiltonian mô tả động học của các electron trong mạng vật liệu trải qua một quá trình biến đổi đoạn nhiệt. Đây là một quá trình liên tục sao cho các khoảng phân tách năng lượng giữa dải đang xét với các dải khác luôn

được giữ ở giá trị khác không. Trong trường hợp này, độ cong Berry biến đổi một cách liên tục, do đó tích phân của nó trong vùng Brillouin (2.83), tức số Chern, không thể thay đổi giá trị vì giá trị của nó bị giới hạn ở các số nguyên [40]. Nếu quá trình biến đổi này khiến cho những khoảng phân tách này bị đóng và mở lại, nghĩa là quá trình không đoạn nhiệt, thì giá trị số Chern có thể thay đổi. Theo nghĩa này, số Chern là một bất biến topo đối với các cấu hình mạng hai chiều [40].

Nói chung, khi cho một toán tử vi phân tuần hoàn lượng tử (hoặc cổ điển), ta có thể thu được phổ của nó được sắp xếp thành một dãy các dải và các khoảng phân tách xen giữa. Nhiều tính chất điện tử của vật liệu có thể được rút ra từ cấu trúc vùng năng lượng và phân bố mật độ trạng thái của nó. Tuy nhiên, những đại lượng này không cung cấp thông tin về sự tiến hóa của pha của các trạng thái riêng trong không gian  $k$ , trong khi đây là một thông tin cần thiết để hiểu và dự đoán một số hiện tượng topo mới nổi như QHE hay QSHE [41]. Khi nghiên cứu tính chất điện tử, các đặc tính topo được rút ra bằng cách xem xét các dải nằm dưới mức Fermi, hay các dải hóa trị.

## 2.6. Phương pháp nghiên cứu

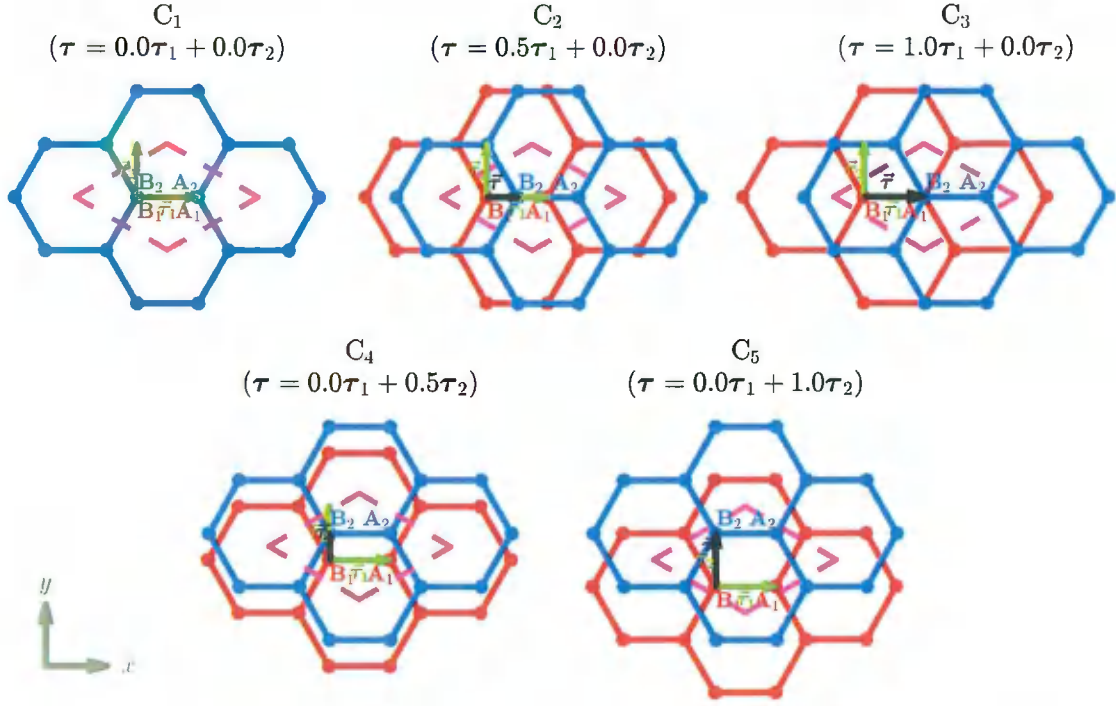
### 2.6.1. Tham số khảo sát

Đối tượng nghiên cứu của luận văn là ảnh hưởng của coupling giữa hai lớp đến đặc tính topo của hệ SBH, do đó mô hình được quan tâm là (2.61), với các tham số được khảo sát ở đây là:

- Các tham số hình học của mạng: vector trượt  $\tau$  và hình dạng biên của dải nano (zigzag/armchair).
- Các tham số động lực của điện tử trong mạng: các tham số tunneling hai lớp (2.19), thế năng onsite  $M_0$ , các pha phức  $\phi_1$  và  $\phi_2$ .

Ở đây, lấy  $t_0 = |t_{||}| = 2,7$  eV làm đơn vị của cường độ tunneling. Do đó, giá trị của các tham số tunneling trong cùng lớp tới lân cận gần nhất là  $t_1 = -t_0$ , tới lân cận gần thứ hai là  $t_2 t_0$ , giữa hai lớp là  $t_v(\mathbf{d}_{\alpha\beta}^j) = (t_{12}/t_0)t(\mathbf{d}_{\alpha\beta}^j)$ , và thế năng onsite là  $M_0 t_0$ . Theo quy ước này,  $t_2$ ,  $t_{12}$  và  $M_0$  là các tham số tỷ lệ không thứ nguyên. Ta có thể điều chỉnh tất cả các cường độ tunneling giữa hai lớp theo cùng một tỷ lệ bằng cách thay đổi tham số  $t_{12}$ , bởi vì các giá trị của  $t(\mathbf{d}_{\alpha\beta}^j)$  đã được cố định theo các kích

thước hình học được chọn của mạng khi tính theo (2.5). Giá trị lớn nhất của  $t_v(\mathbf{d}_{\alpha\beta}^j)$  chỉ đạt được đối với vertical hopping:  $\max t_v(\mathbf{d}_{\alpha\beta}^j) = (t_{12}/t_0)t_{\perp}$ . Sau đây, các giá trị  $t_{12}$  được chọn để khảo sát sẽ được viết ở dạng  $t_{12} = \left[ \max t_v(\mathbf{d}_{\alpha\beta}^j) \right] \times t_0/t_{\perp}$ .



Hình 2.9: Cấu trúc hình học của 5 cấu hình mạng SBH được khảo sát trong luận văn.  
Ý nghĩa của các ký hiệu và màu sắc giống như trong Hình. 2.2a.

Các tham số chung được chọn cho tất cả các tính toán trong luận văn này là:

- Cường độ  $t_2 = 0, 1$ .
- Độ rộng dải nano  $W$ , được biểu thị thông qua số đường dimmed hoặc số đường zigzag:  $N_z = N_d = 70$  (công thức (2.38)). Như vậy mỗi ô cơ sở chứa 280 nguyên tử.

Ảnh hưởng của vector trượt  $\tau$  được khảo sát qua 5 cấu hình sau (Hình. 2.9):

- Cấu hình đặc biệt  $C_1$  (cấu hình xếp AA):  $\tau = (0, 0; 0, 0)$ .
- Cấu hình trung gian  $C_2$ :  $\tau = (0, 5; 0, 0)$ .
- Cấu hình đặc biệt  $C_3$  (cấu hình xếp AB):  $\tau = (1, 0; 0, 0)$ .
- Cấu hình trung gian  $C_4$ :  $\tau = (0, 0; 0, 5)$ .
- Cấu hình trung gian  $C_5$ :  $\tau = (0, 0; 1, 0)$ .



## 2.6.2. Quy trình tính số và khảo sát

Các Hamiltonian tổng quát dễ dàng được chéo hóa bằng phương pháp số. Trong luận văn này, việc chéo hóa số được thực hiện bởi hàm `eig()` trong Matlab. Hàm này trả về cả giá trị riêng và vector riêng của ma trận, do đó có thể thu được cấu trúc vùng năng lượng và đồng thời cả trạng thái riêng cho tính toán số Chern. Quy trình tính số chung bao gồm các tính toán như sau:

- Xác định tập vector hopping ứng với từng phần tử trong ma trận Hamiltonian bằng cách đặt một giới hạn khoảng cách không gian từ mỗi nguyên tử tới các lân cận của nó. Giới hạn này đối với lân cận gần nhất và gần thứ hai trong cùng lớp và lân cận gần nhất khác lớp lần lượt là:

$$r_1 = a_{CC}, \quad r_2 = a, \quad r_v = \sqrt{a_{CC}^2 + d_{GG}^2} \quad (2.84)$$

- Chia lưới vùng Brillouin. Đối với hệ khối hai chiều, để dễ dàng cho việc tính số Chern ở đây, vùng Brillouin được chọn là hình thoi (Hình. 2.1), vì vậy mỗi mảnh nhỏ trong vùng Brillouin cũng là hình thoi. Số điểm chia dọc theo các trục  $k_x$  và  $k_y$  lần lượt là  $N_{k_x}$  và  $N_{k_y}$ . Đối với dải nano một chiều, vùng Brillouin là một chiều  $[-b_x/2, b_x/2]$ , do đó số điểm chia chỉ cần một tham số là  $N_k$ .
- Tại mỗi điểm chia trong vùng Brillouin, xác định giá trị các phần tử của ma trận Hamiltonian. Đây là một ma trận  $4 \times 4$  đối với hệ khối, và là  $2N \times 2N$  đối với dải nano, trong đó  $2N$  là số nguyên tử trong một ô đơn vị của dải. Sau đó, chéo hóa Hamiltonian của các hệ này để thu các tập dữ liệu năng lượng riêng và trạng thái riêng tương ứng tại từng điểm chia. Cấu trúc vùng năng lượng của các hệ trong toàn bộ vùng Brillouin thu được sau khi chéo hóa xong các Hamiltonian tại tất cả các điểm chia.
- Đối với hệ khối, sau khi đã có các trạng thái riêng tại tất cả các điểm chia, số Chern của một dải hóa trị sẽ được tính theo công thức rời rạc (2.77), trong đó thông lượng Berry qua mỗi mảnh hình thoi được tính theo công thức (2.73). Từ đó, số Chern tổng cộng của tất cả các dải hóa trị thu được bằng cách cộng tổng các giá trị số Chern trên từng dải hóa trị riêng biệt.

- Đối với dải nano, các trạng thái riêng thu được tại mỗi điểm chia sẽ được sử dụng để tính giá trị vị trí định xứ trung bình  $X_\psi$  sử dụng các công thức (2.85-2.87) trình bày dưới đây. Giá trị này sau đó sẽ được biểu diễn lên cấu trúc vùng năng lượng của dải nano.

Chúng tôi định nghĩa đại lượng  $X_\psi$ , gọi là "vị trí định xứ trung bình", để biểu diễn mức độ định xứ của trạng thái điện tử trong không gian thực của mạng một chiều. Quy trình tính  $X_\psi$  cụ thể như sau. Đầu tiên, tại mỗi điểm  $(ka, E)$  trên cấu trúc vùng năng lượng của dải nano, chúng tôi tính toán phân bố xác suất của trạng thái điện tử trên các nút mạng trong ô đơn vị theo công thức:

$$P_j(k, E) = |\langle \mathbf{R}_j | \psi(k, E) \rangle|^2 = |\psi_j(k, E)|^2 \quad (2.85)$$

trong đó  $|\psi(k, E)\rangle$  là vector trạng thái thu được tại điểm  $(ka, E)$  bằng cách chéo hóa Hamiltonian. Trong tính toán số, đây là một vector có  $2N$  phần tử, với phần tử thứ  $j$ , hàm sóng  $\psi_j(k, E)$ , là biên độ xác suất của trạng thái  $|\psi(k, E)\rangle$  tại nút mạng  $\mathbf{R}_j$ .

Phân bố xác suất  $P_j(k, E)$  của hàm sóng qua các nút mạng thể hiện mức độ định xứ của trạng thái tại các vị trí khác nhau trong vùng biên và vùng khối của dải nano. Để biểu diễn trực tiếp mức độ định xứ này lên cấu trúc vùng năng lượng cho mục đích thảo luận trong Chương 3,  $X_\psi$  được định nghĩa như sau:

$$X_\psi = (1 - \sigma_r) \times \langle j \rangle_r + 0,5 \times \sigma_r \quad (2.86)$$

trong đó

$$\langle j \rangle_r = \frac{\langle j \rangle}{N}, \quad \langle j \rangle = \sum_{j=1}^N j P_j(k, E), \quad (2.87)$$

$$\sigma_r = \frac{\sigma}{\sigma_{\max}}, \quad \sigma = \sqrt{\langle (j - \langle j \rangle)^2 \rangle}, \quad \sigma_{\max} = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{j=1}^N (j - 1)^2}$$

Ở đây,  $j$  là chỉ số nút mạng dọc theo độ rộng của dải nano trên một lớp ( $1 \leq j \leq N$ ), do đó đại lượng  $\langle j \rangle_r \in [0, 1]$  cho biết vị trí tương đối của trung bình của phân bố xác suất trạng thái so với các biên của dải. Cụ thể,  $\langle j \rangle_r \rightarrow 0$  có nghĩa là trung bình của phân bố lệch về biên ứng với  $j = 1$ , sau đây gọi là "biên trái", trong khi  $\langle j \rangle_r \rightarrow 1$

cho thấy trung bình này lệch về biên ứng với  $j = N$ , gọi là "biên phải". Đại lượng  $\sigma$  biểu thị độ lan ra của hàm sóng trạng thái xung quanh giá trị trung bình  $\langle j \rangle$ , và  $\sigma_{\max}$  được chọn như là giá trị lớn nhất của  $\sigma$ . Vì vậy,  $\sigma_r \in [0, 1]$  là một con số đặc trưng cho mức độ lan ra này.

Công thức (2.86) phụ thuộc vào cả hai đại lượng  $\langle j \rangle_r$  và  $\sigma_r$  và cho ra một giá trị  $X_\psi \in [0, 1]$  đặc trưng cho vị trí định xứ trung bình của hàm sóng trạng thái trong không gian. Cụ thể,  $X_\psi \rightarrow 0$  nghĩa là trạng thái định xứ ở biên trái, trong khi  $X_\psi \rightarrow 1$  ứng với biên phải. Các giá trị trung gian của  $X_\psi$  trực tiếp thể hiện vị trí định xứ của trạng thái trong phần khối của dải nano dọc theo phương độ rộng. Chẳng hạn, khi mức độ lan ra của phân bố là thấp, tức là  $\sigma_r \rightarrow 0$ , thì  $\langle j \rangle_r \rightarrow 0$  hoặc  $\langle j \rangle_r \rightarrow 1$  cho tương ứng  $X_\psi \rightarrow 0$  (trạng thái định xứ mạnh ở biên trái) hoặc  $X_\psi \rightarrow 1$  (trạng thái định xứ mạnh ở biên phải). Ngược lại, khi hàm sóng của trạng thái lan ra rộng trong không gian, tức là  $\sigma_r \rightarrow 1$ , ta có  $X_\psi \rightarrow 0,5$  bất kể  $\langle j \rangle_r \rightarrow 0$  hay  $\langle j \rangle_r \rightarrow 1$ , có nghĩa là hàm sóng định xứ mạnh trong phần khối của dải nano (xung quanh vị trí trung điểm của độ rộng). Khi hệ có hai hay nhiều lớp, vị trí định xứ trung bình của trạng thái trong toàn bộ mạng vật liệu có thể tính bằng cách lấy trung bình giá trị  $X_\psi$  của từng lớp riêng biệt.

Cần lưu ý rằng các đại lượng kết nối Berry, độ cong Berry và do đó số Chern của một dải năng lượng chỉ có thể được xác định nếu dải này được phân tách hoàn toàn khỏi các dải khác bởi các khoảng phân tách năng lượng, sau đây sẽ gọi tắt là "khoảng phân tách" (*KPT*). Ngược lại, khi các dải năng lượng giao cắt với nhau, trạng thái của điện tử tại các điểm giao cắt không được xác định rõ ràng, do đó việc tính toán số Chern cho từng dải này không thể thực hiện được. Lúc này, không thể sử dụng số Chern để kiểm tra đặc trưng topo của những dải như vậy. Trong thuật toán tính số chúng tôi áp dụng ở đây, việc tính số Chern vẫn cho ra kết quả cho các dải bị giao cắt, nhưng là những số nguyên ngẫu nhiên, biểu thị sự không xác định.

Một công cụ có thể thay thế cho số Chern trong những trường hợp như vậy là "Wilson loop", cho phép kiểm tra đặc trưng topo tổng cộng của tất cả các dải giao cắt, do đó là một công cụ khảo sát tính chất topo của hệ vật liệu chặt chẽ và toàn diện hơn. Tuy nhiên, thực tế rằng số Chern chỉ có thể được định nghĩa cho từng dải năng lượng riêng biệt cũng chính là một ưu điểm cho phép chúng tôi khảo sát được đặc trưng topo

của từng dải một cách độc lập. Ngoài ra, việc tính số Chern đơn giản hơn so với tính Wilson loop, do đó giúp tiết kiệm thời gian khảo sát. Hơn nữa, giá trị của số Chern có ý nghĩa gắn liền với đại lượng vật lý, chẳng hạn độ dẫn Hall, trong khi các trị riêng của Wilson loop là đại lượng thuần túy toán học, không gắn với đại lượng vật lý. Vì vậy, chúng tôi sử dụng số Chern để khảo sát đặc trưng topo của tất cả các cấu hình vật liệu được nghiên cứu, bao gồm cả trường hợp giao cắt dải năng lượng xảy ra, với sự hỗ trợ của tính toán cấu trúc vùng năng lượng.

Bước đầu tiên của quá trình khảo sát tính chất topo của hệ SBH là tính toán các giản đồ pha topo cho 5 cấu hình trượt được chọn trong Hình. 2.9 như một phác thảo ban đầu về các pha topo khả dĩ có thể xuất hiện. Đây là giản đồ thể hiện sự phụ thuộc của giá trị số Chern của các dải năng lượng của hệ khối vào  $M_0$ ,  $\phi_1$  và  $\phi_2$ , ba tham số động lực đặc trưng của mô hình Haldane hai lớp. Mỗi giá trị cụ thể của số Chern thể hiện một đặc trưng topo nhất định của hệ khối. Chúng tôi thay đổi các tham số động lực khác nhau nêu trên để kiểm tra sự hình thành và biến đổi của các pha topo khác nhau. Ở bước tiếp theo của quá trình khảo sát, chúng tôi tính toán cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối và của các cấu hình dải nano tương ứng tại các bộ tham số động lực khác nhau được lựa chọn dựa trên các giản đồ pha. (Chi tiết phương pháp được trình bày trong chương sau.) Cấu trúc vùng năng lượng thể hiện một cách định lượng hơn các đặc trưng topo của trạng thái điện tử so với giản đồ pha, do đó kết hợp cả hai kết quả này để kiểm tra sự thống nhất giữa chúng giúp chúng tôi đánh giá lại các pha topo của điện tử đã được phác thảo trước, bao gồm trong cả những miền pha tại đó số Chern không được định nghĩa, từ đó xác nhận pha vật lý của vật liệu.

Trong quá trình trình bày kết quả ở chương tiếp theo, các từ viết tắt "VB1", "VB2" và "CB2" được sử dụng lần lượt để chỉ các dải hóa trị thứ nhất (thấp hơn), dải hóa trị thứ hai (cao hơn, nằm gần mức Fermi) và dải dẫn thứ hai (dải dẫn thấp hơn, nằm gần mức Fermi), và "VBT" chỉ giản đồ pha số Chern tổng cộng của cả hai dải hóa trị.

## Chương 3. KẾT QUẢ VÀ THẢO LUẬN

### 3.1. Sự hình thành của các pha topo

#### 3.1.1. Giản đồ pha $M_0$ - $\phi$

Các giản đồ pha  $M_0$ - $\phi$ , trong đó  $\phi = \phi_1 = \phi_2$ , được khảo sát để kiểm tra ảnh hưởng của hiệu ứng coupling giữa hai lớp, hay vector trượt  $\tau$ , khi ta gấp đôi số lớp của mô hình Haldane gốc, vì các tham số động lực của hai lớp ở đây là giống hệt nhau. Kết quả tính được đưa ra trên Hình. 3.1, với các tham số chung được chọn là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 3t_0/t_{\perp}$ .

Hình. 3.1 cho thấy việc xếp chồng hai lớp về cơ bản cho phép xuất hiện các giá trị số Chern tổng cộng cao hơn trường hợp chỉ có một lớp, cụ thể ở đây  $C = \pm 2$ . Trong tất cả các cấu hình trượt, cấu hình  $C_3$  (xếp AB) là đáng chú ý vì đây là cấu hình duy nhất hỗ trợ các pha topo bậc cao  $C = \pm 2$  ngay trên dải hóa trị VB2, trong khi dải VB1 hoàn toàn tầm thường về mặt topo với  $C = 0$ . Trong khi đó, đối với tất cả những cấu hình khác, số Chern  $C = \pm 2$  chỉ thu được như là đóng góp tổng cộng của cả hai dải hóa trị, với  $|C| \leq 1$  trên từng dải riêng biệt. (Chú ý rằng số Chern nhận giá trị nguyên.)

Trong số các cấu hình được khảo sát, hai cấu hình  $C_1$  (xếp AA) và  $C_5$  thể hiện những điểm pha  $(M_0, \phi)$  tại đó giá trị số Chern không xác định, với một hình ảnh giống như nhiễu trên giản đồ pha. Sự không xác định này xảy ra đối với cả hai dải VB1 và VB2 của mẫu  $C_5$ , trong khi chỉ xuất hiện trên giản đồ VB2, và do đó cả VBT, của mẫu  $C_1$ . Ngoài ra, có thể thấy đối với mẫu  $C_5$ , các điểm không xác định phân bố ngẫu nhiên gần như trong toàn miền giá trị của  $M_0$  và  $\phi$ , trong khi với mẫu  $C_1$ , có sự phân biệt rõ ràng giữa các miền trong đó giá trị của  $C$  không xác định hoặc được xác định rõ ràng. Đây là hai cấu hình duy nhất cho thấy những điểm không xác định khi  $\phi_1 = \phi_2$ . Nguyên nhân của sự không xác định này là do trong cấu trúc vùng năng lượng của các cấu hình SBH với các điểm pha đó xảy ra sự giao cắt giữa các dải năng lượng, cụ thể là giữa VB2 và CB2 đối với  $C_1$  và giữa VB1 và VB2 đối với  $C_5$ . Đặc trưng topo của những miền không xác định này sẽ được chỉ ra ở phần sau.

Đối với các cấu hình trung gian  $C_2$  và  $C_4$ , giản đồ pha của dải VB1 thu được là giống hệt như giản đồ của hệ đơn lớp, với các đường chuyển pha tuân theo phương

trình (2.57). Trên giản đồ pha VB2 của chúng, xuất hiện những thêm những miền nhỏ với  $C = \pm 1$ , cho phép các giản đồ VBT tương ứng có thể chứa tất cả các pha nằm trong khoảng  $-2 \leq C \leq 2$ .

Để xem xét thêm ảnh hưởng của cường độ coupling giữa hai lớp, chúng tôi theo dõi sự biến đổi của các pha trên giản đồ VB2 của các cấu hình trên khi thay đổi tham số  $t_{12}$ . Ngoài ra, để chỉ ra rằng các điểm có số Chern không xác định đối với hai cấu hình  $C_1$  và  $C_5$  chỉ xuất hiện khi  $\phi_1 = \phi_2$ , chúng tôi tính các giản đồ pha của hai cấu hình này với  $(\phi_1, \phi_2) = (\phi, \phi - \epsilon_\phi)$  trong đó  $\epsilon_\phi \rightarrow 0$ . Cụ thể,  $\epsilon_\phi = 10^{-5}$  và  $\epsilon_\phi = 10^{-1}$  lần lượt cho  $C_1$  và  $C_5$ . Kết quả được trình bày trên Hình. 3.2 với tham số chung  $t_2 = 0, 1$ .

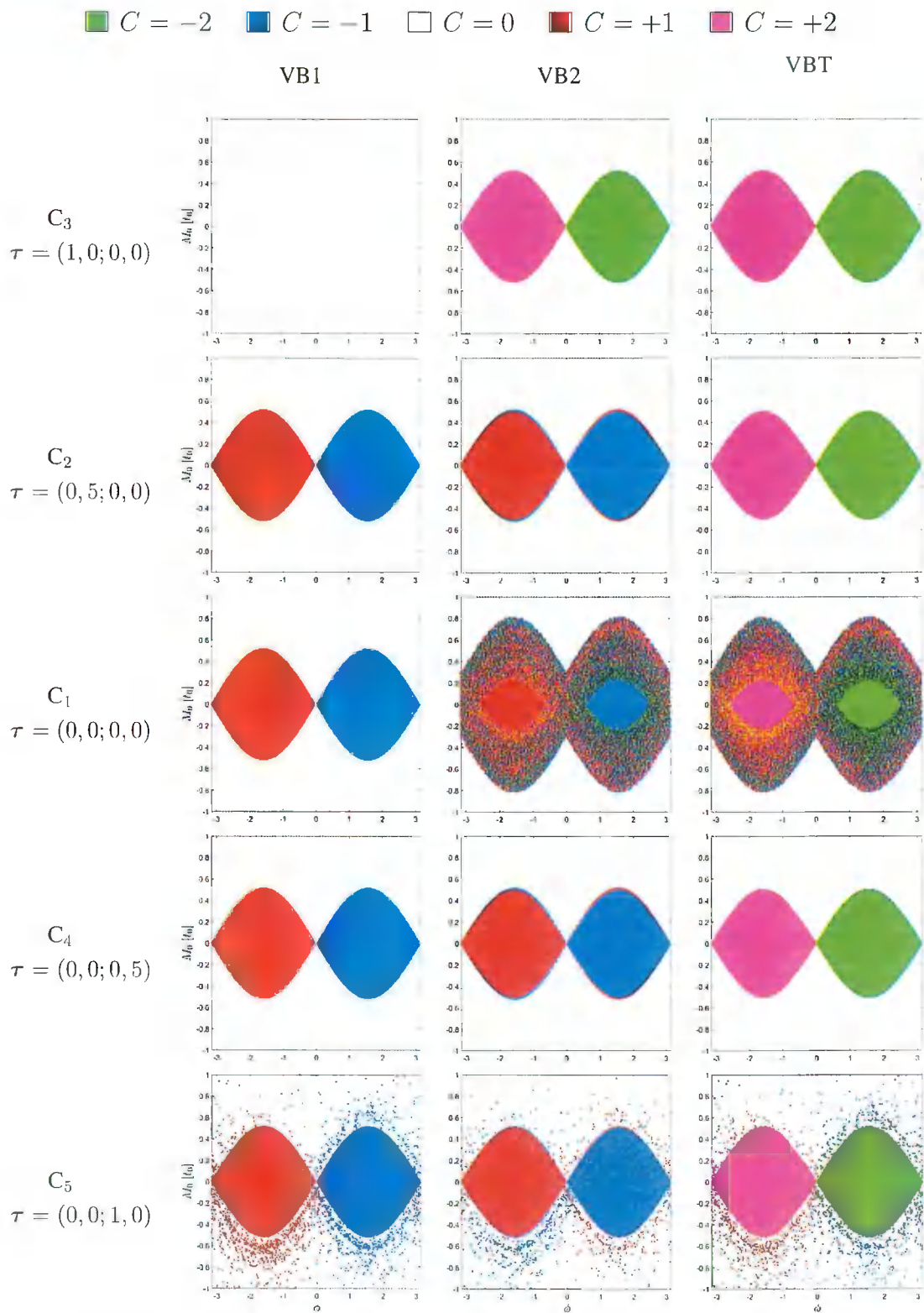
Có thể thấy đối với cấu hình  $C_1$  (xếp AA), khi  $\phi_1 - \phi_2 = \epsilon_\phi$ , giản đồ pha tổng cộng của nó thể hiện một hiệu ứng tương đương với việc dịch giản đồ pha của hệ đơn lớp (Hình. 2.4) một lượng bằng  $|t_{12}t_\perp|$  (eV) theo hai hướng ngược nhau dọc trục tung sau đó cộng lại và thu được  $C = \pm 2$  tại những phần giao nhau. Điều này được chỉ ra bằng cách so sánh các giản đồ VBT và VB2 của  $C_1$  trên Hình. 3.1 và 3.2. Đối với dải VB1, phương trình đường chuyển pha tiếp tục được cho bởi (2.57), còn đối với dải VB2 và giản đồ VBT, ta có thêm các đường chuyển pha với phương trình như sau:

$$M_0 = \xi 3\sqrt{3}t_2 \sin \phi \pm t_{12}t_\perp \quad (t_{12} \geq 0) \quad (3.1)$$

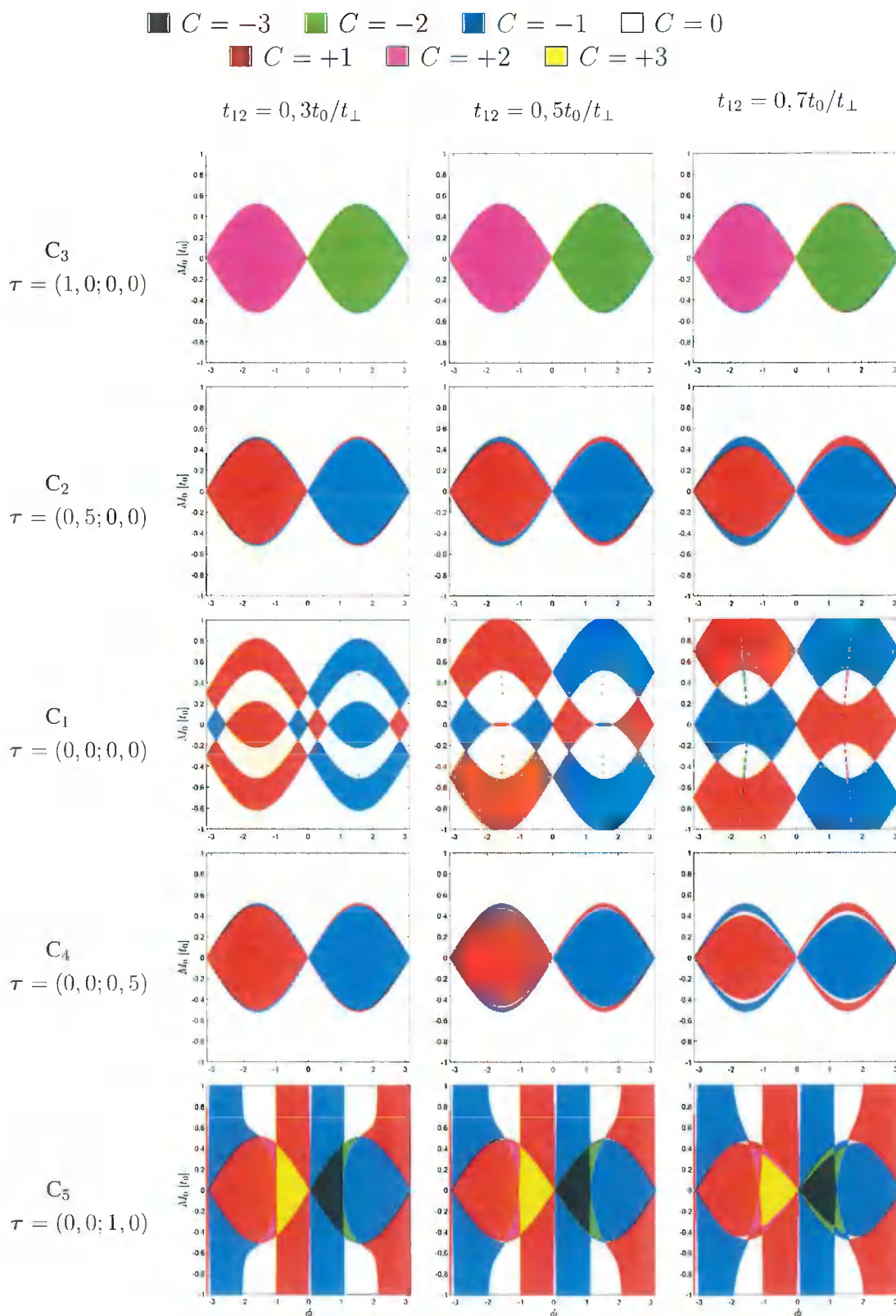
Từ (3.1), dễ thấy khi  $t_{12} \geq t_\perp/(3\sqrt{3}t_2)$ , các phần giao nhau ứng với  $C = \pm 2$  trên giản đồ VBT của  $C_1$  hoàn toàn biến mất, khi đó chỉ tồn tại các pha topo bậc thấp  $C = \pm 1$ , chẳng hạn như trường hợp  $t_{12} = 0, 7t_0/t_\perp$  trên Hình. 3.2. Như vậy với cấu hình này, các pha topo  $|C| \in \{1, 2\}$  có thể được hỗ trợ bằng cách thay đổi cường độ coupling hai lớp.

Đối với cấu hình  $C_5$ , khi  $\phi_1 - \phi_2 = \epsilon_\phi$ , xuất hiện thêm các pha topo bậc cao hơn lên tới  $C = \pm 3$  (Hình. 3.2). Đối với các giá trị tham số được kiểm tra ở đây, có thể thấy phần lớn miền giá trị của  $(M_0, \phi)$  là các pha  $C = \pm 1$ . Miền pha  $C = \pm 3$  lớn hơn  $C = \pm 2$ , nhưng thu hẹp dần khi tăng  $t_{12}$ .

Các cấu hình trung gian  $C_2$  và  $C_4$  cho thấy các miền  $C = \pm 1$  nhỏ mở rộng dần dọc theo trục tung về phía  $M_0 = 0$  khi tăng  $t_{12}$ . Đặc biệt, đối với các cấu hình trượt dọc theo  $\tau_2$ , đại diện là  $C_4$ , xuất hiện thêm các miền nhỏ với  $C = 0$  nằm xen giữa



Hình 3.1: Giản đồ pha  $M_0$ - $\phi$  của hệ mạng lực giác hai lớp trượt. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 3t_0/t_{\perp}$ .



Hình 3.2: Giản đồ pha  $M_0$ - $\phi$  ứng với dải VB2 của hệ mạng lực góc hai lớp trượt. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ . Đối với hai cấu hình  $C_1$  và  $C_5$ , áp dụng  $(\phi_1, \phi_2) = (\phi, \phi - \epsilon_\phi)$  với giá trị lần lượt là  $\epsilon_\phi = 10^{-5}$  và  $\epsilon_\phi = 10^{-1}$  (Radian). Với các cấu hình còn lại,  $\phi_1 = \phi_2 = \phi$ .



và cũng mở rộng dần. Ngoài ra, với cấu hình  $C_3$  (xếp AB), sự xuất hiện và mở rộng dần của các miền nhỏ tương tự cũng được quan sát thấy trên dải VB2, chẳng hạn từ  $t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$ , dẫn đến một giản đồ pha cho dải này tương tự như giản đồ VBT của cấu hình  $C_4$ . Tuy nhiên, sự thể hiện này chỉ thực sự rõ ràng với các giá trị  $t_{12}$  cao hơn so với  $C_2$  và  $C_4$  (không được trình bày trên Hình. 3.2).

### 3.1.2. Giản đồ pha $\phi_1$ - $\phi_2$

Chúng tôi kiểm tra sự xuất hiện và biến đổi của các pha topo của hệ BLH khi thay đổi đồng thời  $\phi_1$  và  $\phi_2$  trong trường hợp không có chênh lệch thế năng nguyên tử trên các nút mạng ( $M_0 = 0$ ). Kết quả thu được cho 5 cấu hình đại diện được hiển thị trên Hình. 3.3, 3.4 và 3.5 lần lượt cho các dải hóa trị VB1, VB2 và tổng của chúng (VBT).

Đối với dải VB1 (Hình. 3.3), xuất phát từ cấu hình  $C_1$  sau đó trượt hai lớp dọc theo  $\tau_2$  ( $C_1 \rightarrow C_4 \rightarrow C_5$ ) chỉ cho thấy hai pha topo với số Chern  $C = \pm 1$ . Trong khi đó, trượt theo hướng còn lại  $\tau_1$  ( $C_1 \rightarrow C_2 \rightarrow C_3$ ) cho thấy thêm những pha topo tầm thường với  $C = 0$ . Theo hướng trượt này, khi tăng cường độ coupling giữa hai lớp, có thể thấy xu hướng mở rộng dần của pha  $C = 0$  trong khi các pha  $C = \pm 1$  biến mất dần. Dọc theo hướng  $\tau_2$ , có thể thấy giản đồ pha của các cấu hình  $C_1$  và  $C_4$  khá tương đồng với nhau, trong khi cấu hình  $C_5$  thể hiện một sự khác biệt rõ rệt. Trên thực tế, sự chuyển tiếp  $C_1 \rightarrow C_4 \rightarrow C_5$  là liên tục, tuy nhiên giai đoạn chuyển tiếp nhanh chóng và rõ ràng chỉ có thể quan sát thấy khi  $\tau$  biến đổi trong khoảng từ  $(0, 0; 0, 8)$  đến  $(0, 0; 1, 0)$  (không được đưa ra trên hình).

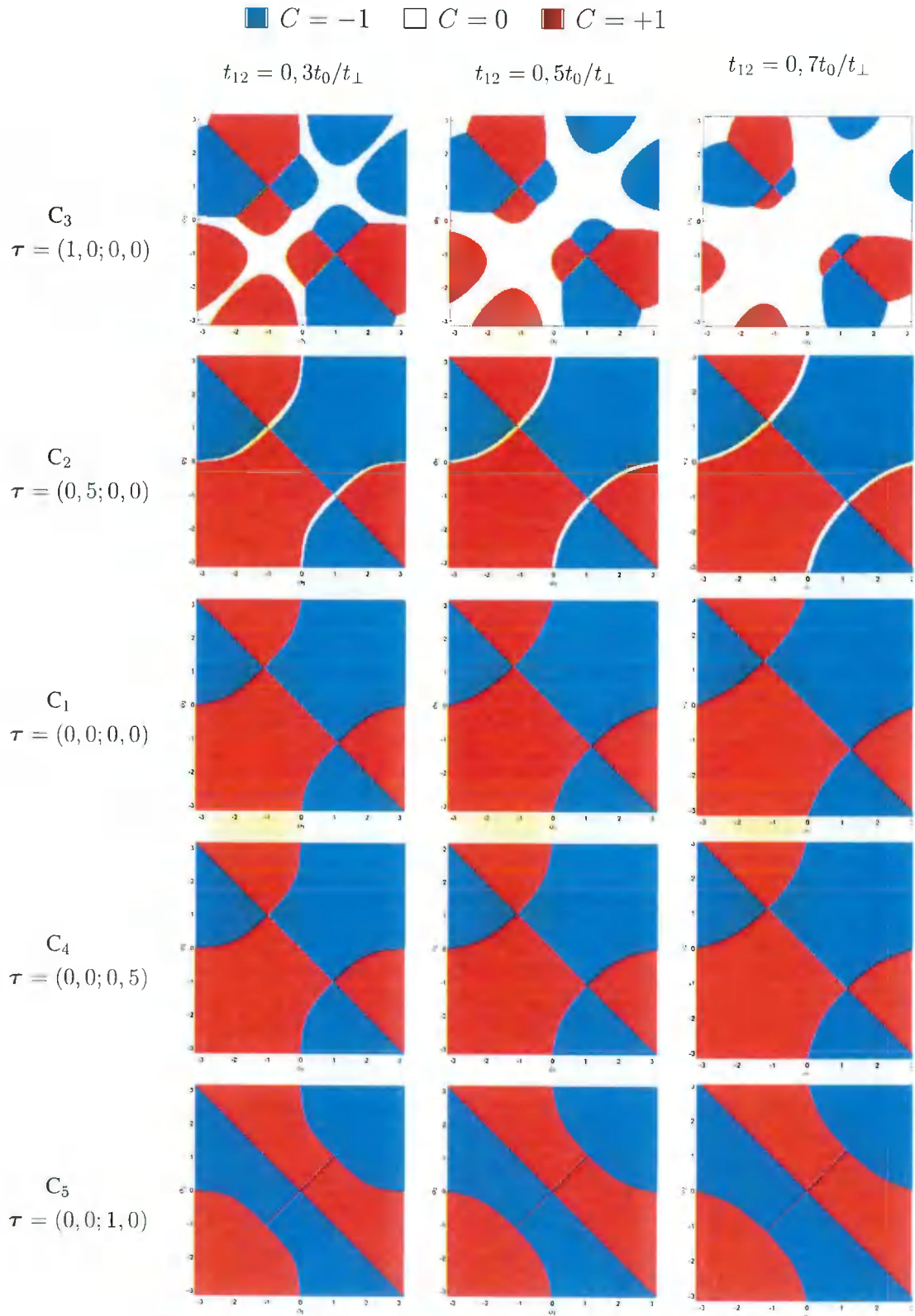
Đối với dải VB2 (Hình. 3.4), khi trượt dọc theo hướng  $\tau_1$ , chúng tôi quan sát thấy sự xuất hiện và mở rộng dần của các miền pha ứng với các pha topo bậc cao  $|C| \in \{2, 3\}$  khi tăng dần cường độ coupling giữa hai lớp, bên cạnh các pha với  $|C| \leq 1$ . Đối với phương trượt còn lại, chỉ quan sát thấy các pha với  $|C| = 1$  khi  $\tau$  biến đổi từ  $(0, 0; 0, 0)$  đến  $(0, 0; 0, 5)$ . Tuy nhiên từ  $(0, 0; 0, 5)$  đến  $(0, 0; 1, 0)$ , các miền pha ứng với  $|C| = 3$  xuất hiện và mở rộng dần ra, nhưng không có các pha  $|C| = 2$ .

Trong một nghiên cứu gần đây, Mondal và cộng sự [24] cũng đã khảo sát tính chất topo của cấu hình xếp AB (cấu hình  $C_3$ ) của mạng lục giác hai lớp. Tuy nhiên, các tác giả đã đơn giản hóa quá trình tunneling giữa hai lớp, chỉ bao gồm phần tử

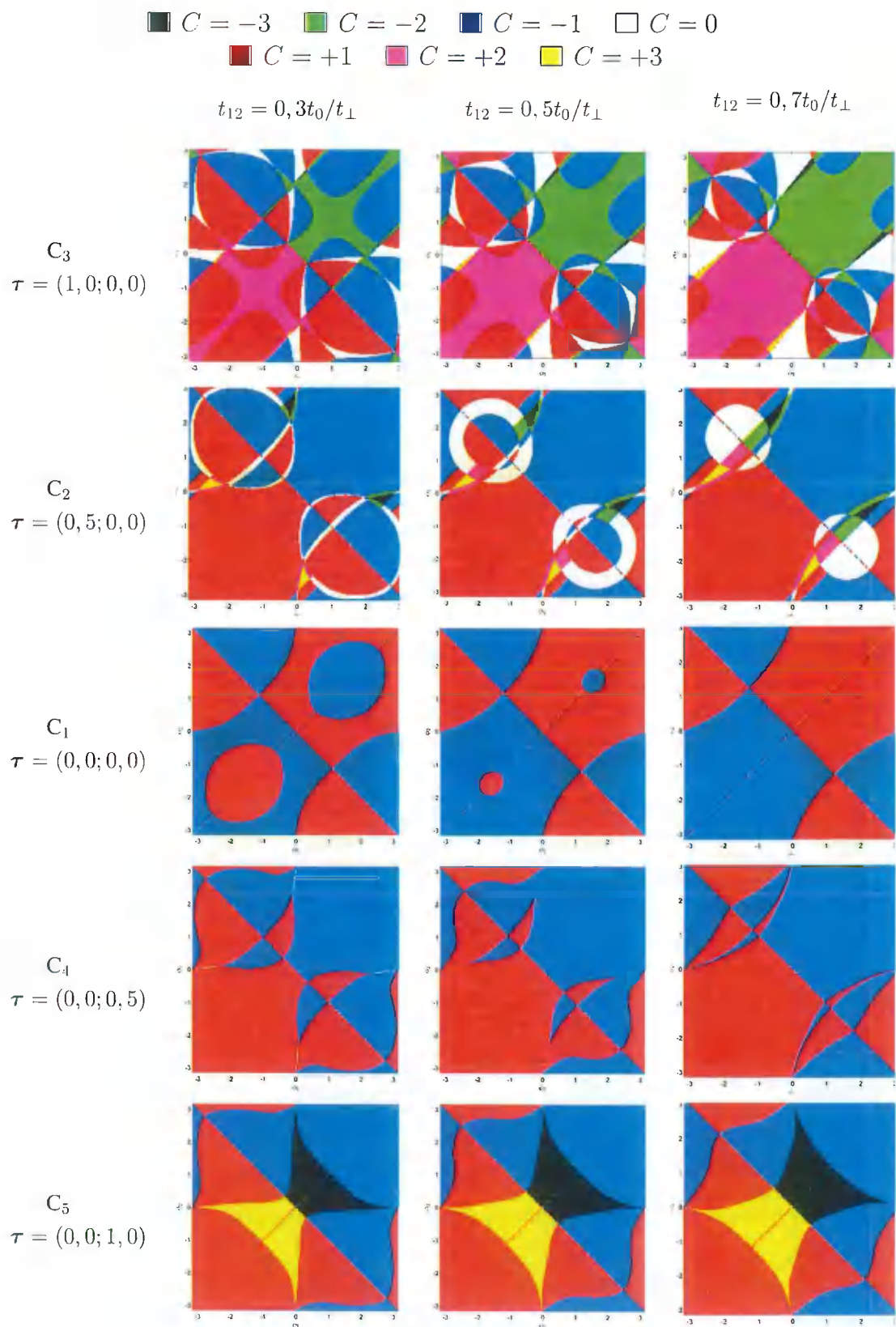
vertical hopping  $v_k = t_{12}t_{\perp}$ , như trong Hamiltonian (2.35). Các tác giả đã quan sát được các pha topo bậc cao  $|C| = 2$  trên dải VB2, nhưng không có các giá trị cao hơn. Do đó, để so sánh ảnh hưởng của các số hạng tunneling giữa hai lớp khác nhau, chúng tôi đã tính toán giản đồ pha  $\phi_1 - \phi_2$  của hệ xếp AB trong hai trường hợp khi chỉ có vertical hopping ( $u_k = w_k = 0$ ), như trong nghiên cứu trên, và khi có đóng góp của skew hopping ( $u_k, w_k \neq 0$ ). Kết quả được trình bày trên Hình. 3.6.

So sánh cho thấy các phần tử  $u_k$  và  $w_k$  gần như không ảnh hưởng đến các pha topo trên dải VB1, nhưng đóng vai trò quan trọng trong sự hình thành của các pha topo bậc cao trên dải VB2. Khi  $u_k = w_k = 0$ , chúng tôi thu lại được kết quả (của các tác giả trên) chỉ xuất hiện các pha  $|C| \leq 2$  khi thay đổi cường độ coupling  $t_{12}$ . Trong trường hợp này, việc tăng cường độ coupling hai lớp chỉ làm thu hẹp dần các miền pha ứng với  $|C| = 1$ . Hai pha topo bậc cao hơn  $C = \pm 3$  chỉ xuất hiện khi  $u_k, w_k \neq 0$ , và miền pha của chúng mở rộng dần khi tăng  $t_{12}$ . Khi cộng tổng số Chern của cả hai dải hóa trị, sự có mặt của  $u_k$  và  $w_k$  cũng hỗ trợ các pha  $|C| = 3$ , trong khi đó trường hợp  $u_k = w_k = 0$  chỉ có  $|C| \leq 2$ . Kết quả này thống nhất với phát hiện của Sticlet và cộng sự [28] rằng giá trị số Chern lớn nhất có thể đạt được bằng với số điểm satellite-Dirac tại mỗi valley. Cụ thể, trong hệ xếp AB, sự có mặt của các phần tử skew hopping trong quá trình tunneling giữa hai lớp khiến cấu trúc vùng năng lượng tại mỗi valley bị tách ra thêm ba điểm satellite-Dirac tạo thành hình tam giác đều nằm xung quanh điểm  $\mathbf{K}$ , hiệu ứng được gọi là "trigonal warping", cho phép khả năng tồn tại của các giá trị  $|C| = 3$ . Diện tích của các miền  $|C| = 3$  này nhỏ so với các miền  $|C| = 2$  là vì cường độ của skew hopping yếu hơn so với vertical hopping. Do đó, ở một giá trị nhỏ nhất định của  $t_{12}$ , các miền  $|C| = 3$  có thể đủ nhỏ để bỏ qua được, đồng nghĩa với việc có thể bỏ qua bổ chính của các phần tử skew hopping trong Hamiltonian. Khi vắng mặt các phần tử skew hopping, giá trị số Chern tối đa có thể thu được nhìn chung bằng với số lớp vật liệu, trong đó mỗi lớp có giá trị  $|C| \leq 1$  [26, 27].

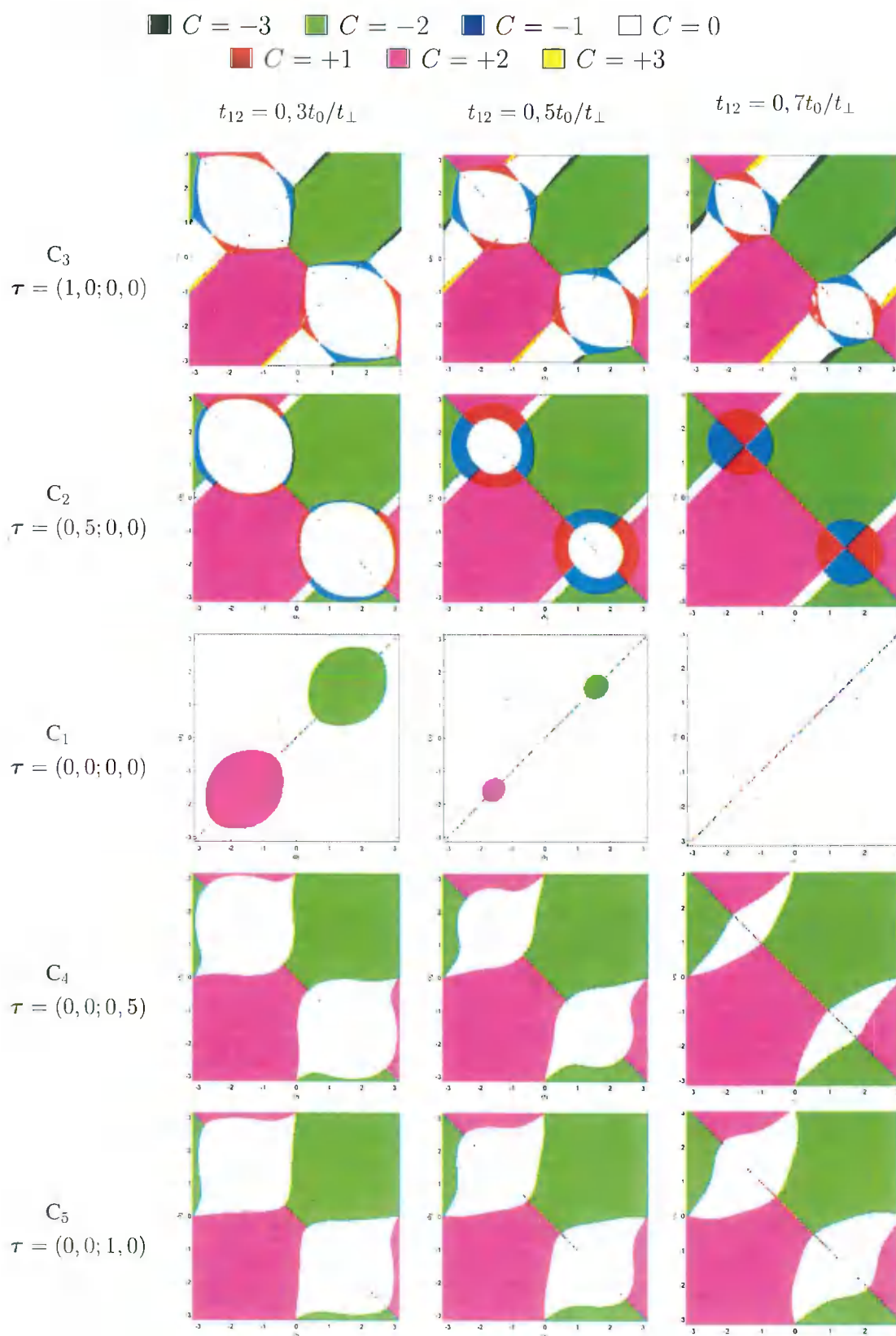
Các giản đồ VBT (Hình. 3.5) cho biết tính chất topo của toàn bộ hệ vật liệu. Mặc dù các cấu hình  $C_2$  và  $C_5$  hỗ trợ tới số Chern  $|C| = 3$  trên dải VB2, nhưng tổng thể hệ chỉ có  $|C| \leq 2$ . Cấu hình duy nhất có sự tồn tại của pha  $|C| = 3$  tổng cộng là cấu hình  $C_3$  (xếp AB), được hỗ trợ mạnh mẽ bởi coupling giữa hai lớp. Ngược lại, với cấu hình  $C_1$  (xếp AA), coupling giữa hai lớp có xu hướng khiến hệ trở nên tầm



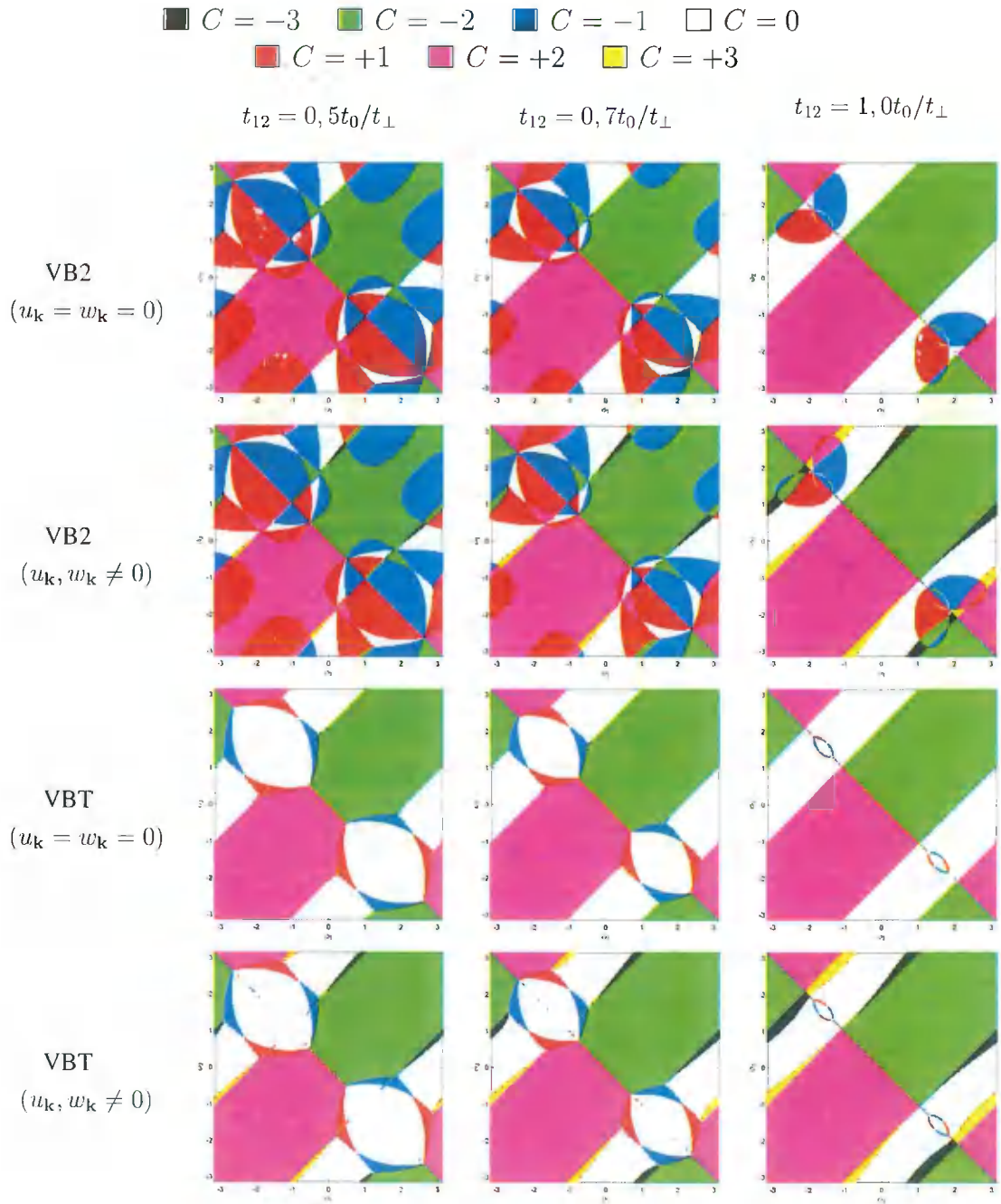
Hình 3.3: Giản đồ pha  $\phi_1 - \phi_2$  cho dải VB1 của hệ mạng lục giác hai lớp trượt. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $M_0 = 0$ .



Hình 3.4: Giản đồ pha  $\phi_1 - \phi_2$  cho dải VB2 của hệ mạng lục giác hai lớp trượt. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $M_0 = 0$ .



Hình 3.5: Giản đồ pha  $\phi_1$ - $\phi_2$  tổng cộng của hai dải hóa trị (VBT) của hệ mạng lục giác hai lớp trượt. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, M_0 = 0$ .



Hình 3.6: Giảm đồ pha  $\phi_1$ - $\phi_2$  cho dải VB2 và tổng hai dải hóa trị (VBT) của cấu hình  $C_3$  (xếp AB).  $u_{\mathbf{k}} = w_{\mathbf{k}} = 0$  ứng với quá trình tunneling giữa hai lớp chỉ bao gồm số hạng lớn nhất (vertical hopping  $v_{\mathbf{k}}$ ) và  $u_{\mathbf{k}}, w_{\mathbf{k}} \neq 0$  ứng với quá trình tunneling hai lớp tính đến skew hopping ( $u_{\mathbf{k}}, w_{\mathbf{k}}$ ). Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $M_0 = 0$ .

thường về mặt topo: có thể thấy khi tăng cường độ của  $t_{12}$  tới một giá trị nhất định, các miền  $C = \pm 2$  hoàn toàn biến mất, chỉ còn lại giá trị  $C = 0$ . Lúc này, cách để đưa hệ vào các pha topo không tầm thường là thêm vào hệ một thế năng  $M_0$ , như thể hiện trên Hình. 3.2. Tương tự cấu hình  $C_1$ , các cấu hình  $C_4$  và  $C_5$  cũng chỉ xuất hiện các pha tổng cộng với số Chern  $C = 0$  và  $C = \pm 2$ , trong đó coupling giữa hai lớp thúc đẩy những pha không tầm thường. Thậm chí khi hai lớp coupling yếu với nhau, dường như hai pha  $C = \pm 2$  cũng không bị triệt tiêu.

Như vậy, các pha topo với  $|C| = 1$  được hỗ trợ bởi quá trình tunneling trong một lớp, như đã được chỉ ra trong mô hình Haldane gốc, trong khi coupling giữa hai lớp cho phép hình thành các pha topo bậc cao hơn. Khi hai lớp coupling mạnh mẽ với nhau, các pha  $|C| = 1$  dần bị triệt tiêu trong khi các pha với số Chern cao hơn trở nên trội hơn, đặc biệt là các pha  $|C| = 2$  (trừ trường hợp ngoại lệ cấu hình  $C_1$ ).

### 3.2. Tính chất điện tử của các pha topo và chuyển pha

#### 3.2.1. Phương pháp phân tích

Trong phần này, chúng tôi xem xét tính chất điện tử của hệ vật liệu tương ứng với 5 giản đồ pha  $\phi_1$ - $\phi_2$  đại diện cho 5 cấu hình mạng nguyên tử đã được khảo sát ở trên bằng cách tính cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối (hai chiều) và hệ một chiều (dải nano) với Hamiltonian có các tham số được chọn theo các điểm pha khác nhau trên các giản đồ pha. Các điểm này được chọn nằm trong các vùng giá trị khác nhau của số Chern cũng như trên ranh giới chuyển tiếp giữa các vùng này, và được xem xét riêng biệt trên từng dải năng lượng hóa trị. Bởi vì các giản đồ  $\phi_1$ - $\phi_2$  vốn dĩ đối xứng qua đường chéo  $\phi_1 = \phi_2$  khi các tham số khác của hai lớp là giống hệt nhau, và cũng đối xứng qua đường chéo  $\phi_1 = -\phi_2$  trong trường hợp  $M_0 = 0$ , như mô hình (2.61) và (2.62) thể hiện, nên các điểm pha được chọn trong các vùng nhất định dưới đây là đủ để khảo sát toàn bộ giản đồ pha. (Để ngắn gọn và dễ theo dõi, chúng tôi sẽ không liệt kê ra giá trị cụ thể của các bộ tham số ứng với các điểm pha.) Với các dải nano chúng tôi xem xét hai dạng với biên armchair (ANR) hoặc zigzag (ZNR), cho phép đánh giá sự xuất hiện của các trạng thái biên đối với các cấu hình biên khác nhau và sự bền vững của chúng khi cấu trúc mạng bị thay đổi mà những đối xứng quan trọng của hệ khối vẫn được bảo toàn. Bên cạnh đó, vị trí định xứ trung bình của hàm sóng

của trạng thái điện tử trong dải nano sẽ được đánh giá bởi đại lượng  $X_\psi$  (2.86) và được biểu thị trực tiếp bằng màu sắc trên cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều.

Đánh giá cấu trúc vùng năng lượng là một công cụ hỗ trợ cực kỳ hiệu quả cho việc khảo sát tính chất topo của hệ bằng số Chern vì những lý do sau. Đầu tiên, dựa vào cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối có thể dễ dàng nhận biết nguồn gốc của các miền pha mà số Chern không xác định trên một số giản đồ  $M_0-\phi$  trình bày trước đó. Nhìn chung, nguyên nhân của sự không xác định này là do giao cắt giữa các dải năng lượng khiến cho định nghĩa số Chern cho từng dải năng lượng riêng biệt không còn hiệu lực.

Thứ hai, cấu trúc vùng năng lượng cho phép phân loại các vị trí chuyển tiếp giữa các pha topo khác nhau, hay các đường chuyển pha. Mặc dù Hình. 3.4 cho thấy rất nhiều đường và điểm chuyển tiếp giữa hai hay nhiều pha topo khác nhau, song các đặc điểm của cấu trúc vùng năng lượng tại nhiều vị trí chuyển pha là tương tự nhau và do đó có thể được phân loại. Ở đây, chúng tôi phân loại những đường chuyển pha này dựa trên đặc điểm chung của cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối. Dấu hiệu chung của sự chuyển pha xảy ra trên một dải năng lượng là quá trình đóng và mở lại các KPT năng lượng liên quan đến dải đó khi đi qua vị trí chuyển pha. Sự đóng này được thể hiện bởi giao cắt giữa các dải năng lượng xung quanh KPT, tại đó các dải năng lượng tiếp xúc với nhau tại một số điểm hữu hạn. Quá trình này không nhất thiết phải xảy ra giống nhau ở cả hai valley, do đó chúng tôi xem xét các KPT địa phương tại mỗi valley một cách riêng biệt, và đánh dấu cùng màu các đường chuyển pha có đặc tính đóng-mở KPT giống nhau, ngoại trừ màu xám dành cho miền mà tại đó số Chern là không xác định. (Khi phân tích đặc trưng của các đường chuyển pha, màu của đường sẽ được chỉ ra bằng ký hiệu hình vuông không có biên, chẳng hạn ■, để tiện cho việc đối chiếu.)

Ở đây, có hai KPT cần phải xem xét: KPT giữa hai dải VB1 và VB2, ký hiệu  $\Delta_{VV}$ , và giữa hai dải VB2 và CB2, ký hiệu  $\Delta_{VC}$ . Có thể thấy, sự chuyển pha của VB1 chỉ bị điều khiển bởi  $\Delta_{VV}$ , trong khi các chuyển pha của VB2 được đóng góp bởi cả hai KPT này. Trên hình, hai đóng góp này đối với giản đồ của dải VB2 được chỉ ra một cách riêng biệt: những chuyển pha liên quan đến  $\Delta_{VV}$  được vẽ bằng các đường màu trắng, tại đó  $\Delta_{VC}$  không trải qua quá trình đóng và mở lại, còn những chuyển pha



liên quan đến  $\Delta_{VC}$  được phân loại bằng các màu khác. Rõ ràng, chỉ hành xử của  $\Delta_{VC}$  có ảnh hưởng đến tính chất điện tử của toàn bộ hệ vật liệu. Cụ thể, vật liệu có thể là điện môi nếu giữa hai dải VB2 và CB2 tồn tại một KPT chung cho mọi vector  $k$  trong vùng Brillouin, đó chính là vùng cấm năng lượng. Ngược lại, nếu KPT giữa hai dải này chỉ tồn tại địa phương tại những giá trị  $k$  nhất định, vật liệu là kim loại. Do đó, các chuyển pha trên dải VB2 chỉ liên quan đến  $\Delta_{VC}$  cũng là các chuyển pha có mặt trên giản đồ tổng cộng VBT.

Thứ ba, tính chất topo của hệ khối hai chiều được phản ánh lên các trạng thái biên của dải nano, cụ thể là số Chern tỷ lệ với độ dẫn Hall và bằng số cặp trạng thái biên dẫn (không suy biến) của hệ vật liệu. Đây chính là nguyên lý tương ứng bulk-edge. Ngoài việc giúp xác nhận các pha vật lý thực sự của vật liệu bằng cách so sánh số Chern của hệ khối và số cặp trạng thái biên của dải nano thì sự tương ứng này còn có một lợi thế to lớn khác. Đó là việc đánh giá tính chất topo của hệ khối vẫn có thể thực hiện được trong trường hợp số Chern không xác định do giao cắt dải năng lượng, bằng cách phân tích đặc trưng của các trạng thái biên của hệ một chiều tương ứng.

Để thuận tiện cho việc quan sát các dải khối tại các điểm pha, chúng tôi chọn góc quan sát để trình bày các dải này phụ thuộc vào đặc điểm biến dạng của chúng theo vector trượt  $\tau$ . Nghiên cứu của V. Nam Do [16] đã chỉ ra rằng việc trượt hai lớp mạng graphene tương đối với nhau làm biến dạng các mặt năng lượng theo cách làm dịch chuyển, và do đó phân tách, các điểm Dirac theo hướng của vector trượt. Cụ thể, xuất phát từ cấu hình xếp AA, trong đó hai nón Dirac gần mức Fermi của vùng hóa trị và vùng dẫn lồng vào nhau tạo ra một mặt cắt hình tròn ngay tại mức không, trượt hai lớp dọc theo  $\tau_1$  (Hình. 2.2a) làm dịch hai mặt năng lượng dọc theo trục  $x$  tạo ra hai điểm satellite-Dirac tại mỗi valley, trong khi trượt theo  $\tau_2$  tách mỗi valley thành hai điểm dọc theo hướng  $y$ . Điểm khác biệt giữa hai phương trượt này là hai điểm satellite-Dirac tạo thành trong trường hợp thứ nhất nằm trên cùng mức không, trong khi trong trường hợp sau, chúng không có cùng mức năng lượng. Nghiên cứu được tiến hành trong luận văn này cho thấy các đặc trưng này nhìn chung vẫn được bảo toàn trong mô hình Haldane. Do đó, đối với cấu hình  $C_1$  (xếp AA) và hai cấu hình trượt dọc theo  $\tau_1$   $C_2$  và  $C_3$ , hướng quan sát các dải khối là dọc theo trục  $y$ . Đối với hai cấu hình còn lại trượt theo  $\tau_2$ , hướng quan sát được chọn là dọc trục  $x$ . Hai hướng này

được minh họa lần lượt bởi hai mũi tên màu xanh da trời và xanh lục trên Hình. 2.1b. Vùng Brillouin được chọn để hiển thị cấu trúc vùng năng lượng ở đây là hình thoi, với lợi thế cho phép cấu trúc vùng năng lượng tại cả hai valley được thể hiện theo cách dễ quan sát hơn so với chọn hình lục giác.

### 3.2.2. Kết quả tính toán

Để dễ theo dõi, các kết quả tính toán trong phần này được trình bày trong các Hình. 3.7-3.28 ở phần Phụ lục.

#### a) Các miền số Chern không xác định

Trên Hình. 3.7 và 3.24, các miền số Chern không xác định của hai cấu hình tương ứng  $C_1$  và  $C_5$  được chỉ ra bởi các đường chéo màu xám (■) ứng với  $\phi_1 = \phi_2$ . Đường chéo này chỉ xuất hiện đối với dải VB2 của mẫu  $C_1$  nhưng lại xảy ra với cả hai dải hóa trị của mẫu  $C_5$ , và không xuất hiện trong 3 cấu hình còn lại. Đối với dải VB2 của mẫu  $C_1$  (Hình. 3.7), đường chéo này không cắt qua hai miền  $C = \pm 1$  hình oval, đây là hai miền ứng với hai pha  $C = \pm 1$  được bao bọc bên trong vùng không xác định trên giản đồ  $M_0-\phi$  (Hình. 3.1). Trên Hình. 3.7, chúng tôi lấy hai điểm pha  $\chi_1$  và  $\chi_7$  trên đường  $\phi_1 = \phi_2$ , trong đó  $\chi_7$  thuộc vùng không xác định. Các cấu trúc vùng năng lượng tương ứng (Hình. 3.8) cho thấy tại  $\chi_1$ , tồn tại các KPT địa phương giữa các dải VB1 và VB2, cũng như giữa VB2 và CB2, do đó số Chern xác định tại điểm pha này. Trong khi đó tại  $\chi_7$ , số Chern chỉ xác định cho dải VB1 bởi vì dải VB2 giao cắt với CB2. Đối với cấu hình  $C_5$ , kiểm tra tại điểm pha  $\eta_4$  (Hình. 3.24, 3.25) cho thấy hai dải VB1 và VB2 giao cắt nhau, do đó không thể tính số Chern cho cả hai dải này. Bên ngoài đường chéo này ( $\phi_1 - \phi_2 = \epsilon_\phi \neq 0$ ), giản đồ  $M_0-\phi$  cho hai cấu hình này có thể được tính như kết quả trên Hình. 3.2.

#### b) Đặc trưng topo của cấu hình $C_1$

Đối với cấu hình  $C_1$ , Hình. 3.7 cho thấy chỉ có một kiểu chuyển pha trên dải VB1 (màu xanh lục ■), tại đó hai điểm pha  $\chi_4$  và  $\chi_6$  cho thấy KPT  $\Delta_{VV}$  đóng lại tại cả hai valley, tại chính xác các điểm K, bởi tiếp xúc giữa VB1 và VB2 (Hình. 3.8). Trong khi đó, dải VB2 có một kiểu đường chuyển pha màu hồng nhạt (■) bao bọc hai miền hình oval riêng biệt. Trên đường này VB2 và CB2 tiếp xúc với nhau tại các điểm K (thể hiện bởi điểm pha  $\chi_2$ ) và hệ là bán kim loại.

Tại các điểm pha  $\chi_1, \chi_3, \chi_4, \chi_5$  và  $\chi_6$ , hệ nhìn chung là vật liệu điện môi. Có thể thấy từ Hình. 3.9 rằng tại mỗi điểm pha này xuất hiện hai cặp trạng thái biên cắt qua miền năng lượng ứng với vùng cấm  $\Delta_{VC}$  của hệ khối khi giới hạn hệ khối bởi biên armchair, trừ trường hợp chúng suy biến thành chỉ một dải năng lượng trên đường chéo  $\phi_1 = -\phi_2$  tại  $\chi_6$ . (Lưu ý rằng mặc dù điểm  $\chi_3$  thể hiện nhiều hơn hai cặp trạng thái định xứ mạnh tại biên đối với cấu hình ANR, tuy nhiên thực tế cũng chỉ có hai cặp kết nối vùng dẫn với vùng hóa trị.) Như vậy, cấu hình ANR dường như thể hiện đặc tính của một vật liệu điện môi topo, tuy nhiên thực tế những trạng thái biên này không bền vững khi biên được thay đổi thành zigzag. Hình. 3.10 cho thấy những trạng thái này tại 4 điểm pha  $\chi_3, \chi_4, \chi_5$  và  $\chi_6$  bị phá vỡ trong miền  $\Delta_{VC}$  và trở nên định xứ trong vùng hóa trị. Trong trường hợp này, những cặp trạng thái biên chỉ đặc trưng cho tính chất topo riêng biệt của từng dải hóa trị thay vì toàn bộ hệ vật liệu. Cụ thể, có một cặp trạng thái biên cắt qua miền năng lượng ứng với  $\Delta_{VV}$  của hệ khối, ứng với số Chern  $C = \pm 1$  riêng biệt của từng dải hóa trị. Số Chern tổng cộng của cả hai dải tại  $\chi_3$  và  $\chi_5$  là  $C = 0$ , thể hiện tính chất điện môi tầm thường của toàn bộ hệ. Pha điện môi topo thực sự chỉ có thể thu được trong hai miền hình oval với đại diện  $\chi_1$ . Có thể thấy rõ từ giản đồ VBT của cấu hình này (Hình. 3.5) rằng pha điện môi topo có số Chern  $C = \pm 2$ , thể hiện bởi hai cặp trạng thái biên chiral bền vững khi thay đổi cấu hình biên của dải nano.

Ngoài ra, mặc dù số Chern không được định nghĩa cho điểm pha  $\chi_7$ , tức trường hợp  $\phi_1 = \phi_2$ , việc kiểm tra các cấu hình ANR và ZNR tương ứng của hệ tại điểm này cho phép đánh giá tính chất topo của hệ. Cụ thể, sự tồn tại của hai cặp trạng thái biên trong trường hợp này hoàn toàn tương tự như trong hai miền  $C = \pm 2$  hình oval, tức điểm pha  $\chi_1$ , do đó khi  $\phi_1 = \phi_2$  hệ khối vẫn có topo không tầm thường với đặc tính topo tương tự như các miền với  $C = \pm 2$ . Điều khác biệt trong trường hợp này là hệ là kim loại topo thay vì vật liệu điện môi. Ta cũng có thể kết luận được rằng hệ khối thu được tại các điểm pha thuộc vùng không xác định trên giản đồ  $M_0-\phi$  (Hình. 3.1) là kim loại topo với đặc trưng topo giống như đặc trưng của các pha có số Chern  $C = \pm 2$ .

### c) Đặc trưng topo của cấu hình $C_2$

Cấu hình  $C_2$  có 3 kiểu đường chuyển pha khác nhau trên dải VB1 (Hình. 3.11),

được đặc trưng bởi sự đóng và mở lại của KPT  $\Delta_{VV}$  xảy ra chỉ tại một trong hai valley (Hình. 3.12), đó là  $K_-$  đối với  $\gamma_{10}$  (■) và là  $K_+$  đối với  $\gamma_{11}$  (■), và tại cả hai valley đối với các điểm pha  $\gamma_4, \gamma_8, \gamma_{14}, \gamma_{16}$  và  $\gamma_{17}$  (■). Đối với cấu hình trượt này chúng tôi không trình bày kết quả tính cho biên armchair tại tất cả các điểm pha, mà chỉ trình bày một kết quả cho điểm  $\gamma_{16}$  trong Hình. 3.13, vì hầu hết các điểm còn lại thể hiện các đặc trưng cấu trúc vùng năng lượng của cấu hình ANR hoàn toàn tương tự như điểm này, trong đó hầu như không có trạng thái nào định xứ mạnh tại biên. Bằng cách quan sát cấu trúc vùng năng lượng của cấu hình ZNR (Hình. 3.13), có thể thấy các đặc trưng topo của riêng dải VB1, tức số Chern  $C = \pm 1$ , được chỉ ra bởi một cặp trạng thái biên trong vùng hóa trị cắt qua KPT  $\Delta_{VV}$  tương ứng của hệ khối. Trong miền với  $C = 0$  của dải này, với điểm pha  $\gamma_9$ , đặc trưng topo tầm thường được thể hiện bởi cặp trạng thái biên bị phân tách năng lượng địa phương tại mọi giá trị  $ka$ .

Đối với dải VB2, có 4 kiểu đường chuyển pha khác nhau liên quan đến  $\Delta_{VC}$ :

- Đường màu cam nhạt (■,  $\gamma_2$ ): KPT  $\Delta_{VC}$  bị đóng bởi tiếp xúc giữa hai dải VB2 và CB2 tại 2 điểm satellite-Dirac tại valley  $K_-$ , trong khi đó có một KPT địa phương khác không tại valley còn lại.
- Đường màu cam đậm (■,  $\gamma_7, \gamma_8, \gamma_{12}$ ): đặc trưng chuyển pha của đường này là hai điểm satellite-Dirac tại valley  $K_-$  hợp nhất với nhau và do đó hai dải VB2 và CB2 chỉ tiếp xúc với nhau tại một điểm Dirac. Đường này bao một miền hình oval trong đó hai điểm satellite-Dirac tiếp tục hợp nhất tại  $K_-$ , trong khi chúng tách ra bên ngoài vùng này. Ngoài ra, tại valley còn lại, có thể có một KPT địa phương giữa hai dải này ( $\gamma_8$  và  $\gamma_8$ ), hoặc KPT này đóng lại bởi tiếp xúc tại 2 điểm satellite-Dirac ( $\gamma_{12}$ ).
- Đường màu xanh da trời nhạt (■,  $\gamma_5, \gamma_{13}, \gamma_{14}, \gamma_{16}$ ): sự đóng KPT diễn ra tại  $K_+$  với tiếp xúc giữa hai dải tại 2 điểm satellite-Dirac, trong khi đó có một KPT địa phương mở ở valley còn lại.
- Đường màu xanh lục đậm (■,  $\gamma_4, \gamma_{17}$ ): không có KPT địa phương nào tồn tại ở cả hai valley. Tại mỗi valley có 2 điểm satellite-Dirac tách ra rõ ràng và là vị trí tiếp xúc giữa hai dải VB2 và CB2.

Đây cũng chính là 4 đường chuyển pha tồn tại trên giản đồ tổng cộng của hệ (Hình. 3.5), trong đó các điểm  $\gamma_5, \gamma_9, \gamma_{10}, \gamma_{11}$  và  $\gamma_{15}$  thuộc cùng một pha có số Chern  $C = +2$ . Một cách tương ứng, Hình. 3.13 cho thấy các điểm pha này thể hiện hai cặp trạng thái biên cắt qua các miền năng lượng ứng với KPT địa phương  $\Delta_{VC}$  của hệ khối. Mỗi cặp trạng thái này kết nối vùng hóa trị và vùng dẫn một cách riêng biệt tại mỗi valley. Điểm  $\gamma_3$  thuộc miền pha  $C = -2$  thể hiện các trạng thái biên tương tự. Ngoài ra, các điểm pha  $\gamma_{13}, \gamma_{14}$  và  $\gamma_{16}$  thuộc đường chuyển pha giữa các miền  $C = \pm 1$  trên giản đồ tổng cộng. Có thể thấy tại các điểm này, chỉ có một cặp trạng thái biên xuất hiện ở một valley, mặc dù chúng bị suy biến thành một dải tại  $\gamma_{14}$  và  $\gamma_{16}$  do  $\phi_1 = -\phi_2$ , trong khi vùng hóa trị và vùng dẫn hoàn toàn bị phân tách ở valley còn lại. Cuối cùng, các miền có số Chern cao  $C = \pm 3$  thu được trên dải VB2 là do đóng góp của dải VB1. Cụ thể, giá trị  $C = +3$  trên dải này tại điểm pha  $\gamma_5$  được thể hiện bởi 3 cặp trạng thái biên, một cặp trong số đó cắt qua miền năng lượng ứng với KPT  $\Delta_{VV}$  của hệ khối. Hai cặp còn lại thuộc miền  $\Delta_{VC}$  thể hiện thực tế rằng số Chern tổng cộng của hệ tại điểm pha này chỉ là  $C = +2$ .

*d) Đặc trưng topo của cấu hình  $C_3$*

Đối với cấu hình này, chúng tôi quan sát được ba kiểu đường chuyển pha trên dải VB1 như sau (Hình. 3.15):

- Đường màu xanh da trời nhạt (■,  $\alpha_2$ ): KPT  $\Delta_{VV}$  đóng tại valley  $K_-$  với một điểm tiếp xúc giữa hai dải VB1 và VB2, trong khi đó một KPT địa phương mở ở valley còn lại.
- Đường màu xanh lục nhạt (■,  $\alpha_7$ ): KPT  $\Delta_{VV}$  đóng tại valley  $K_+$  với một điểm tiếp xúc giữa VB1 và VB2. Ngược lại, KPT địa phương mở ra ở valley kia.
- Đường màu xanh lục đậm (■,  $\alpha_{18}$ ): tương tự điểm  $\alpha_7$ , KPT địa phương  $\Delta_{VV}$  đóng tại  $K_+$  và mở ở  $K_-$ . Tuy nhiên, điều khác biệt ở đây là tiếp xúc giữa hai dải VB1 và VB2 ở  $K_+$  diễn ra tại chính xác vị trí điểm  $K$  và 3 điểm satellite-Dirac xung quanh do hiệu ứng "trigonal warping" (không được chỉ rõ trên Hình. 3.15).

Bên cạnh đó, có 5 kiểu đường chuyển pha liên quan đến  $\Delta_{VC}$  trên dải VB2:

- Đường màu nâu đậm (■,  $\alpha_4$ ): KPT  $\Delta_{VC}$  đóng tại valley  $K_+$  với 3 điểm tiếp xúc

giữa hai dải VB2 và CB2, hay 3 điểm satellite-Dirac, có nón tán sắc gần tuyến tính, trong khi đó KPT địa phương mở ở valley còn lại.

- Đường màu cam đậm (■,  $\alpha_5$ ): KPT  $\Delta_{VC}$  đóng tại valley  $K_+$  với tiếp xúc giữa hai dải VB2 và CB2 tại chỉ một điểm (điểm  $K$ ) có nón tán sắc gần tuyến tính. 3 điểm satellite-Dirac vẫn xuất hiện ở đây với nón tán sắc dạng parabol tại mỗi điểm. Ở valley còn lại, một KPT địa phương được mở ra.
- Đường màu cam nhạt (■,  $\alpha_{11}, \alpha_{17}$ ): KPT  $\Delta_{VC}$  đóng tại valley  $K_-$  với tiếp xúc giữa hai dải VB2 và CB2 ngay tại điểm  $K$ , với nón tán sắc gần tuyến tính. 3 điểm satellite-Dirac không xuất hiện ở đây. Valley còn lại có một KPT địa phương khác không.
- Đường màu xanh da trời nhạt (■,  $\alpha_9$ ): KPT  $\Delta_{VC}$  đóng tại valley  $K_-$  với tiếp xúc tại 3 điểm satellite-Dirac có nón tán sắc gần tuyến tính, trong khi đó KPT địa phương mở ở valley còn lại.
- Đường màu hồng nhạt (■,  $\alpha_{14}$ ): KPT  $\Delta_{VC}$  đóng tại cả hai valley với tiếp xúc giữa hai dải VB2 và CB2 diễn ra tại 4 điểm ở mỗi valley (điểm  $K$  và 3 điểm satellite-Dirac xung quanh).

Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều với biên armchair đưa ra trên Hình. 3.16 về cơ bản khá tương tự nhau và hầu hết không thể hiện ra các trạng thái định xứ tại biên. Đó là vì trong trường hợp ANR, cấu trúc vùng năng lượng tại hai valley của hệ khối được chiếu lên cùng vị trí  $ka = 0$  trong vùng Brillouin của dải nano (Hình. 2.1b), do đó chỉ trong trường hợp hệ khối là điện môi với vùng cấm đủ rộng, chẳng hạn tại các điểm pha  $\alpha_1, \alpha_6$  và  $\alpha_{15}$ , sự xuất hiện của các trạng thái biên mới có thể được đánh giá thực sự dễ dàng. Vì vậy, các đặc trưng topo hệ khối của cấu hình  $C_3$  chủ yếu được phản ánh trên cấu trúc vùng năng lượng của ZNR.

Trước hết, tại các điểm pha  $\alpha_6, \alpha_7, \alpha_8, \alpha_{18}$  và  $\alpha_{20}$ , mặc dù mỗi dải VB1 và VB2 riêng biệt thể hiện ra các pha topo với số Chern khác nhau, nhưng hệ là tầm thường về mặt topo với  $C = 0$  (Hình. 3.5). Điều này được thể hiện bởi thực tế rằng không có cặp trạng thái biên nào thực sự kết nối vùng hóa trị và vùng dẫn trên cấu trúc vùng năng lượng tương ứng của hệ tại các điểm pha này, mặc dù vẫn tồn tại hai cặp

trạng thái biên trong đó hai trạng thái trong mỗi cặp định xứ trên hai biên khác nhau, và chúng đều cắt qua miền năng lượng tương ứng với KPT  $\Delta_{VC}$  (Hình. 3.17). Sự thay đổi về số Chern trên từng dải hóa trị riêng biệt tại các bộ tham số này được thể hiện bởi các trạng thái biên nằm trong miền năng lượng ứng với KPT  $\Delta_{VV}$ . Chẳng hạn, điểm  $\alpha_6$  không cho thấy trạng thái nào kết nối dải VB1 và VB2, ứng với số Chern  $C = 0$  trên cả hai dải. Tại hai điểm  $\alpha_7$  và  $\alpha_8$ , một trạng thái biên như vậy có thể được quan sát thấy, ứng với số Chern  $C = \pm 1$ .

Các điểm pha  $\alpha_{16}$  và  $\alpha_{19}$  cùng thuộc các miền topo không tầm thường của hệ với số Chern tổng cộng  $C = \pm 1$ . Dễ thấy từ Hình. 3.17 rằng trong số hai cặp trạng thái biên được hình thành trong miền năng lượng ứng với  $\Delta_{VC}$ , chỉ có một cặp kết nối vùng hóa trị và vùng dẫn, trong khi mỗi trạng thái trong cặp còn lại chỉ kết nối các valley trong cùng một vùng. Các trạng thái trong mỗi cặp định xứ tại hai biên khác nhau. Đối với cặp trạng thái không thể hiện đặc trưng topo, trạng thái biên kết nối hai valley trong vùng hóa trị định xứ ở biên phải, trong khi trạng thái biên kết nối hai valley trong vùng dẫn định xứ ở biên trái. Lưu ý rằng mặc dù các đặc trưng này là dễ thấy đối với điểm pha  $\alpha_{16}$ , chúng có thể khó nhận biết đối với điểm  $\alpha_{19}$ . Đó là vì trên cấu trúc vùng năng lượng của điểm  $\alpha_{19}$ , trạng thái biên topo định xứ tại biên phải kết nối vùng dẫn tại một valley với vùng hóa trị tại valley kia trải qua một đoạn tiếp xúc với các dải khối.

Tiếp theo, các điểm pha  $\alpha_1$ ,  $\alpha_{12}$ ,  $\alpha_{13}$  và  $\alpha_{15}$  thuộc các miền topo không tầm thường với số Chern tổng cộng  $C = \pm 2$ . Đặc trưng topo của hệ tại các điểm này được thể hiện rõ ràng bởi hai cặp trạng thái biên kết nối vùng hóa trị và vùng dẫn. (Lưu ý rằng tại các điểm  $\alpha_{12}$  và  $\alpha_{13}$ , các trạng thái biên này có cắt qua các dải khối.)

Cuối cùng, các pha topo với số Chern  $C = \pm 3$  thu được trên giản đồ tổng cộng cũng được thể hiện bởi 3 cặp trạng thái biên trên cấu trúc vùng năng lượng của cấu hình ZNR, cụ thể là tại các điểm pha  $\alpha_3$  và  $\alpha_{10}$ , tuy nhiên chỉ có hai cặp dễ nhận biết trên Hình. 3.17. Để chỉ ra cặp còn lại, chúng tôi hiển thị trên Hình. 3.18 cấu trúc vùng năng lượng của cấu hình ZNR tại hai điểm pha này trong một miền năng lượng hẹp hơn được đánh dấu bởi các hình vuông nét đứt trên Hình. 3.17. Từ đây, có thể quan sát được cặp trạng thái biên thứ ba của điểm pha  $\alpha_3$  nằm trong khoảng  $ka \in [1, 9; 2, 1]$  và miền năng lượng  $E \in [0, 06; 0, 15] \times t_0$ . Đối với điểm  $\alpha_{10}$ , cặp trạng thái biên đang

quan tâm nằm trong khoảng  $ka \in [4, 1; 4, 3]$  và miền  $E \in [0, 32; 0, 39] \times t_0$ . Sự khó quan sát của cặp trạng thái biên thứ ba này có thể là do các miền pha  $C = \pm 3$  chỉ chiếm diện tích nhỏ trên giản đồ pha, hay chỉ là một sự bổ chính của các phần tử skew hopping. Lưu ý rằng từ Hình. 3.18 có thể thấy rằng hai trạng thái biên định xứ trên hai biên khác nhau có thể thuộc cùng một dải năng lượng của hệ một chiều, đặc biệt rõ ràng trong trường hợp của điểm  $\alpha_{10}$ . Tuy nhiên, đây vẫn là hai trạng thái biên khác nhau vì chúng bị phân tách bởi một đoạn chuyển tiếp tại đó trạng thái điện tử định xứ trong phân khối của dải nano.

Để khẳng định chắc chắn hơn về các pha với  $C = \pm 3$  này, chúng tôi cũng phóng to trên Hình. 3.18 cấu trúc vùng năng lượng của ANR tại hai điểm pha  $\alpha_2$  và  $\alpha_3$  trong các miền năng lượng hẹp được đánh dấu trên Hình. 3.16 để so sánh. Quan sát sơ bộ có thể thấy cấu trúc các dải của hai điểm pha này trong miền năng lượng được chỉ ra là khá giống nhau. Tuy nhiên, các cấu trúc vùng năng lượng của các hệ khối tương ứng (Hình. 3.15) cho thấy rằng cấu trúc vùng của ANR tại điểm pha  $\alpha_3$  là thể hiện của hiệu ứng "trigonal warping" trong hệ khối, vì vậy các dải khối của hệ một chiều tương ứng tiếp cận với nhau tại hai vị trí  $ka = \pm 0, 5$  ngoài vị trí tiếp xúc tại  $ka = 0$  (3 vị trí ứng với 3 điểm satellite-Dirac), trong khi đó đối với điểm pha  $\alpha_2$ , các dải khối chỉ có một vị trí tiếp xúc thực sự tại  $ka = 0$ , còn  $ka = \pm 0, 5$  là vị trí tiếp cận của các trạng thái biên. Vì vậy, trong trường hợp của  $\alpha_3$ , mỗi điểm satellite-Dirac gắn với một cặp trạng thái biên topo. Quan sát sự biến đổi của giá trị  $X_\psi$  của cấu hình ANR của  $\alpha_3$  trên Hình. 3.18 cho thấy 3 cặp trạng thái biên lần lượt nằm trong các miền  $ka \in [-1; -0, 5]$ ,  $ka \in [-0, 25; 0, 25]$  và  $ka \in [0, 5; 1]$ . Một lần nữa, mặc dù 3 cặp này chỉ thuộc vào hai dải năng lượng của cấu hình ANR đang xét, nhưng chúng được phân tách bởi những đoạn chuyển tiếp nhỏ tại đó trạng thái điện tử định xứ trong phân khối, vì vậy kết quả này thống nhất với giá trị số Chern tổng  $C = +3$  tại điểm pha này. Một điểm pha khác cũng được đoán nhận có đặc trưng trạng thái biên tương tự là  $\alpha_{10}$ , thuộc miền topo  $C = -3$  của hệ, tuy nhiên bởi vì hệ khối tương ứng (Hình. 3.15) không có vùng cấm như trường hợp  $\alpha_3$  nên không thể quan sát được đặc trưng trên cấu trúc vùng năng lượng của cấu hình ANR.

Ngược lại với  $\alpha_3$ , điểm pha  $\alpha_2$  không chứa cặp trạng thái biên nào trong khoảng  $ka \in [-0, 25; 0, 25]$  mà chỉ có 2 cặp trong  $ka \in [-1; -0, 25]$  và  $ka \in$



$[0, 25; 1]$ . Tuy nhiên, bởi vì điểm  $\alpha_2$  nằm trên đường chuyển tiếp giữa các pha topo  $C = +2$  và  $C = +3$  của hệ (Hình. 3.14), tương tự như điểm  $\alpha_5$ , nên có thể chỉ ra được rằng khi đi dọc theo đường  $\alpha_1 \rightarrow \alpha_2 \rightarrow \alpha_3$  trên giản đồ pha, sự chuyển pha được thể hiện bởi sự tách ra của điểm Dirac duy nhất tại  $\alpha_1$  và sự hình thành của cặp trạng thái biên thứ ba trong khoảng  $ka \in [-0, 25; 0, 25]$  khi đi qua điểm  $\alpha_2$ . Điều này cũng giải thích tại sao cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều tại hai điểm pha  $\alpha_2$  và  $\alpha_3$  khá giống nhau trong miền năng lượng hẹp được chỉ ra trên Hình. 3.18.

e) *Đặc trưng topo của cấu hình  $C_4$*

Dải VB1 của cấu hình này chỉ chứa một đặc trưng chuyển pha được biểu thị bởi các đường màu xanh lục đậm (■,  $v_1, v_5$  và  $v_8$ ) (Hình. 3.19), hoàn toàn tương tự như dải VB1 của cấu hình  $C_1$  (Hình. 3.7). Cụ thể là KPT  $\Delta_{VV}$  đóng bởi tiếp xúc giữa VB1 và VB2 tại một điểm Dirac ở mỗi valley (Hình. 3.20). Đối với dải VB2, các kiểu đường chuyển pha quan sát được là như sau:

- Đường màu xanh lục đậm (■,  $v_1, v_8$ ): KPT  $\Delta_{VC}$  đóng bởi tiếp xúc giữa hai dải VB2 và CB2 xảy ra tại 2 điểm satellite-Dirac tại mỗi valley.
- Đường màu hồng nhạt (■,  $v_3$ ): KPT  $\Delta_{VC}$  đóng ở cả hai valley bởi tiếp xúc giữa hai dải VB2 và CB2 xảy ra tại điểm satellite-Dirac nằm thấp hơn (điểm còn lại không xảy ra tiếp xúc).
- Đường màu xanh lục nhạt (■,  $v_6$ ): tương tự như đường màu hồng nhạt, nhưng ở đây tiếp xúc chỉ xảy ra tại điểm satellite-Dirac nằm cao hơn.

Đặc trưng topo của hệ, thể hiện trên giản đồ tổng cộng Hình. 3.5, bao gồm các miền với số Chern  $C = 0$  ( $v_4, v_5$  và  $v_7$ ) và  $C = \pm 2$  ( $v_2, v_9$  và  $v_{10}$ ). Đối với miền  $C = 0$ , cấu hình ANR thể hiện ra hai cặp trạng thái biên tại mỗi điểm pha  $v_4, v_5$  và  $v_7$  (Hình. 3.21). Có thể thấy rằng các trạng thái biên này kết nối các dải khối thuộc cùng một dải hóa trị VB2 hoặc dải dẫn CB2 của hệ khối thay vì kết nối dải hóa trị và dải dẫn với nhau. Tuy nhiên, quan sát các trạng thái biên của các cấu hình ZNR tương ứng vẫn cho phép ta kết luận chắc chắn hơn về tính topo tầm thường của hệ tại các điểm pha này, bởi vì hai valley của hệ khối không bị chiếu lên cùng một giá trị  $ka$  trong vùng Brillouin của cấu hình biên này. Trên Hình. 3.22, các trạng thái biên nằm trong miền năng lượng ứng với KPT  $\Delta_{VC}$  của ba điểm  $v_4, v_5$  và  $v_7$  có bản chất giống

nhau, mặc dù tại  $v_5$  và  $v_7$ , chúng hoàn toàn bị cắt qua các dải khối khiến việc đánh giá gặp khó khăn. Đối với điểm  $v_4$ , trên Hình. 3.23 chúng tôi phóng to cấu trúc vùng năng lượng của ZNR trong các miền được đánh dấu bởi hình vuông nét đứt trên Hình. 3.22. Từ đây, có thể thấy rõ ràng rằng các cặp trạng thái biên không kết nối vùng hóa trị và vùng dẫn với nhau, thể hiện số Chern  $C = 0$ .

Đối với pha có số Chern  $C = \pm 2$ , chỉ có điểm pha  $v_{10}$  là đại diện để quan sát nhất trên cấu trúc vùng năng lượng của ZNR, cho thấy rõ hai cặp trạng thái biên kết nối vùng hóa trị và vùng dẫn. Tuy nhiên để chỉ ra rằng các điểm pha  $v_2$  và  $v_9$  cũng có bản chất tương tự, trên Hình. 3.23 chúng tôi cũng phóng to cấu trúc vùng năng lượng của ZNR của hai điểm này tại các vùng được đánh dấu tương ứng trên Hình. 3.22 để giúp đánh giá chính xác các trạng thái biên. Kết hợp hai hình này có thể thấy hai cặp trạng thái biên kết nối các vùng năng lượng ứng với VB2 và CB2 của hệ khối, mặc dù có những trạng thái biên bị cắt qua các dải khối.

f) *Đặc trưng topo của cấu hình  $C_5$*

Đối với cấu hình  $C_5$ , có hai kiểu đường chuyển pha trên VB1 (Hình. 3.25):

- Đường màu xanh lục đậm (■,  $\eta_3, \eta_{10}, \eta_{11}$ ): sự đóng KPT  $\Delta_{VV}$  ở đây là đáng chú ý vì chỉ xảy ra tại điểm M của vùng Brillouin thay vì tại các valley  $K_{\pm}$  riêng biệt, mặc dù các điểm Dirac của từng valley này vẫn tồn tại.
- Đường màu xanh lục nhạt (■,  $\eta_6$ ): KPT  $\Delta_{VV}$  đóng tại cả hai valley với một điểm Dirac tiếp xúc ở mỗi valley.

và 3 kiểu đường chuyển pha trên VB2:

- Đường màu xanh lục đậm (■,  $\eta_3, \eta_{11}$ ): đường chuyển pha này là một phần của đường chéo  $\phi_1 = -\phi_2$ . Phần còn lại của đường chéo này, tức đoạn màu trắng, là chuyển pha chỉ liên quan đến KPT  $\Delta_{VV}$ . Đặc trưng chuyển pha trên đường này là sự đóng KPT  $\Delta_{VC}$  bởi tiếp xúc xảy ra tại cả hai điểm satellite-Dirac ở mỗi valley. Điều đặc biệt của đường chuyển pha này là vị trí chuyển tiếp giữa nó và đoạn màu trắng, cụ thể là vị trí gần điểm pha  $\eta_{11}$ , hiện vẫn chưa được xác định chính xác. Trong thời gian nghiên cứu của luận văn này, tọa độ của điểm chuyển tiếp này được ước tính có giá trị xấp xỉ  $\phi_1 = -\phi_2 = \pm\pi/3$ .

- Đường màu xanh da trời nhạt (■,  $\eta_1$ ): KPT  $\Delta_{VC}$  đóng ở cả hai valley bởi tiếp xúc giữa hai dải VB2 và CB2 xảy ra tại điểm satellite-Dirac nằm thấp hơn (điểm còn lại không xảy ra tiếp xúc).
- Đường màu hồng nhạt (■,  $\eta_8$ ): tương tự như đường màu xanh da trời nhạt, nhưng ở đây tiếp xúc chỉ xảy ra tại điểm satellite-Dirac nằm cao hơn.

Đặc trưng topo của hệ, thể hiện trên giản đồ tổng cộng Hình. 3.5, có hình trạng khá tương tự như giản đồ của cấu hình  $C_4$ , bao gồm các miền với số Chern  $C = 0$  ( $\eta_9, \eta_{10}$  và  $\eta_{11}$ ) và  $C = \pm 2$  ( $\eta_2, \eta_5, \eta_6$  và  $\eta_7$ ). Các pha với  $C = \pm 2$  của hệ thể hiện khá rõ bởi hai cặp trạng thái biên kết nối vùng hóa trị và vùng dẫn trên cấu trúc vùng năng lượng của ZNR, ứng với KPT  $\Delta_{VC}$  của hệ khối, tại các điểm pha  $\eta_5, \eta_6$  và  $\eta_7$ . điểm pha  $\eta_2$  cũng có hai cặp trạng thái biên với bản chất tương tự, mặc dù một cặp trong số đó không thể quan sát được đối với cấu hình ZNR do bị lẫn vào vùng các dải khối.

Trong khi đó, các pha topo tầm thường của hệ, với  $C = 0$ , tại các điểm pha  $\eta_9, \eta_{10}$  và  $\eta_{11}$  không được thể hiện rõ ràng bởi các trạng thái biên của cấu hình ZNR. Nguyên nhân vẫn là do ảnh hưởng của các dải khối (Hình. 3.28). May mắn thay, các cấu trúc vùng năng lượng của cấu hình ANR cho phép ta đánh giá đặc trưng topo trong trường hợp này. Việc này được thực hiện bằng cách so sánh các trạng thái biên của 3 điểm pha này và của các điểm  $\eta_5, \eta_6$  và  $\eta_7$  trên Hình. 3.26. Vì các trạng thái biên của hai điểm  $\eta_{10}$  và  $\eta_{11}$  suy biến do  $\phi_1 = \phi_2$ , nên để dễ dàng, chúng tôi so sánh cấu trúc vùng năng lượng của 3 điểm pha  $\eta_5, \eta_6$  và  $\eta_9$ . Trên Hình. 3.27 chúng tôi phóng to cấu trúc vùng năng lượng trong các vùng được đánh dấu bởi hình vuông nét đứt trên Hình. 3.26 của 3 điểm pha này để dễ dàng cho việc quan sát. Bằng cách kết hợp cả hai hình, hai điểm  $\eta_5$  và  $\eta_6$  cho thấy rõ hai cặp trạng thái biên kết nối các dải khối ứng với hai dải VB2 và CB2 của hệ khối, do đó thể hiện đúng đặc trưng topo với số Chern  $C = +2$ . Ngược lại, điểm pha  $\eta_9$ , thuộc miền pha trong đó hệ có topo tầm thường ( $C = 0$ ), không thể hiện các đặc trưng như vậy của các trạng thái biên.

Các pha topo với số Chern  $C = \pm 3$  thu được trên dải VB2 của hệ khối không phải là các pha topo của toàn bộ hệ, bởi vì giá trị  $C = \pm 3$  này liên quan đến các trạng thái biên đóng góp bởi dải VB1, tức các trạng thái biên nằm trong miền năng lượng

ứng với KPT  $\Delta_{VV}$  của hệ khối, tương tự như trường hợp  $C = \pm 3$  đã gặp ở cấu hình  $C_2$ .

Cuối cùng, điểm pha  $\eta_4$  thể hiện rất rõ trên cấu trúc vùng năng lượng của cả cấu hình ANR và ZNR hai cặp trạng thái biên topo tương tự như các điểm  $\eta_5$  và  $\eta_6$ . Vì vậy, mặc dù số Chern của hệ khối không thể được định nghĩa tại điểm này, hay chính xác hơn là trong trường hợp  $\phi_1 = -\phi_2$  (đường màu xám (■) trên Hình. 3.24 và các điểm nhiễu trên Hình. 3.1), do giao cắt giữa hai dải VB1 và VB2, kết quả tại điểm  $\eta_4$  vẫn cho ta biết rằng trong trường hợp này hệ có đặc trưng topo giống như đặc trưng topo của các pha với số Chern  $C = \pm 2$ .

## KẾT LUẬN

Trong luận văn này, chúng tôi đã nghiên cứu khả năng hình thành và tồn tại của các pha kim loại và điện môi khác nhau trong các hệ mạng lục giác hai lớp trượt. Cụ thể, chúng tôi đã sử dụng xấp xỉ TB tới lân cận gần thứ hai trong mô hình Haldane cho các hệ khối hai chiều và các dải nano một chiều để tính toán cấu trúc vùng năng lượng của các hệ này cũng như các vector trạng thái Bloch tương ứng. Từ đó, giá trị của bất biến topo đặc trưng, số Chern, đã được tính. Các kết quả thu được đã cho thấy các pha điện tử khác nhau về mặt topo xuất hiện khi thay đổi các tham số hình học và tham số động lực của hệ vật liệu, được trình bày dưới dạng giản đồ pha. Cụ thể, tồn tại các pha tầm thường về mặt topo với số Chern bằng 0 và các pha không tầm thường với số Chern thay đổi từ  $-3$  đến  $+3$ . Sự chuyển pha giữa hai pha topo khác nhau là quá trình đóng và mở lại các vùng cấm năng lượng có liên quan. Các quá trình chuyển pha này đã được phân loại dựa trên cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối. Bên cạnh đó, giá trị bất biến topo đặc trưng của hệ hai chiều cũng được phản ánh về mặt năng lượng bởi sự xuất hiện của các trạng thái biên bền vững nhất định trong hệ một chiều tương ứng, bên cạnh các dải khối được tạo thành do hiệu ứng lượng tử hóa.

Như vậy, nghiên cứu của luận văn đã trình bày một quy trình khảo sát tính chất topo của các trạng thái điện tử của hệ vật liệu hai chiều, xuất phát từ việc tính toán cấu trúc vùng năng lượng và các trạng thái điện tử của hệ khối, sau đó tính bất biến topo đặc trưng, và kiểm tra sự hình thành cũng như đặc tính của các trạng thái biên trong hệ một chiều tương ứng. Hiệu ứng lượng tử hóa và nguyên lý "tương ứng bulk-edge" đã được thể hiện rõ ràng qua việc so sánh cấu trúc vùng năng lượng của các hệ hai chiều và một chiều tương ứng, cung cấp một cách tiếp cận định lượng để nghiên cứu các trạng thái topo. Quan trọng hơn, nghiên cứu đã thiết lập các điều kiện cần và đủ cho sự tồn tại của các pha điện tử với tính chất topo nhất định, cũng như chỉ ra rằng việc điều chỉnh một cách thích hợp các tham số của hệ vật liệu có thể dẫn đến sự chuyển pha từ kim loại sang điện môi và ngược lại, với tính chất topo mong muốn.

Nghiên cứu này không chỉ có ý nghĩa lý thuyết mà còn có ý nghĩa ứng dụng. Các hệ vật liệu mạng hai lớp lục giác đã và đang thu hút sự quan tâm rất lớn trong lĩnh vực vật lý vật liệu và điện tử. Hiểu rõ hơn về tính chất topo của các hệ này có thể

có đóng góp lớn vào phát triển các thiết bị và linh kiện điện tử mới với hiệu suất cao hơn cùng với khả năng truyền tải thông tin nhanh chóng và an toàn hơn. Nghiên cứu của chúng tôi đã cung cấp những kiến thức cần thiết để thiết kế và điều khiển các hệ thống này theo cách tốt nhất.

Tuy nhiên, nghiên cứu hiện tại cũng còn một số hạn chế. Thứ nhất, chúng tôi đã chọn mô hình Haldane để nghiên cứu các tính chất topo. Mặc dù đây là mô hình điển hình trong lĩnh vực topo và QHE, nhưng vẫn là một mô hình thuần túy lý thuyết được đề xuất để mô phỏng lại hiệu ứng vật lý thực, do đó có thể không phản ánh cơ chế vật lý chính xác của thế giới thực đằng sau những hiệu ứng này. Thứ hai, chúng tôi sử dụng các xấp xỉ TB để mô phỏng các hệ mạng lục giác hai lớp. Mặc dù các mô hình thu được đã cho ra những kết quả đáng chú ý, song đó vẫn chỉ là một mức độ xấp xỉ và có thể không phản ánh được hoàn toàn hành vi của các hệ thực. Do đó, việc nghiên cứu thêm các mô hình chính xác hơn và phân tích sự ảnh hưởng của các tham số khác cũng là một hướng nghiên cứu tiềm năng. Và thứ ba, bất biến topo được sử dụng, số Chern, chưa phải là một công cụ toàn năng trong việc phân loại tính chất topo của hệ vật liệu được nghiên cứu ở đây. Vẫn xuất hiện những cấu hình vật liệu ở đó số Chern không thể được sử dụng. Về điểm này, các nghiên cứu trong tương lai của chúng tôi có thể sử dụng thêm những bất biến topo khác, chẳng hạn như Wilson loop, đi kèm với những phương pháp phân tích khác.

Tóm lại, nghiên cứu của chúng tôi đã đóng góp vào việc hiểu rõ hơn về tính chất topo của các hệ mạng lục giác hai lớp trượt. Hy vọng rằng nghiên cứu này sẽ đóng góp vào sự tiến bộ của lĩnh vực vật lý vật liệu và điện tử và mở ra những cơ hội mới cho ứng dụng công nghệ trong tương lai. Với cá nhân tôi, luận văn này là một cơ hội để tôi trau dồi lại cũng như học hỏi thêm nhiều kiến thức và phương pháp nghiên cứu trong lĩnh vực topo của vật liệu nói riêng cũng như trong ngành Vật lý chất rắn nói chung. Những hiểu biết này là hết sức quan trọng vì chúng cần thiết cho tôi khi theo đuổi những bài toán nghiên cứu khác trong tương lai.

## DANH MỤC TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] A. Shuaibu et al., 2019, “First Principle Study of Structural, Elastic and Electronic Properties of Hexagonal Boron Nitride (hex-BN) Single Layer”, *American J. Cond. Matt. Phys.*, **9**, 1, tr. 1–5.
- [2] C. Kamal, 2012, “Controlling Band Gap in Silicene Monolayer Using External Electric Field”, *arXiv*, URL: [arxiv.org/abs/1202.2636](https://arxiv.org/abs/1202.2636).
- [3] G. H. Ryu et al., 2012, “Atomic Resolution Imaging of Rotated Bilayer Graphene Sheets Using a Low kV Aberration-corrected Transmission Electron Microscope”, *Korean Journal of Microscopy*, **42**, 4, tr. 218–222.
- [4] Ossila, 2023, “Molybdenum Disulfide (MoS<sub>2</sub>): Theory Applications”, *Ossila*, URL: [ossila.com/pages/molybdenum-disulfide-mos2](https://ossila.com/pages/molybdenum-disulfide-mos2).
- [5] P. R. Wallace, 1947, “The Band Theory of Graphite”, *Phys. Rev.*, **71**, 622.
- [6] A. H. C. Neto, F. Guinea, and N. M. R. Peres, 2006a, “Drawing conclusions from graphene”, *Phys. World*, **19**, 33.
- [7] M. I. Katsnelson, K. S. Novoselov, and A. K. Geim, 2006, “Chiral tunnelling and the Klein paradox in graphene”, *Nat. Phys.*, **2**, 620.
- [8] M. I. Katsnelson and K. S. Novoselov, 2007, “Graphene: New bridge between condensed matter physics and quantum electrodynamics”, *Solid State Comm.*, **143**, tr. 3–13.
- [9] V. P. Gusynin and S. G. Sharapov, 2005, “Unconventional Integer Quantum Hall Effect in Graphene”, *Phys. Rev. Lett.*, **95**, 146801.
- [10] Y. Zhang et al., 2005, “Experimental observation of the quantum Hall effect and Berry’s phase in graphene”, *Nature*, **438**, tr. 201–204.
- [11] K. S. Novoselov et al., 2005, “Two-dimensional gas of massless Dirac fermions in graphene”, *Nature*, **438**, tr. 197–200.
- [12] N. M. R. Peres, A. H. C. Neto, and F. Guinea, 2006, “Conductance quantization in mesoscopic graphene”, *Phys. Rev. B*, **73**, 195411.
- [13] M. I. Katsnelson, 2007, “Conductance quantization in graphene nanoribbons: adiabatic approximation”, *Eur. Phys. J. B*, **57**, tr. 225–228.
- [14] A. Rycerz, J. Tworzydło, and C. W. J. Beenakker, 2007, “Valley filter and valley valve in graphene”, *Nat. Phys.*, **3**, tr. 172–175.

- [15] H. B. Heersche et al., 2007, “Bipolar supercurrent in graphene”, *Nature*, **446**, tr. 56–59.
- [16] V. N. Do, 2021, “Proof for the electronic band crossing in sliding bilayer graphene”, *Phys. Rev. B*, **104**, 205121.
- [17] F. D. M. Haldane, 1988, “Model for a Quantum Hall Effect without Landau Levels: Condensed-Matter Realization of the Parity Anomaly”, *Phys. Rev. Lett.*, **61**, 18.
- [18] E. H. Hall, 1879, “On a New Action of the Magnet on Electric Currents”, *American Journal of Mathematics*, **2**, 3.
- [19] K. v. Klitzing, G. Dorda, and M. Pepper, 1980, “New Method for High-Accuracy Determination of the Fine-Structure Constant Based on Quantized Hall Resistance”, *Phys. Rev. Lett.*, **45**, 494.
- [20] R. B. Laughlin, 1981, “Quantized Hall conductivity in two dimensions”, *Phys. Rev. B*, **23**, 5632(R).
- [21] D. J. Thouless et al., 1982, “Quantized Hall Conductance in a Two-Dimensional Periodic Potential”, *Phys. Rev. Lett.*, **49**, 405.
- [22] Q. Niu, D. J. Thouless, and Y. Wu, 1985, “Quantized Hall conductance as a topological invariant”, *Phys. Rev. B*, **31**, 3372.
- [23] B. Wang et al., 2021, “Higher-order topological insulator phase in a modified Haldane model”, *Phys. Rev. B*, **104**, L121108.
- [24] S. Mondal and S. Basu, 2023, “Band-engineered bilayer Haldane model: Evidence of multiple topological phase transitions”, *Phys. Rev. B*, **108**, 045307.
- [25] S. Bhattacharjee et al., 2021, “Bilayer Haldane system: Topological characterization and adiabatic passages connecting Chern phases”, *Phys. Rev. B*, **103**, 224304.
- [26] M. Trescher and E. J. Bergholtz, 2012, “Flat bands with higher Chern number in pyrochlore slabs”, *Phys. Rev. B*, **86**, 241111(R).
- [27] S. Yang et al., 2012, “Topological flat band models with arbitrary Chern numbers”, *Phys. Rev. B*, **86**, 241112(R).
- [28] D. Sticlet et al., 2012, “Geometrical engineering of a two-band Chern insulator in two dimensions with arbitrary topological index”, *Phys. Rev. B*, **85**, 165456.

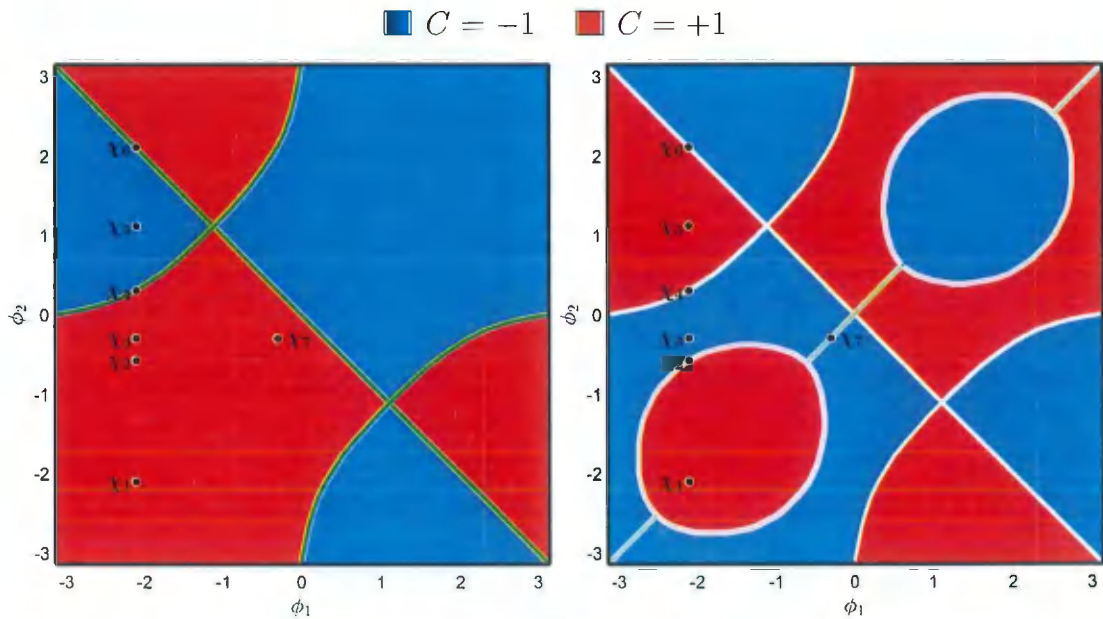


- [29] D. Sticlet and F. Piéchon, 2013, “Distant-neighbor hopping in graphene and Haldane models”, *Phys. Rev. B*, **87**, 115402.
- [30] N. Hao et al., 2008, “Topological edge states and quantum Hall effect in the Haldane model”, *Phys. Rev. B*, **78**, 075438.
- [31] X. Wu, C. X. Zhang, and M. A. Zubkov, 2022, “Multilayer Haldane model”, *Solid State Comm.*, **353**, 114863.
- [32] J. Ibanez-Azpiroz et al., 2015, “Ab initio analysis of the topological phase diagram of the Haldane model”, *Phys. Rev. A*, **92**, 195132.
- [33] J. Ibanez-Azpiroz et al., 2014, “Breakdown of the Peierls substitution for the Haldane model with ultracold atoms”, *Phys. Rev. A*, **90**, 033609.
- [34] E. Colomé and M. Franz, 2018, “Antichiral Edge States in a Modified Haldane Nanoribbon”, *Phys. Rev. Lett*, **120**, 086603.
- [35] C. L. Kane and E. J. Mele, 2005, “Quantum Spin Hall Effect in Graphene”, *Phys. Rev. Lett*, **95**, 226801.
- [36] G. Jotzu et al., 2014, “Experimental realization of the topological Haldane model with ultracold fermions”, *Nature*, **515**, tr. 237–240.
- [37] X. Cheng et al., 2021, “Antichiral edge states and hinge states based on the Haldane model”, *Phys. Rev. B*, **104**, L081401.
- [38] M. C. Rechtsman et al., 2013, “Photonic Floquet topological insulators”, *Nature*, **496**, tr. 196–200.
- [39] M. Modugno and G. Pettini, 2017, “Correspondence between a shaken honeycomb lattice and the Haldane model”, *Phys. Rev. A*, **96**, 053603.
- [40] J. K. Asbóth, L. Oroszlány, and A. Pályi, 2016, *A Short Course on Topological Insulators: Band Structure and Edge States in One and Two Dimensions*, 1st, Springer, Switzerland, ISBN: 978-3-319-25607-8.
- [41] M. B. de Paz et al., 2019, “Tutorial: Computing Topological Invariants in 2D Photonic Crystals”, *Adv. Quantum Technol.*, **2**, 2.

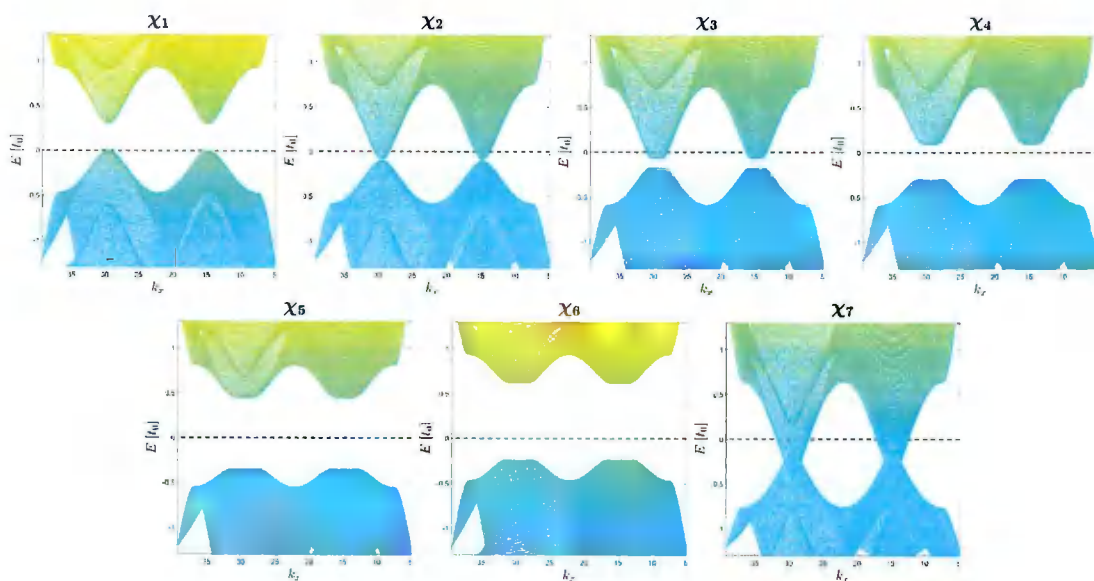
## PHỤ LỤC

Phụ lục này trình bày kết quả tính toán cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối và các dải nano hai lớp tương ứng tại các điểm pha của các cấu hình trượt được khảo sát, phục vụ cho phân tích trong Phần 3.2.2 của nội dung chính.

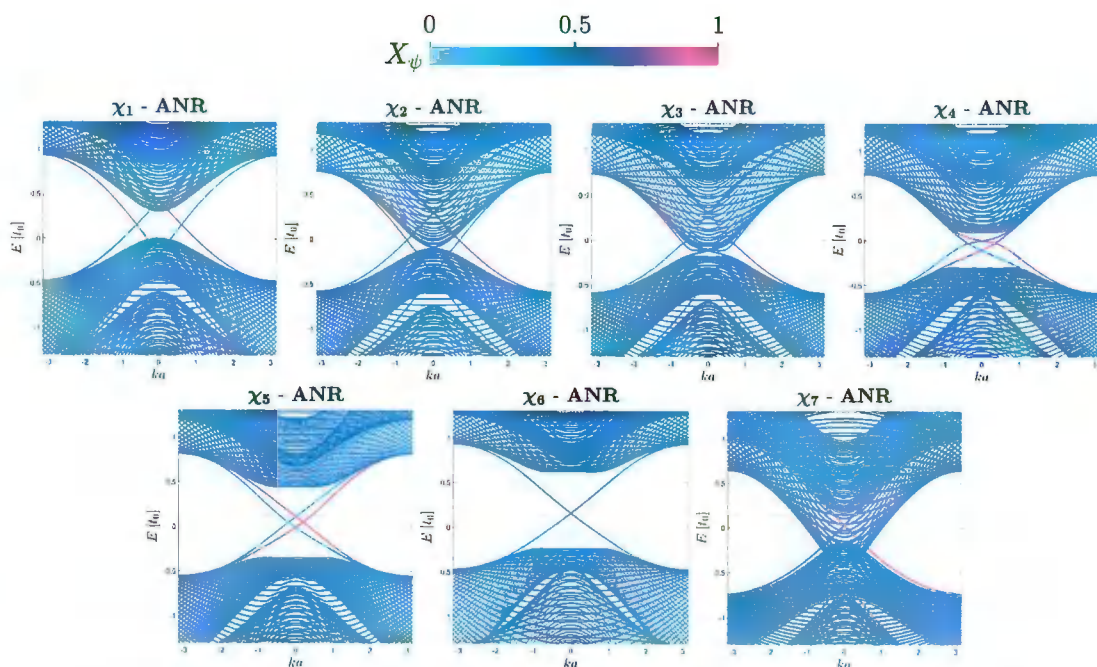
- Cấu hình  $C_1$



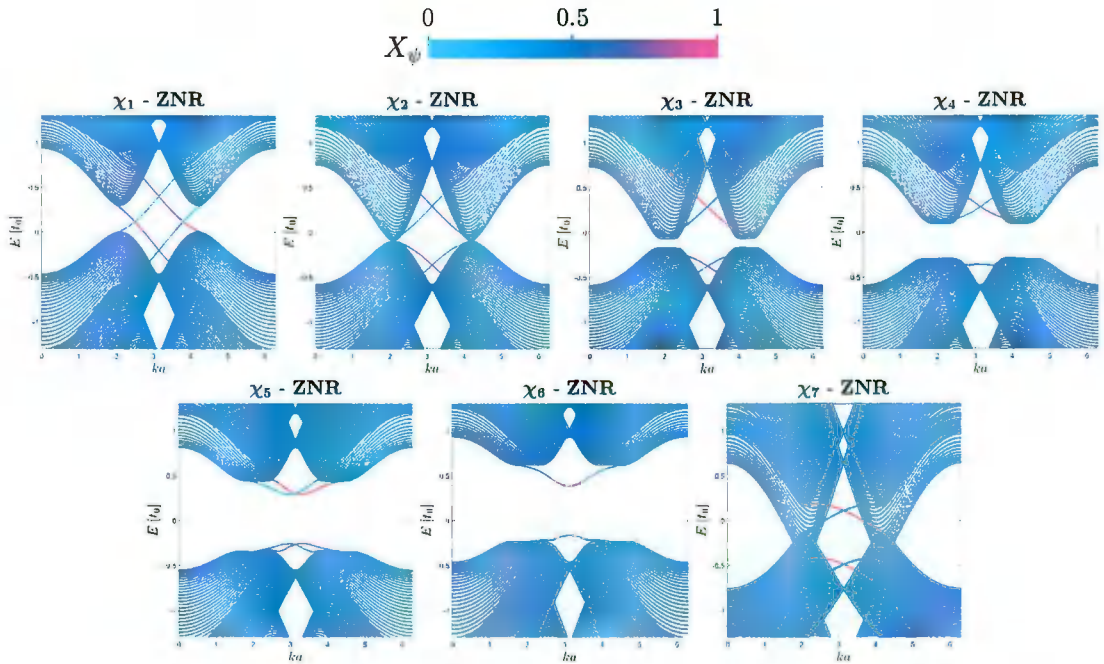
Hình 3.7: Giản đồ pha  $\phi_1$ - $\phi_2$  ứng với dải VB1 (trái) và VB2 (phải) của cấu hình  $C_1$  (xếp AA) với 7 điểm pha  $\chi_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 7$ ). Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 3t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Lưu ý: chú thích màu ở trên không dành cho các đường chuyển pha (xem mô tả chi tiết trong phần nội dung chính).



Hình 3.8: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ hai chiều với cấu hình  $C_1$  (xếp AA) ứng với 7 điểm pha được chọn trên Hình. 3.7. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 3t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Hướng quan sát ở đây là mũi tên xanh da trời trên Hình. 2.1b. Đường nét đứt biểu thị mức Fermi.

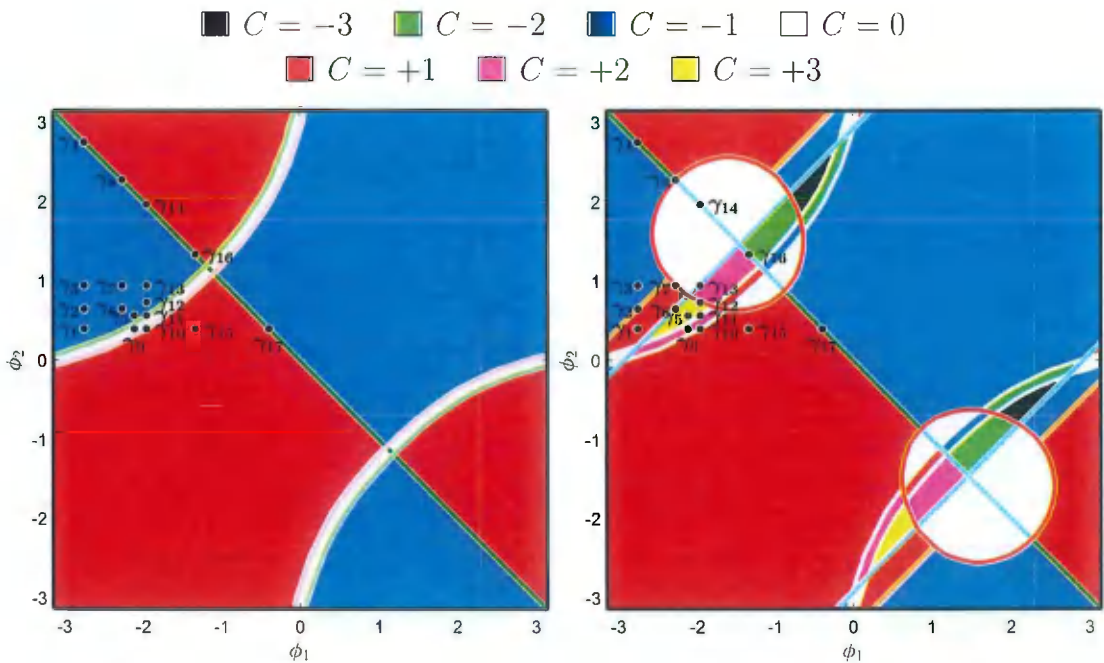


Hình 3.9: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_1$  (xếp AA) và biên armchair ứng với 7 điểm pha được chọn trên Hình. 3.7. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 3t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ .

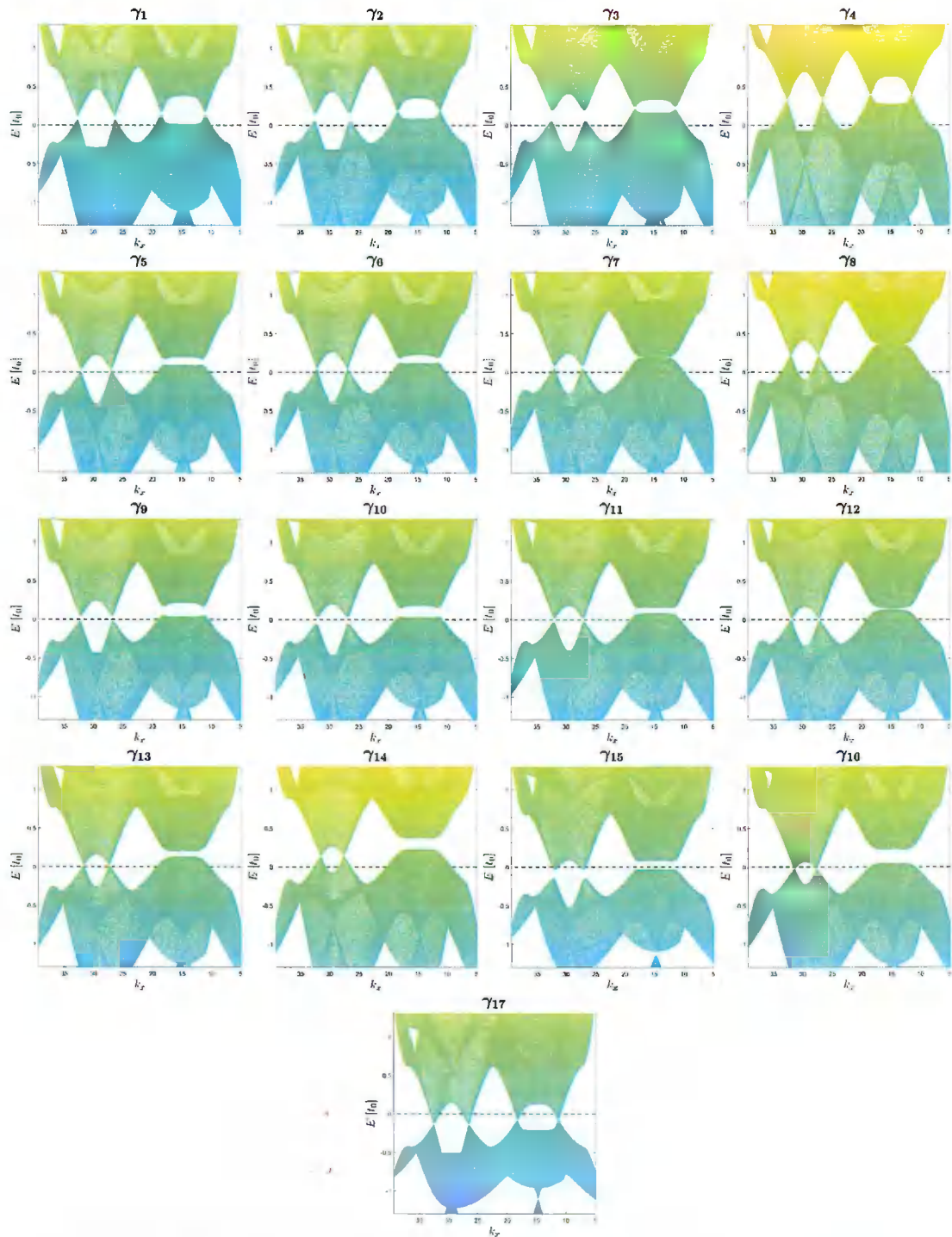


Hình 3.10: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dây nano) với cấu hình  $C_1$  (xếp AA) và biên zigzag ứng với 7 điểm pha được chọn trên Hình. 3.7. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 3t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ .

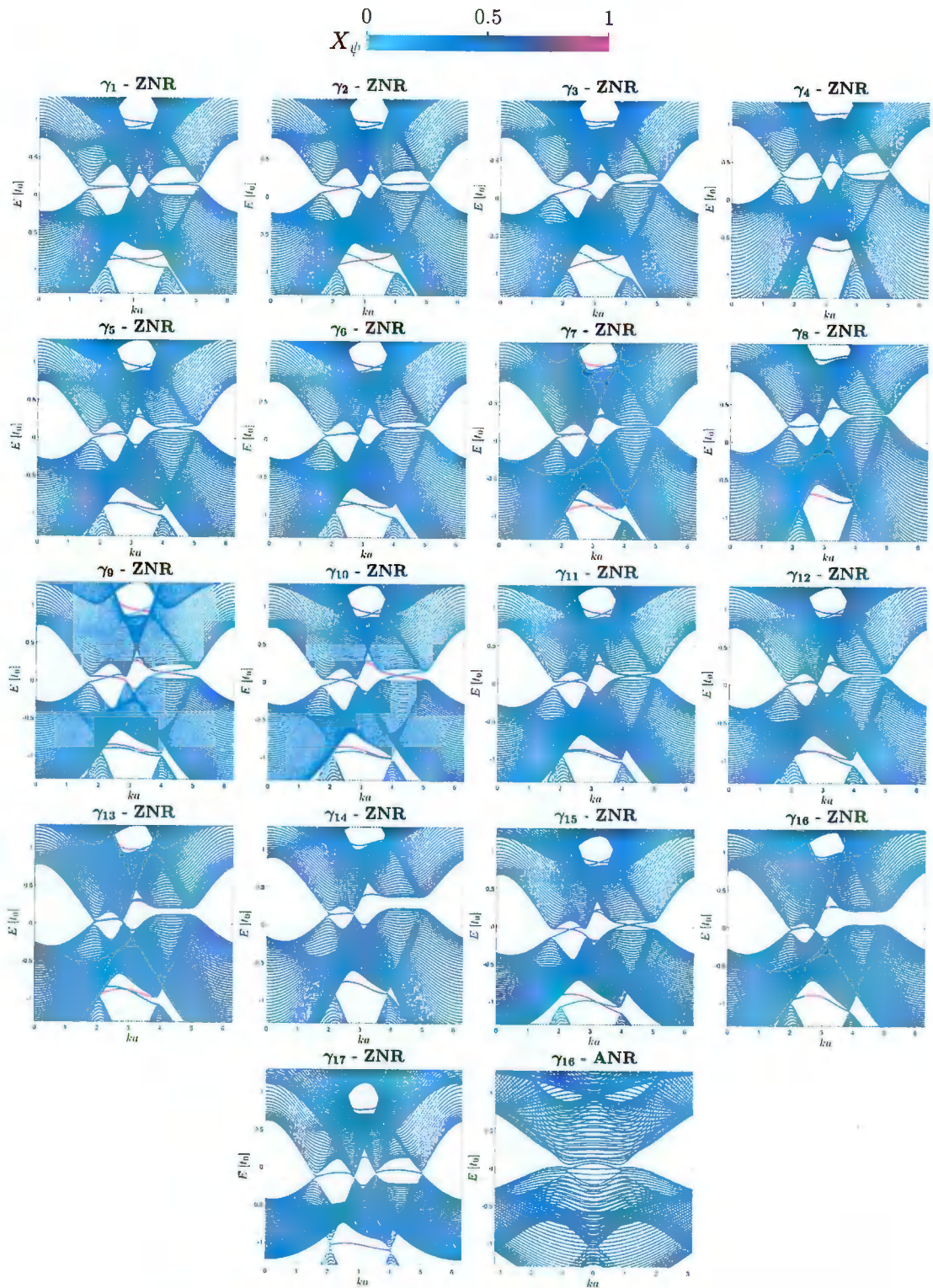
- Cấu hình  $C_2$



Hình 3.11: Giản đồ pha  $\phi_1$ - $\phi_2$  ứng với dải VB1 (trái) và VB2 (phải) của cấu hình  $C_2$  với 17 điểm pha  $\gamma_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 17$ ). Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Lưu ý: chú thích màu ở trên không dành cho các đường chuyển pha, các đường chuyển pha cùng màu trên hai giản đồ không mang cùng ý nghĩa (xem mô tả chi tiết trong phần nội dung chính).

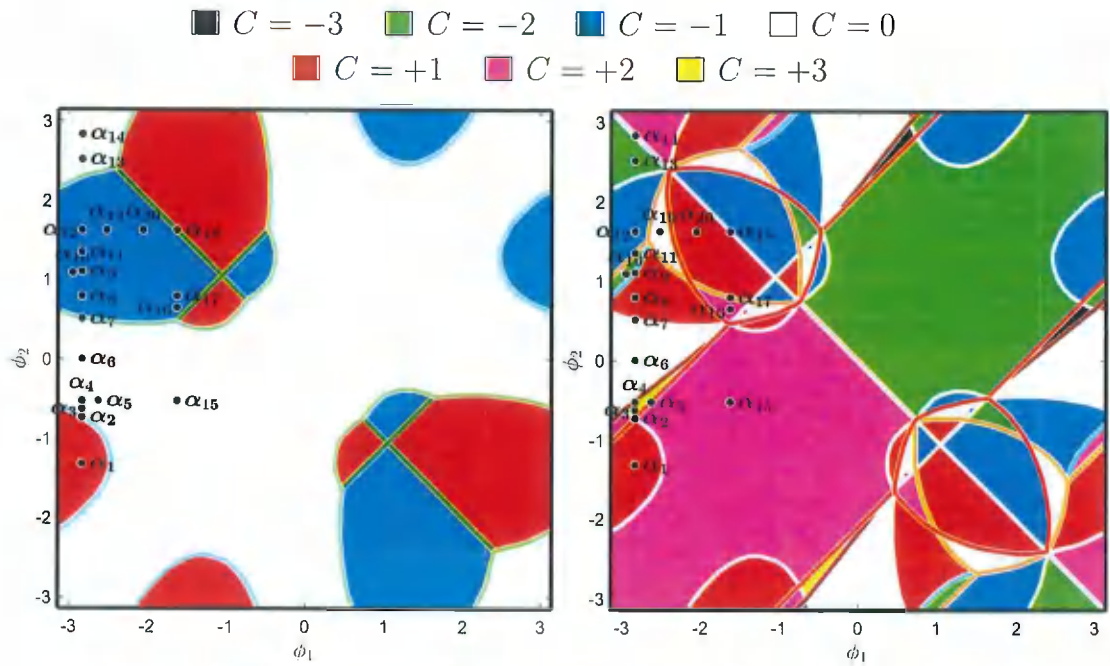


Hình 3.12: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ hai chiều với cấu hình  $C_2$  ứng với 17 điểm pha được chọn trên Hình. 3.11. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Hướng quan sát ở đây là mũi tên xanh da trời trên Hình. 2.1b. Đường nét đứt biểu thị mức Fermi.

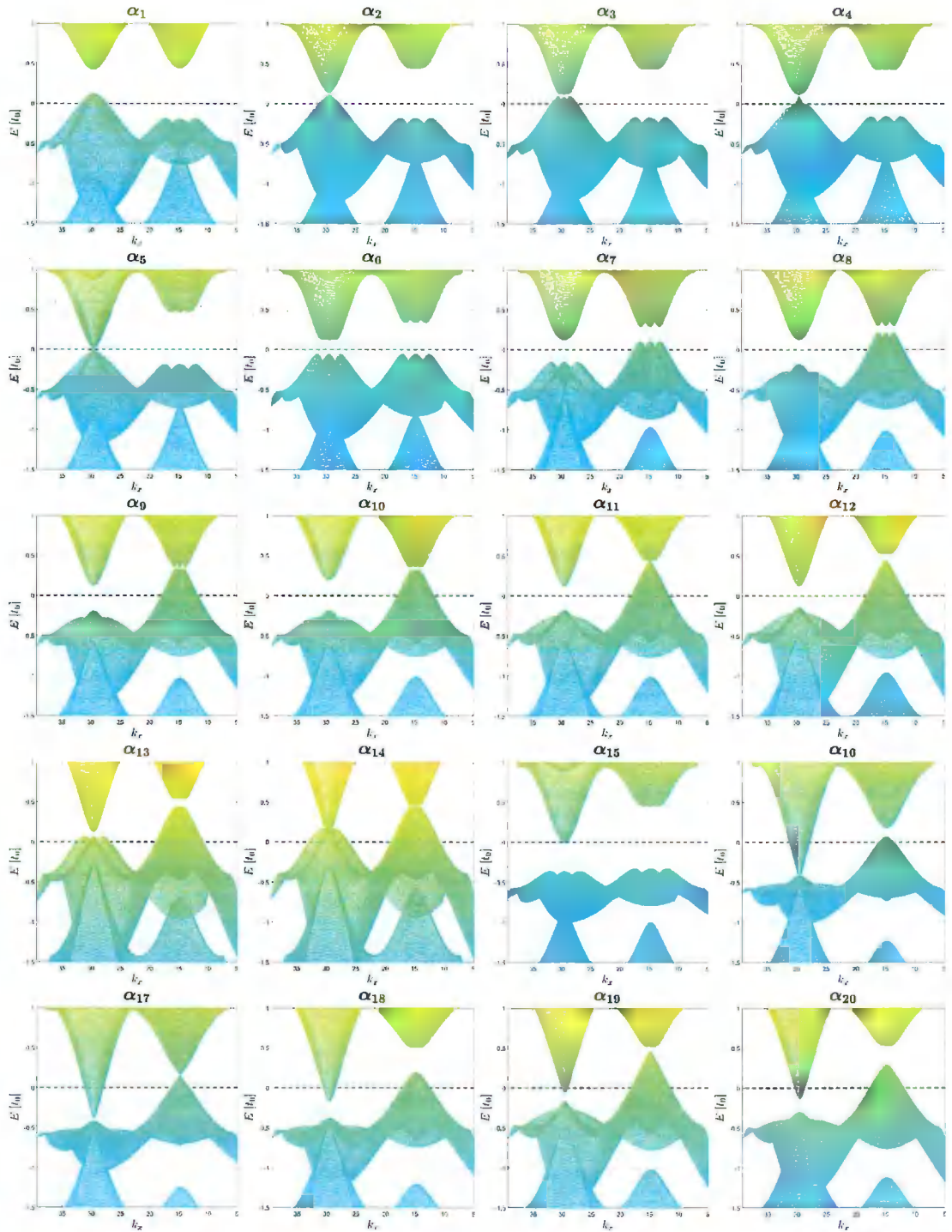


Hình 3.13: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_2$  và hai biên zigzag và armchair ứng với 17 điểm pha được chọn trên Hình. 3.11. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Lưu ý rằng chỉ có một điểm pha của cấu hình armchair được đưa ra ở đây, đó là  $\gamma_{16}$  (dưới cùng).

• Cấu hình  $C_3$

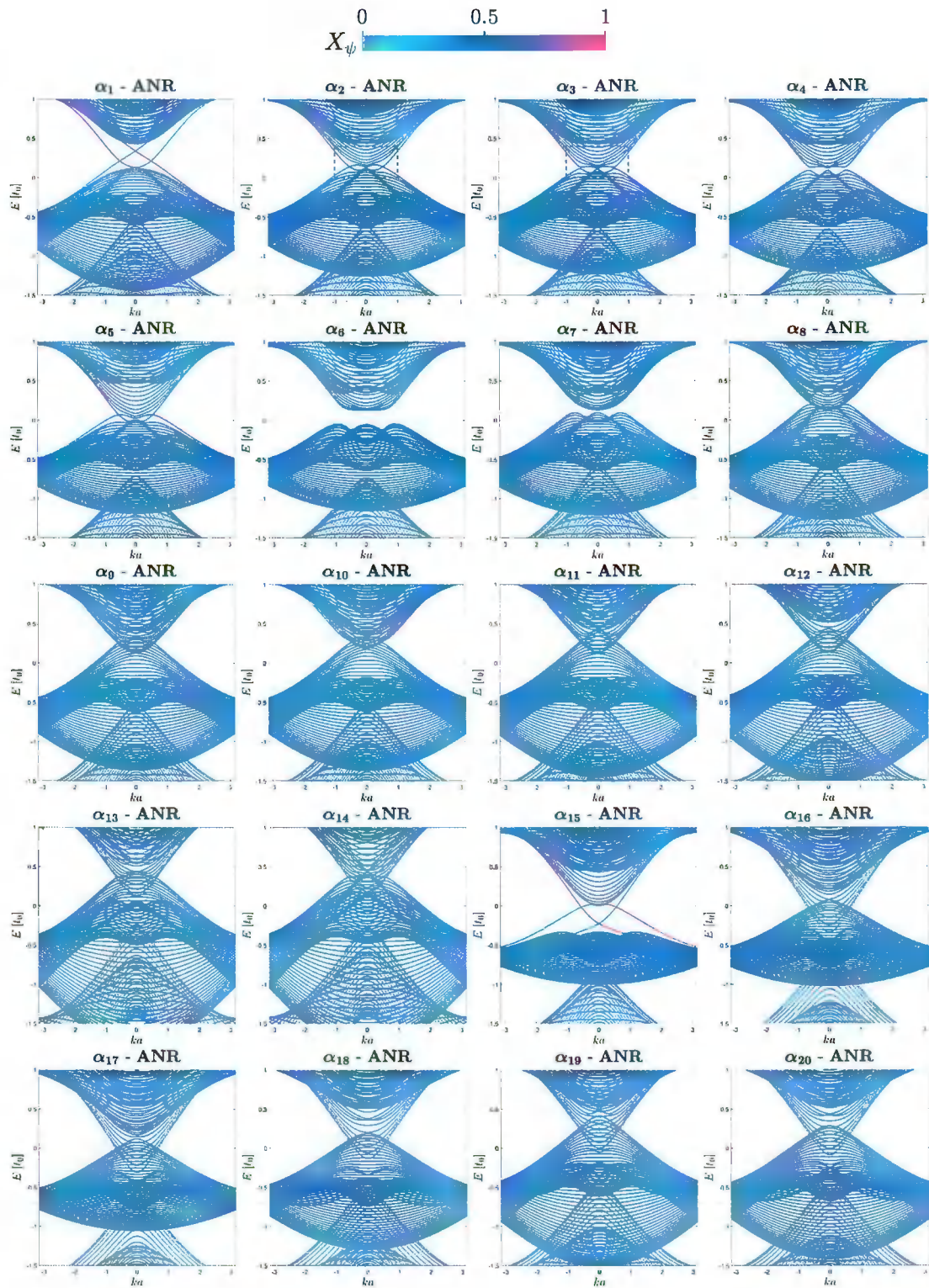


Hình 3.14: Giản đồ pha  $\phi_1$ - $\phi_2$  ứng với dải VB1 (trái) và VB2 (phải) của cấu hình  $C_3$  (xếp AB) với 20 điểm pha  $\alpha_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 20$ ). Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_\perp$  và  $M_0 = 0$ . Lưu ý: chú thích màu ở trên không dành cho các đường chuyển pha, các đường chuyển pha cùng màu trên hai giản đồ không mang cùng ý nghĩa (xem mô tả chi tiết trong phần nội dung chính).

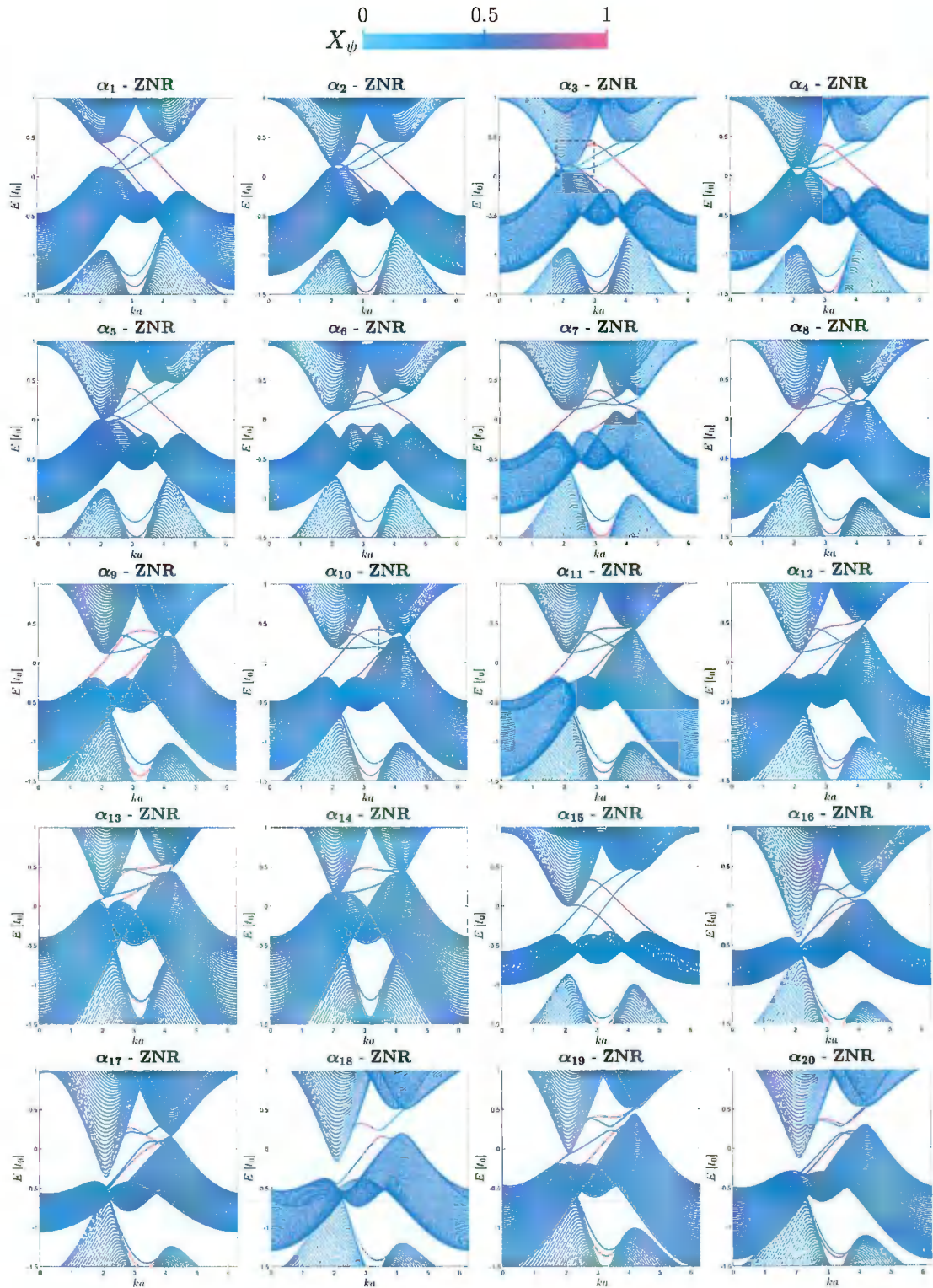


Hình 3.15: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ hai chiều với cấu hình  $C_3$  (xếp AB) ứng với 20 điểm pha được chọn trên Hình. 3.14. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Hướng quan sát ở đây là mũi tên xanh da trời trên Hình. 2.1b. Đường nét đứt biểu thị mức Fermi.

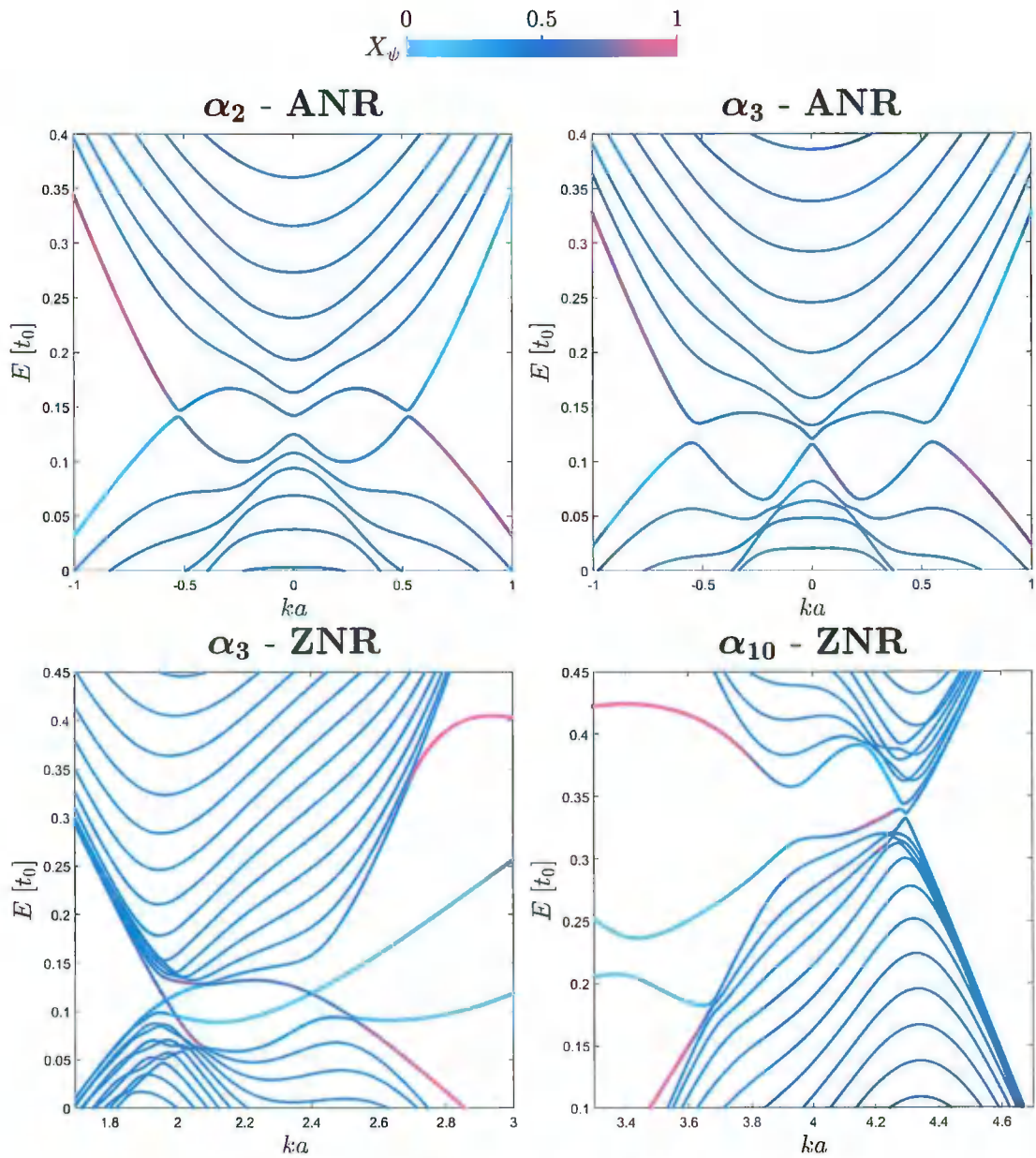




Hình 3.16: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_3$  (xếp AB) và biên armchair ứng với 20 điểm pha được chọn trên Hình. 3.14. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Đối với hai điểm  $\alpha_2$  và  $\alpha_3$ , chúng tôi phóng to cấu trúc vùng năng lượng bên trong các miền hình vuông nét đứt trên Hình. 3.18 để giúp đánh giá chính xác các trạng thái biên.

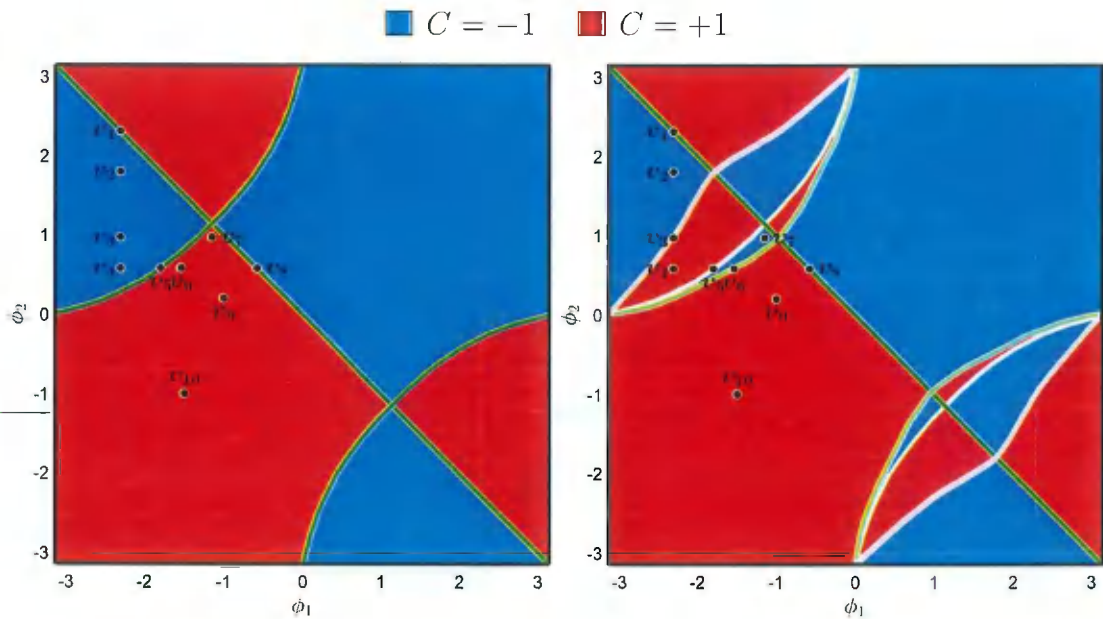


Hình 3.17: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dây nano) với cấu hình  $C_3$  (xếp AB) và biên zigzag ứng với 20 điểm pha được chọn trên Hình. 3.14. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Đối với hai điểm  $\alpha_3$  và  $\alpha_{10}$ , chúng tôi phóng to cấu trúc vùng năng lượng bên trong các miền hình vuông nét đứt trên Hình. 3.18 để giúp đánh giá chính xác các trạng thái biên.

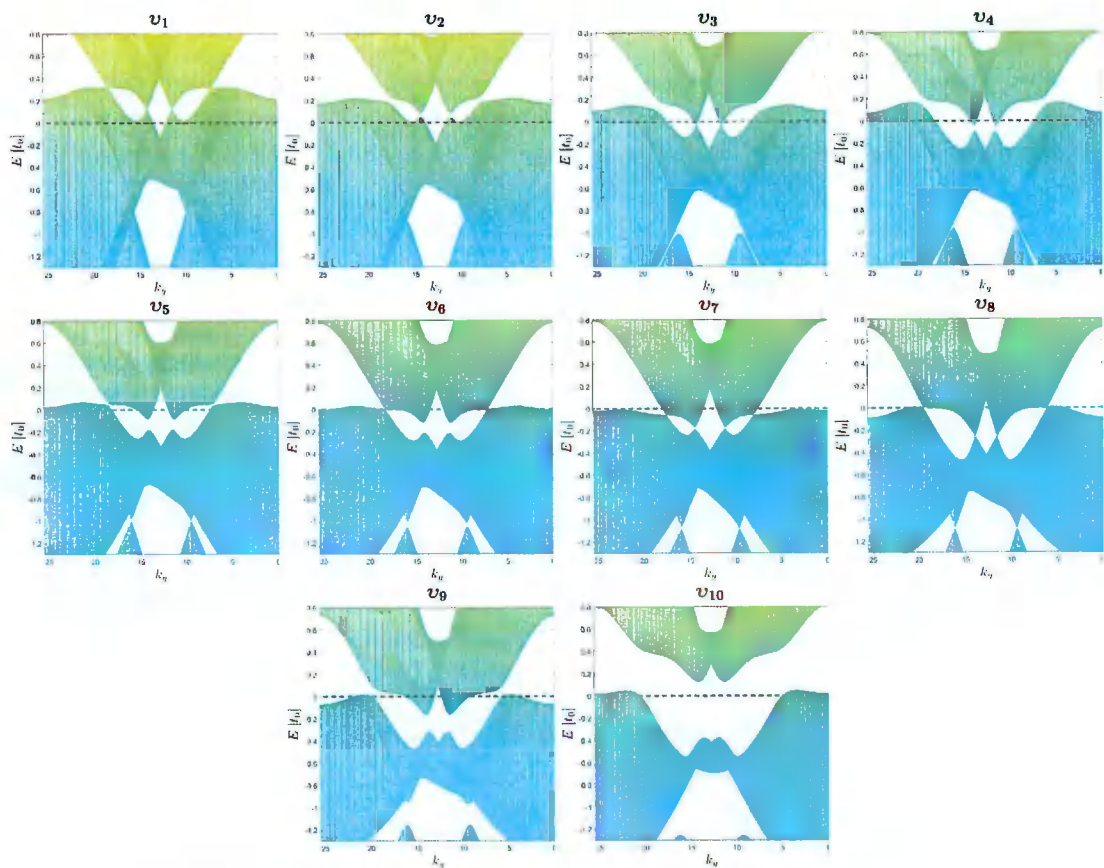


Hình 3.18: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_3$  (xếp AB) và biên armchair hoặc zigzag của 3 điểm pha  $\alpha_2$ ,  $\alpha_3$  và  $\alpha_{10}$  trong các miền nét đứt đánh dấu trên Hình. 3.16 và 3.17. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ .

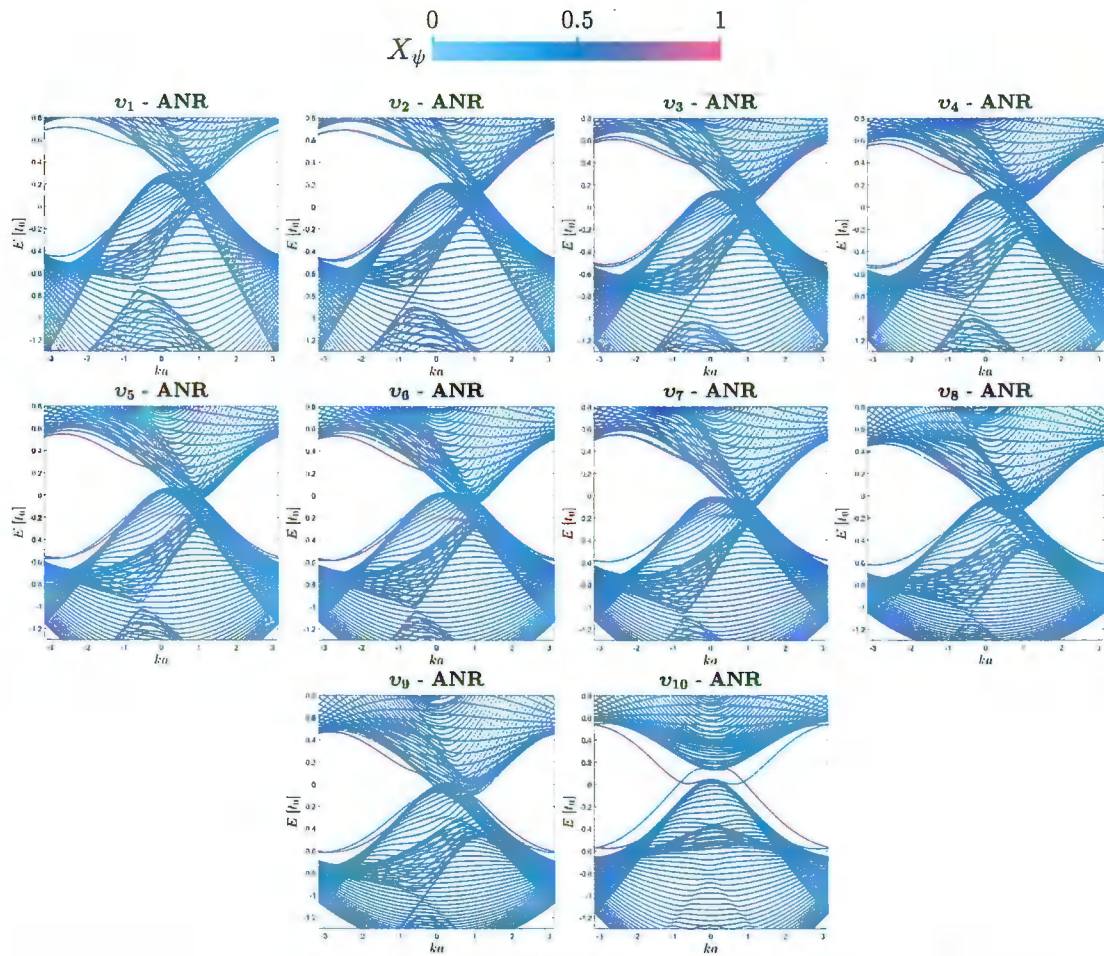
• Cấu hình  $C_4$



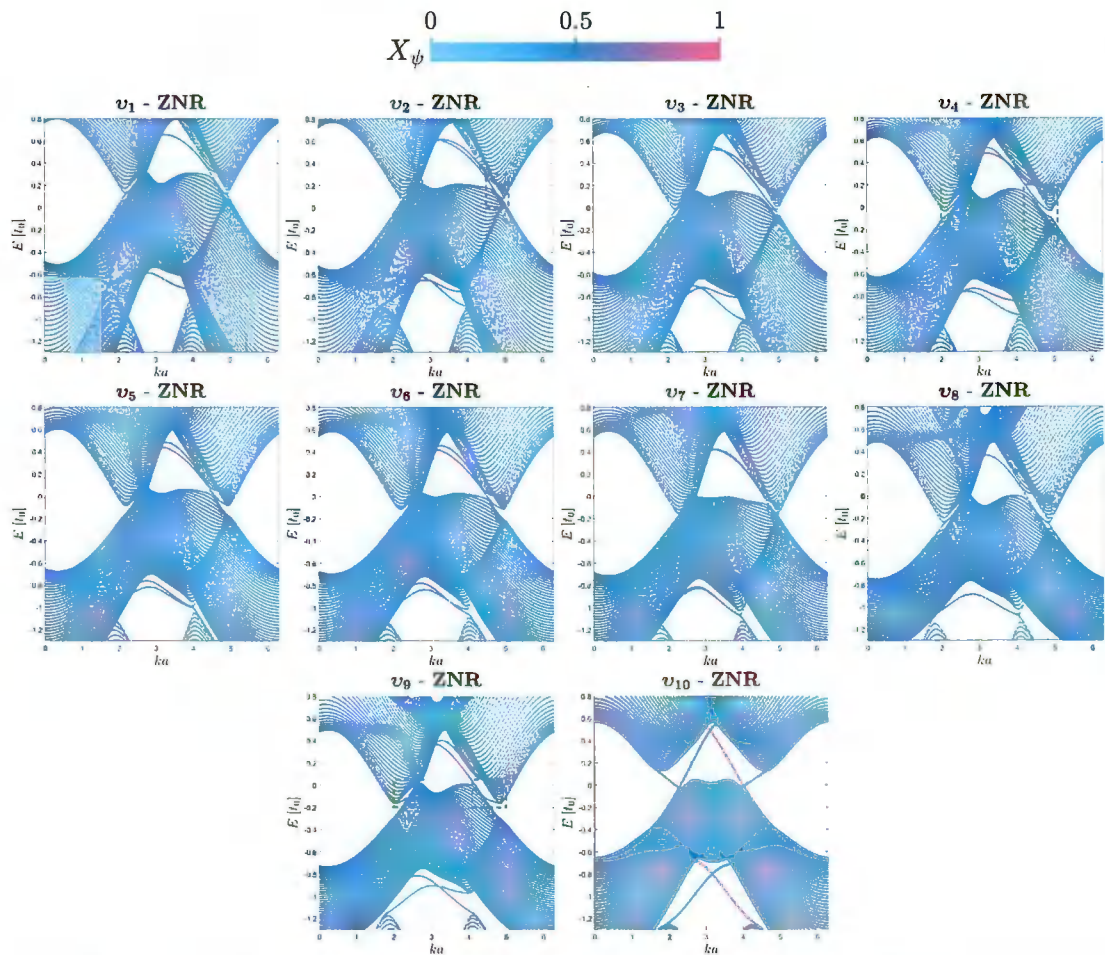
Hình 3.19: Giản đồ pha  $\phi_1$ - $\phi_2$  ứng với dải VB1 (trái) và VB2 (phải) của cấu hình  $C_4$  với 10 điểm pha  $v_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 10$ ). Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Lưu ý: chú thích màu ở trên không dành cho các đường chuyển pha, các đường chuyển pha cùng màu trên hai giản đồ không mang cùng ý nghĩa (xem mô tả chi tiết trong phần nội dung chính).



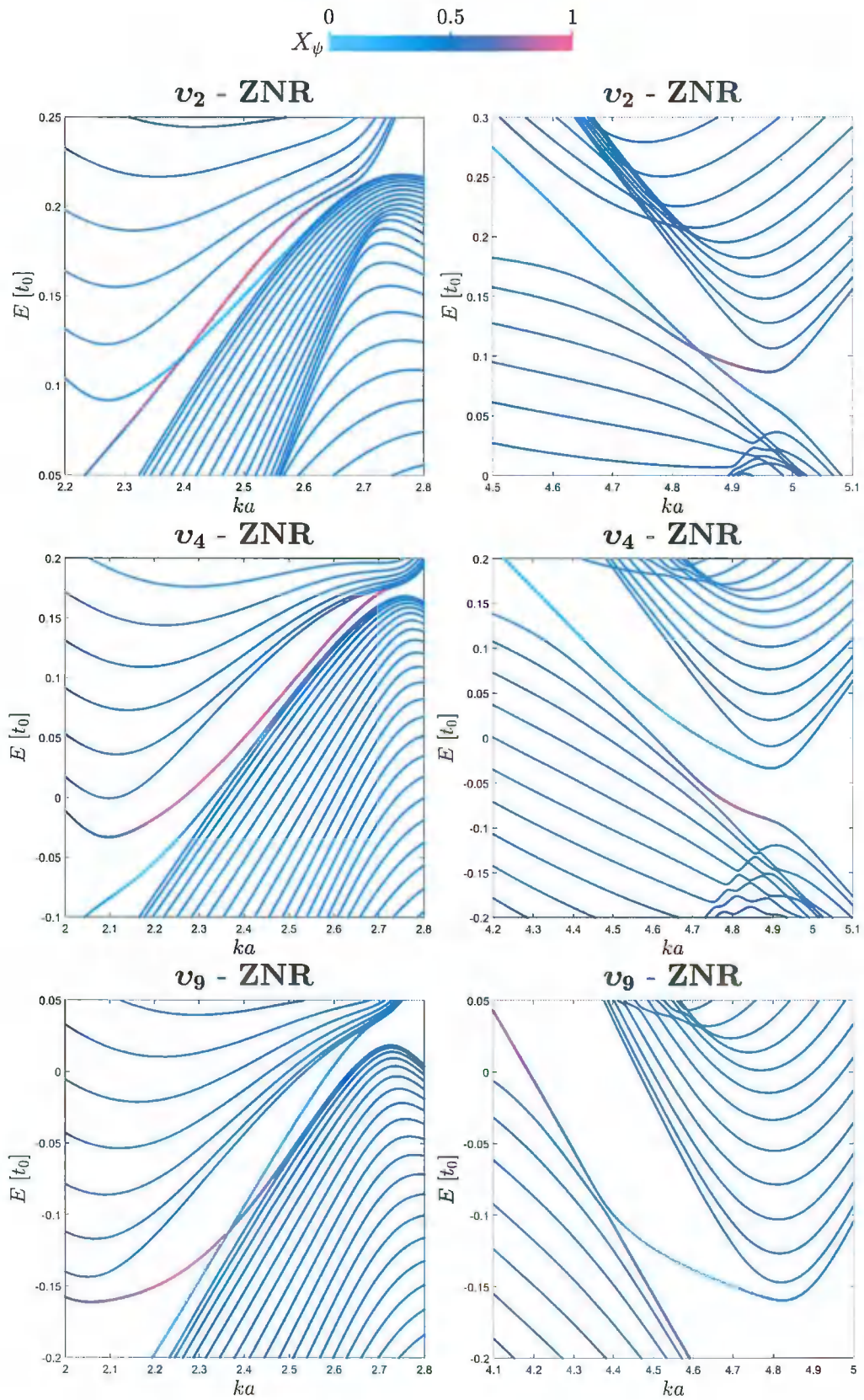
Hình 3.20: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ hai chiều với cấu hình  $C_4$  ứng với 10 điểm pha được chọn trên Hình. 3.19. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_\perp$  và  $M_0 = 0$ . Hướng quan sát ở đây là mũi tên xanh lục trên Hình. 2.1b. Đường nét đứt biểu thị mức Fermi.



Hình 3.21: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dây nano) với cấu hình  $C_4$  và biên armchair ứng với 10 điểm pha được chọn trên Hình. 3.19. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_\perp$  và  $M_0 = 0$ .



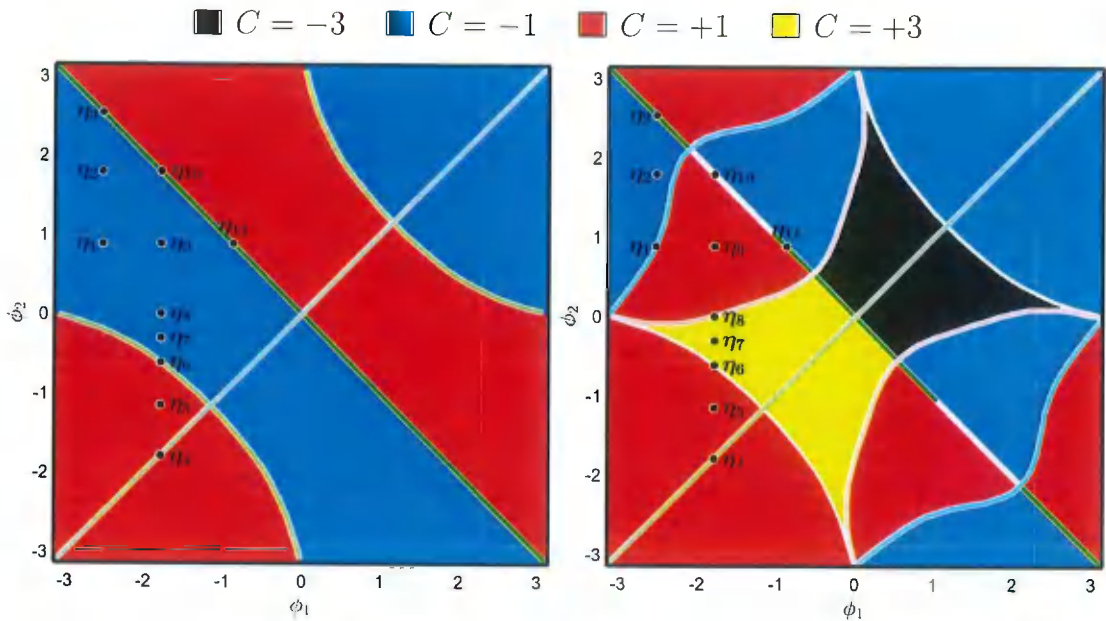
Hình 3.22: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_4$  và biên zigzag ứng với 10 điểm pha được chọn trên Hình. 3.19. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Đối với 3 điểm  $v_2$ ,  $v_4$  và  $v_9$ , chúng tôi phóng to cấu trúc vùng năng lượng bên trong các miền hình vuông nét đứt trên Hình. 3.23 để giúp đánh giá chính xác các trạng thái biên.



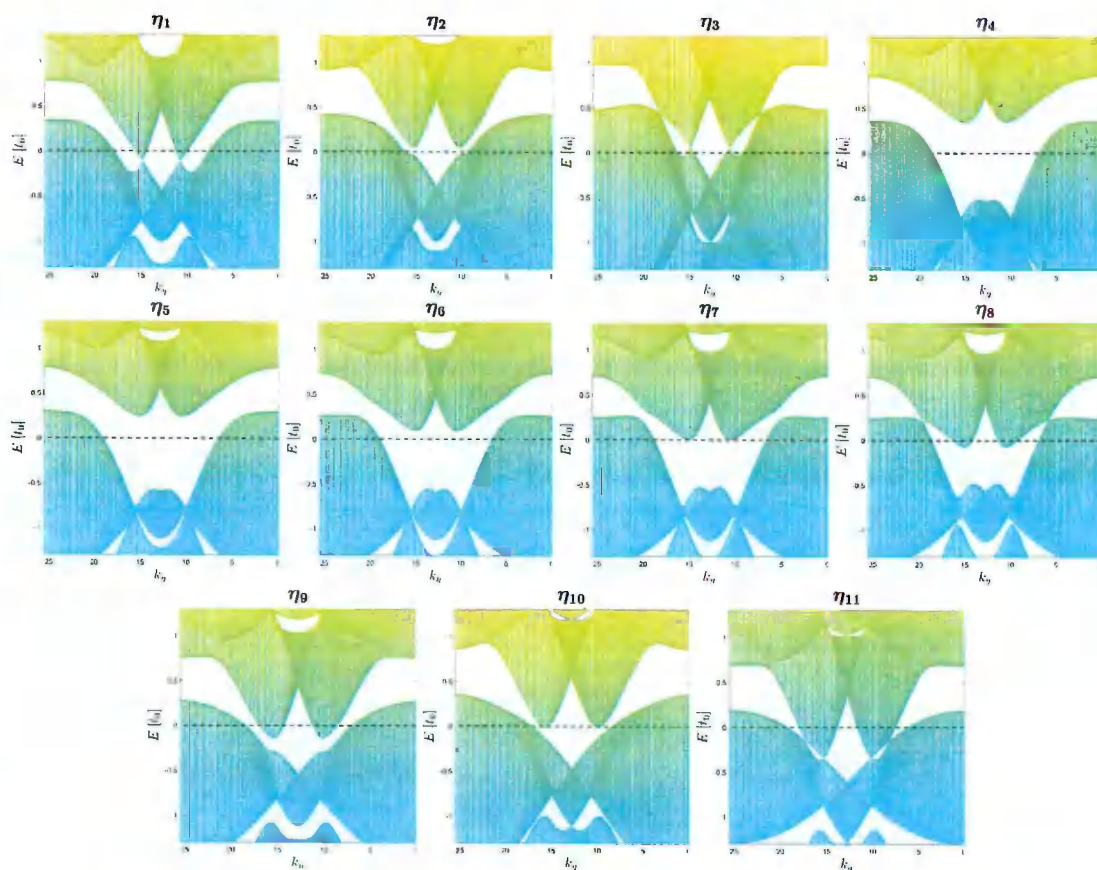
Hình 3.23: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_4$  và biên zigzag tại 3 điểm pha  $\nu_2$ ,  $\nu_4$  và  $\nu_9$  trong các miền nét đứt đánh dấu trên Hình 3.22. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_\perp$  và  $M_0 = 0$ .



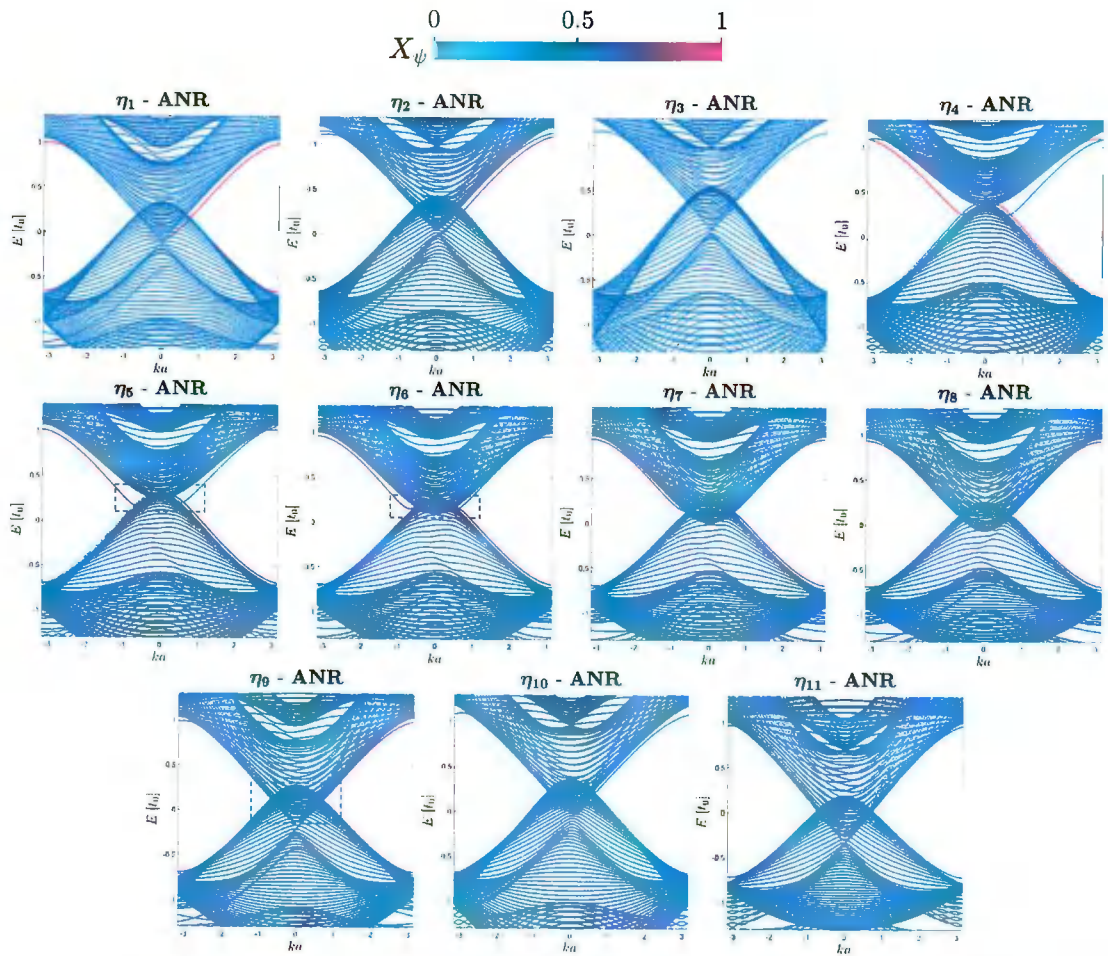
• Cấu hình  $C_5$



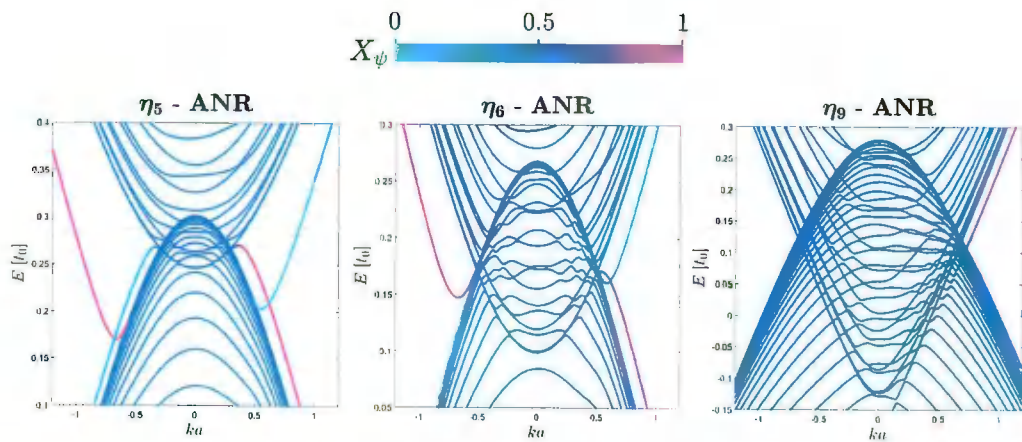
Hình 3.24: Giản đồ pha  $\phi_1$ - $\phi_2$  ứng với dải VB1 (trái) và VB2 (phải) của cấu hình  $C_5$  với 11 điểm pha  $\eta_j$  ( $j = 1, 2, \dots, 11$ ). Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Lưu ý: chú thích màu ở trên không dành cho các đường chuyển pha, các đường chuyển pha cùng màu trên hai giản đồ không mang cùng ý nghĩa (xem mô tả chi tiết trong phần nội dung chính).



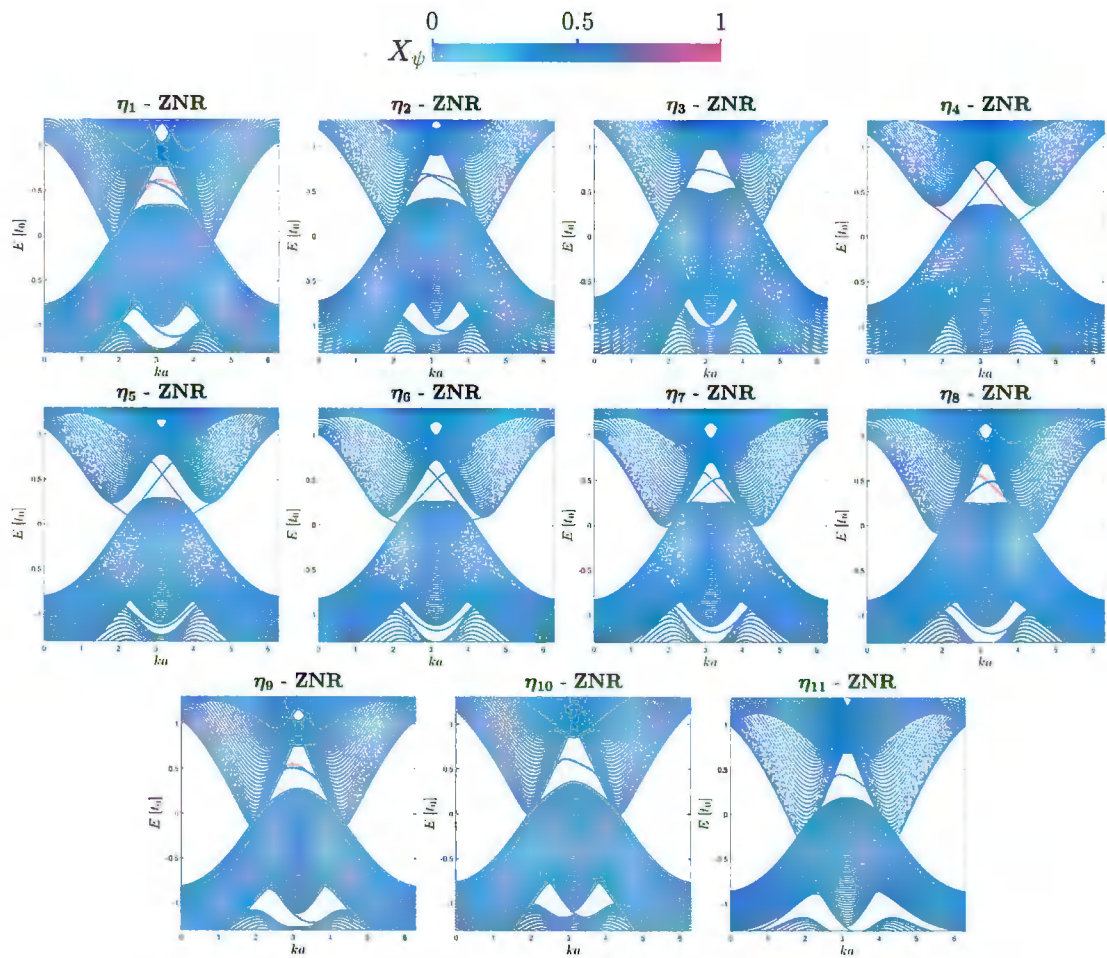
Hình 3.25: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ hai chiều với cấu hình  $C_3$  ứng với 11 điểm pha được chọn trên Hình. 3.24. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1, t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Hướng quan sát ở đây là mũi tên xanh lục trên Hình. 2.1b. Đường nét đứt biểu thị mức Fermi.



Hình 3.26: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_5$  và biên armchair ứng với 11 điểm pha được chọn trên Hình. 3.24. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ . Đối với 3 điểm  $\eta_5$ ,  $\eta_6$  và  $\eta_9$ , chúng tôi phóng to cấu trúc vùng năng lượng bên trong các miền hình vuông nét đứt trên Hình. 3.27 để giúp đánh giá chính xác các trạng thái biên.



Hình 3.27: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_5$  và biên armchair tại 3 điểm pha  $\eta_5$ ,  $\eta_6$  và  $\eta_9$  trong các miền nét đứt đánh dấu trên Hình. 3.26. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ .



Hình 3.28: Cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều (dải nano) với cấu hình  $C_5$  và biên zigzag ứng với 11 điểm pha được chọn trên Hình. 3.24. Tham số chung ở đây là  $t_2 = 0, 1$ ,  $t_{12} = 0, 7t_0/t_{\perp}$  và  $M_0 = 0$ .

Hà Nội, ngày 10 tháng 10 năm 2023

Số: 163 /QĐ-HVKHCN

**QUYẾT ĐỊNH**  
**Về việc thành lập Hội đồng đánh giá luận văn thạc sĩ**

**GIÁM ĐỐC**  
**HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ**

Căn cứ Quyết định số 303/QĐ-VHL ngày 01/3/2023 của Chủ tịch Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam về việc ban hành Quy chế Tổ chức và hoạt động của Học viện Khoa học và Công nghệ;

Căn cứ Thông tư số 15/2014/TT-BGDĐT ngày 15/5/2014 của Bộ trưởng Bộ Giáo dục và Đào tạo ban hành Quy chế đào tạo trình độ thạc sĩ;

Căn cứ Quyết định số 775/QĐ-HVKHCN ngày 21/11/2016 của Giám đốc Học viện Khoa học và Công nghệ ban hành Quy chế đào tạo trình độ thạc sĩ;

Căn cứ Quyết định số 1488/QĐ-HVKHCN ngày 01/11/2021 của Giám đốc Học viện Khoa học và Công nghệ về việc công nhận học viên cao học trúng tuyển đợt 2 năm 2021;

Căn cứ Quyết định số 121/QĐ-HVKHCN ngày 03/3/2023 của Giám đốc Học viện Khoa học và Công nghệ về việc công nhận đề tài và cử người hướng dẫn luận văn thạc sĩ;

Xét đề nghị của Trưởng khoa Vật lý, Trưởng phòng Đào tạo.

**QUYẾT ĐỊNH:**

**Điều 1.** Thành lập Hội đồng đánh giá luận văn thạc sĩ cho học viên Lâm Hữu Minh với đề tài: “**Các pha kim loại, điện môi topo trong hệ hai mạng lục giác xếp lớp**”

Chuyên ngành: Vật lý chất rắn,

Mã số: 8 44 01 04

Danh sách thành viên Hội đồng đánh giá luận văn kèm theo Quyết định này.

**Điều 2.** Hội đồng có trách nhiệm đánh giá luận văn thạc sĩ theo đúng quy chế hiện hành của Bộ Giáo dục và Đào tạo, Học viện Khoa học và Công nghệ. Quyết định này có hiệu lực trong thời hạn tối đa 60 ngày làm việc kể từ ngày ký.

Hội đồng tự giải thể sau khi hoàn thành nhiệm vụ.

**Điều 3.** Trưởng phòng Tổ chức – Hành chính và Truyền thông, Trưởng phòng Đào tạo, Trưởng phòng Kế toán, Trưởng khoa Vật lý, các thành viên có tên trong danh sách Hội đồng và học viên cao học có tên tại Điều 1 chịu trách nhiệm thi hành Quyết định này./.

**Nơi nhận:**

- Như Điều 3;
- Lưu hồ sơ học viên;
- Lưu: VT, ĐT, HK.12.



**GIÁM ĐỐC**

GS.TS. Vũ Đình Lãm



## ĐANH SÁCH HỘI ĐỒNG ĐÁNH GIÁ LUẬN VĂN THẠC SĨ

(Kèm theo Quyết định số 163/QĐ-HVKHCN ngày 10/10/2023 của Giám đốc Học viện Khoa học và Công nghệ)

Chợ luận văn của học viên: Lâm Hữu Minh

Tên đề tài: **"Các pha kim loại, điện môi topo trong hệ hai mạng lục giác xếp lớp"**

Chuyên ngành: Vật lý chất rắn

Mã số: 8 44 01 04

Người hướng dẫn: PGS.TS. Đỗ Văn Nam, Trường Đại học Phenikaa,  
Bộ Giáo dục và Đào tạo

TT	Họ và tên, học hàm, học vị	Chuyên ngành	Cơ quan công tác	Trách nhiệm trong Hội đồng
1.	PGS.TS. Trần Minh Tiến	Vật lý lý thuyết và vật lý toán	Viện Vật lý, Viện Hàn lâm KHCNVN	Chủ tịch
2.	PGS.TS. Lê Đức Ánh	Vật lý lý thuyết và vật lý toán	Trường ĐH Sư phạm Hà Nội I, Bộ Giáo dục và Đào tạo	Phản biện 1
3.	PGS.TS. Nguyễn Hồng Quang	Vật lý lý thuyết và vật lý toán	Viện Vật lý, Viện Hàn lâm KHCNVN	Phản biện 2
4.	TS. Đỗ Thị Nga	Vật lý lý thuyết và vật lý toán	Viện Vật lý, Viện Hàn lâm KHCNVN	Ủy viên- Thư ký
5.	TS. Nguyễn Văn Duy	Vật lý lý thuyết và vật lý toán	Trường Đại học Phenikaa, Bộ Giáo dục và Đào tạo	Ủy viên

Hội đồng gồm 05 thành viên././ *ĐV*

Hà Nội, ngày 19 tháng 10 năm 2023

## BIÊN BẢN HỌP HỘI ĐỒNG ĐÁNH GIÁ LUẬN VĂN THẠC SĨ

Thực hiện Quyết định số: 1163/QĐ-HVKHCN ngày 10/10/2023 của Giám đốc Học viện Khoa học và Công nghệ về việc thành lập Hội đồng đánh giá luận văn thạc sĩ của học viên Lâm Hữu Minh.

Tên đề tài: "**Các pha kim loại, điện môi topo trong hệ hai mạng lục giác xếp lớp**"

Ngành/Chuyên ngành: Vật lý chất rắn

Mã số: 8 44 01 04

Hôm nay, ngày 19/10/2023 Hội đồng đã họp tại P.1705 - Học viện Khoa học và Công nghệ, Viện Hàn lâm KHCNVN vào lúc 8h, Hội đồng gồm 05 thành viên:

TT	Họ và tên	Chức danh
1.	PGS.TS. Trần Minh Tiến	Chủ tịch Hội đồng
2.	TS. Đỗ Thị Nga	Thư ký Hội đồng
3.	PGS.TS. Lê Đức Ánh	Phản biện 1
4.	PGS.TS. Nguyễn Hồng Quang	Phản biện 2
5.	TS. Nguyễn Văn Duy	Ủy viên Hội đồng

Thành viên vắng mặt: 0 (Phản biện hoặc ủy viên, đã có bản nhận xét đồng ý cho phép học viên được bảo vệ trước Hội đồng đánh giá luận văn thạc sĩ)

### NỘI DUNG LÀM VIỆC

- Đại diện cơ sở đào tạo đọc quyết định thành lập Hội đồng đánh giá luận văn
- Chủ tịch Hội đồng, điều khiển phiên họp
- Thư ký HĐ, đọc lí lịch khoa học và bảng điểm của học viên
- Học viên trình bày luận văn trước Hội đồng
- Phản biện 1 (PGS. TS. Lê Đức Ánh), đọc bản nhận xét luận văn, đặt câu hỏi và học viên trả lời

**Câu hỏi 1:** Giải thích sự khác nhau giữa 2 điểm đại diện  $\lambda_3$  và  $\lambda_5$  trên Hình 2.5?

**Học viên trả lời:**

Hai điểm này có hai sự khác biệt, thứ nhất là ứng với hai giá trị ngược dấu nhau của pha  $\phi$ , thứ hai là thuộc hai miền có số Chern ngược dấu ( $\pm 1$ ). Những khác biệt này thể hiện bởi sự hoán đổi đặc trưng của 2 valley cho nhau trên cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối ứng với 2 điểm tham số này, và sự ngược nhau trong chiều dẫn của các trạng thái biên của các dải nano tương ứng.

**Câu hỏi 2:** Chỉ ra các tính chất topo có thể đánh giá được nếu chỉ quan sát các trạng thái biên mà không tính số Chern?

**Học viên trả lời:**

Số cặp trạng thái biên và chiều dẫn điện của chúng trên cấu trúc vùng năng lượng của dải nano có thể giúp đánh giá định tính tính chất topo bởi vì số Chern của hệ khối bằng với số cặp trạng thái biên không suy biến, trong đó mỗi cặp có tính chiral. Tuy nhiên, các hệ khối với số Chern bằng 0 vẫn có thể cho ra các cặp trạng thái biên như vậy trên cấu trúc vùng năng lượng của dải nano tương ứng, nhưng không có tính bền vững của các trạng thái biên topo thực sự. Việc chỉ quan sát các trạng thái biên chưa đủ để xác nhận topo của hệ, mà cần kết hợp với tính toán số Chern.

**Câu hỏi 3:** Giải thích tính Hermit của Hamiltonian của mô hình Haldane.

**Học viên trả lời:**

Hamiltonian của mô hình Haldane vẫn có tính Hermit mặc dù các tham số nhảy tới lân cận gần thứ hai là tham số nhảy phức là do cách định nghĩa dấu của pha phức ngược nhau trên hai phân mạng A và B.

6. Phản biện 2 (PGS.TS. Nguyễn Hồng Quang), đọc bản nhận xét luận văn, đặt câu hỏi và học viên trả lời

**Câu hỏi 1:** Giải thích cơ chế vật lý đằng sau số Chern bằng  $\pm 3$  tính được và liệu các miền tham số ứng với số Chern này có thể được bỏ qua như một mức độ xấp xỉ nhỏ hay không?

**Học viên trả lời:**

Số Chern tổng cộng bằng  $\pm 3$  chỉ thu được đối với cấu hình  $C_3$  (xếp AB). Đối với cấu hình  $C_3$ , khi xét thêm các quá trình nhảy hai lớp lệch (bên cạnh nhảy vuông góc), hiệu ứng ‘trigonal warping’ xảy ra khiến cho tại mỗi valley mật năng lượng của dải VB2 bị tách ra thêm 3 điểm satellite-Dirac, do đó cho phép số Chern bằng  $\pm 3$  có thể xuất hiện. Khi không có các phân tử nhảy lệch (chỉ có nhảy vuông góc), nghiên cứu đã cho thấy các giá trị số Chern  $|C| \leq 2$ , như là kết quả của việc xếp chồng hai lớp. Hiệu ứng ‘trigonal warping’ không xảy ra đối với các cấu hình còn lại và cả cấu hình  $C_3$  khi vắng mặt các phân tử nhảy lệch. Như vậy, số Chern  $\pm 3$  liên quan đến số điểm satellite-Dirac và do đó đến mức độ xấp xỉ trong các quá trình nhảy hai lớp. Các miền số Chern này khá nhỏ, do đó có thể được bỏ qua, khi cường độ nhảy hai lớp là nhỏ.

**Câu hỏi 2:** Giải thích lý do chọn giá trị  $t_2 = 0,1|t_0|$  trong toàn bộ luận văn?

**Học viên trả lời:**



Trong nghiên cứu, có nhiều giá trị khác của  $t_2$  đã được khảo sát (chẳng hạn  $t_2 = 0,3; 0,5$  eV) để lựa chọn ra giá trị giúp thể hiện tốt nhất sự thay đổi của các đặc trưng trên giản đồ pha topo cũng như trên cấu trúc vùng năng lượng khi giá trị của các tham số được khảo sát khác thay đổi. Do đó  $t_2 = 0,1|t_0|$  là giá trị thể hiện tốt nhất việc trình bày kết quả. Ngoài ra để tập trung vào mục đích khảo sát ảnh hưởng của coupling giữa hai lớp, các giá trị khác nhau của  $t_2$  không được đưa vào.

**Câu hỏi 3:** Chỉ ra công cụ Matlab có được dùng để thực hiện những tính toán khác và vẽ hình bên cạnh chức năng chéo hóa Hamiltonian

**Học viên trả lời:**

Phần mềm Matlab được sử dụng để thực hiện mọi tính toán và trình bày số liệu, hình vẽ biểu diễn kết quả thu được trong luận văn.

7. Các thành viên HĐ và những người tham dự nêu câu hỏi

- Câu hỏi của TS. Nguyễn Văn Duy (Ủy viên Hội đồng):

**Câu hỏi:** Chỉ ra các tính chất điện tử liên quan đến các giá trị số Chern khác nhau như 0, 1, 2, v.v.

**Học viên trả lời:**

Giá trị của số Chern tỷ lệ với độ dẫn Hall của vật liệu, và được thể hiện bởi số cặp trạng thái biên topo không suy biến trên cấu trúc vùng năng lượng của hệ có biên, tức dải nano trong luận văn. Hai trạng thái biên trong một cặp có tính chiral, tức là dẫn ngược chiều nhau trên hai biên. Ngoài ra chiều dẫn của chúng đảo cho nhau nếu số Chern đổi dấu. Trong thực nghiệm, khi hệ khối có vùng cấm, các cặp trạng thái biên của dải nano tương ứng sẽ cắt qua miền năng lượng ứng với vùng cấm của hệ khối, khi đó có thể đo được độ dẫn và hướng truyền của chúng bằng thí nghiệm đo độ dẫn điện.

- Câu hỏi của TS. Đỗ Thị Nga (Thư ký Hội đồng)

**Câu hỏi 1:** Chỉ ra nhiệt độ tại đó số Chern đã được tính?

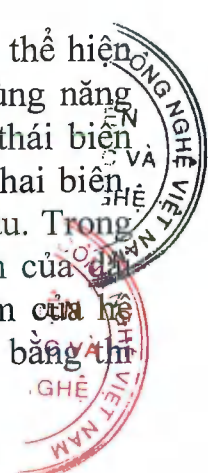
**Học viên trả lời:**

Các tính toán trên các cấu hình hệ đã chọn được thực hiện tại nhiệt độ 0K.

**Câu hỏi 2:** Chỉ ra liệu các tính toán đã thực hiện có bị ảnh hưởng của hiệu ứng kích thước hữu hạn hay không?

**Học viên trả lời:**

Các tính toán đã thực hiện xuất phát từ việc chéo hóa Hamiltonian Bloch trong không gian  $\mathbf{k}$ . Đối với cả hệ khối và dải nano, ô cơ sở đều được xác định, do đó Hamiltonian thu được là tuần hoàn theo hai chiều đối với hệ khối và theo một chiều đối với dải nano, vì vậy không cần có bất kỳ xấp xỉ nào liên quan đến kích thước của mẫu trong việc xây dựng và chéo hóa Hamiltonian. Nói cách khác, các tính toán trong luận văn không bị ảnh hưởng bởi hiệu ứng kích thước hữu hạn.



8. Hội đồng họp kín và cho điểm

- Hội đồng bầu ban kiểm phiếu gồm 3 thành viên:

Trưởng ban: PGS.TS. Nguyễn Hồng Quang

Ủy viên: PGS. TS. Lê Đức Ánh

Ủy viên: TS. Đỗ Thị Nga

- Kết quả kiểm phiếu như sau:

Số phiếu phát ra: 05

Số phiếu thu về: 05

Tổng số điểm: 45,0

Điểm trung bình: 9,0

Điểm thưởng công trình công bố: 0

Tổng điểm đánh giá luận văn và thưởng công trình công bố: 9,0

- Kết luận của Hội đồng:

+ Luận văn: đạt yêu cầu

+ Luận văn không trùng lặp về nội dung và tên đề tài với các công bố trước đó

9. Chủ tịch Hội đồng, công bố kết quả, yêu cầu học viên chỉnh sửa luận văn với các nội dung sau:

Luận văn hoàn toàn đáp ứng các yêu cầu đối với luận văn Thạc sĩ. Học viên cần chỉnh sửa một số lỗi in ấn theo nhận xét của các thành viên trong Hội đồng.

Buổi họp đã kết thúc vào 10 giờ 30 phút ngày 19/10/2023

Hà Nội, ngày 19 tháng 10 năm 2023

THƯ KÝ HỘI ĐỒNG



TS. Đỗ Thị Nga



CHỦ TỊCH HỘI ĐỒNG

SAO Y BẢN CHÍNH

Hà Nội, ngày 19 tháng 10 năm 2023

TL. GIÁM ĐỐC

TRƯỞNG PHÒNG TỔ CHỨC-HÀNH CHÍNH

VÀ TRUYỀN THÔNG

Đỗ Thị Lâm Thanh

Trần Minh Tuấn

XÁC NHẬN CỦA CƠ SỞ ĐÀO TẠO

KT. GIÁM ĐỐC

PHÓ GIÁM ĐỐC



Nguyễn Thị Trung

**BẢN NHẬN XÉT PHẢN BIỆN LUẬN VĂN THẠC SĨ**

Họ và tên người phản biện: Lê Đức Ánh

Học hàm, học vị: PGS. TS

Chuyên ngành: VLLT&VLT

Cơ quan công tác: Trường ĐHSP Hà Nội

Họ và tên học viên: Lâm Hữu Minh

Tên đề tài: Các pha kim loại, điện môi topo trong hệ hai mạng lục giác xếp lớp

Chuyên ngành: Vật lý chất rắn

Mã số: 8440104

**NỘI DUNG NHẬN XÉT**

1. Tính cấp thiết, tính thời sự, ý nghĩa khoa học và thực tiễn của đề tài luận văn:

Vật lý của hệ các điện tử trên mạng lục giác và các cấu trúc tạo thành từ các mạng lục giác là một chủ đề nóng bỏng, có tính thời sự, khoa học và thực tiễn cao, thu hút được nhiều nghiên cứu trong và ngoài nước. Các kết quả nghiên cứu bước đầu cho thấy tiềm năng ứng dụng to lớn của lớp vật liệu này, hứa hẹn sẽ thay thế thế hệ công nghệ bán dẫn đã dẫn đi đến cực hạn. Tuy nhiên có nhiều nghiên cứu về lớp vật liệu này nhưng còn nhiều vấn đề cần nghiên cứu còn bỏ ngỏ, trong đó có bài toán mạng hai lớp với hai bậc tự do với tịnh tiến và xoay hứa hẹn sẽ có nhiều tính chất mới lạ. Ngoài ra, trong vật lý các chất cô đặc, các pha điện môi tô pô và các chuyển pha của chúng là các bài toán cũng được quan tâm nghiên cứu nhiều và là một trong những xu thế khá lớn trong nghiên cứu vật lý. Do đó đề tài luận văn nghiên cứu “Các pha kim loại, điện môi tô pô trong hệ hai mạng lục giác xếp lớp” là bài toán có tính thời sự, khoa học và thực tiễn,

2. Sự không trùng lặp của đề tài nghiên cứu so với các công trình khoa học, luận văn đã công bố ở trong và ngoài nước; tính trung thực, rõ ràng và đầy đủ trong trích dẫn tài liệu tham khảo:

Theo hiểu biết của người viết nhận xét, luận văn không trùng lặp so với đề án, luận văn, luận án hay công trình khoa học đã công bố trong và ngoài nước. Việc trích dẫn tài liệu tham khảo là trung thực, rõ ràng, đầy đủ.

3. Sự phù hợp giữa tên đề tài với nội dung nghiên cứu cũng như với chuyên ngành và mã số đào tạo:

Tên của luận văn phản ánh đúng nội dung nghiên cứu. Nội dung của luận văn phù hợp với chuyên ngành và mã số chuyên ngành.

4. Độ tin cậy và tính hiện đại của phương pháp nghiên cứu đã sử dụng để hoàn thành luận văn:

Luận văn sử dụng phương pháp tính toán giải tích kết hợp với tính toán bằng số để phân tích cấu trúc vùng năng lượng cho các cấu hình khác nhau từ đó tính số Chern để nhận diện các pha dựa trên nguyên lý tương ứng. Đây là phương pháp nghiên cứu thông thường trong vật lý lý thuyết và vật lý toán có độ tin cậy cao.

5. Kết quả nghiên cứu của luận văn:

Tác giả đã nghiên cứu khả năng hình thành và sự tồn tại của các pha kim loại, diện môi khác nhau trong hệ mạng lục giác hai lớp trượt sử dụng mô hình tight-binding tới lân cận gần thứ hai trong mô hình Haldance cho các hệ khối hai chiều và các dải nano một chiều để tính toán vùng năng lượng cũng như véc tơ trạng thái Bloch tương ứng.

Tác giả đã tính được số Chern, phân tích cấu trúc vùng năng lượng của các cấu hình khác nhau từ đó tìm được điều kiện tồn tại và xuất hiện của các pha tầm thường về mặt tô pô và các pha tô pô. Tác giả cũng đã thảo luận các quá trình chuyển pha, tính ổn định và bất ổn định, điều kiện thiết lập của các pha kim loại, diện môi tô pô.

Các kết quả của luận văn khá phong phú, đa dạng, có ý nghĩa khoa học và thực tiễn, đóng góp vào việc nghiên cứu, phát triển các thiết bị và linh kiện mới.

6. Những hạn chế, thiếu sót của luận văn về nội dung và hình thức:

Cách tiếp cận của tác giả dựa trên gần đúng tight-binding ở lân cận gần nhì là một gần đúng bước đầu, sau đó có thể phát triển để hoàn thiện mô hình để mô tả tốt hơn hệ vật liệu thực. Tuy nhiên đối với một luận văn thạc sĩ thì đây là một cách tiếp cận phù hợp.

Một số thuật ngữ dùng trong luận văn chưa được chuẩn hóa và còn có một số lỗi in ấn.

7. Nếu tác giả chưa viết bài báo khoa học thì nội dung của luận văn có thể được viết thành các bài báo để gửi đăng trên tạp chí khoa học, sách chuyên ngành hoặc tuyển tập công trình hội nghị khoa học cấp quốc gia, quốc tế hay không?

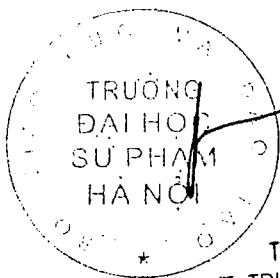
Nếu bổ sung thêm một kết quả và hoàn thiện thêm, luận văn hoàn toàn có thể công bố dưới dạng bài báo quốc gia, quốc tế.

8. Kết luận chung (khẳng định mức độ đáp ứng các yêu cầu đối với một luận văn Thạc sĩ; luận văn có thể đưa ra bảo vệ để nhận học vị Thạc sĩ được hay không?):

Luận văn đáp ứng tốt các yêu cầu đối với một luận văn Thạc sĩ; luận văn có thể đưa ra bảo vệ để tác giả nhận học vị Thạc sĩ.

....., ngày ..... tháng 10 năm 2023

**Xác nhận của cơ quan công tác**



TL. HIỆU TRƯỞNG  
KT. TRƯỞNG PHÒNG HCĐN  
PHÓ TRƯỞNG PHÒNG HCĐN  
TS. Hồ Công Lưu

**Người phản biện**

(Ký, ghi rõ họ tên)

*Le Du An*

Lưu ý:

- Nhận xét được làm thành 02 bản, có chữ ký của người nhận xét và xác nhận của cơ quan công tác (nếu đang công tác) và gửi về phòng Đào tạo 02 ngày trước buổi bảo vệ.
- Địa chỉ liên hệ: phòng Đào tạo, Học viện Khoa học và Công nghệ, Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam. 18 Hoàng Quốc Việt, Cầu Giấy, Hà Nội. ĐT: 024.33899977

## BẢN NHẬN XÉT PHẢN BIỆN LUẬN VĂN THẠC SĨ

Họ và tên người phản biện: Nguyễn Hồng Quang

Học hàm, học vị: PGS.TS

Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết

Cơ quan công tác: Viện Vật lý, Viện Hàn lâm KH&CN Việt Nam

Họ và tên học viên: Lâm Hữu Minh

Tên đề tài: Các pha kim loại, điện môi topo trong hệ hai mạng lục giác xếp lớp.

Chuyên ngành: Vật lý chất rắn

Mã số: 8440104

### NỘI DUNG NHẬN XÉT

1. Tính cấp thiết, tính thời sự, ý nghĩa khoa học và thực tiễn của đề tài luận văn:

Luận văn nghiên cứu hệ mạng lục giác hai lớp xếp chồng – một đối tượng đang được quan tâm nhiều trong thời gian gần đây, kể từ khi các phát hiện về graphene được trao giải Nobel Vật lý, nhằm mục đích tìm hiểu về các pha có thể tồn tại trong chúng trong sự phụ thuộc vào các tham số của hệ. Đây là đề tài có tính ý nghĩa khoa học và thực tế cao vì không những nó đóng góp vào hiểu biết lý thuyết chung của hệ được nghiên cứu, nhất là tính chất topo của hệ mà còn góp phần thúc đẩy những ứng dụng thực tế của các loại vật liệu thuộc hệ này, nhất là trong lĩnh vực phát triển các linh kiện và thiết bị điện tử thế hệ mới.

2. Sự không trùng lặp của đề tài nghiên cứu so với các công trình khoa học, luận văn đã công bố ở trong và ngoài nước; tính trung thực, rõ ràng và đầy đủ trong trích dẫn tài liệu tham khảo:

Theo hiểu biết của tôi thì đề tài nghiên cứu trong luận văn không trùng lặp với các công trình hay luận văn đã công bố trong và ngoài nước trước đó. Tài liệu trích dẫn tập trung vào những vấn đề đã nêu trong luận văn, ngắn gọn nhưng đầy đủ.

3. Sự phù hợp giữa tên đề tài với nội dung nghiên cứu cũng như với chuyên ngành và mã số đào tạo:

Luận văn có tên và nội dung nghiên cứu phù hợp hơn với chuyên ngành Vật lý lý thuyết và Tính toán vì nội dung nghiên cứu chủ yếu là tính toán lý thuyết và tính toán số dựa trên các phương pháp tính mô phỏng số. Tuy nhiên luận văn đang ghi chuyên ngành Vật lý chất rắn có thể tạm chấp nhận ở một nghĩa nào đó, ví dụ theo nghĩa khảo sát tính chất của hệ bằng cách làm thí nghiệm mô phỏng trên máy tính.

4. Độ tin cậy và tính hiện đại của phương pháp nghiên cứu đã sử dụng để hoàn thành luận văn:

Các phương pháp nghiên cứu trong luận văn bao gồm phương pháp giải tích với các mô hình lý thuyết như mô hình Haldane, phương pháp tính số như tight-binding,

chéo hóa số ma trận *có độ tin cậy cao, được sử dụng rộng rãi.*

5. Kết quả nghiên cứu của luận văn:

Đã tính và thu được cấu trúc vùng năng lượng của các hệ mạng lục giác hai lớp trượt cho các hệ khối hai chiều và các dải nano một chiều bằng phương pháp tight-binding tới lân cận gần thứ hai trong mô hình Haldane, nhằm nghiên cứu khả năng hình thành và tồn tại của các pha kim loại và điện môi khác nhau trong các hệ đề.

Trên cơ sở cấu trúc vùng năng lượng thu được, đã tính giá trị của bất biến topo đặc trưng, số Chern....

Các kết quả thu được đã cho thấy các pha điện tử khác nhau về mặt topo xuất hiện khi thay đổi các tham số hình học và tham số động lực của hệ vật liệu, được trình bày dưới dạng giản đồ pha. Cụ thể, tồn tại các pha tầm thường về mặt topo với số Chern bằng 0 và các pha không tầm thường với số Chern thay đổi từ -3 đến +3. Sự chuyển pha giữa hai pha topo khác nhau là quá trình đóng và mở lại các vùng cấm năng lượng có liên quan.

Các quá trình chuyển pha này đã được phân loại dựa trên cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối. Bên cạnh đó, giá trị bất biến topo đặc trưng của hệ hai chiều cũng được phản ánh về mặt năng lượng bởi sự xuất hiện của các trạng thái biên bền vững nhất định trong hệ một chiều tương ứng, bên cạnh các dải khối được tạo thành do hiệu ứng lượng tử hóa

6. Những hạn chế, thiếu sót của luận văn về nội dung và hình thức:

Chưa phát hiện thấy những sai sót đáng kể nào. Nên chăng bổ sung thuật toán của chương trình tính số mô phỏng bằng sơ đồ khối hoặc bằng lời vì đây là một trong những nội dung công việc quan trọng của luận văn.

7. Nếu tác giả chưa viết bài báo khoa học thì nội dung của luận văn có thể được viết thành các bài báo để gửi đăng trên tạp chí khoa học, sách chuyên ngành hoặc tuyển tập công trình hội nghị khoa học cấp quốc gia, quốc tế hay không?

Có thể hoàn thiện để công bố trên tạp chí khoa học chuyên ngành, hoặc tuyển tập công trình khoa học của các hội nghị quốc gia hoặc quốc tế.

8. Kết luận chung (khẳng định mức độ đáp ứng các yêu cầu đối với một luận văn Thạc sĩ; luận văn có thể đưa ra bảo vệ để nhận học vị Thạc sĩ được hay không?):

Luận văn đáp ứng được cả về hình thức và nội dung đối với một luận văn Thạc sĩ. Học viên xứng đáng nhận được học vị Thạc sĩ.

Hà Nội, ngày 18 tháng 10 năm 2023

**Xác nhận của cơ quan công tác**

TRƯỞNG PHÒNG QUẢN LÝ TỔNG HỢP



*Võ Thị Liên Yên*

**Người phản biện**  
(Ký, ghi rõ họ tên)

**Nguyễn Hồng Quang**

**BẢN GIẢI TRÌNH CHỈNH SỬA LUẬN VĂN  
THEO KẾT LUẬN CỦA HỘI ĐỒNG ĐÁNH GIÁ LUẬN VĂN THẠC SĨ**

Họ tên học viên: Lâm Hữu Minh

Lớp: Cao học khóa 2021B

Tên đề tài luận văn: Các pha kim loại, điện môi topo trong hệ hai mạng lục giác xếp lớp

Chuyên ngành: Vật lý chất rắn

Mã số: 8440104

Người hướng dẫn khoa học: PGS. TS. Đỗ Văn Nam

Ngày bảo vệ luận văn: 19/10/2023

Căn cứ biên bản họp hội đồng đánh giá luận văn thạc sĩ, học viên đã chỉnh sửa luận văn như sau:

STT	Nội dung đề nghị bổ sung, chỉnh sửa	Nội dung đã bổ sung, chỉnh sửa
1	Đổi tên các chương, mục sau: 1. Mục “2.4.1. Hệ hai chiều đơn lớp” 2. Mục “2.4.2. Hệ hai chiều hai lớp” 3. Mục “2.6.1. Phương pháp tính số” 4. Mục “2.6.2. Kế hoạch khảo sát” 5. Chương “Kết luận và kiến nghị”	Tên đã đổi tương ứng: 1. Mục “2.4.1. Hệ khối đơn lớp” 2. Mục “2.4.2. Hệ khối hai lớp” 3. Mục “2.6.1. Tham số khảo sát” 4. Mục “2.6.2. Quy trình tính số và khảo sát” 5. Chương “Kết luận”
2	Bỏ những thuật ngữ tiếng Anh được chú thích in nghiêng trong ngoặc sau đây: 1. “Condensed matter physics” (trang 14) 2. “dimensionality” (trang 14) 3. “nearest neighbor” (trang 15) 4. “semi-metal” (trang 15, 42) 5. “dispersion curve” (trang 15) 6. “chirality” (trang 15) 7. “QED” (trang 15)	Đã bỏ những thuật ngữ tiếng Anh được liệt kê ở bên.



8. "mesoscopic" (trang 15)
9. "edge" (trang 15)
10. "edge state" (trang 15, 22)
11. "conductance" (trang 15)
12. "vertical axis" (trang 16)
13. "coupling" (trang 16)
14. "hopping hay tunneling"  
(trang 16)
15. "hopping parameter" (trang 16)
16. "corner state" (trang 17)
17. "quantum dot" (trang 17)
18. "semi-Dirac limit" (trang 18)
19. "flat band" (trang 18)
20. "Peierls substitution" (trang 19)
21. "bulk" (trang 20, 33)
22. "impurity" (trang 20)
23. "waveguide" (trang 20)
24. "photonic topological insulator" (trang 21)
25. "interlayer hopping" (trang 22)
26. "bulk-edge correspondence"  
(trang 22)
27. "trivial" (trang 22)
28. "nontrivial" (trang 22)
29. "hopping" (trang 24)
30. "hopping strength" (trang 24)
31. "onsite energy" (trang 24)
32. "in-plane hopping" (trang 25)
33. "vertical hopping" (trang 25)
34. "reciprocal space" (trang 25)
35. "intralayer hopping" (trang 29)
36. "interlayer hopping" (trang 29)
37. "skew hopping" (trang 31)
38. "quantum confinement"  
(trang 33)
39. "bulk band" (trang 33)
40. "principal axis" (trang 38)
41. "inversion symmetry" (trang 38)
42. "sublattice symmetry" (trang



	<p>38)  43. “time-reversal symmetry” (trang 39)  44. “particle-hole symmetry” (trang 40)  45. “trivial topological” (trang 42)  46. “nontrivial topological” (trang 42)  47. “insulating” (trang 48)  48. “adiabatic process” (trang 48)  49. “adiabatic theorem” (trang 48)  50. “adiabatically equivalent” (trang 48)  51. “phase factor” (trang 49)  52. “dynamical phase” (trang 49)  53. “local gauge transformation” (trang 49)  54. “Berry connection” (trang 50)  55. “Berry flux” (trang 51)  56. “torus” (trang 52)  57. “vortex” (trang 53)  58. “Berry curvature” (trang 53)  59. “topological invariant” (trang 54)  60. “adiabatic invariant” (trang 54)  61. “thermodynamic limit” (trang 54)  62. “band crossing” (trang 56)</p>	
3	<p>Sửa các thuật ngữ sau trong toàn bộ luận văn:  1. “quá trình nhảy”  2. “nhảy một lớp”  3. “nhảy dọc”  4. “nhảy lệch”  5. “điểm tham số”  6. “miền tham số”</p>	<p>Các thuật ngữ đã được sửa tương ứng thành:  1. “quá trình tunneling”  2. “in-plane hopping”  3. “vertical hopping”  4. “skew hopping”  5. “điểm pha”  6. “miền pha”</p>
4	<p>Sửa các nội dung sau:  1. “Kết luận và kiến nghị: đưa ra kết luận chung và kiến nghị (nếu có)” (trang 13)  2. “Một công cụ có thể thay thế cho số Chern trong trường hợp</p>	<p>Các nội dung đã sửa tương ứng:  1. “Kết luận: đưa ra kết luận chung” (trang 13)  2. “Một công cụ có thể thay thế cho số Chern trong những trường hợp [...] giản đồ pha số Chern tổng cộng</p>

này [...] cũng như tính chất topo của vật liệu nói chung.” (trang 56)

3. “sao cho giá trị của  $s_{vj}$  là ngược nhau trên hai phân mạng đối với cùng một giá trị  $R_j$  (Hình. 2.3).” (trang 41)

4. “Tính toán này được thực hiện cho cả hệ hai chiều vô hạn (Hình. 2.5), tức hệ khối, và hệ một chiều, tức dải nano, có hình dạng biên là armchair (Hình. 2.6) hoặc zigzag (Hình. 2.7).” (trang 44)

5. “Cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối cho thấy rõ 3 pha điện môi nói trên, có số Chern lần lượt là  $C = 0$  ( $\lambda_1$ ),  $C = +1$  ( $\lambda_3$  và  $\lambda_4$ ) và  $C = -1$  ( $\lambda_5$ ). Khi giới hạn hệ khối bởi biên zigzag hoặc armchair, giá trị  $C = \pm 1$ ” (trang 44)

6. “Ngoài ra, điểm  $\lambda_5$  được chọn đối xứng với  $\lambda_3$  qua  $\phi = 0$  để chỉ ra rằng hai valley được hoán vị với nhau khi pha  $\phi$  đổi dấu.” (trang 46)

7. “Chúng tôi bắt đầu quá trình khảo sát tính chất topo của hệ SBH bằng cách tính toán các giản đồ pha topo cho 5 cấu hình trượt này.” (trang 58)

8. “Một công cụ có thể thay thế cho số Chern trong trường hợp [...] mô hình Haldane nói riêng cũng như tính chất topo của vật liệu nói chung.” (trang 56)

9. “do đó kết hợp cả hai kết quả này giúp chúng tôi đánh giá chính xác hơn và đầy đủ hơn tính chất topo của điện tử trong hệ vật liệu, bao gồm trong cả những miền tham số tại đó số Chern không được định nghĩa.” (trang 58-59)

10. “hình tam giác đều, cái được gọi là "trigonal warping" [...] số Chern tối đa có thể thu được được

của cả hai dải hóa trị.” (trang 58-59)

3. “sao cho giá trị của  $s_{vj}$  là ngược nhau trên hai phân mạng đối với cùng một giá trị  $R_j$  (Hình. 2.3). Cách quy ước dấu này đảm bảo tính hermitian của Hamiltonian của mô hình Haldane.” (trang 40)

4. “Kết quả tính cho hệ hai chiều vô hạn (hệ khối) được đưa ra trên Hình. 2.5, cho hệ một chiều (dải nano) được đưa ra trên Hình. 2.6 (biên armchair) và Hình. 2.7 (biên zigzag) với số đường zigzag hoặc armchair  $N_z = N_d = 70$ .” (trang 42)

5. “Cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối cho thấy sự hiện diện của pha điện môi hoặc bán kim loại, tuy nhiên đặc trưng topo của chúng chỉ có thể được phân biệt dựa vào cấu trúc vùng của hệ một chiều tương ứng. Khi giới hạn hệ khối bởi biên zigzag hoặc armchair, giá trị  $C = -1$  (điểm  $\lambda_5$ ) và  $C = +1$  (các điểm  $\lambda_3$  và  $\lambda_4$ )” (trang 44)

6. “Điểm  $\lambda_5$  được chọn đối xứng với  $\lambda_3$  qua  $\phi = 0$  để chỉ ra rằng đặc trưng năng lượng [...] các giá trị số Chern cao hơn ( $|C| \geq 2$ ) ngay trên hệ đơn lớp.” (trang 45)

7. “Bước đầu tiên của quá trình khảo sát tính chất topo của hệ SBH là tính toán các giản đồ pha topo cho 5 cấu hình trượt được chọn trong Hình. 2.9 như một phác thảo ban đầu về các pha topo khả dĩ có thể xuất hiện.” (trang 59)

8. “Một công cụ có thể thay thế cho số Chern trong những trường hợp [...] với sự hỗ trợ của tính toán cấu trúc vùng năng lượng.” (trang 58-59)

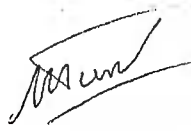
9. “do đó kết hợp cả hai kết quả này để kiểm tra sự thống nhất giữa chúng giúp chúng tôi đánh giá lại các pha topo của điện tử đã được

	<p>dự đoán bằng với số lớp vật liệu” (trang 63)</p> <p>11. “số Chern cao hơn trở nên trội hơn. Và ngoại trừ cấu hình <math>C_1</math>, các pha <math> C  = 2</math> luôn tồn tại mạnh mẽ trong các cấu hình còn lại nhờ coupling hai lớp.” (trang 64)</p> <p>12. “Đầu tiên, dựa vào cấu trúc vùng năng lượng của hệ khối có thể [...] trên cấu trúc vùng năng lượng của hệ một chiều tương ứng.” (trang 71)</p> <p>13. “Ngoài ra, để thuận tiện cho việc quan sát các dải khối tại các điểm đại diện” (trang 72)</p> <p>14. “Lưu ý rằng từ Hình. 3.18 có thể thấy rằng hai trạng thái biên định xứ [...] bị phân tách bởi một đoạn chuyển tiếp ở giữa” (trang 78)</p>	<p>phác thảo trước, bao gồm trong cả những miền pha tại đó số Chern không được định nghĩa, từ đó xác nhận pha vật lý của vật liệu.” (trang 59)</p> <p>10. “hình tam giác đều nằm xung quanh điểm <math>K</math>, hiệu ứng được gọi là "trigonal warping" [...] bằng với số lớp vật liệu, trong đó mỗi lớp có giá trị <math> C  \leq 1</math>” (trang 65)</p> <p>11. “số Chern cao hơn trở nên trội hơn, đặc biệt là các pha <math> C  = 2</math> (trừ trường hợp ngoại lệ cấu hình <math>C_1</math>.)” (trang 70)</p> <p>12. “Đánh giá cấu trúc vùng năng lượng là một công cụ hỗ trợ [...] cho từng dải năng lượng riêng biệt không còn hiệu lực.” (trang 71)</p> <p>13. “Thứ ba, tính chất topo của hệ khối hai chiều được phản ánh [...] Để thuận tiện cho việc quan sát các dải khối tại các điểm pha” (trang 72)</p> <p>14. “Sự khó quan sát của cặp trạng thái biên thứ ba này có thể là do các miền pha <math>C = \pm 3</math> [...] chúng bị phân tách bởi một đoạn chuyển tiếp” (trang 79)</p>
5	<p>Đổi vị trí các nội dung sau:</p> <p>1. “Để kiểm tra mức độ định xứ của trạng thái điện tử [...] lấy trung bình giá trị <math>X_\psi</math> của từng lớp riêng biệt.” (trang 36-38)</p> <p>2. “Các Hamiltonian tổng quát dễ dàng được chéo hóa bằng phương pháp số. [...] mô hình Haldane nói riêng cũng như tính chất topo của vật liệu nói chung.” (trang 55-56)</p> <p>3. “Đối tượng nghiên cứu của luận văn là ảnh hưởng của coupling [...] Cấu hình trung gian <math>C_5</math>: <math>\tau = (0,0; 1,0)</math>.” (trang 57)</p>	<p>Vị trí được thay đổi:</p> <p>1. Chuyển nội dung này vào mục “2.6.2. Quy trình tính số và khảo sát”, trang 57-58.</p> <p>2. Chuyển nội dung này vào mục “2.6.2. Quy trình tính số và khảo sát”, trang 56-58.</p> <p>3. Chuyển nội dung này vào mục “2.6.1. Tham số khảo sát”, trang 54-55.</p>
6	<p>Chỉnh sửa tài liệu tham khảo</p>	<p>Đồng bộ định dạng của tất cả tài liệu tham khảo và bổ sung thêm 4 tài liệu tham khảo sau cho Hình 1.1:</p>

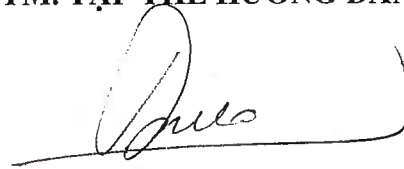
		<p>[1] A. Shuaibu et al., 2019, “First Principle Study of Structural, Elastic and Electronic Properties of Hexagonal Boron Nitride (hex-BN) Single Layer”, <i>American J. Cond. Matt. Phys.</i>, 9, 1, tr. 1–5.</p> <p>[2] C. Kamal, 2012, “Controlling Band Gap in Silicene Monolayer Using External Electric Field”, <i>arXiv</i>, URL: <a href="https://arxiv.org/abs/1202.2636">arxiv.org/abs/1202.2636</a>.</p> <p>[3] G. H. Ryu et al., 2012, “Atomic Resolution Imaging of Rotated Bilayer Graphene Sheets Using a Low kV Aberration-corrected Transmission Electron Microscope”, <i>Korean Journal of Microscopy</i>, 42, 4, tr. 218–222.</p> <p>[4] Ossila, 2023, “Molybdenum Disulfide (MoS<sub>2</sub>): Theory Applications”, <i>Ossila</i>, URL: <a href="https://ossila.com/pages/molybdenum-disulfide-mos2">ossila.com/pages/molybdenum-disulfide-mos2</a>.</p>
7	Chỉnh sửa các hình ảnh	Đã điều chỉnh vị trí các hình, từ Hình 2.2 đến Hình 3.6, sao cho phù hợp với nội dung chính của luận văn.

Hà Nội, ngày 25 tháng 12 năm 2023


CHỦ TỊCH HỘI ĐỒNG

  
Trần Minh Tiến

TM. TẬP THỂ HƯỚNG DẪN

  
Đỗ Văn Nam

HỌC VIÊN

  
Lâm Hữu Minh

XÁC NHẬN CỦA CƠ SỞ ĐÀO TẠO



  
Nguyễn Thị Trung