

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ



NGUYỄN THỊ HẢI YẾN

**CHUYỂN PHA MOTT VÀ ĐỊNH XỬ ANDERSON TRONG MỘT SỐ
HỆ TƯƠNG QUAN MẠNH VÀ MẤT TRẬT TỰ**

LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ

Hà Nội – 2024

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO

VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM

HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ



NGUYỄN THỊ HẢI YẾN

**CHUYỂN PHA MOTT VÀ ĐỊNH XỬ ANDERSON TRONG MỘT SỐ
HỆ TƯƠNG QUAN MẠNH VÀ MẤT TRẬT TỰ**

LUẬN ÁN TIẾN SĨ VẬT LÝ

**Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết và Vật lý toán
Mã số chuyên ngành: 9.44.01.03**

Người hướng dẫn khoa học: PGS. TS. Hoàng Anh Tuấn

Hà Nội - 2024

Lời cảm ơn

Đầu tiên, tôi xin gửi lời cảm ơn chân thành đến thầy Hoàng Anh Tuấn, thầy đã luôn nhiệt tình hướng dẫn và giúp đỡ tôi trong suốt thời gian từ những ngày tôi bắt đầu công việc nghiên cứu. Tôi đã được làm việc với thầy từ khi tôi học thạc sĩ tại Viện Vật lý năm 2013 cho tới nay và trong suốt thời gian làm việc chung tôi đã được thầy chỉ dẫn cho nhiều kiến thức, kỹ năng tính toán cũng như kỹ năng viết bài luận về vật lý.

Tiếp theo, tôi cũng muốn gửi lời cảm ơn sâu sắc tới thầy Lê Đức Ánh, thầy là người luôn sẵn sàng giúp đỡ, chia sẻ những kinh nghiệm cho tôi trong quá trình tính số bằng ngôn ngữ lập trình FORTRAN. Từ đó, tôi đã có nhiều kinh nghiệm quý báu trong lĩnh vực tôi nghiên cứu.

Tôi xin chân thành cảm ơn các thầy cô, đồng nghiệp tại trung tâm Vật lý lý thuyết, cán bộ Viện Vật lý và Học viện Khoa học và Công nghệ đã luôn tạo điều kiện thuận lợi cho tôi trong suốt thời gian làm nghiên cứu sinh. Đặc biệt, tôi đã nhận được sự hỗ trợ từ nguồn học bổng cho nghiên cứu sinh của học viện và được tham gia chương trình trao đổi sinh viên giữa học viện và đại học Osaka năm 2022, đây thực sự là một cơ hội tốt để tôi được học tập và tiếp cận nhiều kiến thức mới.

Cuối cùng, tôi xin gửi lời cảm ơn đến bố mẹ hai bên gia đình, chồng đã luôn ủng hộ, tạo điều kiện chăm sóc con nhỏ giúp tôi để tôi có thời gian học tập và nghiên cứu. Trong quá trình soạn thảo luận án sẽ còn những thiếu sót, tôi rất mong được góp ý của quý thầy cô và các bạn để luận án được hoàn thiện hơn. Mọi ý kiến thắc mắc có thể gửi về hòm thư yen.a3k44@gmail.com.

Hà Nội, ngày 14 tháng 7 năm 2023

Nghiên cứu sinh

Lời cam đoan

Tôi xin cam đoan những kết quả trình bày trong luận án là do bản thân tôi đã thực hiện trong thời gian làm nghiên cứu sinh. Cụ thể, Chương 1 là phần giới thiệu tổng quát các vấn đề nghiên cứu có liên quan đến luận án. Chương 2 và Chương 3, tôi sử dụng các kết quả nghiên cứu mà tôi đã thực hiện cùng thầy hướng dẫn PGS. TS. Hoàng Anh Tuấn và PGS. TS. Lê Đức Ánh. Cuối cùng, tôi xin khẳng định các kết quả có trong luận án “Chuyển pha Mott và định xứ Anderson trong một số hệ tương quan và mất trật tự” là kết quả mới, không trùng lặp với kết quả của các luận án và công trình đã có.

Nghiên cứu sinh

Mục lục

Lời cảm ơn	i
Lời cam đoan	ii
Danh sách hình vẽ	x
Danh mục các từ viết tắt	xi
MỞ ĐẦU	1
1 ĐIỆN MÔI MOTT VÀ ĐIỆN MÔI ANDERSON, LÝ THUYẾT MÔI TRƯỜNG ĐIỂN HÌNH VÀ MẠNG QUANG HỌC	10
1.1 Điện môi Mott và điện môi Anderson	11
1.1.1 Điện môi Mott	11
1.1.2 Điện môi Anderson	19
1.2 Lý thuyết môi trường điển hình	26
1.2.1 Lý thuyết trường trung bình động (DMFT)	26
1.2.2 Lý thuyết trường trung bình động (DMFT) - Lý thuyết môi trường điển hình (TMT)	31
1.3 Các nguyên tử cực lạnh trên mạng quang học	35
1.3.1 Mạng quang học trật tự	35
1.3.2 Mạng quang học mất trật tự	39
1.4 Kết luận	40
2 HỆ FERMION TƯƠNG TÁC VỚI MẮT TRẬT TỰ CÓ PHÂN BỐ GAUSS	42
2.1 Mô hình Anderson - Hubbard (AH)	43

2.1.1	Mô hình và phương pháp tính toán	44
2.1.2	Kết quả và thảo luận	52
2.2	Mô hình Anderson - Falicov - Kimball (AFK)	57
2.2.1	Mô hình và phương pháp tính toán	58
2.2.2	Kết quả và thảo luận	62
2.3	Kết luận	64
3	MÔ HÌNH AH BẤT ĐỐI XỨNG VÀ MÔ HÌNH AH CÓ TƯƠNG TÁC PHỤ THUỘC VÀO NÚT	66
3.1	Mô hình AH bất đối xứng (mất cân bằng khối lượng)	66
3.1.1	Mô hình và phương pháp tính toán	69
3.1.2	Kết quả và thảo luận	72
3.2	Mô hình AH có tương tác phụ thuộc vào nút	77
3.2.1	Mô hình và phương pháp tính toán	78
3.2.2	Kết quả và thảo luận	82
3.3	Kết luận	88
	KẾT LUẬN CHUNG	91
	DANH MỤC CÁC CÔNG TRÌNH ĐÃ CÔNG BỐ	93
	TÀI LIỆU THAM KHẢO	94
	PHỤ LỤC	108
	A Phương trình chuyển động của hàm Green	108
	B Phương trình tuyến tính hóa DMFT	118
	C Phương trình tuyến tính hóa DMFT	120
	D Phương trình tuyến tính hóa DMFT	122

Danh sách hình vẽ

1.1.1 Phân loại chất rắn thành chất dẫn điện, điện môi và bán dẫn theo lý thuyết vùng năng lượng [40].	11
1.1.2 Sử dụng kết hợp XPS và BIS để tìm ra các vị trí đỉnh của điện tử d và lỗ trống d cho NiO, từ đó thu được khe năng lượng $E_{gap} = 4.3$ eV [41].	12
1.1.3 Sự thay đổi của ε theo a có thể tuân theo hai cách [44].	13
1.1.4 Cấu hình quỹ đạo $3d$ của kim loại chuyển tiếp có cầu nối bởi các quỹ đạo phối tử p [46].	15
1.1.5 Chuyển pha kim loại - điện môi Mott theo mô hình Hubbard theo hai tham số U/t và số lấp đầy n . Có hai cách để có thể xảy ra chuyển pha kim loại - điện môi Mott là FC-MIT và BC-MIT [46].	17
1.1.6 Nửa trên: Độ rộng vùng W được xác định thông qua mô hình liên kết chặt tương ứng với nồng độ pha tạp x . Nửa dưới: Khe năng lượng E_g tương ứng với nồng độ pha tạp x cho $\text{La}_x\text{Y}_{1-x}\text{TiO}_3$ [51].	18
1.1.7 Giảm độ pha điện trở suất của $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{VO}_3$ phụ thuộc vào x ở miền nhiệt độ từ 2 K - 200 K, chuyển pha FC-MIT xảy ra tại $x_c \approx 0.2$ [54].	18
1.1.8 Sự phụ thuộc của tham số $\beta(g) = \frac{d \ln g}{\ln L}$ theo $\ln g$ ứng với số chiều $d > 2$, $d = 2$, $d < 2$. $g(L)$ là độ dẫn cục bộ được chuẩn hóa theo kích thước L của hệ. Đường chấm chấm là gần đúng $\beta = s \ln(g/g_c)$ cho trường hợp $d > 2$ [10].	20

1.1.9	Đóng góp giao thoa của một vài cấu hình đa tán xạ trong môi trường mất trật tự. a) Ba cấu hình điển hình từ \mathbf{r} đến \mathbf{r}' , mỗi đường là một bước ngẫu nhiên trong bối cảnh có tạp chất và được thể hiện là mỗi một màu tương ứng. b)-d) là các đóng góp tồn tại sau khi lấy trung bình khi có mất trật tự. Các đường nét liền biểu diễn biên độ trường, các đường nét đứt biểu diễn sự liên hợp của nó. b) Đóng góp cổ điển dẫn tới khuếch tán, số hạng đầu tiên trong phương trình (1.1.13). c) Quỹ đạo vòng trong trường hợp $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, góp phần gia tăng sự chuyển động về vị trí ban đầu. d) Quỹ đạo chứa một vòng lặp trong trường hợp $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$, nó chi phối các định xứ yếu và làm giảm sự khuếch tán [60].	23
1.1.10	Hàm sóng của điện tử trong thế tuần hoàn ion có dạng là hàm sóng Bloch (phía trên), hàm này là hàm lan truyền. Trong khi đó, nếu như có mất trật tự thì bất biến tịnh tiến bị phá vỡ, thế năng tại mỗi nguyên tử là một đại lượng ngẫu nhiên, khi đó thì hàm sóng trở nên định xứ, suy giảm theo hàm mũ trong không gian (phía dưới), W đặc trưng cho độ mất trật tự của các nút tạp trong hệ [56].	24
1.1.11	(a) Trạng thái ban đầu của ngưng tụ Bose-Einstein, (b) Bẫy từ trường theo chiều dọc z tắt, trạng thái định xứ xuất hiện [58].	25
1.1.12	Đường màu hồng trong (c), (d) là mật độ trạng thái ban đầu, màu đỏ tương ứng với quan sát định xứ Anderson [58].	25
1.1.13	Độ dài định xứ xác định trong thí nghiệm BEC một chiều [58].	26
1.2.1	Xét cấu trúc ở số chiều $d = 3$, số phối vị $Z = 12$, có thể coi là lớn. Ở giới hạn d hoặc $Z \rightarrow \infty$, bài toán nhiều hạt có thể đưa về bài toán một tạp nhúng vào một bể điện tử. Các điện tử trong bể có thể nhảy vào hoặc ra nút này và tương tác với tạp, trạng thái điện tử ở nút có thể thay đổi theo thời gian [59].	28
1.2.2	Hàm mật độ trạng thái được tính theo trung bình cộng ρ_{av} (arithmetic averaged) và trung bình nhân ρ_{typ} (geometric averaged) như là hàm của độ mất trật tự W . Kết quả thu được cho thấy ρ_{typ} triệt tiêu tại một giá trị hữu hạn đặc trưng cho độ mất trật tự W , trong khi ρ_{av} vẫn là giá trị hữu hạn khi W lớn [19].	34

1.3.1	Thế lưỡng cực quang của chùm laser Gaussian lần lượt với lệch đỏ (a) và lệch xanh (b) [82].	38
1.3.2	Mô hình hai kênh cho cộng hưởng Feshbach. Hiện tượng xảy ra khi hai nguyên tử va chạm ở năng lượng E ở kênh đầu vào cộng hưởng với trạng thái liên kết E_c ở kênh đóng. Trong khuôn khổ khí cực lạnh, va chạm thường xảy ra ở năng lượng $E \rightarrow 0$, do đó cộng hưởng kết cặp cần điều chỉnh năng lượng từ E_c gần 0 [85].	38
1.3.3(a)	Hiện thực hóa thí nghiệm mô tả tạo thể ngẫu nhiên lốm đốm. Một chùm tia laser có đường kính D và bước sóng λ được hội tụ bằng một thấu kính hội tụ. Chùm tia hội tụ có đường kính D' được tán xạ bởi một kính khuếch tán. Mô hình đốm quan sát được trên tiêu diện của thấu kính. Chùm tia tán xạ phân kỳ thành một vệt có bán kính w trên mặt phẳng tiêu cự. (b) Hình ảnh một thể mất trật tự bất đẳng hướng tạo ra bằng cách sử dụng quang học hình trụ để tạo điện thế ngẫu nhiên 1D cho BEC theo chiều Oz [89].	39
1.3.4	Mạng lưỡng sắc được tạo ra nhờ sự chồng chập của hai mạng con có hằng số mạng vô ước với nhau, phá vỡ bất biến tịnh tiến và xáo trộn năng lượng của các nút [56].	40
2.1.1	Giải đồ pha tại $T = 0$ cho mô hình AH tại lấp đầy một nửa với phân bố đều: So sánh giữa kết quả thu được giữa TMT-DMFT với EOM và TMT-SB4 [98] (đường nét liền với điểm hình tròn). Kết quả của chúng tôi thu được các đường nét liền (nét đứt) được xác định lần lượt từ giá trị trung bình nhân (cộng) từ các phương trình tuyến tính hóa DMFT, các điểm vuông ứng với kết quả thu được từ tính số các phương trình DMFT. Các tham số U, Δ được xác định theo đơn vị năng lượng $W = 1$	52
2.1.2	Giải đồ pha tại $T = 0$ cho mô hình AH tại lấp đầy một nửa với phân bố Gauss cho mất trật tự, thu được từ TMT-DMFT với EOM. Đường nét liền được tính từ giá trị trung bình nhân từ phương trình tuyến tính hóa DMFT, điểm hình tròn là kết quả từ tính số tự hợp DMFT.	53

- 2.1.3 Giá trị trung bình cộng và trung bình nhân của mật độ trạng thái địa phương tại tâm vùng $\omega = 0$ tại $U = 0.5$ như hàm của Δ đối với hàm phân bố đều và phân bố Gauss. Đường nét liền (đứt) được xác định qua trung bình nhân (cộng). Các đường với hình vuông (tròn) thu được cho hàm phân bố đều (Gauss). 54
- 2.1.4(a) Giá trị trung bình nhân của LDOS tại tâm vùng ($\omega = 0$) khi $U = 1.2$ như hàm của Δ cho phân bố đều và phân bố Gauss. Đường với các điểm hình vuông (tròn) thu được từ phân bố đều (Gauss). (b) Giá trị trung bình cộng của LDOS tại tâm vùng ($\omega = 0$) khi $\Delta = 0.6$ như hàm của U cho phân bố đều và phân bố Gauss. Đường nét đứt với các điểm hình vuông (tròn) thu được từ phân bố đều (Gauss). 55
- 2.2.1 Giản đồ pha cho mô hình AFK với phân bố Gauss cho tập tại các giá trị khác nhau của mất trật tự Coulomb. Đường nét liền màu đỏ (nét đứt màu xanh) xác định từ trung bình nhân (trung bình cộng) so sánh với trường hợp $\delta = 0$ (đường nét đứt màu xám). Đường chấm chấm thẳng đứng $U = \delta/2$ chia miền của U thành hai miền gồm miền $U < \delta/2$ (miền bên tay trái, không xét) và miền $U \geq \delta/2$. W là đơn vị năng lượng. . . . 63
- 2.2.2 Giản đồ pha cho AFK với phân bố Gauss cho tập và phân bố đều cho tương tác Coulomb (kết quả của chúng tôi, đường màu đỏ nối các hình vuông) so sánh với kết quả thu được của AFK với phân bố đều cho cả tập và tương tác Coulomb ở Ref.[108] (đường màu xanh nối các hình tròn). . . 64
- 3.1.1 Giá trị trung bình nhân và trung bình cộng của LDOS cho hai thành phần spin tại tâm vùng ($\omega = 0$) với $r = 0.5$, $\Delta = 1$ (phía trên) và $\Delta = 4.0$ (phía dưới) như hàm của U . Đường nét liền (chấm) xác định cho giá trị trung bình nhân (cộng) cho thành phần spin hướng lên. Đường nét đứt (nét đứt với chấm) xác định giá trị trung bình nhân (cộng) cho thành phần spin hướng xuống. 72
- 3.1.2 Giá trị trung bình nhân của LDOS tại tâm vùng ($\omega = 0$) với $r = 0.1, 0.5, 1.0$ cho $U = 2.0$ (phía trên) và $U = 4.0$ (phía dưới) như hàm của Δ . Các đường nét liền (đứt) được tính cho $r = 0.1$ cho thành phần spin hướng lên (xuống). Các đường chấm (đứt chấm) tính cho $r = 0.5$ cho thành phần spin hướng lên (xuống). Đường đứt chấm chấm cho trường hợp cân bằng $r = 1.0$. . . 73

- 3.1.3 Giản đồ pha trạng thái cơ bản không từ tính cho mô hình AH tại lấp đầy một nửa với mất cân bằng khối lượng cho $r = 0.1, 0.5$ so sánh với kết quả thu được ở trường hợp cân bằng khối lượng $r = 1.0$. Đường nét liền với hình vuông (tròn) được xác định từ giá trị trung bình nhân (cộng) cho $r = 0.1$. Đường nét đứt với hình vuông (nét đứt với hình tròn) được xác định từ giá trị trung bình nhân (cộng) cho $r = 0.5$. Các đường chấm chấm với hình vuông (tròn) xác định từ giá trị trung bình nhân (cộng) cho trường hợp cân bằng $r = 1.0$. Pha định xứ chọn lọc spin (SSL) là đường tại $U = 0, \Delta_{r\downarrow} < \Delta < \Delta_{c\uparrow}$ 74
- 3.1.4 Giá trị tới hạn U_c xác định cho chuyển pha Mott như hàm đơn điệu của r cho $\Delta = 0, 2.0, 6.0, 12.0$. Rõ ràng sự khác biệt giữa $U_c(r = 1)$ và $U_c(r = 0)$ giảm khi Δ tăng. 75
- 3.2.1 Giản đồ pha cho mô hình AH với độ mất trật tự Coulomb (nét liền) so sánh với trường hợp $\delta = 0$ (nét đứt). M, AI, MI và LS kí hiệu lần lượt cho pha kim loại, định xứ Anderson, điện môi Mott và định xứ trong khe Mott. Đơn vị năng lượng $W = 1$ 83
- 3.2.2 Giá trị trung bình cộng (nhân) cho $\delta = 0, 1.0, 1.5$ và 2.1 khi $U = 2.0, \Delta = 3.0$ ở phía trên (dưới). Mất trật tự Coulomb dẫn hệ chuyển từ pha kim loại tương quan tới pha AI khi δ tăng. 84
- 3.2.3 Giá trị trung bình cộng (nhân) cho $\delta = 0, 1.0, 1.5$ và 2.1 khi $U = 1.5, \Delta = 1.35$ ở phía trên (dưới). Mất trật tự Coulomb dẫn hệ chuyển từ pha định xứ trong khe Mott sang pha kim loại khi δ tăng. 85
- 3.2.4 Giản đồ pha của hệ khi không có mất trật tự Anderson ($\Delta = 0$) như hàm của δ và $U - \delta/2$. Pha định xứ trong khe Mott (LS) và định xứ Anderson (AI) xuất hiện khi có sự hiện diện của mất trật tự Coulomb. 86
- 3.2.5 Giá trị trung bình cộng (nhân) của LDOS tại tâm vùng ($\omega = 0$) cho hai mạng con s với $\gamma = 1.0, 0.8, 0.5$ như hàm của U khi $\Delta = 1.0$ ở nửa phía trên (phía dưới). Cả $\rho_{A,arith}(0), \rho_{B,arith}(0)$ cũng như $\rho_{A,geom}(0), \rho_{B,geom}(0)$ đều cùng triệt tiêu tại cùng một giá trị tới hạn của U với mỗi trường hợp của γ 87

3.2.6	Giải đồ pha cho mô hình AH tại lấp đầy một nửa có thể tương tác xen kẽ nút mạng khi $\gamma = 0.5, 0.8$ so sánh với $\gamma = 1.0$. M, AI và MI kí hiệu lần lượt cho các pha kim loại, điện môi Anderson và điện môi Mott.	88
3.2.7	Giá trị trung bình cộng (nhân) của mạng con - s khi $\Delta = 1.0, U_B = 1.0$ với $\gamma = 0.5, 0.8, 1.0$ ở nửa trên (dưới) của đồ thị. Trong trường hợp Δ nhỏ sự chênh lệch thế tương tác dẫn tới sự xuất hiện của pha định xứ trong khe Mott.	89
3.2.8	Giá trị trung bình nhân của LDOS cho hai mạng con tại $\Delta = 2.0, U = 1.5$. Trong trường hợp Δ và U lớn sự chênh lệch thế tương tác lớn dẫn tới hệ xuất hiện pha định xứ Anderson.	90

Danh mục các từ viết tắt

ADOS	Averaged Density of States (Mật độ trạng thái trung bình)
AFK	Anderson - Falikov - Kimball Model (Mô hình Anderson - Falikov - Kimball)
AH	Anderson - Hubbard Model (Mô hình Anderson - Hubbard)
AI	Anderson Insulator (Điện môi Anderson)
DOS	Density of States (Mật độ trạng thái)
DMFT	Dynamic Mean Field Theory (Lý thuyết trường trung bình động)
ED	Exact diagonalization (Chéo hóa chính xác)
EOM	Equations of Motion (Phương trình chuyển động)
HM	Hubbard Model (Mô hình Hubbard)
IPT	Iterative Perturbation Theory (Lý thuyết nhiễu loạn lặp)
LDOS	Local Density of States (Mật độ trạng thái địa phương)
M	Metal (Kim loại)
MI	Mott Insulator (Điện môi Mott)
MITs	Metal-Insulator Transitions (Chuyển pha kim loại - điện môi)
NRG	Numerical Renormalization Group (Nhóm số tái chuẩn hóa)
PDF	Probability Distribution Function (Hàm phân bố xác suất)
QMC	Quantum Monte Carlo (Monte Carlo lượng tử)
TDOS	Typical Density of States (Mật độ trạng thái điển hình)
TMT	Typical Medium Theory (Lý thuyết môi trường điển hình)

MỞ ĐẦU

Lí do chọn đề tài

Hệ các fermion tương quan và mất trật tự là một trong những chủ đề nghiên cứu tiên phong của vật lý các chất cô đặc trong nhiều thập kỷ qua. Đặc biệt, tương tác Coulomb trên nút và mất trật tự là hai nguyên nhân chính dẫn tới chuyển pha kim loại - điện môi. Chuyển pha kim loại - điện môi gây ra bởi tương tác Coulomb trên nút gọi là chuyển pha Mott - Hubbard [1], trong khi đó mất trật tự gây nên định xứ Anderson [2].

Bởi vì tương tác giữa các điện tử và mất trật tự đều có thể gây ra chuyển pha kim loại - điện môi, người ta có thể đoán rằng sự có mặt đồng thời của chúng khiến cho các điện tử bị định xứ mạnh hơn. Tuy nhiên thực tế không đơn giản như vậy. Chẳng hạn, các nghiên cứu chỉ ra rằng: mất trật tự yếu có khả năng làm suy giảm hiệu ứng tương quan khiến cho một điện môi có thể trở thành kim loại (yếu) [3]. Hơn thế nữa, các tương tác tầm gần dẫn đến sự thay đổi trọng số của các phân vùng Hubbard khiến cho cường độ mất trật tự tới hạn của chuyển pha kim loại - điện môi Anderson tăng. Do vậy, có thể nói: sự tương hỗ giữa mất trật tự và tương tác dẫn tới nhiều hiệu ứng tinh tế và đặt ra những thách thức cơ bản cho cả lý thuyết lẫn thực nghiệm, không chỉ trong vật lý chất cô đặc mà cả trong lĩnh vực các nguyên tử lạnh trên mạng quang học, ở đó các thông số của hệ dễ dàng được kiểm soát và thay đổi, giúp cho chúng ta có thể nghiên cứu các vấn đề nói trên một cách hệ thống [4], [5].

Các nghiên cứu lý thuyết của mô hình có mặt đồng thời cả tương tác và mất trật tự chắc chắn là không đơn giản. Nó đòi hỏi công cụ tính toán phức tạp, cách tiếp cận không nhiều loạn mới và thường khó tránh khỏi việc khảo sát bằng tính số. Từ kết quả nghiên cứu đầu tiên của nhóm chúng tôi về hệ tương tác và mất trật tự cho mô hình Anderson

- Hubbard lấp đầy một nửa có mất trật tự tuân theo phân bố đều và phân bố Gauss [6], trong khuôn khổ luận án này chúng tôi tiếp tục nghiên cứu cho mô hình phức tạp hơn, như mô hình Anderson - Hubbard mất cân bằng khối lượng và mô hình Anderson - Hubbard với tương tác phụ thuộc nút mạng để làm rõ ảnh hưởng của tương tác Coulomb và mất trật tự trong hệ.

Trước khi thảo luận về mô hình mô tả đồng thời hai hiệu ứng kể trên, xin điểm qua hai trong số các mô hình chủ yếu mô tả hệ điện tử tương quan mạnh (tương tác Coulomb trên nút lớn) là mô hình Hubbard và mô hình Falicov - Kimball. Mô hình Hubbard mô tả các điện tử linh động trên mạng với tham số nhảy nút t và tương tác đẩy Coulomb U của hai điện tử trên cùng một nút mạng. Tuy đây là một mô hình đơn giản nhưng nó chỉ giải được chính xác trong trường hợp số chiều bằng vô cùng hoặc bằng một. Ở trường hợp một chiều, kết quả chỉ ra rằng không có chuyển pha kim loại - điện môi Mott cho mô hình Hubbard lấp đầy một nửa. Cụ thể, hệ ở pha điện môi với mọi giá trị $U \neq 0$ và hệ ở pha kim loại với $U = 0$ [7]. Ở trường hợp số chiều vô hạn, lý thuyết trường trung bình động (DMFT) chỉ ra rằng trạng thái cơ bản của hệ lấp đầy một nửa, nếu không có hiện tượng vấp ¹, là điện môi phản sắt từ với mọi giá trị của U [8]. Trong trường hợp bị vấp, hệ nằm ở trạng thái thuận từ. Với U nhỏ hệ là kim loại được mô tả bằng chất lỏng Fermi, khi U tăng trạng thái kim loại bị phá vỡ và hệ chuyển sang trạng thái điện môi Mott với một miền đồng tồn tại giữa hai pha kim loại và điện môi [8]. Một mô hình quan trọng khác của hệ tương quan mạnh là mô hình Falicov - Kimball (FK), một trường hợp đơn giản của mô hình Hubbard, khi các hạt với một hướng spin nào đó có tham số nhảy nút bằng không, tức là chúng không chuyển động. Ở mô hình này đối xứng SU(2) của spin bị phá vỡ và lý thuyết trường trung bình động chỉ ra rằng tại lấp đầy một nửa hệ nằm ở pha điện môi phản sắt từ, và hiện tượng tách pha xảy ra tại hệ lấp đầy khác một nửa khi tương tác Coulomb U nhỏ. Tương tự như ở mô hình Hubbard, chuyển pha kim loại - điện môi tại hệ lấp đầy một nửa cũng xảy ra ở FK khi U thay đổi. Điều khác biệt cơ bản giữa hai mô hình là trong khi pha kim loại ở mô hình Hubbard được mô tả bởi chất lỏng Fermi thì pha kim loại ở FK là chất lỏng không Fermi [9].

¹Hiện tượng vấp đề cập đến tình huống xuất hiện khi trong hệ có sự cạnh tranh giữa các tương tác khác nhau, ví dụ tương tác sắt từ và phản sắt từ, dẫn tới trạng thái của hệ bị suy biến. Chẳng hạn, ở mạng hình vuông, nếu chỉ xét tương tác từ giữa các moment từ gần nhất thì trạng thái cơ bản của hệ là trật tự sắt từ hoặc phản sắt từ, nhưng ở mạng tam giác nếu moment từ ở hai nút mạng gần nhất sắp xếp phản song, thì moment từ trên nút còn lại dù hướng lên hay hướng xuống thì năng lượng của hệ đều như nhau, tức là nó bị suy biến. Và ta nói hệ bị vấp từ.

Trong lúc đó, mô hình đơn giản nhất mô tả hệ mất trật tự là mô hình Anderson gồm một số hạng mô tả các điện tử linh động trên mạng với tham số nhảy nút t và một số hạng khác mô tả thế ngẫu nhiên trên các nút mạng i . Khi xem xét tính chất vận chuyển trong mô hình này, Anderson đi tới kết luận rằng khi cường độ của thế mất trật tự đủ lớn (lấy t làm đơn vị năng lượng), một hạt ban đầu chiếm chỗ tại nút mạng i cho trước, không lan truyền ra xa mà chỉ dừng lại tại một vùng lân cận của nút i , nghĩa là nó trở nên định xứ [2]. Trong trường hợp một và hai chiều, mất trật tự với cường độ tùy ý, cũng làm cho các điện tử bị định xứ hoàn toàn, và do vậy hệ là điện môi [10]. Với số chiều lớn hơn hoặc bằng ba, khi cường độ của mất trật tự nhỏ, luôn tồn tại trạng thái lan truyền trong hệ [10]. Theo giả thuyết của Mott [11], trong trường hợp này các trạng thái định xứ và lan truyền cần được chia tách bởi năng lượng E_c , gọi là ngưỡng linh động. Sự tồn tại của ngưỡng linh động này được xác nhận bằng tính số [11], [13] cũng như bằng thực nghiệm [14], [15], [16]. Ngoài ra, mức Fermi thay đổi (so với ngưỡng linh động) cũng có thể gây ra chuyển pha kim loại - điện môi Anderson.

Sự kết hợp giữa mô hình Anderson và mô hình Hubbard tạo nên mô hình Anderson - Hubbard (AH), trong lúc đó sự kết hợp giữa mô hình Anderson và mô hình Falicov - Kimball gọi là mô hình Anderson - Falicov - Kimball (AFK). Như vậy, so với mô hình Hubbard (mô hình Falicov - Kimball) thì mô hình AH (AFK) được bổ sung số hạng thứ ba mô tả thế mất trật tự V_i phân bố một cách ngẫu nhiên trên các nút mạng theo hàm phân bố xác suất $P(V_i)$ nào đó. Các hàm phân bố xác suất (PDF) thường được xét đến là phân bố đều, phân bố Gauss, phân bố Lorentz và phân bố nhị phân. Để nghiên cứu hệ mất trật tự cần phải sử dụng các PDF của các đại lượng ngẫu nhiên mà ta quan tâm. Thực ra, trong các bài toán vật lý hay thống kê người ta thường quan tâm đến các giá trị “điển hình” của các đại lượng ngẫu nhiên (chính là giá trị có xác suất lớn nhất). Tuy nhiên, trong nhiều trường hợp chúng ta không biết được toàn bộ PDF mà chỉ biết được một số thông tin hạn chế về hệ thống thông qua các moment của nó. Trong trường hợp đó điều quan trọng là chọn được đại lượng trung bình chứa đựng nhiều thông tin nhất của biến ngẫu nhiên. Ví dụ, nếu PDF của biến ngẫu nhiên có một đỉnh và các đuôi giảm nhanh thì giá trị điển hình của đại lượng ngẫu nhiên có thể ước lượng tốt bằng kỳ vọng, tức là trung bình cộng của nó. Tuy nhiên có nhiều trường hợp, chẳng hạn như với mật độ trạng thái địa phương (LDOS) của hệ mất trật tự, biết được trung bình cộng là chưa đủ, vì hàm phân bố xác suất PDF của LDOS cho hệ mất trật tự có đuôi dài và được đặc

trung bởi vô hạn các moment [18]. Vì vậy, không ngạc nhiên khi trung bình cộng của LDOS hoàn toàn không giống với giá trị điển hình của nó. Nghĩa là, giá trị trung bình cộng của đại lượng ngẫu nhiên LDOS không bị triệt tiêu tại điểm tới hạn cho chuyển pha Anderson và do vậy không mô tả được chuyển pha này. Việc tìm kiếm thông số trật tự đơn hạt khả dĩ có thể phân biệt được trạng thái định xứ và trạng thái lan truyền trong chuyển pha Anderson là một trong những thách thức chủ yếu khi nghiên cứu hệ điện tử mất trật tự. Trái với trung bình cộng, trung bình nhân đưa ra một xấp xỉ tốt hơn cho giá trị khả dĩ nhất của mật độ trạng thái định xứ [18]. Dobrosavljevic và các cộng sự đã phát triển lý thuyết môi trường điển hình (TMT) để nghiên cứu các hệ mất trật tự, trong đó mật độ trạng thái điển hình (TDOS) được xấp xỉ bằng cách lấy theo trung bình nhân các cấu hình mất trật tự, thay cho mật độ trạng thái lấy theo trung bình cộng [19]. Nhóm tác giả này chứng tỏ rằng TDOS triệt tiêu một cách liên tục khi độ lớn của mất trật tự tiến đến giá trị tới hạn và nó có thể dùng làm thông số trật tự hiệu dụng trung bình cho chuyển pha Anderson. Giản đồ pha (Δ, U) tại nhiệt độ không độ tuyệt đối cho mô hình AH lấp đầy một nửa thu được từ lý thuyết môi trường điển hình TMT cho trường hợp V_i tuân theo phân bố đều trên đoạn $[-\Delta/2 : \Delta/2]$ bao gồm 3 pha: kim loại, điện môi Mott (có khe cấm) và điện môi Anderson (không có khe cấm) [20], [21]. Kết quả tương tự cũng được tìm thấy đối với mô hình AFK lấp đầy một nửa [3]. Gần đây giản đồ pha cho mô hình này ở trường hợp nhiệt độ hữu hạn cũng đã được nghiên cứu trong khuôn khổ của lý thuyết TMT, theo đó tại $T \neq 0$ xuất hiện một miền đồng tồn tại của điện môi Mott và điện môi Anderson phụ thuộc vào cường độ của mất trật tự [22].

Ngoài lý thuyết môi trường điển hình được áp dụng chủ yếu cho hệ mất trật tự mạnh, có một lý thuyết khác sử dụng hàm phân bố xác suất toàn phần của mật độ xác suất định xứ làm thông số trật tự của chuyển pha Anderson trong khuôn khổ của DMFT. Lý thuyết này được gọi là lý thuyết trường trung bình động thống kê (statistical DMFT). So với lý thuyết môi trường điển hình thì lý thuyết trường trung bình động thống kê cho kết quả chính xác hơn, áp dụng cho diện rộng hơn của các bài toán trong hệ mất trật tự, tuy nhiên phương pháp này đòi hỏi rất nhiều tài nguyên tính toán và khá tốn kém [23], [24]. Phương pháp lý thuyết trường trung bình động thống kê đã được áp dụng cho mô hình Anderson - Hubbard khi V_i tuân theo phân bố nhị phân. Giản đồ pha tại $T = 0$ K bao gồm pha kim loại, pha điện môi vùng và pha điện môi Anderson - Mott [25]. Ở trường hợp V_i tuân theo phân bố Gauss, một số phương pháp khác như gần đúng Hartree - Fock

không hạn chế và DMFT + gần đúng Σ cũng được sử dụng để nhận được giản đồ pha của trạng thái cơ bản ở AH lấp đầy một nửa [26], [27]. Trường hợp phân bố của V_i phụ thuộc theo cả hướng của spin điện tử cũng được xem xét bởi K. Byczuk và cộng sự [28], theo đó mất trật tự phụ thuộc spin làm thu nhỏ miền kim loại so với trước đây (khi mất trật tự không phụ thuộc spin), dẫn tới xuất hiện một miền định xứ với spin chọn lọc khi tương tác yếu và mất trật tự mạnh. Giản đồ pha từ ở trạng thái cơ bản của AH tại lấp đầy một nửa nhận được từ công trình của Byczuk và cộng sự [29] cho thấy sự cạnh tranh giữa tương tác và mất trật tự dẫn tới các miền kim loại thuận từ và phản sắt từ được tìm thấy khi tương tác yếu. Mất trật tự lớn dẫn tới định xứ Anderson của các điện tử và phá vỡ trật tự phản sắt từ tầm xa.

Trái với sự phong phú về các kết quả lý thuyết ở trên, các thực nghiệm gặp nhiều khó khăn hơn, bởi vì rất khó để thiết kế và tạo ra một hệ có độ mất trật tự Δ cùng bậc với độ lớn tương tác Coulomb U trong cấu trúc điện tử của nó. Hầu hết các bán dẫn [30], [31] có số hạng mất trật tự và động năng là rất lớn nhưng $U \ll \Delta$. Trong khi đó các oxit kim loại chuyển tiếp họ perovskite ABO_3 với mất trật tự ở nút A như $(Ca,Sr)VO_3$ thì ion kim loại ở nút A không đóng góp vào tính chất dẫn, nên số hạng Δ thường không đáp ứng điều kiện (vì $\Delta \ll U$). Mặt khác một vài oxit kim loại chuyển tiếp perovskite với mất trật tự ở vị trí B lại có thể đáp ứng điều kiện $\Delta \sim U$ ví dụ như $La(Ni,Mn)O_3$, $La(Ni,Fe)O_3$ [32]. Tuy nhiên, hệ oxit này quá phức tạp bởi vì ion kim loại tại vị trí B có các điện tử d với đặc tính của cả t_{2g} và e_g . Các hợp chất perovskite với một vị trí B được thay thế, ví dụ $SrTi_{1-x}Ru_xO_3$ được đưa ra bởi nhóm thực nghiệm ở Hàn Quốc [33] có nhiều ưu điểm như sau: $SrTiO_3$ không có điện tử d , trạng thái p của oxi tạo thành dải hóa trị, $SrRuO_3$ là kim loại có 4 điện tử t_{2g} trong cấu hình spin thấp. Như vậy bằng cách này họ có thể chế tạo ra một vật liệu có thể xảy ra quá trình chuyển pha MIT. Khi trộn $SrRuO_3$ với $SrTiO_3$ chúng sẽ tạo ra một hỗn hợp với độ pha tạp x tùy ý và chuyển pha kim loại - điện môi xảy ra tại $x \approx 0.5$ ở nhiệt độ phòng. Ở hợp chất $SrTi_{1-x}Ru_xO_3$ cả hai loại ion của kim loại chuyển tiếp giữ nguyên hóa trị 4^+ như ở vật liệu chủ. Khi thay thế Ru^{4+} cho ion Ti^{4+} các điện tử t_{2g} được đặt vào trạng thái điện môi d^0 và sự thay thế này không đi kèm sự chuyển pha mà có thể làm thay đổi cấu trúc điện tử của $SrTi_{1-x}Ru_xO_3$. Chính vì thế vật liệu $SrTi_{1-x}Ru_xO_3$ là hệ lý tưởng để nghiên cứu một cách hệ thống các hiệu ứng kết hợp của mất trật tự và tương quan. Từ các dữ liệu về tính chất vận chuyển và quang học của hệ, nhóm các tác giả này đã tìm ra hàng loạt pha khác nhau tùy thuộc vào nồng độ pha

tạp: kim loại tương quan ($x \sim 1.0$), kim loại mất trật tự ($x \sim 0.7$), điện môi Anderson ($x \sim 0.5$), điện môi có một khe nhỏ (do tương tác Coulomb tăng dần) ($x \sim 0.4$), điện môi tương quan mất trật tự ($x \sim 0.2$), điện môi vùng ($x \sim 0.0$). Để giải thích kết quả thực nghiệm này, điều rõ ràng là cần phải xem xét đồng thời các hiệu ứng của mất trật tự và tương quan điện tử. Gần đây R. Pablo-Pedro cùng các cộng sự đã sử dụng tính toán theo nguyên lý đầu tiên (First principle theory) để nghiên cứu các ảnh hưởng của mất trật tự (pha tạp các nguyên tử Carbon) đối với các tính chất điện tử ở cụm nano silicene [34]. Vị trí nguyên tử Carbon thay thế trong cấu trúc sẽ liên quan đến độ mất trật tự trong hệ. Bằng việc thay đổi vị trí mất trật tự, người ta tìm thấy rằng điện môi Mott và điện môi Anderson chuyển pha một cách liên tục thông qua hàm mật độ trạng thái.

Những khó khăn khi tiến hành các thí nghiệm trên vật liệu thực tế khi nghiên cứu các hiệu ứng của mất trật tự và tương quan điện tử có thể được khắc phục nhờ sự phát triển của các thí nghiệm với các nguyên tử siêu lạnh trên mạng quang học. Ngày nay khí siêu lạnh là các hệ nguyên tử (hoặc phân tử) loãng được làm lạnh đến nhiệt độ rất thấp (vài nK), và được bẫy nhờ các tổ hợp thích hợp của các tia sáng. Những hệ thống này rất linh hoạt, dễ kiểm soát, và đã chứng tỏ là công cụ rất hứa hẹn cho việc nghiên cứu những hệ mất trật tự và tương tác. So với hệ cô đặc thì hệ nguyên tử siêu lạnh trên mạng quang học có những ưu thế sau: 1) Nó cho phép làm việc với các boson, fermion hay hỗn hợp của chúng, và người ta có thể kiểm soát chính xác số hạt cũng như nhiệt độ; 2) Các thế của mạng giống như trong các hệ cô đặc có thể được tạo ra từ các mẫu giao thoa của hàng loạt tia laser, chẳng hạn: sử dụng các cặp tia laser ngược nhau tạo nên thế tuần hoàn, mô phỏng mô hình Hubbard. Tương tác lưỡng cực có thể được sử dụng để thiết kế thế quang học ngẫu nhiên; 3) Tương tác giữa các nguyên tử có thể được kiểm soát nhờ cộng hưởng Feshbach, từ đó chỉ bằng cách thay đổi từ trường chúng ta có thể đi từ hệ không tương tác đến hệ tương quan mạnh. Với tất cả những lý do đó, khí siêu lạnh thường được ví như các hệ lượng tử giả lập, hiểu theo nghĩa nó hiện thực hóa các mô hình Hamiltonian, trong đó các tham số của chúng có thể kiểm soát bằng thực nghiệm và thay đổi liên tục, cũng như được tính toán hóa học lượng tử (Ab initio) từ các thông số thực nghiệm. Có thể xem cách tiếp cận này là sự bổ sung cho các công cụ lý thuyết và tính toán. Quan trọng nhất là nó cho phép khám phá những chế độ rất khó thực hiện ở chất cô đặc, dẫn tới những phát hiện bất ngờ và đưa đến những thách thức mới cho lý thuyết [35].

Từ kết quả nghiên cứu thực nghiệm vật liệu của nhóm các nhà vật lý Hàn Quốc, cũng như khả năng tạo ra mạng quang học kèm theo mất trật tự, việc nghiên cứu lý thuyết các tính chất điện tử của các vật liệu mất trật tự với tương tác Coulomb khác nhau trên nút quan trọng và cần thiết.

Ngoài ra, việc hỗn hợp các fermion với khối lượng hiệu dụng khác nhau được quan sát thấy ở các hợp chất kim loại-đất hiếm cũng như việc phá vỡ đối xứng spin $SU(2)$ của hệ fermion khi cho nó liên kết với từ trường ngoài đã được thực hiện [36]-[37], từ đó việc nghiên cứu lý thuyết về giản đồ pha ở hỗn hợp fermion mất cân bằng khối lượng trên mạng quang học mất trật tự cũng là một bài toán thú vị và có tính thời sự khoa học.

Mục tiêu nghiên cứu

Mục tiêu của đề tài là thu được/làm rõ các tính chất chuyển pha kim loại - điện môi Mott và chuyển pha Anderson trong một số mạng fermion tương tác và mất trật tự trên hai mô hình AFK và AH.

Nội dung nghiên cứu

Các bài toán được xem xét và giải quyết bao gồm: 1) Khảo sát sự ảnh hưởng của phân bố Gauss của mất trật tự lên giản đồ pha cho mô hình AH và AFK; 2) Nghiên cứu giản đồ pha của mô hình AH bất đối xứng (mất cân bằng khối lượng) tại lấp đầy một nửa và mô hình AH có thể tương tác phụ thuộc vào nút.

Phương pháp nghiên cứu

Để mô tả chuyển pha Anderson trong các mô hình nói trên chúng tôi sử dụng lý thuyết môi trường điển hình TMT. Phương pháp này được xem như là sự mở rộng tối thiểu của DMFT cho các hệ mất trật tự, nó không đòi hỏi việc tính số quá nhiều như lý thuyết trường trung bình động thống kê mà vẫn cho được một bức tranh định tính đạt yêu cầu. Phương pháp giải bài toán tạp mà chúng tôi sử dụng là phương pháp ngắt chuỗi phương trình chuyển động đối với hàm Green. Chúng tôi kết hợp việc tính giải tích với phương pháp tính số sử dụng ngôn ngữ lập trình FORTRAN.

Những đóng góp mới của luận án

1) Chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của phân bố Gauss lên giản đồ pha của mô hình AH và AFK. So sánh với phân bố đều, kết quả cho hai mô hình AH và AFK tại lấp đầy một nửa chỉ ra rằng theo một cách định tính giản đồ pha không phụ thuộc vào cách chọn hàm phân bố (đều hay Gauss) cho biến mất trật tự.

2) Khảo sát ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng (đặc trưng bởi đại lượng $r = t_{\downarrow}/t_{\uparrow}$) lên giản đồ pha cho mô hình AH. Ngoài ba pha đã xuất hiện trong trường hợp cân bằng khối lượng (kim loại, điện môi Mott, điện môi Anderson), giản đồ pha cho mô hình AH mất cân bằng khối lượng còn chứa thêm pha định xứ chọn lọc spin. Đối với trường hợp $0 < r < 1$ chúng tôi thấy rằng ngoại trừ trường hợp không tương tác, chuyển pha xảy ra đồng thời cho hai loại spin, cả hai miền điện môi Anderson và Mott đều được mở rộng, đồng thời miền kim loại thu hẹp khi mất cân bằng khối lượng tăng lên (r giảm).

Đối với mô hình AH tại lấp đầy một nửa có thể tương tác phụ thuộc vào nút, hai loại tương tác phụ thuộc đơn giản nhất được xem xét là mất trật tự tương tác và tương tác xen kẽ (hai mạng con A, B có $U_A \neq U_B$) trong không gian mạng tinh thể. Trong trường hợp tương tác là biến ngẫu nhiên tuân theo hàm phân bố đều, chúng tôi đã chỉ ra rằng hiệu ứng chính của mất trật tự Coulomb là dẫn hệ chuyển từ pha kim loại sang một pha định xứ Anderson ngay cả khi không có mất trật tự Anderson (mất trật tự cấu trúc). Đối với trường hợp tương tác Coulomb xen kẽ (đặc trưng cho sự chênh lệch thế Coulomb giữa hai nút mạng liền kề là $\gamma = U_B/U_A$). Có ba pha khác nhau (kim loại, điện môi Mott, điện môi Anderson) được tìm thấy ở giới hạn $0 < \gamma < 1$, nhưng các miền này đã thay đổi: miền kim loại bị thu hẹp lại, miền điện môi Anderson và điện môi Mott được mở rộng khi γ giảm.

Bố cục của luận án

Bố cục của luận án bao gồm phần mở đầu, kết luận và ba chương chính:

Chương 1: Trình bày ba nội dung: (1) Khái niệm điện môi Mott, điện môi Anderson; (2) Phương pháp nghiên cứu môi trường điển hình (TMT) và lý thuyết trường trung bình động DMFT; (3) Mạng quang học.

Chương 2: Nghiên cứu chuyển pha kim loại - điện môi (MITs) trong hệ AFK và AH có mất trật tự tuân theo hàm phân bố Gauss.

Chương 3: Nghiên cứu giản đồ pha cho mô hình AH tại lớp dày một nửa có mất cân bằng khối lượng và giản đồ pha cho mô hình AH tại lớp dày một nửa có tương tác phụ thuộc vào nút.

Chương 1

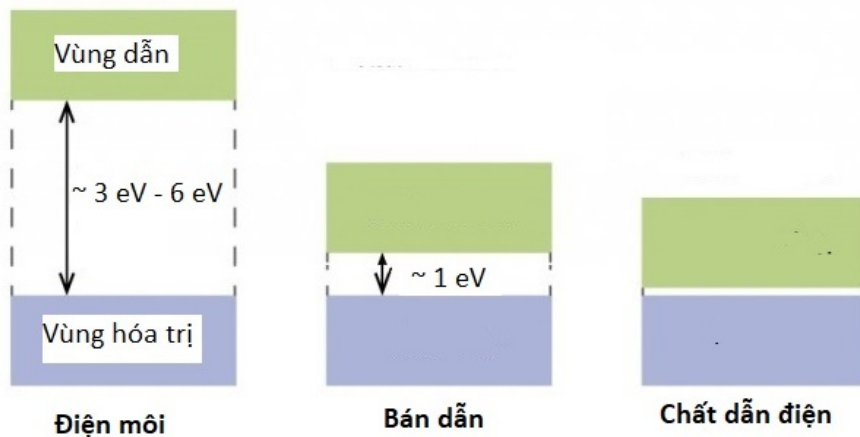
ĐIỆN MÔI MOTT VÀ ĐIỆN MÔI ANDERSON, LÝ THUYẾT MÔI TRƯỜNG ĐIỂN HÌNH VÀ MẠNG QUANG HỌC

Ở chương này, chúng tôi trình bày các khái niệm cơ bản liên quan đến nội dung nghiên cứu của luận án. Đầu tiên là khái niệm cơ bản về hai loại điện môi Mott và điện môi Anderson. Điện môi Mott hình thành là do tương quan Coulomb giữa các điện tử trên cùng một nút, trong khi đó cơ chế gây ra điện môi Anderson là mất trật tự. Tiếp theo, chúng tôi trình bày hai lý thuyết sử dụng trong luận án. Cụ thể, lý thuyết trường trung bình động (DMFT) và lý thuyết môi trường điển hình (TMT) để giải bài toán mạng với mất trật tự. Cuối cùng, chúng tôi trình bày các khái niệm, định nghĩa liên quan đến mạng quang học. Mạng quang học với các nguyên tử siêu lạnh là phương pháp thực nghiệm có khả năng hiện thực hóa, kiểm tra các mô hình Hubbard và Anderson - Hubbard. Chúng tôi hy vọng rằng một số kết quả tiên đoán bằng lý thuyết của chúng tôi sẽ được kiểm tra bằng thực nghiệm trong tương lai gần thông qua mạng quang học.

1.1 Điện môi Mott và điện môi Anderson

1.1.1 Điện môi Mott

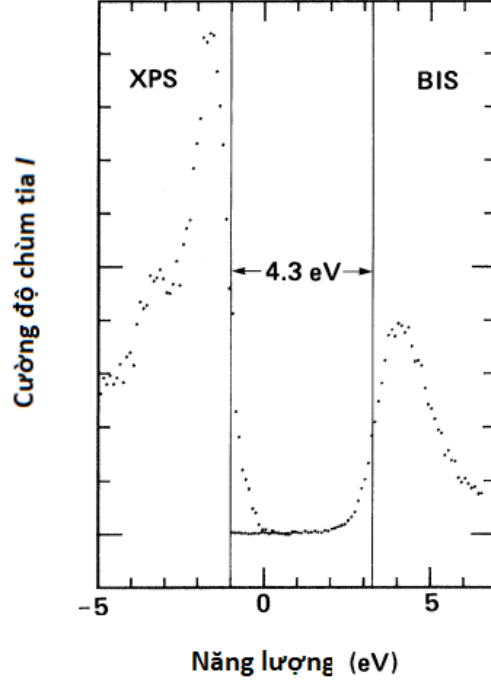
Vào khoảng những năm 1928-1929, một lý thuyết tổng quát đã được đề xuất và xây dựng bởi Bethe [38], Sommerfeld [39], Bloch [40] phân loại chất rắn thành chất dẫn điện, điện môi và bán dẫn tại nhiệt độ không độ tuyệt đối dựa vào sự lấp đầy của vùng năng lượng. Đối với kim loại, vùng dẫn (vùng trên cùng) bị lấp đầy một phần, trong khi đó, đối với điện môi, vùng dẫn và vùng hóa trị có một khe cấm cỡ 3 eV - 6 eV. Trong trường hợp giữa vùng dẫn và vùng hóa trị có một khe hẹp (cỡ 1 eV), ta gọi chất đó là bán dẫn, nó trở thành một chất dẫn yếu khi có sự kích thích nhiệt điện tử. Việc hình thành vùng năng lượng là do cấu trúc tuần hoàn của các nguyên tử trong mạng tinh thể. Mặc dù bức



Hình 1.1.1: Phân loại chất rắn thành chất dẫn điện, điện môi và bán dẫn theo lý thuyết vùng năng lượng [40].

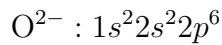
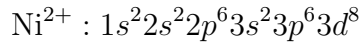
tranh vùng năng lượng đã rất thành công trong việc phân loại các chất rắn, tuy nhiên với rất nhiều oxit kim loại chuyển tiếp có vùng d lấp đầy một phần đã biểu hiện như một chất dẫn điện kém và phần lớn là chất cách điện. Ví dụ như NiO, CoO₂, MgO có tổng điện tử ở lớp ngoài cùng là số lẻ nhưng theo quan sát thực nghiệm, các chất này là điện môi. Một ví dụ thí nghiệm cho NiO [41] dùng phổ phát xạ tia X (XPS) để tìm các đỉnh điện tử d và vị trí lỗ trống d bằng quang phổ hấp thụ bức xạ (BIS) thu được khe $E_{gap} = 4.3$ eV, hình (1.1.2).

Peierls cũng đã chỉ ra trong bài báo [42] rằng đối với các vật liệu như NiO, tương quan giữa điện tử - điện tử đóng vai trò quan trọng: lực đẩy Coulomb giữa các điện tử có thể là

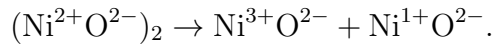


Hình 1.1.2: Sử dụng kết hợp XPS và BIS để tìm ra các vị trí đỉnh của điện tử d và lỗ trống d cho NiO, từ đó thu được khe năng lượng $E_{gap} = 4.3$ eV [41].

nguồn gốc dẫn tới biểu hiện của chúng là điện môi. Wigner [43] đã bổ sung số hạng tương tác e^2/r_{12} vào mô hình, giả sử đối với khí tự do mật độ thấp sẽ tạo thành mạng tinh thể trạng thái điện môi. Năm 1949, Mott [1] đã đề xuất một mô hình cho NiO, cụ thể



là một điện môi, trong đó sự truyền dẫn dựa theo công thức



Trong tình huống này, điện tử ở lớp d sẽ nhảy giữa các ion Ni^{2+} tạo thành các vùng năng lượng. Khi tính đến tương tác Coulomb giữa các điện tử trên cùng một nút, hai vùng năng lượng được hình thành bao gồm vùng dưới tương ứng mỗi điện tử chiếm đóng một nút trống, vùng trên cùng tương ứng với một điện tử chiếm đóng vào một nút đã có sẵn

điện tử. Độ rộng của khe năng lượng giữa hai vùng được ước lượng

$$E_{gap} \approx U - 2zt$$

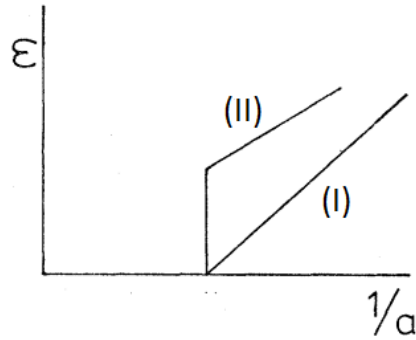
với z là số lân cận gần nhất. Sự cạnh tranh giữa thế Coulomb U giữa các điện tử và tham số nhảy nút t giữa các điện tử lân cận sẽ quyết định hệ ở pha điện môi hay kim loại. Nếu U đủ lớn so với tham số nhảy nút t tức là $E_{gap} > 0$, hệ ở pha điện môi.

Mott [44] đã thảo luận cho một mạng tinh thể lập phương của các nguyên tử với tham số mạng a , và chỉ ra rằng khi a đủ lớn (ngăn cản sự chui ngầm) hệ ở pha điện môi. Đối với giá trị nhỏ của a , theo như mô hình của Wilson [12], hệ ở pha kim loại. Do đó, tồn tại một giá trị tới hạn a_0 sẽ có sự chuyển pha từ kim loại sang điện môi tại nhiệt độ không độ tuyệt đối.

Giả sử năng lượng kích hoạt cần thiết để tạo thành một cặp điện tử dẫn là ε . Nếu các nguyên tử tách nhau thì

$$\varepsilon = I - E \quad (1.1.1)$$

với I là năng lượng ion hóa và E là ái lực điện tử. Khi a nhỏ, ε giảm. Theo Mott sự chuyển pha của hệ có thể tuân theo hai cách như hình (1.1.3). Nếu năng lượng ε thay đổi



Hình 1.1.3: Sự thay đổi của ε theo a có thể tuân theo hai cách [44].

một cách liên tục (đường I) theo tham số $1/a$ thì chuyển pha tương ứng là chuyển pha loại hai. Trong khi đó, nếu ε thay đổi một cách gián đoạn (đường II) theo tham số $1/a$ thì chuyển pha kim loại - điện môi Mott là chuyển pha loại một. Theo Mott sự thay đổi của năng lượng kích thích phải là chuyển pha loại một. Bởi vì điện tử và lỗ trống cũng có thể kết cặp do lực hút Coulomb, thế năng tương hỗ $-e^2/kr_{12}$ tương ứng với năng lượng liên kết cỡ me^4/\hbar^2k^2 , k là hằng số điện môi. Năng lượng kích hoạt cần phải lớn hơn năng

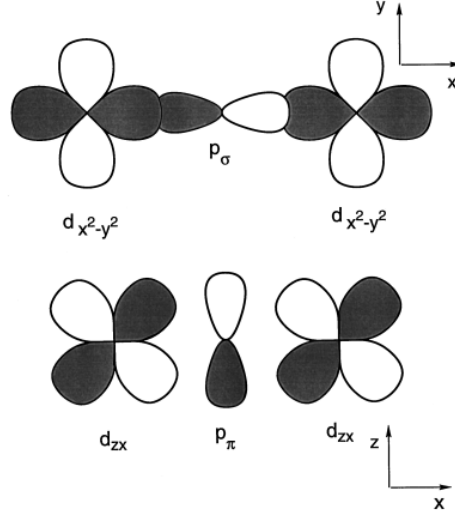
lượng liên kết này để tạo thành trạng thái điện môi. Chính tương quan tĩnh điện giữa các điện tử cản trở việc các điện tử di chuyển. Những quan sát trong thí nghiệm cũng đã dẫn đến các câu hỏi là làm thế nào hệ lấp đầy một phần có thể trở thành điện môi, và làm thế nào một điện môi có thể trở thành kim loại khi điều khiển một số tham số. Chuyển pha này được gọi là chuyển pha kim loại - điện môi Mott.

Tóm lại, với chuyển pha kim loại - điện môi ở các oxit kim loại chuyển tiếp có vùng $3d$ lấp đầy một phần, việc sử dụng lý thuyết đơn hạt đơn giản mà không tính tới tương quan điện tử như gần đúng mật độ địa phương (LDA) hoặc lý thuyết Hartree - Fock sẽ không giải thích được vì sao các oxit này là chất điện môi (khe cấm cỡ 4 eV đối với NiO) và tương quan điện tử - điện tử không thể bỏ qua.

Để xây dựng được mô hình lý thuyết, Mott là người đầu tiên xây dựng các gần đúng quan trọng để từ sự tương quan mạnh của các điện tử có thể dẫn tới một trạng thái điện môi. Trạng thái điện môi này được gọi là điện môi Mott. Mott xét một mạng tinh thể gồm một quỹ đạo điện tử trên mỗi nút mạng. Khi không có tương quan điện tử, một vùng đơn sẽ được hình thành do sự xen phủ của các quỹ đạo nguyên tử trong hệ, vùng sẽ lấp đầy khi hai điện tử có spin trái ngược nhau trên mỗi nút. Tuy nhiên, với hai điện tử có spin trái ngược nhau sẽ có lực đẩy Coulomb, khi đó Mott lập luận rằng vùng sẽ chia làm hai: mức thấp hơn được hình thành từ một điện tử chiếm một nút trống, vùng cao hơn được hình thành khi một điện tử chiếm lấy vị trí đã có sẵn một điện tử. Với mỗi điện tử trên mỗi nút thì vùng dưới lấp đầy, hệ là điện môi.

Các quỹ đạo nguyên tử của các nguyên tố kim loại chuyển tiếp được xây dựng như các trạng thái riêng của một thế năng hình cầu tạo ra bởi các ion kim loại chuyển tiếp. Khi nguyên tử được hình thành, các quỹ đạo nguyên tử tạo ra các vùng năng lượng do thế năng tuần hoàn của các nguyên tử. Độ rộng của vùng được xác định từ sự xen phủ của các quỹ đạo nguyên tử d trên hai kim loại chuyển tiếp liền kề. Do bán kính hàm sóng của quỹ đạo d là nhỏ so với hằng số mạng nên độ rộng vùng d được tạo thành là nhỏ. Thực tế trong các oxit kim loại chuyển tiếp hai quỹ đạo d liên kết gián tiếp thông qua một phối tử p (của nguyên tử O) như hình (1.1.4). Phối tử p như một cầu nối giữa hai quỹ đạo d , dẫn tới độ rộng vùng d trên thực tế còn nhỏ hơn. Một nguyên nhân khác dẫn tới độ rộng vùng hẹp là do hiệu ứng che chắn (screen effect), cụ thể các điện tử ở quỹ đạo $4s$ và $4d$ đẩy nhau mạnh hơn do chúng có lực hút với hạt nhân là nhỏ hơn so với các lớp điện tử

trong cùng. Kết quả là lực tương tác hiệu dụng lớn hơn so với độ rộng vùng. Đối với các vùng hẹp, mô hình liên kết chặt được xây dựng bằng quỹ đạo nguyên tử Wannier (quỹ đạo định xứ xung quanh nguyên tử) là một gần đúng hợp lý.



Hình 1.1.4: Cấu hình quỹ đạo 3d của kim loại chuyển tiếp có cầu nối bởi các quỹ đạo phối tử p [46].

Mô hình lý thuyết đầu tiên được đề xuất để giải thích chuyển pha giữa kim loại và điện môi Mott là mô hình Hubbard [47]-[49]. Mô hình được viết dưới dạng lượng tử hóa lần thứ hai

$$H = H_t + H_U - \mu N, \quad (1.1.2)$$

trong đó H_t là số hạng động năng và H_U là thế năng Coulomb của hai điện tử trên các vùng

$$H_t = - \sum_{ij\sigma, \alpha} t_{ij}^{\alpha} \left(c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{j\alpha\sigma} + H.c. \right),$$

$$H_U = \frac{1}{2} \sum_{ijkl} \sum_{\alpha\beta\lambda\gamma} \sum_{\sigma\sigma'} V_{\alpha\beta\gamma\lambda}(ij, kl) c_{i\alpha\sigma}^{\dagger} c_{j\beta\sigma'}^{\dagger} c_{l\lambda\sigma'} c_{k\gamma\sigma}$$

với $t_{ij}^{\alpha} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\alpha}(\mathbf{k}) e^{i\mathbf{k}(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)}$ là tham số nhảy nút, $\varepsilon_{\alpha}(\mathbf{k})$ là năng lượng của vùng α ,

$$V_{\alpha\beta\gamma\lambda}(ij, kl) = e^2 \int \int d\mathbf{r}_1 d\mathbf{r}_2 \frac{\psi_{\alpha}^*(\mathbf{r}_i - \mathbf{R}_i) \psi_{\beta}^*(\mathbf{r}_j - \mathbf{R}_j) \psi_{\lambda}(\mathbf{r}_\alpha - \mathbf{R}_\alpha) \psi_{\gamma}(\mathbf{r}_l - \mathbf{R}_l)}{|\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2|}.$$

Ta lưu ý, i, j, k, l là chỉ số các nút; $\alpha, \beta, \gamma, \lambda$ là chỉ số các vùng với các quỹ đạo (s, p, \dots).

Trong gần đúng thấp nhất ta chỉ xét tương tác Coulomb trên cùng một nút $i = j = k = l$ vì hàm sóng Wannier $\psi_\alpha^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j)$ ở các nút nguyên tử khác nhau thì giao nhau ít. Do đó H_U có thể viết lại thành

$$\mathcal{H}_U = \frac{1}{2} \sum_{i\alpha\sigma'} \sum_{\alpha\beta\gamma\lambda} \mathbf{V}(\alpha\beta, \gamma\lambda) c_{i\alpha\sigma}^\dagger c_{i\beta\sigma'}^\dagger c_{i\lambda\sigma'} c_{i\gamma\sigma}.$$

Mô hình Hubbard thông thường là khi ta xét gần đúng một vùng $\alpha = \beta = \gamma = \lambda$ nên bỏ qua chỉ số vùng và lúc đó đưa $\mathbf{V}(\alpha\beta, \gamma\lambda) = U$ ra ngoài. Cuối cùng ta có thể viết lại Hamiltonian (1.1.2) như sau

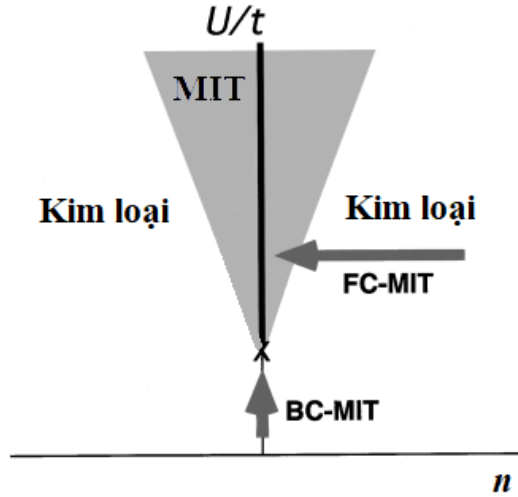
$$\mathcal{H} = -t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} n_{i\sigma}. \quad (1.1.3)$$

với $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) lần lượt là các toán tử sinh (hủy) điện tử ở vùng đơn tại nút i , spin σ tương ứng với toán tử số hạt $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}$. Số hạng đầu mô tả quá trình nhảy nút giữa các điện tử trong gần đúng liên kết chặt với tham số nhảy nút là $t_{ij} = t$, chỉ số $\langle ij \rangle$ muốn nói tổng ở số hạng đầu chỉ tính tới các nút lân cận gần nhất. Số hạng thứ hai mô tả tương tác Coulomb giữa hai điện tử trên cùng một nút i với spin ngược chiều. μ là thế hóa học, đặc trưng cho sự thay đổi năng lượng của hệ khi số hạt thay đổi.

Có hai loại chuyển pha kim loại - điện môi Mott trong mô hình Hubbard là chuyển pha do điều khiển số lấp đầy (FC-MIT) và chuyển pha do điều khiển độ rộng vùng (BC-MIT) tương ứng như trên hình (1.1.5).

Quan sát trực tiếp chuyển pha kim loại - điện môi Mott trong thí nghiệm là một thách thức lớn đối với các nhà thực nghiệm. Như Mott đã lập luận rằng khi ta thay đổi khoảng cách nguyên tử trong mạng a một cách liên tục, tại một giá trị a_0 nào đó sẽ quan sát được chuyển pha, tuy nhiên việc thay đổi a là không dễ dàng trong phòng thí nghiệm. Các nhà thực nghiệm bắt đầu quan sát chuyển pha kim loại - điện môi Mott bằng cách thay đổi độ rộng vùng (loại BC-MIT) trên cấu trúc của vật liệu loại perovskite ABO_3 (A là ion kim loại hóa trị 2 hoặc 3, B là kim loại chuyển tiếp $3d$), cụ thể, nguyên tố A được thay thế bằng một nguyên tố khác như trong [52], [53].

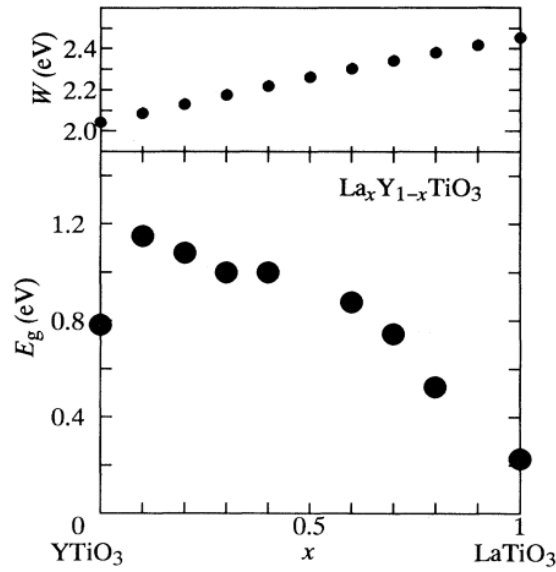
Ví dụ, nguyên tố La được thay bằng nguyên tố Y trong $LaTiO_3$, kết quả là góc liên kết Ti-O-Ti trong $LaTiO_3$ giảm từ 157° xuống còn 140° , điều này có thể làm giảm độ rộng



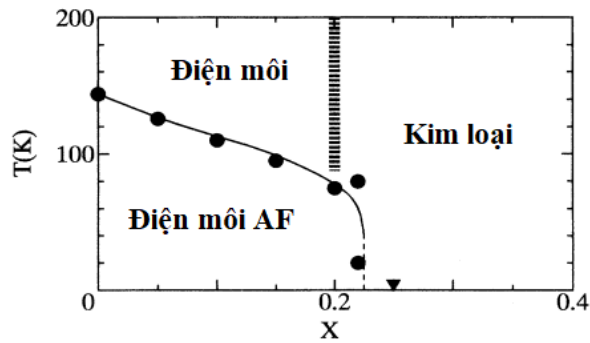
Hình 1.1.5: Chuyển pha kim loại - điện môi Mott theo mô hình Hubbard theo hai tham số U/t và số lấp đầy n . Có hai cách để có thể xảy ra chuyển pha kim loại - điện môi Mott là FC-MIT và BC-MIT [46].

vùng $3d t_{2g}$ xuống 30%. Do đó việc sử dụng các hợp chất dạng $R_{1-x}A_xTiO_3$ với nồng độ pha tạp x sẽ kiểm soát được độ rộng vùng W , và khe năng lượng có thể xác định thông qua độ dẫn quang. Khe năng lượng tăng dần từ 0.2 eV đến 1.2 eV khi tăng nồng độ pha tạp (giảm x) tương ứng với một sự chuyển pha từ kim loại sang điện môi (1.1.6).

Để quan sát được chuyển pha kim loại - điện môi loại FC-MIT, người ta thực hiện các thí nghiệm pha tạp cho các vật liệu của oxit kim loại chuyển tiếp có tương tác Coulomb lớn. Ví dụ pha tạp các lỗ trống làm thay đổi số lấp đầy của vật liệu $La_{1-x}Sr_xVO_3$. Giảm độ pha thu được như hình (1.1.7), kết quả cho thấy chuyển pha kim loại - điện môi Mott loại FC-MIT xảy ra khi $x_c \approx 0.2$.



Hình 1.1.6: Nửa trên: Độ rộng vùng W được xác định thông qua mô hình liên kết chặt tương ứng với nồng độ pha tạp x . Nửa dưới: Khe năng lượng E_g tương ứng với nồng độ pha tạp x cho $\text{La}_x\text{Y}_{1-x}\text{TiO}_3$ [51].



Hình 1.1.7: Giản đồ pha điện trở suất của $\text{La}_{1-x}\text{Sr}_x\text{VO}_3$ phụ thuộc vào x ở miền nhiệt độ từ 2 K - 200 K, chuyển pha FC-MIT xảy ra tại $x_c \approx 0.2$ [54].

1.1.2 Điện môi Anderson

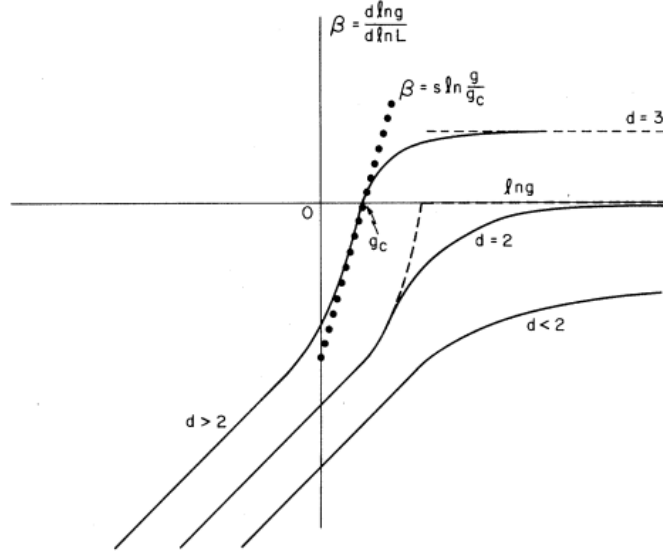
Phần lớn các nghiên cứu vật lý thường mô tả tính chất truyền dẫn của các điện tử trong hệ lý tưởng, không có tạp, các điện tử được mô tả bằng một hàm sóng Bloch trong một thể tuần hoàn của mạng tinh thể. Trong khi mất trật tự tồn tại rất phổ biến trong tinh thể vật rắn. Mạng tinh thể không bao giờ hoàn hảo, sẽ có những lỗi, khiếm khuyết, thừa hoặc trống nguyên tử và dẫn tới phá vỡ tính chất bất biến tịnh tiến.

Nghiên cứu các hệ mất trật tự rất khó và thường sẽ được bỏ qua trong các bước gần đúng đầu tiên. Tuy nhiên đến năm 1958, Anderson [2] đã đưa ra một cái nhìn mới về mất trật tự, theo đó chỉ với mất trật tự đủ nhỏ cũng có thể ảnh hưởng một cách định tính và đáng kể đến tính chất vật lý của hệ. Trong một mẫu mất trật tự, cấu trúc vi mô chưa được biết, không thể tiếp cận bằng thực nghiệm. Hơn nữa, các mẫu là khác nhau và chúng tương ứng với các cấu hình khác nhau. Do đó, yêu cầu một lý thuyết không phải giải quyết một trường hợp cụ thể mà cần phải mô tả cả một hệ thống, các thuộc tính chung. Điều này có thể đạt được nhờ việc đưa vào khái niệm tính ngẫu nhiên bao gồm tất cả các bậc tự do mà chúng ta không thể hoặc không muốn kiểm soát như vị trí chính xác của tạp và thay vào đó bằng một thể ngẫu nhiên. Mất trật tự của hệ cùng một lớp sẽ được đặc trưng bởi tính chất thống kê, tính chất chung phổ quát của chúng sẽ thu được bằng cách tính trung bình thống kê. Do đó các phương pháp tiếp cận cần quan tâm đến các giá trị trung bình thống kê. Chuyển pha kim loại - điện môi gây ra bởi mất trật tự gọi là chuyển pha Anderson, điện môi đó gọi là điện môi Anderson (hoặc định xứ Anderson).

Một số kết quả cho định xứ Anderson như sau: Sử dụng gần đúng nhóm tái chuẩn hóa (RG), lý thuyết tỉ lệ [10] thông qua độ dẫn lượng tử cho hệ mất trật tự chỉ ra rằng ở nhiệt độ không độ tuyệt đối tại số chiều $d = 1$ hoặc 2 hệ ở pha điện môi và không có sự khuếch tán lượng tử với bất kỳ giá trị nào của độ mất trật tự. Trong khi đó, tại số chiều $d > 2$ hệ mất trật tự có thể xảy ra quá trình chuyển pha kim loại - điện môi như hình (1.1.8).

Để khảo sát ảnh hưởng của mất trật tự đến chuyển pha, xét mô hình Anderson đơn giản có Hamiltonian cho hệ mất trật tự

$$H = \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i - g \sum_{\langle i,j \rangle} (c_i^\dagger c_j + c_j^\dagger c_i), \quad (1.1.4)$$



Hình 1.1.8: Sự phụ thuộc của tham số $\beta(g) = \frac{d \ln g}{\ln L}$ theo $\ln g$ ứng với số chiều $d > 2$, $d = 2$, $d < 2$. $g(L)$ là độ dẫn cực bộ được chuẩn hóa theo kích thước L của hệ. Đường chấm chấm là gần đúng $\beta = s \ln(g/g_c)$ cho trường hợp $d > 2$ [10].

trong đó các toán tử c_i^\dagger, c_i là các toán tử sinh, hủy một điện tử tại nút i . Tham số nhảy nút $g > 0$, kí hiệu $\langle i, j \rangle$ nghĩa là tổng lấy theo các nút lân cận gần nhất. Năng lượng trên mỗi nút ε_i là biến độc lập, tuân theo hàm phân bố đều trong khoảng $[-W/2, W/2]$, với W là đại lượng đặc trưng cho độ lớn mất trật tự. Bài toán sẽ được xem xét ở hai giới hạn đơn giản nhất là không có mất trật tự ($W = 0$) và mất trật tự vô hạn cho mạng vuông có điều kiện biên tuần hoàn [55].

Trường hợp 1: Không có mất trật tự

Trong trường hợp không có mất trật tự $W = 0$, Hamiltonian đưa về của hệ điện tử tự do, bất biến với phép biến đổi tịnh tiến. Do đó, trạng thái riêng (giá trị riêng) $H\psi_k = E_k\psi_k$ là các hàm sóng phẳng với d là số chiều của hệ

$$\psi_k(j) = \frac{1}{L^d} e^{ik_i \cdot j_i}, \quad i = 0, 1, \dots, d. \quad (1.1.5)$$

và $E_k = -2g \sum_{i=1}^d \cos k_i$, $k_i = \frac{2\pi}{L} n$, $n = 0, 1, \dots, L-1$, j là chỉ số nút.

Bài toán bây giờ là tính xác suất để điện tử trở lại vị trí ban đầu thông qua hàm sóng.

Giả sử vị trí ban đầu của điện tử tại nút j , hàm sóng

$$\psi(t=0, j) = \frac{1}{L^d} \sum_k e^{ik_i j_i}. \quad (1.1.6)$$

Khi đó hàm sóng phụ thuộc vào k và thời gian t một cách độc lập theo dạng

$$\psi(t, j) = \frac{1}{L^d} \sum_k e^{ik_i j_i} e^{-iE_k t} = \frac{1}{L^d} \sum_k e^{ik_i j_i + 2igt \sum_i^d \cos k_i}. \quad (1.1.7)$$

Ở giới hạn nhiệt độ $L \rightarrow \infty$

$$\psi(t, j) = \int_{k \in [0, 2\pi]^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} e^{ik_i j_i + 2igt \sum_i^d \cos k_i} = i^d \prod_{i=1}^d J_{j_i}(2tg), \quad (1.1.8)$$

trong đó J là hàm Bessel loại một. Do đó

$$\psi(t, j=0) \approx \frac{e^{-i2dtg}}{t^{d/2}} \int \frac{d^d p}{(2\pi)^d} e^{-igp}. \quad (1.1.9)$$

Xác suất để điện tử trở về vị trí ban đầu sau một thời gian t là

$$p(t) = |\psi(t, j=0)|^2 \approx \frac{1}{t^{d/2}}. \quad (1.1.10)$$

Như vậy, ở trường hợp không có mất trật tự, khi thời gian tiến tới vô cùng thì xác suất để điện tử trở về vị trí ban đầu tiến tới 0, có nghĩa là điện tử ở trạng thái lan truyền.

Hàm mật độ trạng thái địa phương có dạng

$$\rho(j, E) = \sum_k \delta(E - E_k) |\langle k | j \rangle|^2 \approx \int_{k \in [0, 2\pi]^d} \frac{d^d k}{(2\pi)^d} \delta \left(E + 2g \sum_{i=1}^d \cos(k_i) \right), \quad (1.1.11)$$

không phụ thuộc vào j . Với $d = 1$ thì $\rho(j, E) = \frac{1}{2\pi} \frac{\theta(2g - |E|)}{\sqrt{4g^2 - E^2}}$. Ở giới hạn nhiệt độ lực học $L \rightarrow \infty$ thì hàm mật độ trạng thái địa phương là hàm liên tục. Tính chất liên tục này là một dấu hiệu quan trọng để phân biệt so với các trường hợp có mất trật tự.

Trường hợp 2: Mất trật tự lớn

Khi mất trật tự đủ lớn hoặc tham số nhảy nút nhỏ g/W tiến tới 0. Khi đó trạng thái

riêng có dạng

$$\psi_i(j) = \delta_{j,i}, E_i = \varepsilon_i. \quad (1.1.12)$$

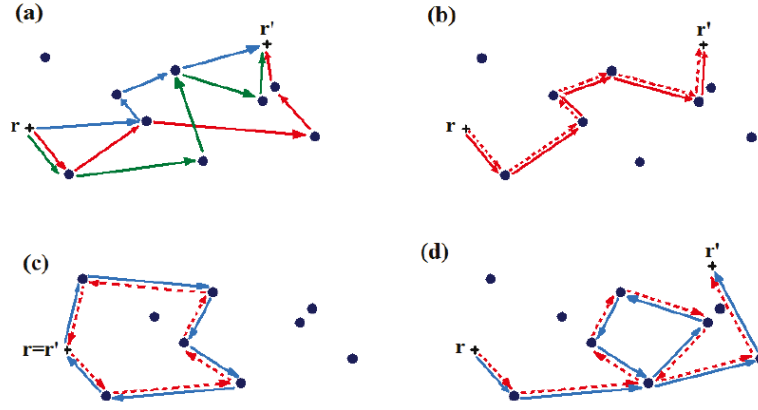
Trong giới hạn này thì $\psi_i(t, j) = e^{-i\varepsilon_0 t} \delta_{j,0}$, $E_i = \varepsilon_i$, dẫn tới xác suất trở lại vị trí ban đầu $p(t) = 1$. Như vậy trong giới hạn mất trật tự lớn, điện tử trở nên định xứ, hàm mật độ trạng thái địa phương có dạng rời rạc $\rho(j, E) = \delta(E - \varepsilon_j)$ khác với tính chất liên tục ở giới hạn độ mất trật tự yếu.

Sự ảnh hưởng của mất trật tự có thể được hình dung thông qua bức tranh đơn giản trong khuôn khổ lý thuyết truyền dẫn lượng tử. Cụ thể, sóng đến được giả định lan truyền tự do trong không gian và chịu sự tán xạ đàn hồi từ mỗi vị trí tạp. Sau đó, tất cả các sóng được tán xạ nhiều lần có thể giao thoa và mật độ hàm sóng là kết quả của quá trình giao thoa phức tạp. Trong cách tiếp cận của Feynmann trong cơ học lượng tử, sự lan truyền của đơn hạt lượng tử từ nút \mathbf{r} đến \mathbf{r}' được mô tả bởi biên độ phức của hàm ${}^1G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, được biết đến là hàm Green. Hàm này là tổng của tất cả các đóng góp được liên kết từ \mathbf{r} đến \mathbf{r}' , mỗi đóng góp i được mô tả bởi một biên độ phức $A_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}')$, mà pha của nó tỉ lệ với độ dài đường dẫn đầy đủ và với tất cả sự lệch pha riêng lẻ tại mỗi lần tán xạ. Xác suất để điện tử đi từ \mathbf{r} đến \mathbf{r}' là bình phương modul của hàm Green

$$P(\mathbf{r}, \mathbf{r}') = |G(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2 = \sum_{\text{path } j} |A_j(\mathbf{r}, \mathbf{r}')|^2 + \sum_{\text{path } i \neq j} A_i(\mathbf{r}, \mathbf{r}') A_j^*(\mathbf{r}, \mathbf{r}'). \quad (1.1.13)$$

Số hạng đầu tiên là hoàn toàn cổ điển, xác suất để đi từ \mathbf{r} đến \mathbf{r}' là tổng xác suất của tất cả các đường riêng rẽ đóng góp cho sự khuếch tán của điện tử trong hệ. Số hạng thứ hai tương ứng với giao thoa lượng tử giữa các đường khác nhau, và đóng góp của nó được cho là bị triệt tiêu khi lấy trung bình theo mất trật tự. Tuy nhiên, có những đóng góp vẫn tồn tại sau khi lấy trung bình theo mất trật tự. Ví dụ như trường hợp khi một đường A_i và một đường tự hợp A_j^* cùng đến các tâm tán xạ như nhau $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$ như quỹ đạo (c) trên hình (1.1.9), khi đó giao thoa lượng tử làm tăng xác suất trở về vị trí ban đầu. Khi $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$, lập luận tương tự áp dụng cho quỹ đạo nào chứa vòng lặp (quỹ đạo (d) trên hình (1.1.9)), do nó có thể giao thoa với quỹ đạo mà vòng lặp được di chuyển ngược; trong trường hợp này, giao thoa lượng tử làm giảm truyền dẫn từ \mathbf{r} đến \mathbf{r}' , và mặc dù chuyển động vẫn là khuếch tán nhưng hằng số khuếch tán và độ dẫn điện giảm. Cho tới nay, các nghiên cứu

¹Các đại lượng véc tơ trong luận án sẽ được kí hiệu in đậm



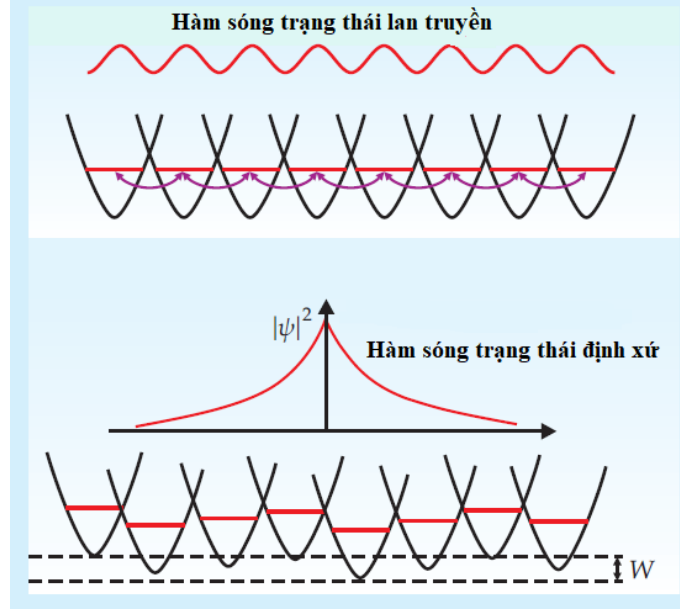
Hình 1.1.9: Đóng góp giao thoa của một vài cấu hình đa tán xạ trong môi trường mất trật tự. a) Ba cấu hình điển hình từ \mathbf{r} đến \mathbf{r}' , mỗi đường là một bước ngẫu nhiên trong bối cảnh có tạp chất và được thể hiện là mỗi một màu tương ứng. b)-d) là các đóng góp tồn tại sau khi lấy trung bình khi có mất trật tự. Các đường nét liền biểu diễn biên độ trường, các đường nét đứt biểu diễn sự liên hợp của nó. b) Đóng góp cổ điển dẫn tới khuếch tán, số hạng đầu tiên trong phương trình (1.1.13). c) Quỹ đạo vòng trong trường hợp $\mathbf{r} = \mathbf{r}'$, góp phần gia tăng sự chuyển động về vị trí ban đầu. d) Quỹ đạo chứa một vòng lặp trong trường hợp $\mathbf{r} \neq \mathbf{r}'$, nó chi phối các định xứ yếu và làm giảm sự khuếch tán [60].

mới chỉ dừng lại ở những quỹ đạo chứa một vòng lặp duy nhất, rất nhiều những đóng góp khác (những quỹ đạo nhiều vòng và tất cả những cặp đường dẫn có cùng chung tán xạ đều kết thúc cùng một điểm) mang lại hiệu ứng giao thoa không triệt tiêu. Chúng có thể dẫn tới không chỉ làm giảm độ dẫn, mà nó làm triệt tiêu hoàn toàn sự truyền dẫn, đưa tới một hiệu ứng gọi là định xứ mạnh hay điện môi Anderson.

Khi không có mất trật tự, hàm sóng của điện tử trong mạng tinh thể tuần hoàn là hàm sóng Bloch. Nhưng khi có mất trật tự, thay vì coi các điện tử như các sóng lan truyền với thời gian sống ngắn, chúng có thể xem như sóng giới hạn trong không gian có thời gian sống dài. Hàm sóng $\psi(r)$ của điện tử như hàm mũ định xứ xung quanh điểm r_0 một khoảng cách ξ (gọi là độ dài định xứ) có dạng như hình (1.1.10).

$$|\psi(r)|^2 \sim A \exp\left(-\frac{|r - r_0|}{\xi}\right). \quad (1.1.14)$$

Độ dài định xứ ξ đã được đánh giá trong một số trường hợp hệ ngưng tụ Bose-Einstein (BEC) một chiều [61], hai chiều và ba chiều [10],[63],[64]. Cụ thể, độ dài định xứ phụ thuộc vào biên độ thế ngẫu nhiên V_R và độ dài tương quan của thế ngẫu nhiên σ_R (đối với thế ngẫu nhiên, biến đổi Fourier của hàm tương quan triệt tiêu ứng với $k > 1/\sigma_R$) trong



Hình 1.1.10: Hàm sóng của điện tử trong thế tuần hoàn ion có dạng là hàm sóng Bloch (phía trên), hàm này là hàm lan truyền. Trong khi đó, nếu như có mất trật tự thì bất biến tịnh tiến bị phá vỡ, thế năng tại mỗi nguyên tử là một đại lượng ngẫu nhiên, khi đó thì hàm sóng trở nên định xứ, suy giảm theo hàm mũ trong không gian (phía dưới), W đặc trưng cho độ mất trật tự của các nút tập trong hệ [56].

trường hợp hệ ngưng tụ Bose-Einstein (BEC) một chiều có thể mất trật tự [61] như sau

$$\xi = \frac{2\hbar^4 k^2}{\pi m^2 V_R^2 \sigma_R (1 - k\sigma_R) \Theta(1 - k\sigma_R)} \quad (1.1.15)$$

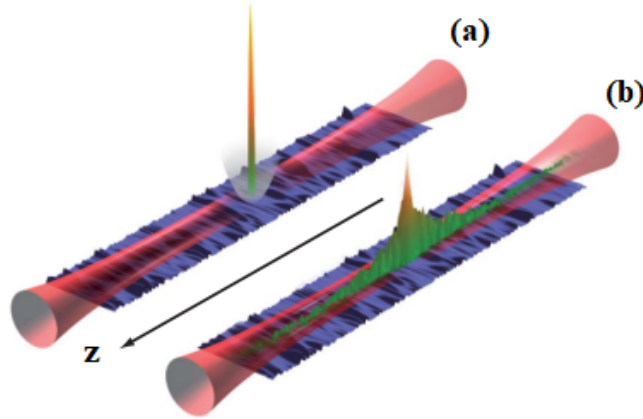
với Θ là hàm Heaviside. Kết quả này phù hợp với kết quả thu được từ phép tính ma trận truyền [62]. Đối với trường hợp ba chiều, lý thuyết nhóm tái chuẩn hóa (RG) [64], [63], [10] đưa ra lời giải của độ dài định xứ trong vùng lân cận $W < W_c$ như sau

$$\xi \propto (W - W_c)^\nu, \quad (1.1.16)$$

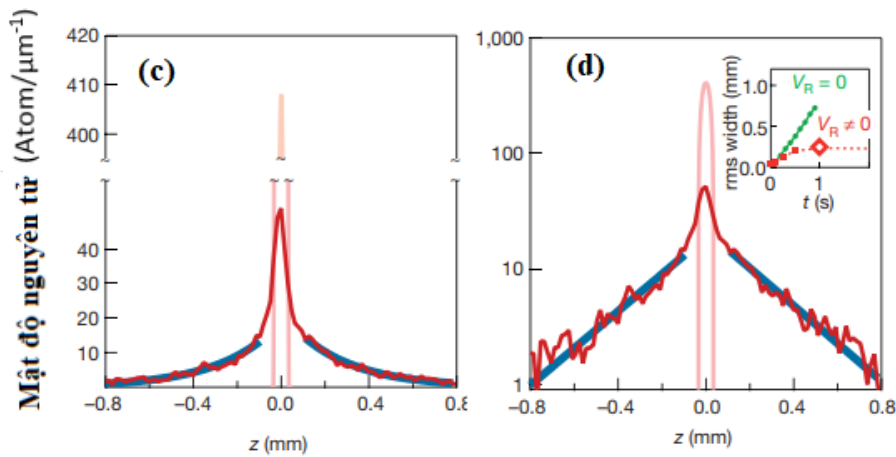
với giá trị số mũ tới hạn $\nu \approx 1.68$ (≈ 1.58 khi tính toán sử dụng mô phỏng mô hình Anderson [17]).

Về mặt thực nghiệm, định xứ Anderson đã được tìm thấy với sóng ánh sáng [65] - [66], vi sóng [67]-[68], sóng âm [70], và khí điện tử [71]. Tuy nhiên, đó đều không phải là các quan sát trực tiếp định xứ hàm số mũ của bất kỳ sóng vật chất loại nào. Năm 2008, nhóm nghiên cứu sinh của Philippe Bouyer [58] lần đầu tiên đã quan sát trực tiếp định xứ Anderson của sóng vật chất. Kết quả là quan sát được sự định xứ hàm số mũ của hệ

ngưng tụ Bose-Einstein (BEC) một chiều được kiểm soát bởi chùm laser thông qua mật độ nguyên tử như hàm của thời gian. Ở mật trật tự đủ yếu và trạng thái tĩnh, mật độ nguyên tử định xứ theo hàm mũ, một dấu hiệu trực tiếp của định xứ Anderson như hình (1.1.12).



Hình 1.1.11: (a) Trạng thái ban đầu của ngưng tụ Bose-Einstein, (b) Bẫy từ trường theo chiều dọc z tắt, trạng thái định xứ xuất hiện [58].

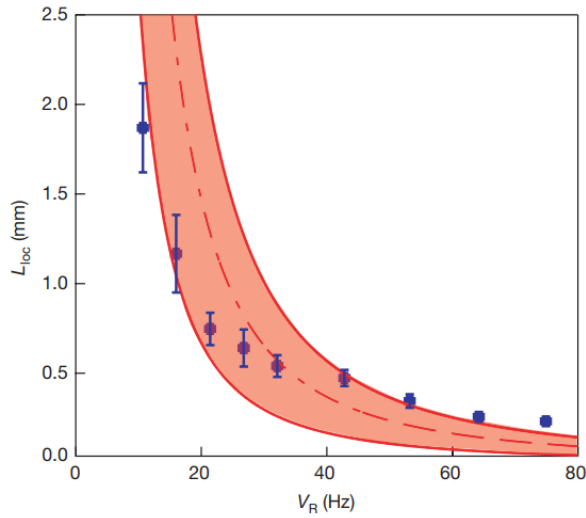


Hình 1.1.12: Đường màu hồng trong (c), (d) là mật độ trạng thái ban đầu, màu đỏ tương ứng với quan sát định xứ Anderson [58].

Thí nghiệm bắt đầu bằng việc đưa vào khoảng 1.7×10^4 nguyên tử ^{87}Ru dọc theo một ống có bán kính theo chiều ngang là $3 \mu\text{m}$ và theo chiều dọc là $35 \mu\text{m}$. Một bẫy quang - từ dị hướng được tạo ra dọc theo trục z , trong đó một sóng quang học với tần số bẫy theo chiều ngang $\omega_{\perp}/2\pi = 70 \text{ Hz}$ và một bẫy từ trường có tần số theo phương dọc $\omega_z/2\pi = 5.4 \text{ Hz}$. Một thể mất trật tự sử dụng chùm laser thông qua tấm khuếch tán áp dụng cho hệ.

Thời điểm ban đầu $t = 0$ và tắt bẫy từ trường, BEC bắt đầu mở rộng dọc theo trục z khoảng một vài mm (do tương tác đẩy nội tại giữa các nguyên tử ^{87}Rb). Do sự có mặt của thế quang học mất trật tự, BEC bắt đầu mở rộng nhưng sự mở rộng nhanh chóng dừng lại như 1.1.11 (b).

Độ dài định xứ thu được từ hàm mật độ trạng thái cũng được so sánh với kết quả lý thuyết tương ứng như phương trình (1.1.15) trong [61]. Ở hình (1.1.13) các chấm tròn là kết quả thu được từ hàm sóng của thí nghiệm. Đường nét đứt là kết quả thu được từ phương trình (1.1.15). Miền tô đậm là miền sai số. Như vậy, kết quả cho độ dài định xứ là phù hợp với kết quả lý thuyết.



Hình 1.1.13: Độ dài định xứ xác định trong thí nghiệm BEC một chiều [58].

1.2 Lý thuyết môi trường điển hình

1.2.1 Lý thuyết trường trung bình động (DMFT)

Việc khám phá ra các hợp chất của các fermion nặng và siêu dẫn nhiệt độ cao đã gây chú ý mạnh mẽ tới các hệ tương quan mạnh. Trong các hệ này tương quan điện tử - điện tử là đáng kể so với động năng của các điện tử. Nhiều mô hình và lý thuyết được đưa ra để giải thích cho các thí nghiệm trên các oxit của kim loại chuyển tiếp, từ chuyển pha kim loại - điện môi cho tới các vấn đề về phản sắt từ linh động. Trong đó, hai mô hình đơn giản nhất là mô hình Hubbard [47],[48],[49] và mô hình mạng Kondo [50]. Ở trường hợp một chiều, chúng ta có thể khảo sát hai mô hình một cách hệ thống bằng nhiều phương

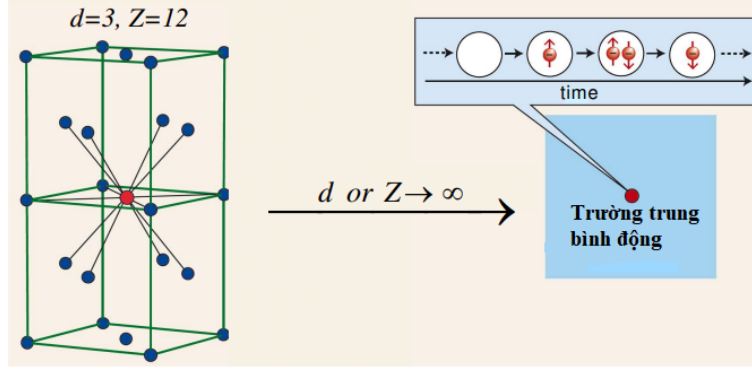
pháp khác nhau. Tuy nhiên, ở số chiều lớn hơn, chúng ta không có một lời giải tổng quát cho hai mô hình này. Một số phương pháp tính số góp phần giải quyết các mô hình này như phương pháp chéo hóa chính xác (ED) và Monte Carlo lượng tử (QMC). Tuy nhiên, phương pháp chéo hóa chính xác bị giới hạn bởi sự tăng lên theo cấp số nhân của số phép tính theo kích thước của hệ, trong khi đó phương pháp Monte Carlo lượng tử bị hạn chế ở miền nhiệt độ cao.

Một gần đúng mới đã được xây dựng và phát triển dựa trên ý tưởng là thay thế một mạng nhiều điện tử bằng một bài toán tạp. Cụ thể, bức tranh tạp được hình dung là một nút lượng tử được nhúng vào một bể điện tử (các điện tử trong bể là không tương tác với nhau) và tương tác với bể điện tử này thông qua một trường hiệu dụng được xác định một cách tự hợp. Mô hình tạp cung cấp một cái nhìn trực quan về động lực học cục bộ của một hệ lượng tử nhiều hạt. Rất nhiều các phương pháp được đưa ra để giải quyết mô hình tạp này. Các điều kiện tự hợp cần thỏa mãn tính chất bất biến tịnh tiến và các hiệu ứng kết hợp trong mạng. Gần đúng này được gọi là gần đúng tự hợp đơn tạp (LISA). Bản chất của LISA là lý thuyết trung bình Weiss cho hệ lượng tử nhiều hạt. Lý thuyết trung bình ở đây được hiểu là không phải tất cả các thăng giáng đều bị đóng băng. Cụ thể, chỉ thăng giáng trong không gian là bị đóng băng còn tất cả các thăng giáng địa phương vẫn được xem xét (ví dụ như trạng thái lượng tử tại một nút thay đổi theo thời gian). Do đó LISA còn được gọi là lý thuyết trường trung bình động. Georges and Kotliar chỉ ra rằng một pha kim loại tại $d = \infty$ của mô hình Hubbard là một pha chất lỏng Fermi với mọi giá trị pha tạp và độ lớn tương tác [8]. Mục đích chính của lý thuyết trường trung bình động là thay vì giải quyết với bài toán mạng với nhiều bậc tự do, chúng ta xét một nút lượng tử nhúng trong một bể các điện tử chứa tất cả các bậc tự do còn lại. Khi đó bài toán sẽ được đưa về bài toán Anderson một tạp hiệu dụng, các bậc tự do của bể điện tử được lấy gần đúng bằng một hàm lai và phải xác định một cách tự hợp.

Xét Hamiltonian của hệ có dạng

$$H = - \sum_{ij\sigma} t_{i,j} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1.2.1)$$

với $c_{i\sigma}^\dagger (c_{i\sigma})$ là toán tử sinh (hủy) điện tử ở nút i với spin σ . t_{ij} là tích phân nhảy giữa hai nút i, j . U là thế Coulomb của hai điện tử trên cùng một nút.



Hình 1.2.1: Xét cấu trúc ở số chiều $d = 3$, số phối vị $Z = 12$, có thể coi là lớn. Ở giới hạn d hoặc $Z \rightarrow \infty$, bài toán nhiều hạt có thể đưa về bài toán một tạp nhúng vào một bể điện tử. Các điện tử trong bể có thể nhảy vào hoặc ra nút này và tương tác với tạp, trạng thái điện tử ở nút có thể thay đổi theo thời gian [59].

Hàm tác động S cho mô hình Hubbard được cho bởi

$$S = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^* c_{j\sigma} + \sum_i U c_{i\uparrow}^*(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{i\downarrow}^*(\tau) c_{i\downarrow}(\tau) \right] \quad (1.2.2)$$

với $c_{i\sigma}^*, c_{i\sigma}$ là các biến Grassmann.

Tách hàm tác động S làm ba phần

$$S = S_0 + \Delta S + S^{(0)}, \quad (1.2.3)$$

trong đó S_0 là hàm chỉ chứa các biến tại nút 0

$$S_0 = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{0\sigma} c_{0\sigma}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{0\sigma}(\tau) + U c_{0\uparrow}^*(\tau) c_{0\uparrow}(\tau) c_{0\downarrow}^*(\tau) c_{0\downarrow}(\tau) \right]. \quad (1.2.4)$$

ΔS là hàm chứa tham số nhảy nút từ nút 0 đến các nút còn lại $i \neq 0$

$$\Delta S = - \int_0^\beta d\tau \sum_{i \neq 0, \sigma} [t_{i0} c_{i\sigma}^* c_{0\sigma} + t_{0i} c_{0\sigma}^* c_{i\sigma}] \quad (1.2.5)$$

và phần còn lại kí hiệu là $S^{(0)}$ là phần hàm tác động với $i, j \neq 0$

$$S^{(0)} = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i \neq 0, \sigma} c_{i\sigma}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{i\sigma}(\tau) - \sum_{ij \neq 0, \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^* c_{i\sigma} + \sum_{i \neq 0} U c_{i\uparrow}^*(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{i\downarrow}^*(\tau) c_{i\downarrow}(\tau) \right]. \quad (1.2.6)$$

Ở giới hạn $d \rightarrow \infty$, hàm mật độ trạng thái xét cho mạng siêu lập phương sẽ trở thành hàm Gauss và mở rộng một cách tùy ý (công thức 7.4 trong [59]), do đó để hàm sóng có ý nghĩa ta cần lấy tỉ lệ tham số nhảy nút t_{ij} thành $\frac{t^*}{\sqrt{d}}$. Khi $Z \rightarrow \infty$ chỉ có đóng góp của các hàm Green $G_{ij\sigma}^{(0)}$

$$G_{ij\sigma}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2) \equiv \langle T_\tau c_{i\sigma}(\tau_1) c_{j\sigma}^*(\tau_2) \rangle_{(0)}. \quad (1.2.7)$$

Áp dụng định lý liên kết cụm và chỉ xét các đóng góp của hàm liên thông, hàm tác động địa phương DMFT có thể được biểu diễn thông qua trường trung bình "Weiss" $\mathcal{G}(\tau_1 - \tau_2)$ (mô tả biên độ hiệu dụng để một điện tử được tạo ra tại nút 0 ở thời điểm τ_1 - nhảy từ bể điện tử vào và bị hủy ở thời điểm τ_2 - trở lại bể điện tử) như sau

$$S_{loc} = - \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_\sigma c_\sigma^*(\tau_1) \mathcal{G}_\sigma^{-1}(\tau_1 - \tau_2) c_{0\sigma}(\tau_2) + U \int_0^\beta d\tau c_{0\uparrow}^*(\tau) c_{0\uparrow}(\tau) c_{0\downarrow}^*(\tau) c_{0\downarrow}(\tau) \quad (1.2.8)$$

với $\mathcal{G}_\sigma^{-1}(\tau_1 - \tau_2) = - \left(\frac{\partial}{\partial \tau_1} - \mu \right) \delta_{\tau_1 \tau_2} - \Delta_\sigma(\tau_1 - \tau_2)$, $\Delta_\sigma(\tau_1 - \tau_2)$ là hàm lai hóa được định nghĩa

$$\Delta_\sigma(\tau_1 - \tau_2) = \sum_{j, j \neq 0} t_{i0}^* t_{j0} G_{ij\sigma}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2). \quad (1.2.9)$$

Cuối cùng, ta cần mối quan hệ giữa hàm Green $G_{ij\sigma}^{(0)}(\tau - \tau')$ ($i, j \neq 0$) và hàm Green của toàn mạng

$$G_{ij\sigma}^{(0)} = G_{ij\sigma} - G_{i0\sigma} G_{00\sigma}^{-1} G_{0j\sigma}. \quad (1.2.10)$$

Để thuận tiện, mối quan hệ giữa các hàm Green địa phương $G_{00\sigma} \equiv G_\sigma$ và trường trung

bình "Weiss" \mathcal{G}^{-1} được thể hiện qua phương trình Dyson

$$\begin{aligned} G_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) &= \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(i\omega_n) - \Sigma_{\sigma}(i\omega_n) \\ &= i\omega_n + \mu - \Delta_{\sigma}(i\omega_n) - \Sigma_{\sigma}(i\omega_n). \end{aligned} \quad (1.2.11)$$

Khi $d \rightarrow \infty$ ta có $\Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, \omega) \equiv \Sigma_{\sigma}(\omega)$, hàm Green mạng trong không gian \mathbf{k} , $G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n)$ được cho bởi

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma_{\sigma}(i\omega_n)}. \quad (1.2.12)$$

Thực hiện biến đổi Hilbert ta thu được hàm Green địa phương

$$\begin{aligned} G_{\sigma}(i\omega_n) &= \sum_{\mathbf{k}\sigma} G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma_{\sigma}(i\omega_n)}, \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\rho_0(\omega)}{i\omega_n - \varepsilon + \mu - \Sigma_{\sigma}(i\omega_n)}, \end{aligned} \quad (1.2.13)$$

trong đó $\rho_0(\omega)$ tương ứng với hàm mật độ trạng thái không tương tác. Vòng tự hợp trong DMFT được đóng lại bằng phương trình

$$G_{i\sigma}(i\omega_n) = -\frac{1}{Z} \int \prod_{i\sigma} Dc_{i\sigma}^* Dc_{i\sigma} [c_{i\sigma}(i\omega_n) c_{i\sigma}^*(i\omega_n)] \exp[-S_{loc}] \quad (1.2.14)$$

với

$$Z = \int \prod Dc_{i\sigma}^* Dc_{i\sigma} \exp[-S_{loc}]. \quad (1.2.15)$$

Các phương trình (1.2.8)-(1.2.14) tạo thành hệ phương trình tự hợp cho hàm Green địa phương $G_{\sigma}(i\omega_n)$ và năng lượng riêng $\Sigma_{\sigma}(i\omega_n)$. Các phương trình này có thể được giải bằng phương pháp lặp như sau: Đầu tiên bắt đầu với một giá trị của năng lượng riêng, thông qua phương trình (1.2.13) để thu được hàm Green địa phương, sau đó thu được hàm Green của bề điện tử từ phương trình (1.2.11). Sau đó xác định hàm tác động địa phương mới S_{loc} ở phương trình (1.2.8) để tính hàm Green địa phương mới ở (1.2.14) và hàm Green bề mới. Tuy vậy, việc giải bài toán một tạp vẫn là một bài toán khó, không thể giải tổng quát.

Cuối cùng, chú ý rằng hàm tác động S_{loc} mô tả động lực học của tạp với tương tác đẩy

liên kết với bề điện tử dẫn, do vậy nó tương đương với mô hình tạp Anderson

$$H_{imp} = U c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow} c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\downarrow} - \mu \sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + \sum_{k\sigma} \left(V_{k\sigma} a_{k\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + H.c \right) + \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} a_{k\sigma}^{\dagger} a_{k\sigma}, \quad (1.2.16)$$

trong đó $a_{k\sigma}^{\dagger}$ ($a_{k\sigma}$) là toán tử sinh (hủy) điện tử dẫn với năng lượng $\varepsilon_{k\sigma}$, $V_{k\sigma}$ là yếu tố ma trận lai hóa giữa tạp và bề điện tử.

1.2.2 Lý thuyết trường trung bình động (DMFT) - Lý thuyết môi trường điển hình (TMT)

Các tính chất của một vật rắn không chỉ chịu ảnh hưởng của tương tác giữa các điện tử trong thể tuần hoàn của mạng tinh thể, vì ở đó luôn có hiện diện của mất trật tự, khuyết tật trên mạng, hay những tạp. Cụ thể, tương tác Coulomb và mất trật tự đều dẫn tới sự chuyển pha kim loại - điện môi khác nhau. Chuyển pha kim loại - điện môi Mott gây ra bởi lực đẩy Coulomb giữa các điện tử, kết quả là xuất hiện một khe của hàm mật độ trạng thái tại mức Fermi. Ngược lại, định xứ Anderson là do sự tán xạ ngược của các hạt không liên kết từ sự phân bố ngẫu nhiên của các tạp [2]. Tại chuyển pha Anderson đặc tính của hàm phổ thay đổi từ hàm phổ liên tục sang hàm phổ điểm dày đặc. Cả hai chuyển pha MITs này đều được đặc trưng bởi một đại lượng duy nhất là hàm mật độ trạng thái địa phương (LDOS). Mặc dù LDOS không phải là một thông số trật tự liên quan đến một chuyển pha phá vỡ đối xứng, nhưng nó có thể phân biệt được một kim loại và một điện môi.

DMFT có thể mở rộng bài toán tương quan điện tử với mất trật tự địa phương [73]. Xét mô hình Anderson - Hubbard cho điện tử tạp với Hamiltonian

$$\hat{H} = -t \sum_{ij,\sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_i n_{i\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (1.2.17)$$

năng lượng ionic ε_i là biến ngẫu nhiên địa phương, tuân theo một hàm phân bố $P(\varepsilon_i)$, có thể là một hàm liên tục. Nếu trong khuôn khổ của DMFT ảnh hưởng của mất trật tự được xác định thông qua giá trị trung bình cộng của LDOS sẽ không mô tả được tính chất vật lý của định xứ Anderson [72]-[73]. Để khắc phục được điều này Dobrosavljevic [19] đã cùng các cộng sự đưa ra một biến thể của DMFT ở đó giá trị trung bình nhân của

LDOS được tính toán tự hợp như một thông số trật tự cho chuyển pha Anderson. Nhóm của ông đã tập trung tìm một thông số trật tự có thể xác định thông qua tính toán tự hợp và mô tả theo kiểu trường trung bình cho định xứ Anderson. Hình thức luận này không bị hạn chế ở miền nhiệt độ thấp hoặc miền chất lỏng Fermi, và ngoài ra có thể kết hợp với lý thuyết trường trung bình động DMFT cho hệ tương quan mạnh [20], [29]. Lý thuyết này được gọi là lý thuyết môi trường điển hình (TMT), mở ra hướng giải quyết cho các hệ điện tử mà chịu chi phối bởi vật lý phi nhiễu loạn.

Dựa trên ý tưởng xem xét từng hạt riêng rẽ của Anderson [2], Dobrosavljevic và các cộng sự tiến hành khảo sát khả năng một điện tử phi định xứ từ một nút cho sẵn khi mất trật tự lớn. Điều này dễ dàng thực hiện nhất bằng cách tập trung vào mật độ trạng thái điện tử địa phương tại nút i (LDOS) (không phải là trung bình)

$$\rho_i(\omega) = \sum_n \delta(\omega - \omega_n) |\psi_n(i)|^2. \quad (1.2.18)$$

Mật độ trạng thái toàn cục ADOS (lấy trung bình) là không bị triệt tiêu tại chuyển pha Anderson trong khi đó LDOS trải qua một sự thay đổi về chất khi xảy ra quá trình định xứ. Điều này xuất phát từ thực tế rằng LDOS đo trực tiếp biên độ địa phương của hàm sóng điện tử. Khi điện tử định xứ, hàm phổ chuyển từ liên tục sang gián đoạn, và giá trị điển hình của LDOS bị triệt tiêu. Ở miền kim loại, nhưng rất gần với sự chuyển pha, các đỉnh của hàm delta trong công thức (1.2.18) chuyển thành các trạng thái cộng hưởng tồn tại lâu dài, và do đó thu được một tỉ lệ thoát hữu hạn từ một nút cho sẵn. Theo quy tắc vàng Fermi, tỉ lệ thoát này có thể ước tính thông qua tham số nhảy nút t và mật độ trạng thái địa phương ρ khu vực lân cận của nút cho sẵn. Do vậy, tỉ lệ thoát điển hình được xác định bởi mật độ trạng thái điển hình (TDOS), vậy nên TDOS trực tiếp xác định độ dẫn của các điện tử. Những lập luận đơn giản này gợi ý rằng TDOS nên được nhìn nhận như một thông số trật tự phù hợp tại chuyển pha Anderson. Bởi vì hàm phân bố cho LDOS càng mở rộng khi quá trình chuyển pha đang tiệm cận, giá trị điển hình mong muốn được biểu thị tốt bởi giá trị trung bình nhân $\rho_{\text{typ}} = \exp \langle \ln \rho \rangle$, với $\langle \rangle$ nghĩa là lấy giá trị trung bình thông thường.

Để xây dựng một lý thuyết tự hợp cho các thông số trật tự, Dobrosavljevic [19] đã đề xuất phương pháp hốc (Cavity method), một chiến lược tương tự mượn từ DMFT [8]. Trong cách tiếp cận này, một nút cho sẵn được nhúng vào một môi trường hiệu dụng đặc

trung bởi hàm năng lượng riêng địa phương $\Sigma(\omega)$. Để đơn giản, họ tập trung vào một mô hình đơn dải liên kết chặt của các điện tử không tương tác với năng lượng trên nút ε_i theo phân bố $P(\varepsilon_i)$. Khi đó hàm Green địa phương tương ứng sẽ có dạng

$$G(\omega, \varepsilon_i) = [\omega - \varepsilon_i - \Delta(\omega)]^{-1}, \quad (1.2.19)$$

trong đó, hàm hốc $\Delta(\omega)$ được đưa ra bởi

$$\Delta(\omega) = \Delta_0(\omega - \Sigma(\omega)) \quad (1.2.20)$$

và

$$\Delta_0(\omega) = \omega - \frac{1}{G_0(\omega)} \quad (1.2.21)$$

với hàm Green mạng

$$G_0(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\rho_0(\omega')}{\omega - \omega'} \quad (1.2.22)$$

là biến đổi Hilbert của hàm mật độ trạng thái không tương tác $\rho_0(\omega)$.

Với môi trường hiệu dụng được xác định từ năng lượng riêng $\Sigma(\omega)$, hàm mật độ trạng thái điển hình TDOS được cho bởi

$$\rho_{\text{typ}}(\omega) = \exp \left\{ \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \ln \rho(\omega, \varepsilon_i) \right\}, \quad (1.2.23)$$

trong đó LDOS $\rho(\omega, \varepsilon_i) = -1/\pi \Im G(\omega, \varepsilon_i)$. Hàm Green tương ứng với $\rho_{\text{typ}}(\omega)$ được xác định bởi biến đổi Hilbert

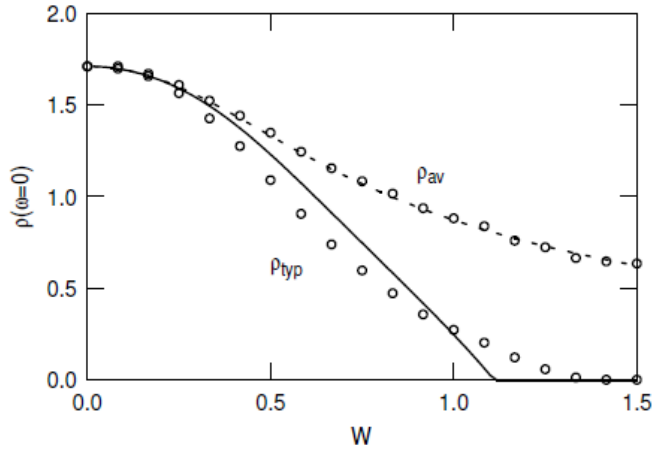
$$G_{\text{typ}} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\rho_{\text{typ}}(\omega')}{\omega - \omega'}. \quad (1.2.24)$$

Cuối cùng, vòng lặp được khép lại bằng việc đặt hàm Green của môi trường hiệu dụng G_{em} bằng với hàm Green tương ứng với thông số trật tự địa phương, nghĩa là

$$G_{\text{em}}(\omega) = G_0(\omega - \Sigma(\omega)) = G_{\text{typ}}(\omega). \quad (1.2.25)$$

Ở đây, các bước được xác định bởi các phương trình (1.2.19)-(1.2.25) là không chỉ riêng cho bài toán không có tương tác. Quy trình giống như vậy có thể được sử dụng trong bất kỳ lý thuyết đặc trưng bởi một năng lượng riêng địa phương. Khác biệt duy nhất trong quy trình này là định nghĩa giá trị điển hình của mật độ trạng thái địa phương TDOS

ở phương trình (1.2.23) như một thông số trật tự cho chuyển pha kim loại - điện môi. Nếu chúng ta chọn trung bình cộng thay vì trung bình nhân cho LDOS, ở giới hạn không tương tác lý thuyết này sẽ đưa về gần đúng thế kết hợp CPA [72], [74] cho ra kết quả hữu hạn cho ADOS với bất kỳ giá trị nào của mất trật tự, nhưng không tìm ra chuyển pha Anderson. Do đó TMT là một lý thuyết có đặc trưng rất tương tự với CPA, tuy sự khác biệt nhỏ nhưng rất quan trọng đó là việc chọn thông số trật tự cho định xứ Anderson. Hình (1.2.2) là kết quả chính mà nhóm Dobrosavljevic [19] đã sử dụng lý thuyết môi



Hình 1.2.2: Hàm mật độ trạng thái được tính theo trung bình cộng ρ_{av} (arithmetic averaged) và trung bình nhân ρ_{typ} (geometric averaged) như là hàm của độ mất trật tự W . Kết quả thu được cho thấy ρ_{typ} triệt tiêu tại một giá trị hữu hạn đặc trưng cho độ mất trật tự W , trong khi ρ_{av} vẫn là giá trị hữu hạn khi W lớn [19].

trường điển hình áp dụng cho mạng vuông ba chiều. Kết quả cho thấy giá trị trung bình cộng của hàm mật độ trạng thái ρ_{av} không cho được giá trị tới hạn ở miền mất trật tự lớn. Trong khi đó thì một giá trị tới hạn của cường độ mất trật tự W có thể thu được khi ρ_{typ} tiến tới 0. Điều này chứng tỏ rằng việc xấp xỉ giá trị điển hình của hàm mật độ trạng thái TDOS bằng giá trị trung bình nhân đã đưa ra một tiêu chuẩn tường minh cho chuyển pha Anderson và hơn thế nó không chỉ tốt cho bài toán không có tương tác, mà còn tiếp tục thành công cho các bài toán phức tạp hơn khi có cả tương tác và mất trật tự.

1.3 Các nguyên tử cực lạnh trên mạng quang học

1.3.1 Mạng quang học trật tự

Phương pháp để lưu trữ và bẫy các nguyên tử trung hòa hay các hạt điện tích được dùng trong các thí nghiệm là chìa khóa cho những tiến bộ khoa học từ phạm vi hạt cơ bản cho tới các nguyên tử cực lạnh. Vùng năng lượng cực lạnh có thể tiếp cận từ sự phát triển của việc làm mát hệ bằng chùm tia laser và các bẫy nguyên tử được phát triển từ những năm 1986 [77], [78].

Đối với các hạt điện tích có tương tác Coulomb mạnh, chúng có thể được bẫy trong điện trường hoặc trường điện từ [79]. Kiểu bẫy này không phụ thuộc vào cấu trúc nội tại của ion, rất thuận tiện để thực hiện nhiều loại thí nghiệm.

Đối với các nguyên tử trung hòa, cơ chế để bẫy yếu hơn so với tương tác Coulomb. Bẫy nguyên tử trung hòa có thể thực hiện trên ba loại tương tác khác nhau tương ứng bẫy áp suất bức xạ, bẫy từ và bẫy lưỡng cực quang.

Bẫy áp suất bức xạ: Hoạt động gần với cộng hưởng ánh sáng, có độ sâu của thế theo đơn vị nhiệt độ (U/k_B) cỡ khoảng vài K [80], do sự phân tán rất mạnh nên chúng cho phép bắt giữ và tích tụ các nguyên tử ngay cả với khí nhiệt. Trong loại bẫy này, tập hợp các nguyên tử sẽ được làm lạnh đến nhiệt độ cỡ $10 \mu\text{K}$. Tuy nhiên, hiệu suất theo phương pháp bẫy này bị giới hạn bởi các kích thích quang mạnh mẽ. Nhiệt độ có thể đạt được bị giới hạn bởi giạt phonon, mật độ có thể đạt được bị giới hạn bởi bức xạ bẫy và các va chạm không đàn hồi bởi ánh sáng.

Bẫy từ [81]: Dựa vào trạng thái của lực trên mômen lưỡng cực từ trong trường không đồng nhất. Độ sâu của thế cỡ khoảng 100 mK , là công cụ tuyệt vời để làm bay hơi và ngưng tụ Bose-Einstein. Tuy nhiên, kiểu bẫy từ này có một hạn chế là phụ thuộc vào trạng thái nội tại của nguyên tử.

Bẫy lưỡng cực quang học: Dựa vào sự tương tác của lưỡng cực điện với ánh sáng, yếu hơn nhiều so với hai cơ chế ở trên. Độ sâu của hố thế nhỏ hơn 1 mK . Kích thích quang học có thể giữ được ở mức cực thấp, do đó không chịu ảnh hưởng bởi các cơ chế cảm ứng

ánh sáng như trong bẫy áp suất bức xạ. Dưới điều kiện thích hợp, cơ chế bẫy không phụ thuộc vào trạng thái cơ bản của điện tử. Do đó, trạng thái động lực nội tại có thể được khai thác. Hơn nữa, các thí nghiệm này có thể tạo ra nhiều dạng bẫy với hình học khác nhau như thế năng dị hướng.

Hướng nghiên cứu của chúng tôi liên quan đến các thí nghiệm mà đã được thực hiện trên hệ các nguyên tử trung hòa được bẫy bằng lưỡng cực quang học. Do đó, trong luận án này, tôi sẽ đưa ra một số khái niệm và định nghĩa liên quan đến bẫy nguyên tử trung hòa bằng chùm tia laser. Cơ chế làm mát các nguyên tử trung hòa bằng chùm tia laser có thể được hình dung như sau: khi chùm ánh sáng chiếu vào một nguyên tử trung hòa, nguyên tử có thể hấp thụ và phát xạ trở lại photon. Quá trình này diễn ra nhiều lần làm cho mô men của nguyên tử thay đổi. Kết quả là vận tốc trung bình và động năng của một tập hợp nguyên tử giảm. Đối với tập hợp các nguyên tử, nhiệt độ động lực học của chúng tỉ lệ thuận với phương sai vận tốc của chúng. Nghĩa là khi vận tốc đồng đều hơn tương ứng với nhiệt độ thấp hơn. Đây chính là cơ chế dùng trong kỹ thuật làm lạnh nguyên tử bằng laser. Nhiệt độ có thể đưa xuống $100 \mu\text{K}$ bằng kỹ thuật làm mát Doppler. Ngoài ra, nguyên tử trung hòa trong trường ánh sáng có thể tạo ra lưỡng cực điện, lưỡng cực điện này tác động với trường ánh sáng tạo thành lực lưỡng cực quang. Độ lớn và hướng của lưỡng cực điện phụ thuộc vào trường điện từ của laser và hàm phân cực của nguyên tử. Đồng thời lưỡng cực điện cảm ứng lại tác dụng với trường điện của laser. Kết quả là một thế lưỡng cực quang tỉ lệ với cường độ của trường ánh sáng. Độ sâu của thế lưỡng cực quang cỡ một vài μK .

Mô hình dao động

Khi một nguyên tử đặt vào ánh sáng laser với trường ánh sáng \mathbf{E} dao động với tần số ω , dẫn tới một momen lưỡng cực điện $p(\omega)$ tỉ lệ với điện trường \mathbf{E} như sau $p(\omega) = \alpha(\omega)\mathbf{E}$, $\alpha(\omega)$ gọi là độ phân cực phức. Thế năng tương tác giữa momen lưỡng cực điện trong điện trường \mathbf{E} cho bởi công thức

$$\mathbf{U}_{\text{dip}} \propto -\langle \mathbf{p} \cdot \mathbf{E} \rangle \propto -\text{Re}(\alpha)I, \quad (1.3.1)$$

với dấu $\langle \rangle$ biểu thị lấy trị trung bình theo thời gian trên các dao động nhanh, cường độ trường $I = \varepsilon_0 c |E^2|/2$, E là biên độ của điện trường \mathbf{E} , c là tốc độ ánh sáng. Như vậy là thế năng lưỡng cực tỉ lệ với cường độ chùm sáng I . Phần ảo của độ phân cực cho ta thông

tin tỉ lệ tán xạ tự phát

$$\Gamma_{\text{rc}} \propto \text{Im}[\alpha(\omega)]I. \quad (1.3.2)$$

Độ phân cực $\alpha(\omega)$ có thể được xác định thông qua mô hình cổ điển. Bức tranh có thể được hình dung một cách đơn giản là một điện tử (m_e , điện tích e) liên kết đàn hồi với lõi có tần số riêng ω_0 . Dựa vào tích phân phương trình chuyển động, α có thể xác định thông qua biểu thức [88]

$$\alpha(\omega) = 6\pi\epsilon_0 c^3 \frac{\Gamma/\omega_0^2}{\omega_0^2 - \omega^2 - i(\omega^3/\omega_0^2)\Gamma}$$

với ω_0 là tần số riêng của nguyên tử, Γ tương ứng với tỉ lệ phân rã của trạng thái kích thích. Xét ở giới hạn bão hòa thấp (ít trạng thái kích thích, tỉ lệ tán xạ thấp) và độ lệch $\Delta = \omega - \omega_0$ lớn, khi đó thế lưỡng cực và tỉ lệ tán xạ tương ứng [88] là

$$U_{\text{dip}} = -\frac{3\pi c^2}{2\omega^3} \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right) I(\mathbf{r}), \quad (1.3.3)$$

$$\Gamma_{\text{rc}} = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_0^3} \left(\frac{\omega}{\omega_0} \right)^3 \left(\frac{\Gamma}{\omega_0 - \omega} + \frac{\Gamma}{\omega_0 + \omega} \right)^2 I(\mathbf{r}). \quad (1.3.4)$$

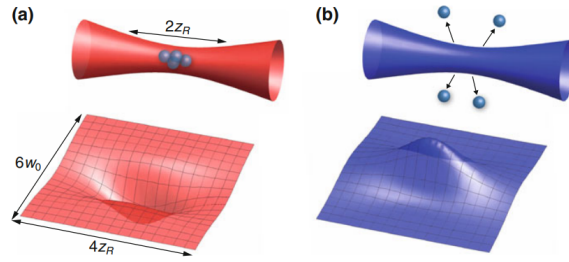
Trong hầu hết các thí nghiệm, chùm laser được sử dụng có tần số ω gần với ω_0 do đó $|\Delta| \ll \omega_0$, tức là $\omega/\omega_0 \approx 1$ và có thể loại bỏ số hạng $1/(\omega_0 + \omega)$, dẫn tới

$$U_{\text{dip}} = \frac{3\pi c^2}{2\omega^3} \frac{\Gamma}{\Delta} I(\mathbf{r}), \quad (1.3.5)$$

$$\Gamma_{\text{rc}} = \frac{3\pi c^2}{2\hbar\omega_0^3} \left(\frac{\Gamma}{\Delta} \right)^2 I(\mathbf{r}). \quad (1.3.6)$$

Hai biểu thức trên thể hiện tính chất vật lý của thế lưỡng cực quang một cách ngắn gọn. Cụ thể, U_{dip} tỉ lệ với I/Δ , trong khi đó Γ_{rc} tỉ lệ với I/Δ^2 . Khi $\Delta > 0$ (ánh sáng xanh) thế lưỡng cực quang là đẩy, khi $\Delta < 0$ (ánh sáng đỏ) thế tương ứng với thế hút, hình (1.3.1).

Muốn tạo thành mạng các nguyên tử thì người ta phải tạo ra các thế bẫy sắp xếp một cách tuần hoàn. Điều này có thể làm được bằng cách dùng các chùm laser kết hợp chiếu ngược chiều vào nhau. Hai chùm sóng kết hợp chiếu vào nhau sẽ tạo nên sóng dừng với các bụng sóng và nút sóng cố định trong không gian. Khi ta đưa vào các nguyên tử siêu lạnh thì những điểm nút sóng hay bụng sóng là những điểm giam cầm nguyên tử tùy theo điều chỉnh sóng là xanh hay đỏ. Nếu dùng hai cặp chùm sóng theo hai phương vuông góc

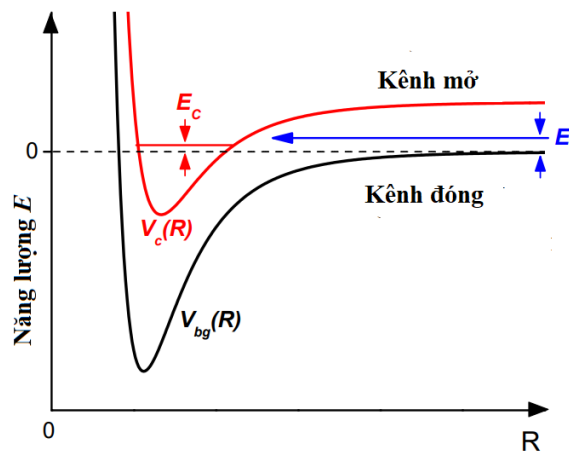


Hình 1.3.1: Thế lưỡng cực quang của chùm laser Gaussian lần lượt với lệch đỏ (a) và lệch xanh (b) [82].

thì ta có thể tạo nên mạng hai chiều, nếu dùng ba cặp chùm sóng thì ta có thể tạo mạng ba chiều.

Cộng hưởng Feshbach

Cộng hưởng Feshbach [83], [84] có thể làm thay đổi độ lớn tương tác thông qua việc thay



Hình 1.3.2: Mô hình hai kênh cho cộng hưởng Feshbach. Hiện tượng xảy ra khi hai nguyên tử va chạm ở năng lượng E ở kênh đầu vào cộng hưởng với trạng thái liên kết E_c ở kênh đóng. Trong khuôn khổ khí cực lạnh, va chạm thường xảy ra ở năng lượng $E \rightarrow 0$, do đó cộng hưởng kết cặp cần điều chỉnh năng lượng từ E_c gần 0 [85].

đổi độ dài tán xạ giữa các nguyên tử cực lạnh. Đối với các nguyên tử chậm (đã được làm lạnh), va chạm giữa chúng xảy ra trong một thời gian nhất định, cộng hưởng Feshbach trở nên quan trọng. Có thể hình dung một cách đơn giản về cộng hưởng Feshbach như sau: Đầu tiên, trạng thái hai nguyên tử ở cách xa nhau, gọi thế năng tương tác ở trạng thái của kênh mở. Khi các nguyên tử va chạm, trạng thái spin của nguyên tử thay đổi, trạng thái này ở kênh đóng. Cộng hưởng Feshbach xảy ra khi năng lượng chênh lệch giữa hai kênh này gần với nhau. Do có sự khác nhau về momen từ giữa các nguyên tử trong kênh mở và kênh đóng, năng lượng Zeeman của chúng thay đổi khác nhau trong từ trường, kết

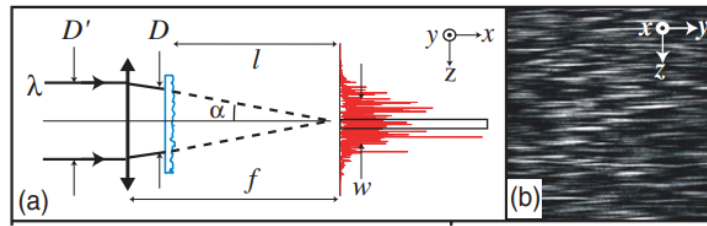
quả là độ dài tán xạ s thay đổi, và do đó cường độ và dấu của các tương tác giữa các nguyên tử, có thể được điều chỉnh về cơ bản bất kỳ giá trị mong muốn. Cụ thể, độ dài tán xạ giữa các nguyên tử có thể được thay đổi do từ trường bên ngoài theo công thức

$$a(B) = a_{bg} \left(1 - \frac{\Delta}{B - B_0} \right), \quad (1.3.7)$$

trong đó a_{bg} là độ dài tán xạ ở trạng thái kênh mở, Δ là độ rộng cộng hưởng (là khoảng cách từ điểm bắt đầu cộng hưởng đến điểm độ dài tán xạ bằng 0), B_0 là giá trị từ trường xảy ra cộng hưởng Feshbach. Độ dài tán xạ giữa các nguyên tử thay đổi tương ứng với tương tác giữa các nguyên tử được điều chỉnh. Đối với độ dài tán xạ âm, tương tác giữa các nguyên tử tương ứng là lực hút và ngược lại.

1.3.2 Mạng quang học mất trật tự

Mất trật tự có thể được đưa vào hệ nguyên tử cực lạnh bằng một vài cách. Từ quan điểm lý thuyết, mất trật tự có thể được mô hình hóa bởi bất kỳ tham số ngẫu nhiên nào trong Hamiltonian (ví dụ như năng lượng ngẫu nhiên trên một nút, hoặc tốc độ xuyên hầm ngẫu nhiên). Trong phần này, chúng tôi chỉ tập trung vào mất trật tự không phụ thuộc vào thời gian dưới dạng thế ngẫu nhiên tĩnh bên ngoài $V(\mathbf{r})$. Một thế ngẫu nhiên được đặc trưng bởi tính chất thống kê của nó, tức là nó phụ thuộc chính xác vào cách nó được tạo ra trong thực nghiệm. Một trường lổm đốm phức có thể được tạo ra nhờ việc phản xạ



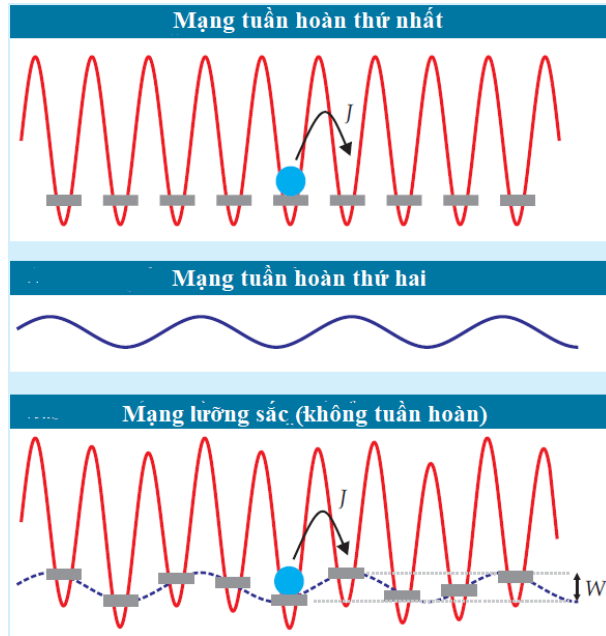
Hình 1.3.3: (a) Hiện thực hóa thí nghiệm mô tả tạo thế ngẫu nhiên lổm đốm. Một chùm tia laser có đường kính D và bước sóng λ được hội tụ bằng một thấu kính hội tụ. Chùm tia hội tụ có đường kính D' được tán xạ bởi một kính khuếch tán. Mô hình đốm quan sát được trên tiêu diện của thấu kính. Chùm tia tán xạ phân kỳ thành một vệt có bán kính w trên mặt phẳng tiêu cự. (b) Hình ảnh một thế mất trật tự bất đẳng hướng tạo ra bằng cách sử dụng quang học hình trụ để tạo điện thế ngẫu nhiên 1D cho BEC theo chiều Oz [89].

hoặc truyền qua của một chùm tia kết hợp thông qua một tấm khuếch tán thô, và sau đó nó được lấy nét bằng một thấu kính hội tụ như hình (1.3.3). Cường độ điện trường tại

mỗi điểm là sự giao thoa của các điểm ngẫu nhiên, trên mặt phẳng quan sát thì nó là một biến ngẫu nhiên theo phân bố Gauss. Ví dụ, thế lưỡng cực ngẫu nhiên thường được tạo ra trong các thí nghiệm BEC là thế lổm đóm được tạo ra có dạng (công thức (1) trong [89])

$$V(\mathbf{r}) = \frac{2\hbar}{3} \frac{\Gamma^2}{8 I_{sat}} \frac{I(\mathbf{r})}{\Delta}, \quad (1.3.8)$$

trong đó $I(\mathbf{r})$ là cường độ chùm tia, $I_{sat}(W/m^2)$ là cường độ bão hòa, Γ là tốc độ phân rã của trạng thái kích thích. Δ là sự chênh lệch giữa tần số của chùm laser ω_L và tần số riêng của nguyên tử ω_0 . Người ta cũng có thể tạo ra thế giả tuần hoàn bằng cách chồng chất hai mạng lên nhau, mà tỉ số hằng số mạng của chúng là số vô tỉ, hay là chúng vô ước với nhau như hình (1.3.4).



Hình 1.3.4: Mạng lưỡng sắc được tạo ra nhờ sự chồng chập của hai mạng con có hằng số mạng vô ước với nhau, phá vỡ bất biến tịnh tiến và xáo trộn năng lượng của các nút [56].

1.4 Kết luận

Trong chương 1, chúng tôi đã trình bày các khái niệm và các phương pháp nghiên cứu liên quan đến nội dung của luận án. Đầu tiên, các khái niệm, định nghĩa và cơ chế dẫn tới hai loại điện môi Mott và điện môi Anderson được trình bày. Trong khi tương tác Coulomb giữa các điện tử trên cùng một nút gây ra chuyển pha kim loại - điện môi Mott thì mất trật tự dẫn tới một sự định xứ của các điện tử trong hệ được gọi là điện môi Anderson.

Sự có mặt đồng thời của cả hai yếu tố này mở ra nhiều hiện tượng vật lý mới và thú vị trong nghiên cứu vật lý chất cô đặc. Tiếp theo, chúng tôi trình bày nội dung hai phương pháp nghiên cứu được sử dụng trong luận án là lý thuyết trường trung bình động DMFT [8] và lý thuyết môi trường điển hình TMT [19]. Các phương trình tự hợp của lý thuyết DMFT được dẫn ra. Để nghiên cứu hệ có mất trật tự, giá trị điển hình của đại lượng ngẫu nhiên có vai trò quan trọng và Dobrosaljevic cùng cộng sự đã đề xuất thông số trật tự cho chuyển pha Anderson [19]. Cụ thể, khi hệ có mất trật tự, giá trị điển hình của mật độ trạng thái địa phương được lấy gần đúng bằng giá trị trung bình nhân của mật độ trạng thái địa phương. Giá trị này bị triệt tiêu tại một giá trị hữu hạn của độ lớn mất trật tự tương ứng với một chuyển pha kim loại - điện môi Anderson. Cuối cùng, chúng tôi trình bày các khái niệm cơ bản liên quan đến các thí nghiệm trên mạng quang học như cách tạo ra một mạng quang học tuần hoàn hoặc mất trật tự của các nguyên tử trung hòa. Nghiên cứu trên mạng quang học có nhiều ưu điểm so với mạng thực và các mô hình Hubbard và Anderson - Hubbard có khả năng được hiện thực hóa trên mạng quang học, ở đó thế năng của các nguyên tử có thể được tạo ra thông qua cường độ chùm tia laser và tương tác Coulomb giữa các nguyên tử có thể được điều khiển chính xác thông qua cộng hưởng Feshbach [112]-[113].

Chương 2

HỆ FERMION TƯƠNG TÁC VỚI MẤT TRẬT TỰ CÓ PHÂN BỐ GAUSS

Trong chương này, chúng tôi khảo sát ảnh hưởng của phân bố Gauss cho đại lượng mất trật tự lên giản đồ pha cho hai mô hình Anderson - Hubbard (AH) và Anderson - Falicov - Kimball (AFK). Cụ thể, chúng tôi xét hai bài toán: (1) Giản đồ pha cho mô hình AH tại lấp đầy một nửa với phân bố đều và phân bố Gauss cho biến ngẫu nhiên; (2) Giản đồ pha cho mô hình AFK tại lấp đầy một nửa có phân bố Gauss cho tạp và phân bố đều cho thế tương tác Coulomb. Cả hai bài toán đều sử dụng lý thuyết môi trường điển hình TMT-DMFT với phương pháp gần đúng phương trình chuyển động EOM giải cho bài toán tạp và hai mô hình được xét ở giới hạn lấp đầy một nửa. Lý do mà các bài toán trong luận án được nghiên cứu đều ở giới hạn lấp đầy một nửa là vì ở mô hình Hubbard chỉ tại lấp đầy này ($n = 1$) người ta mới quan sát thấy chuyển pha kim loại - điện môi (các trường hợp khác hệ luôn là kim loại ($0 < n < 1$ hoặc $1 < n < 2$), hoặc luôn là điện môi ($n = 0$ hoặc $n = 2$), ngoài ra chúng tôi muốn so sánh kết quả thu được với các kết quả đã được công bố của các nhóm nghiên cứu khác ở giới hạn này. Nội dung của chương này đã được công bố trong hai bài báo Ref.[6] năm 2019 và Ref.[91] năm 2021. Trong đó, bài báo năm 2019 [6] được nhận đăng trước khi tôi bắt đầu nhập học chương trình nghiên cứu sinh cuối năm 2019, tuy nhiên đây là một kết quả tiền đề quan trọng cho cả quá trình nghiên cứu làm rõ sự ảnh hưởng của mất trật tự cho các mô hình AH và AFK

nên tôi đã đưa nội dung này vào một phần nhỏ của luận án.

2.1 Mô hình Anderson - Hubbard (AH)

Tương tác và mất trật tự đóng một vai trò quan trọng trong việc xác định tính chất của các chất rắn [92]-[93]. Cụ thể, tương tác Coulomb phổ biến trong các hệ điện tử tương quan mạnh, trong khi đó mất trật tự luôn tồn tại trong các vật liệu thực, đây là hai yếu tố dẫn tới chuyển pha kim loại - điện môi (MITs). Tương quan điện tử - điện tử có thể dẫn tới chuyển pha kim loại - điện môi Mott, mất trật tự có thể ngăn cản sự khuếch tán của các điện tử dẫn tới chuyển pha kim loại - điện môi Anderson [2]. Khi cả hai yếu tố này cùng xuất hiện trong một hệ, sự ảnh hưởng của chúng có thể dẫn tới những hiệu ứng mới thú vị, đây là một thách thức đối với cả các nhà vật lý lý thuyết và vật lý thực nghiệm, đặc biệt đối với các thí nghiệm với các nguyên tử cực lạnh trên mạng quang học [95]-[96].

Lý thuyết trường trung bình động là một phương pháp rất thành công trong việc mô tả chuyển pha Mott trong mô hình Hubbard cho các hệ tương quan mạnh. Ý tưởng chính của phương pháp là ánh xạ mô hình mạng tinh thể lên mô hình Anderson một tạp. Cụ thể, một tạp được nhúng vào một bể điện tử không tương tác. Nút tạp sẽ tương tác với bể thông qua hàm lai hóa. Trạng thái lượng tử của tạp có thể là một trong những trạng thái: (1) không có điện tử, (2) spin hướng lên, (3) spin hướng xuống hoặc (4) hai spin ngược chiều nhau. Phần khó khăn nhất của phương pháp là giải bài toán tạp [8]. Giá trị trung bình cộng của hàm mật độ trạng thái địa phương (LDOS) không thể phân biệt được trạng thái lan truyền và trạng thái định xứ ở miền mất trật tự lớn. Để khắc phục được điều này Dobrosavljevic và Kotliar đã đề xuất phương pháp DMFT thống kê cho phép xem xét tất cả các mất trật tự theo không gian [23], tuy nhiên phương pháp này đòi hỏi số lượng lớn các tính toán.

Bằng cách xấp xỉ giá trị điển hình của mật độ trạng thái địa phương bằng giá trị trung bình nhân của chúng, Dobrosavljevic và cộng sự đề xuất [19] lý thuyết môi trường điển hình (TMT) để nghiên cứu các hệ mất trật tự. Giá trị điển hình của mật độ trạng thái (TDOS) được dùng như một thông số trật tự cho chuyển pha Anderson, nó bị triệt tiêu tại một giá trị hữu hạn của độ lớn mất trật tự. TDOS dễ dàng tính toán trong DMFT [97]-[99]. Các giản đồ pha kim loại - điện môi cho mô hình Anderson - Hubbard với mất

trật tự tuân theo phân bố đều tại lấp đầy một nửa được khảo sát bằng TMT-DMFT sử dụng nhiều các phương pháp giải tạp khác nhau như phương pháp gần đúng nhóm số tái chuẩn hóa (NRG) [97], phương pháp bốn Boson cầm tù (SB4) [98]. Mặt khác, giản đồ pha trạng thái cơ bản cho mô hình Hubbard lấp đầy một nửa với mất trật tự theo phân bố Gaussian đã thu được bởi nhiều phương pháp khác như gần đúng Hatree - Fock không giới hạn [26] và DMFT + gần đúng Σ [27]. Do đó, nó rất khó để so sánh sự ảnh hưởng của các hàm phân bố khác nhau (phân bố đều và phân bố Gauss) trên cùng một giản đồ pha, bởi vì chúng ta không thể biết kết quả nào là do hàm phân bố hay do gần đúng tính toán đang dùng.

Trong phần này, chúng tôi khảo sát hai loại phân bố cho biến ngẫu nhiên trong cùng một mô hình HM tại lấp đầy một nửa bằng phương pháp TMT-DMFT sử dụng phương trình chuyển động để giải bài toán tạp. Gần đúng này cho phép chúng ta so sánh ảnh hưởng của hai loại phân bố khác nhau để thu được hàm mật độ trạng thái trung bình cũng như giản đồ pha tương ứng.

2.1.1 Mô hình và phương pháp tính toán

Hamiltonian của mô hình Anderson - Hubbard có dạng

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle \sigma} \left(a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \text{H.c.} \right) + \sum_i \varepsilon_i n_{i\sigma} + U \sum_{i\sigma} n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (2.1.1)$$

với $a_i^\dagger (a_i)$ lần lượt là các toán tử sinh (hủy) điện tử tại nút i có spin σ , $n_{i\sigma} = a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma}$ là toán tử số hạt tại nút i , t là biên độ tham số nhảy nút giữa hai nút lân cận gần nhất i và j . U là độ lớn tương tác đẩy Coulomb trên mỗi nút i . Năng lượng tại mỗi nút ε_i là biến ngẫu nhiên tuân theo một hàm phân bố $P(\varepsilon_i)$. Trong phần này, chúng tôi khảo sát cả hàm phân bố đều (P_{Bo}) và hàm phân bố Gauss (P_{Ga}) cho biến ε_i lần lượt như sau

$$P_{Bo} = \frac{1}{\Delta_{Bo}} \theta \left(\frac{\Delta_{Bo}}{2} - |\varepsilon_i| \right), \quad (2.1.2)$$

$$P_{Ga} = \sqrt{\frac{6}{\pi \Delta_{Ga}^2}} \exp \left(-6\varepsilon_i^2 / \Delta_{Ga}^2 \right) \quad (2.1.3)$$

với θ là hàm bậc thang, Δ là độ lớn mất trật tự. Để có thể so sánh hai hàm phân bố khác nhau, giá trị Δ_{Ga} được chọn sao cho phương sai của hàm phân bố Gauss bằng với phương

sai của hàm phân bố đều tức là $\Delta_{Bo} = \Delta_{Ga} = \Delta$.

Mô hình Anderson một tạp với mỗi giá trị năng lượng ε_i được nhúng trong bể điện tử không tương tác được biểu diễn như sau

$$H_{imp} = \sum_{\sigma} (\varepsilon_i - \mu) n_{i\sigma} + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \left(V_k c_{k\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} + V_k^* a_{i\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \right) \quad (2.1.4)$$

với μ là thế hóa học, $c_{k\sigma}^{\dagger} (c_{k\sigma})$ là toán tử sinh (hủy) điện tử trong bể điện tử với spin là σ . Hàm lai hóa được xác định thông qua thành phần ma trận V_k và tham số ε_k

$$\eta(\omega) = \sum_k \frac{|V_k|^2}{\omega - \varepsilon_k}. \quad (2.1.5)$$

Với mỗi một năng lượng ε_i , hàm mật độ trạng thái địa phương (LDOS) sẽ được xác định như sau $\rho(\omega, \varepsilon_i) = -\Im G(\omega, \varepsilon_i)/\pi$. Sau đó chúng ta có thể xác định giá trị trung bình nhân của LDOS $\rho_{geom} = \exp[\langle \ln \rho(\omega, \varepsilon_i) \rangle]$ cũng như giá trị trung bình cộng của LDOS $\rho_{arith} = \langle \rho(\omega, \varepsilon_i) \rangle$, với $\langle O(\varepsilon_i) \rangle = \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) O(\varepsilon_i)$. Hàm Green của mạng thu được từ biến đổi Hilbert

$$G_{\alpha}(\omega) = \int d\omega' \frac{\rho_{\alpha}(\omega')}{\omega - \omega'} \quad (2.1.6)$$

với α kí hiệu cho "arith" hoặc "geom".

Ở đây, chúng tôi xét cho mạng Bethe với vô hạn kết nối, $\rho_0(\varepsilon) = \frac{4}{\pi W} \sqrt{1 - 4(\varepsilon/W)^2}$, W là độ rộng vùng, với điều kiện tự hợp tương ứng là

$$\eta(\omega) = W^2 G(\omega)/16. \quad (2.1.7)$$

Để giải được bài toán mô hình Anderson một tạp (2.1.4), chúng tôi sử dụng phương pháp phương trình chuyển động [8], [100]. Chúng tôi xét bài toán ở giới hạn thuận từ tại lấp đầy một nửa, cụ thể $\langle n_{\uparrow} \rangle = \langle n_{\downarrow} \rangle = \langle n_i \rangle / 2$ và $\mu = U/2$. Hàm Green tạp thu được từ gần

đúng phương trình chuyển động (xem phụ lục A) như sau

$$G(\omega, \varepsilon_i) = \frac{1 - \langle n_i \rangle / 2}{\omega - \varepsilon_i + U/2 - \eta(\omega) + U\eta(\omega)[\omega - \varepsilon_i - U/2 - 3\eta(\omega)]^{-1}} \quad (2.1.8)$$

$$+ \frac{\langle n_i \rangle / 2}{\omega - \varepsilon_i - U/2 - \eta(\omega) - U\eta(\omega)[\omega - \varepsilon_i + U/2 - 3\eta(\omega)]^{-1}}.$$

Phương trình (2.1.8) là chính xác trong giới hạn $U = 0$ [21]. Tại giới hạn tuần hoàn $\varepsilon_i = 0$, $U \neq 0$, phương trình (2.1.8) đưa về gần đúng Hubbard III của mô hình Hubbard tại lấp đầy một nửa [49].

Chúng tôi sẽ giải các phương trình tự hợp từ (2.1.6) - (2.1.8) để thu được các giá trị trung bình cộng và trung bình nhân cho LDOS. Giảm đồ pha của mô hình tại lấp đầy một nửa ở trạng thái cơ bản được xác định như sau: (1) Pha kim loại thỏa mãn $\rho_{geom}(0) > 0$ và $\rho_{arith}(0) > 0$; (2) Pha điện môi Anderson thỏa mãn $\rho_{geom}(0) = 0$, $\rho_{arith}(0) > 0$; (3) Pha điện môi Mott thỏa mãn $\rho_{arith} = 0$. Do tính đối xứng của hàm $\rho_\alpha(\omega)$ và định lý hàm phổ, ta dễ dàng chứng minh hàm Green tại mức Fermi là hàm thuần ảo, $G(0) = -i\pi\rho_\alpha(0)$.

Thật vậy, từ công thức (2.1.6) ta có thể viết lại hàm Green thành

$$G(\omega) = \int d\omega' \frac{\rho_\alpha(\omega')}{\omega + i0^+ - \omega'}$$

$$= P \int d\omega' \frac{\rho_\alpha(\omega')}{\omega - \omega'} - i\pi \int d\omega' \rho_\alpha(\omega') \delta(\omega - \omega')$$

$$= P \int d\omega' \frac{\rho_\alpha(\omega')}{\omega - \omega'} - i\pi\rho_\alpha(\omega). \quad (2.1.9)$$

Tại mức Fermi ($\omega = 0$) thì

$$G(0) = P \int d\omega' \frac{\rho_\alpha(\omega')}{-\omega'} - i\pi\rho_\alpha(0). \quad (2.1.10)$$

Do tính đối xứng điện tử lỗ trống, $\rho(\omega) = \rho(-\omega)$ nên $\rho(\omega)$ là hàm chẵn, do đó $\int d\omega' \frac{\rho(\omega')}{-\omega'}$ là hàm lẻ, nhận giá trị bằng 0 khi lấy tích phân từ $-\infty$ tới ∞ . Kết quả hàm Green tại mức Fermi là hàm thuần ảo, tức là

$$G(0) = -i\pi\rho(0). \quad (2.1.11)$$

Tiếp theo, chúng tôi sẽ đưa ra các phương trình tuyến tính hóa DMFT [101] cho các giá

trị tới hạn của Δ và U tại biên giữa miền điện môi và kim loại. Do tính tự hợp của DMFT dẫn tới mối quan hệ đệ quy như sau

$$G(0)^{(n+1)} = -i\pi\rho_\alpha^{(n)}(0) \quad (2.1.12)$$

với phía bên tay trái của phương trình là kết quả cho bước thứ $(n+1)$ trong vòng lặp thông qua giá trị ở bước thứ (n) bên tay phải. Xét miền kim loại tiệm cận miền điện môi trên giản đồ pha, giá trị LDOS khi đó là giá trị dương, nhỏ tùy ý [101]-[3]. Ta lấy giá trị nhỏ của $\rho_\alpha^{(n)}(0)$ và thay vào phương trình (2.1.8). Cụ thể, thay $\omega = 0$, đặt $a = U/2 + \varepsilon_i$ và $b = U/2 - \varepsilon_i$, $\eta = ic$, với c là số thực rất nhỏ, khi đó có thể viết lại phương trình (2.1.8) như sau

$$G(0, \varepsilon_i) = \left(1 - \frac{\langle n_i \rangle}{2}\right) G_1 + \frac{\langle n_i \rangle}{2} G_2, \quad (2.1.13)$$

với

$$G_1 = \frac{a + 3ic}{(a + 3ic)(b - ic) - iUc}$$

$$G_2 = -\frac{b - 3ic}{(b - 3ic)(a + ic) + iUc}.$$

Thực hiện phép biến đổi đồng nhất tách G_1 và G_2 thành phần thực và phần ảo.

$$G_1 = \frac{a + 3ic}{ab + i3bc - iac + 3c^2 - iUc}$$

$$= \frac{a + 3ic}{ab + 3c^2 + i(3bc - ac - Uc)}$$

$$= \frac{(a + 3ic)(ab + 3c^2 - i(3bc - ac - Uc))}{(ab + 3c^2)^2 - (3b - a - U)^2c^2}.$$

Bỏ qua các số hạng bậc cao của c , chỉ giữ lại số hạng tuyến tính của c ta được

$$G_1 = \frac{a^2b - ia(3bc - ac - Uc) + 3icab}{a^2b^2}$$

$$= \frac{a^2b - i(3abc - a^2c - aUc - 3abc)}{a^2b^2}$$

$$= \frac{a^2b + i(a^2c + aUc)}{a^2b^2}.$$

Suy ra

$$\Im G_1 = \frac{ca(a + U)}{a^2b^2}.$$

Biến đổi tương tự cho hàm G_2 .

$$\begin{aligned} G_2 &= -\frac{b-3ic}{ab+ibc-i3ac+3c^2+iUc} = -\frac{b-3ic}{ab+3c^2-i(3ac-bc-Uc)} \\ &= -\frac{(b-3ic)(ab+3c^2+i(3ac-bc-Uc))}{(ab+3c^2)^2-(3a-a+U)^2c^2}. \end{aligned}$$

Ta cũng áp dụng gần đúng bỏ qua các số hạng bậc cao của c và thu được

$$\begin{aligned} G_2 &= -\frac{a^2b+i(3bac-b^2c-bUc-3abc)}{a^2b^2} \\ &= -\frac{a^2b+ib(-Uc-b^2c)}{a^2b^2}, \end{aligned}$$

suy ra

$$\Im G_2 = \frac{cb(b+U)}{a^2b^2}.$$

Như vậy

$$\begin{aligned} \Im G(0, \varepsilon_i) &= \left(1 - \frac{\langle n_i \rangle}{2}\right) \Im G_1 + \frac{\langle n_i \rangle}{2} \Im G_2 \\ &= \left(1 - \frac{\langle n_i \rangle}{2}\right) \frac{ca(a+U)}{a^2b^2} + \frac{\langle n_i \rangle}{2} \frac{cb(b+U)}{a^2b^2} \\ &= \frac{ca(a+U)}{a^2b^2} + \frac{\langle n_i \rangle}{2} \frac{c(b^2-a^2+U(b-a))}{a^2b^2}. \end{aligned} \quad (2.1.14)$$

Lưu ý rằng

$$\begin{aligned} a(a+U) &= \left(\frac{U}{2} + \varepsilon_i\right) \left(\frac{U}{2} + \varepsilon_i + U\right) = \frac{3}{4}U^2 + \varepsilon_i^2 + 2\varepsilon_iU. \\ b^2 - a^2 + U(b-a) &= \left(\frac{U}{2} - \varepsilon_i\right)^2 - \left(\frac{U}{2} + \varepsilon_i\right)^2 - 2\varepsilon_iU = -2\varepsilon_iU - 2\varepsilon_iU = -4\varepsilon_iU. \\ ab &= \left(\frac{U}{2} + \varepsilon_i\right) \left(\frac{U}{2} - \varepsilon_i\right) = \frac{U^2}{4} - \varepsilon_i^2. \end{aligned}$$

Thay tất cả các biến đổi trên vào phương trình (2.1.14) nhận được

$$\begin{aligned} \rho_\alpha^{(n+1)}(0, \varepsilon_i) &= -\frac{1}{\pi} \Im G^{(n+1)}(0, \varepsilon_i) \\ &= -\frac{1}{\pi} c \left[\frac{\varepsilon_i^2 + 3U^2/4 + 2\varepsilon_iU(1 - \langle n_i \rangle)}{(\varepsilon_i^2 - U^2/4)^2} \right]. \end{aligned} \quad (2.1.15)$$

Mặt khác

$$\eta^{(n+1)}(0) = ic = \frac{W^2}{16} G^{(n)}(0) = -i\pi \frac{W^2}{16} \rho^{(n)}(0).$$

Viết lại phương trình (2.1.15)

$$\rho_\alpha^{(n+1)}(0, \varepsilon_i) = \frac{W^2}{16} \rho_\alpha^{(n+1)}(0) Z(\varepsilon_i) \quad (2.1.16)$$

với

$$Z(\varepsilon_i) = \frac{\varepsilon_i^2 + 3U^2/4 + 2\varepsilon_i U(1 - \langle n_i \rangle)}{(\varepsilon_i^2 - U^2/4)^2}. \quad (2.1.17)$$

Để nhận được giá trị trung bình nhân của hàm phổ $\rho_{geom}(0)$, ta lấy trung bình nhân hai vế của phương trình (2.1.16) như sau

$$\begin{aligned} \langle \rho(0, \varepsilon_i) \rangle_{geom}^{(n+1)} &= \frac{W^2}{16} \rho_{geom}^{(n)}(0) \langle Z(\varepsilon_i) \rangle_{geom} \\ \Rightarrow \rho_{geom}^{(n+1)}(0) &= \frac{W^2}{16} \rho_{geom}^{(n)}(0) \langle Z(\varepsilon_i) \rangle_{geom}. \end{aligned} \quad (2.1.18)$$

Tại biên vùng giữa kim loại và điện môi ta có $\rho_{geom}^{(n+1)}(0) = \rho_{geom}^{(n)}(0)$. Do đó ta nhận được một phương trình cho đường biên giữa điện môi Anderson và miền kim loại như sau

$$1 = \frac{W^2}{16} \exp [I_{geom}(U, \Delta)] \quad (2.1.19)$$

với

$$I_{geom} = \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \ln Z(\varepsilon_i) \quad (2.1.20)$$

là phương trình tuyến tính hóa DMFT với trung bình nhân, và

$$1 = \frac{W^2}{16} I_{arith}(U, \Delta) \quad (2.1.21)$$

là phương trình tuyến tính hóa DMFT với trung bình cộng với

$$I_{arith} = \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) Z(\varepsilon_i). \quad (2.1.22)$$

Để đơn giản tính toán, chúng tôi áp dụng giới hạn nguyên tử cho $\langle n_i \rangle$ như sau

$$\langle n_i \rangle = \begin{cases} 2 & \text{nếu } \varepsilon_i < -U/2, \\ 1 & \text{nếu } -U/2 < \varepsilon_i < U/2, \\ 0 & \text{nếu } \varepsilon_i > U/2. \end{cases} \quad (2.1.23)$$

Đối với phân bố Gauss ở phương trình (2.1.20) chúng tôi giải bằng tính số, trong khi đó với phân bố đều, phương trình (2.1.20) và (2.1.22) đều có thể tính toán giải tích. Để tính tích phân phương trình (2.1.20), ta sẽ xét hai trường hợp $\Delta < U$ và $\Delta > U$.

Trường hợp 1: $\Delta < U$, khi đó $\langle n_i \rangle = 1$ tương ứng với cận tích phân ε_i từ $-\Delta/2$ đến $\Delta/2$.

Thay vào phương trình (2.1.20) nhận được

$$I_{geom}(U, \Delta) = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} d\varepsilon_i \ln \frac{\varepsilon_i^2 + 3U^2/4}{(\varepsilon_i^2 - U^2/4)^2}. \quad (2.1.24)$$

Đặt $x = \varepsilon_i$, $a = U/2$.

$$I_{geom}(U, \Delta) = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} dx \ln \frac{x^2 + 3a^2}{(x^2 - a^2)^2}.$$

Tính toán tích phân chi tiết ở phụ lục B. Kết quả cuối cùng thu được

$$I = \int dx \ln \frac{x^2 + 3a^2}{(x^2 - a^2)^2} = x \ln(x^2 + 3a^2) - 2x + 2\sqrt{3}a \arctan \frac{x}{\sqrt{3}a} - 2 \left[x \ln |x^2 - a^2| - 2x - a \ln \left| \frac{x-a}{x+a} \right| \right]. \quad (2.1.25)$$

Thay $a = U/2$ và lấy cận tích phân vào (2.1.25)

$$\begin{aligned} I_{geom}(U, \Delta) &= \frac{1}{\Delta} I \Big|_{-\Delta/2}^{\Delta/2} \\ &= 2 + \ln \left[3 \left(\frac{U}{2} \right)^2 + \left(\frac{\Delta}{2} \right)^2 \right] + \frac{2\sqrt{3}U}{\Delta} \arctan \left(\frac{\Delta}{\sqrt{3}U} \right) \\ &\quad - 2 \ln \left[\left(\frac{U}{2} \right)^2 - \left(\frac{\Delta}{2} \right)^2 \right] - \frac{2U}{\Delta} \ln \frac{\Delta + U}{|\Delta - U|}, \text{ với } \Delta < U. \end{aligned} \quad (2.1.26)$$

Trường hợp 2: $\Delta > U$. Tích phân (2.1.20) được tính toán chi tiết ở phụ lục C. Cuối cùng,

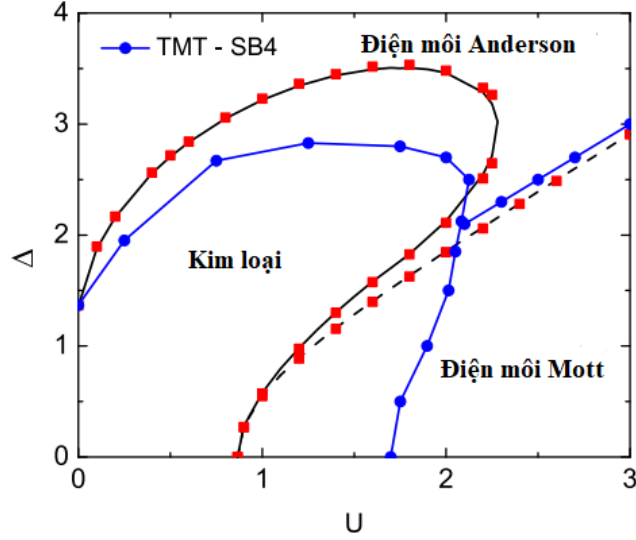
ta thu được

$$\begin{aligned}
I_{geom}(U, \Delta) = & -\frac{4U}{\Delta} \ln 2U + \left(1 + \frac{2U}{\Delta}\right) \ln \left[\left(\frac{\Delta}{2} + \frac{U}{2}\right)^2 - \frac{U^2}{4} \right] \\
& + \frac{U}{\Delta} \ln \frac{\Delta + 3U}{\Delta + U} + \frac{\pi U}{\sqrt{3}\Delta} + 2 - 2 \ln \left| \left(\frac{U}{2}\right)^2 - \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \right| \\
& - \frac{2U}{\Delta} \ln \frac{\Delta + U}{|\Delta - U|}, \text{ với } \Delta > U.
\end{aligned} \tag{2.1.27}$$

Tiếp theo ta tính tích phân ở phương trình (2.1.22) để thu được phương trình tuyến tính hóa DMFT với giá trị trung bình cộng. Ta thấy phương trình này chỉ hội tụ (về phải nhận giá trị khác 0) khi $\Delta < U$ với $\langle n_i \rangle = 1$ và trong trường hợp này

$$\begin{aligned}
I_{arith}(U, \Delta) &= \frac{1}{\Delta} \int d\varepsilon_i \frac{\varepsilon_i^2 + 3U^2/4}{(\varepsilon_i^2 - U^2/4)^2} \\
&= \int dx \frac{(x^2 - a^2) + 4a^2}{(x^2 - a^2)^2} \\
&= \int \frac{dx}{x^2 - a^2} + 4a^2 \int \frac{dx}{(x^2 - a^2)^2} \\
&= \int \frac{1}{2a} \left(\frac{1}{x - a} - \frac{1}{x + a} \right) + \int dx \left[\frac{1}{(x - a)^2} + \frac{1}{(x + a)^2} - \frac{2}{(x - a)(x + a)} \right] \\
&= \int dx \left[\frac{1}{(x - a)^2} + \frac{1}{(x + a)^2} - \frac{1}{2a} \left(\frac{1}{x - a} - \frac{1}{x + a} \right) \right] \\
&= -\frac{1}{x - a} - \frac{1}{x + a} - \frac{1}{2a} \ln \left| \frac{x - a}{x + a} \right|. \\
\Rightarrow I_{arith}(U, \Delta) &= \frac{1}{\Delta} \left[-\frac{2x}{x^2 - a^2} - \frac{1}{2a} \ln \left| \frac{x - a}{x + a} \right| \right] \Big|_{-\Delta/2}^{\Delta/2} \\
&= \frac{2}{\left(\frac{U}{2}\right)^2 - \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2} + \frac{2}{\Delta U} \ln \frac{\Delta + U}{|\Delta - U|}.
\end{aligned} \tag{2.1.28}$$

Như vậy, các phương trình (2.1.26), (2.1.27) và (2.1.28) là các phương trình tuyến tính hóa DMFT để xác định các giá trị tới hạn của U và Δ tại miền giữa điện môi Anderson-kim loại và Mott-kim loại. Kết quả cho trung bình nhân với phân bố đều cũng đã được chúng tôi tính toán trong [100], ở đó một gần đúng đơn giản hơn đã áp dụng cho $\langle n_{i\uparrow} \rangle = \langle n_{i\downarrow} \rangle = 1$, $\forall \varepsilon_i$.

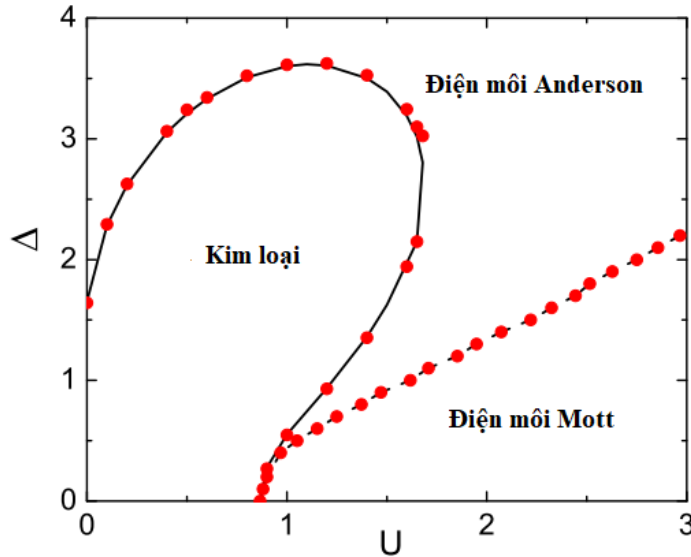


Hình 2.1.1: Giản đồ pha tại $T = 0$ cho mô hình AH tại lấp đầy một nửa với phân bố đều: So sánh giữa kết quả thu được giữa TMT-DMFT với EOM và TMT-SB4 [98] (đường nét liền với điểm hình tròn). Kết quả của chúng tôi thu được các đường nét liền (nét đứt) được xác định lần lượt từ giá trị trung bình nhân (cộng) từ các phương trình tuyến tính hóa DMFT, các điểm vuông ứng với kết quả thu được từ tính số các phương trình DMFT. Các tham số U , Δ được xác định theo đơn vị năng lượng $W = 1$.

2.1.2 Kết quả và thảo luận

Trong nghiên cứu này, chúng tôi lấy độ rộng vùng W là đơn vị năng lượng. Tại $T = 0$, giản đồ pha tương tác - mất trật tự ($U - \Delta$) của AH với phân bố đều được đưa ra trên hình (2.1.1). Kết quả chúng tôi thu được từ phương pháp TMT-DMFT với EOM giải cho bài toán tạp được so sánh với kết quả tương ứng từ phương pháp TMT-DMFT nhưng với phương pháp bốn Boson cầm tù (SB4) giải cho bài toán tạp [98]. Lưu ý rằng trong cùng khuôn khổ TMT-DMFT, phương pháp giải tạp SB4 cũng đã cho các kết quả phù hợp với các kết quả thu được từ phương pháp NRG giải bài toán tạp [97] cũng như phương pháp DMFT thống kê [94]. Kết quả tổng thể cho thấy có hai pha điện môi bao gồm điện môi Mott và điện môi Anderson, bao quanh một pha kim loại tương quan. Pha kim loại tương quan xuất hiện ở miền U và Δ nhỏ, trong khi đó ở miền U lớn xuất hiện pha điện môi Mott và ở miền mất trật tự lớn có pha điện môi Anderson. Hơn nữa, hình dáng của miền kim loại tương quan là phù hợp và đường biên giữa hai loại điện môi xảy ra tại $\Delta \approx U$ khi $U \geq 2$. Đối với hệ không có tương tác, giá trị tới hạn của độ mất trật tự cho chuyển pha Anderson tại $\Delta_c(U = 0) = e/2 \approx 1.36$ như trong các công bố [26] và [27]. Tuy nhiên, giới hạn cho chuyển pha Mott mà chúng tôi thu được là $U_c(\Delta = 0) = \sqrt{3}/2$. Kết quả này

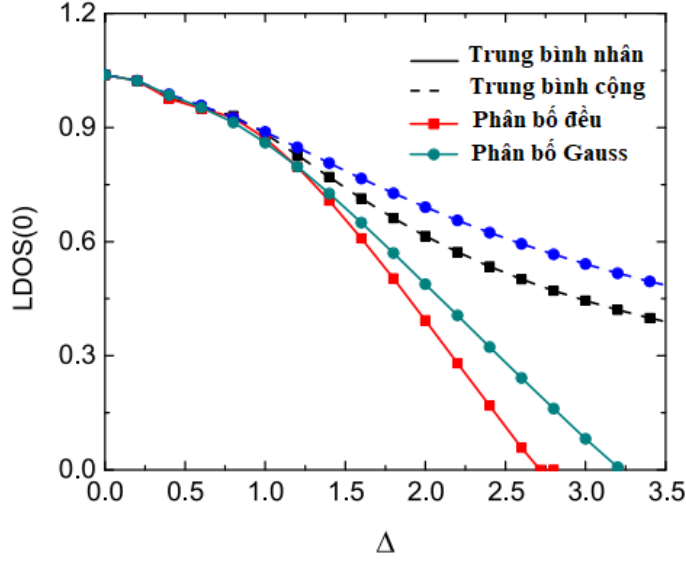
nhỏ hơn đáng kể so với kết quả tính toán thu được từ TMT-DMFT với phương pháp NRG và SB4 [97],[98], cũng như với phương pháp DMFT thống kê [94]. So sánh một cách tổng thể, kết quả của chúng tôi phù hợp khá tốt với các kết quả tính số đã biết trong [94], [97],[98]. Do đó, việc xác định định xứ Anderson bằng phương pháp TMT-DMFT với phương trình chuyển động EOM được thỏa mãn ở mức định tính. Trạng thái cơ bản của AH với phân bố Gauss được thể hiện trên hình (2.1.2). Không có sự khác nhau nhiều với hai phân bố này như ta thấy trong hai hình (2.1.1) và (2.1.2). Đối với hai loại phân bố, miền kim loại vẫn tồn tại ở miền giá trị nhỏ và trung bình của tương tác Coulomb và độ mất trật tự. Hình dạng của miền kim loại cũng gần giống nhau. Tuy nhiên, các kết quả định lượng là khác nhau. Chúng tôi thấy rằng tại một giá trị U nhỏ, giá trị tới hạn của độ mất trật tự của phân bố Gauss là lớn hơn so với phân bố đều. Ví dụ, $\Delta_c(U = 0) \approx 1.66$ là lớn hơn so với phân bố đều $\Delta_c(U = 0) \approx 1.36$, điều này phù hợp so với kết quả trong [102]. Hơn nữa, đối với phân bố Gauss chuyển pha kim loại - điện môi Mott xảy ra ở miền mất trật tự nhỏ. Trong trường hợp này, tích phân ở phương trình (2.1.22) là phân kỳ khi $\Delta \neq 0$, do đó chuyển pha kim loại - điện môi Mott chỉ được xác định thông qua tính số. Từ hình (2.1.2) có thể thấy đường biên giữa điện môi Mott và điện môi Anderson đối với



Hình 2.1.2: Giản đồ pha tại $T = 0$ cho mô hình AH tại lấp đầy một nửa với phân bố Gauss cho mất trật tự, thu được từ TMT-DMFT với EOM. Đường nét liền được tính từ giá trị trung bình nhân từ phương trình tuyến tính hóa DMFT, điểm hình tròn là kết quả từ tính số tự hợp DMFT.

phân bố Gauss là thấp hơn so với phân bố đều trên mặt phẳng (U, Δ) . Để làm rõ điều này, chúng tôi tính LDOS tại tâm của vùng năng lượng ($\omega = 0$) như hàm của độ mất trật

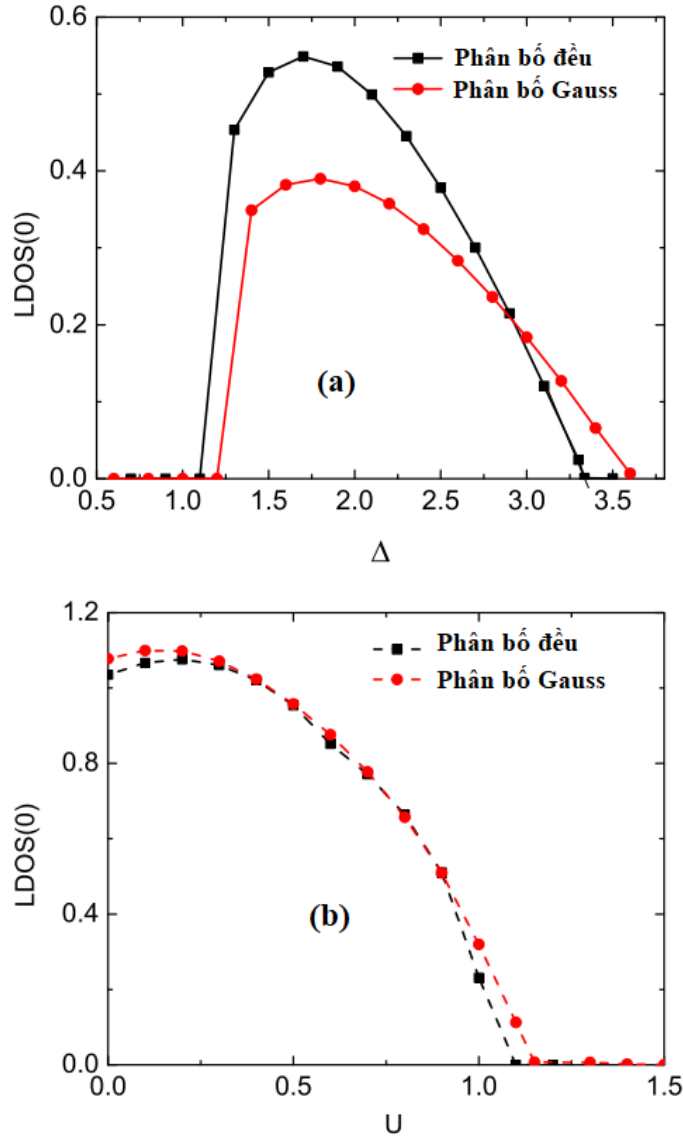
tự Δ tại $U = 0.5$ cho cả hai loại phân bố.



Hình 2.1.3: Giá trị trung bình cộng và trung bình nhân của mật độ trạng thái địa phương tại tâm vùng $\omega = 0$ tại $U = 0.5$ như hàm của Δ đối với hàm phân bố đều và phân bố Gauss. Đường nét liền (đứt) được xác định qua trung bình nhân (cộng). Các đường với hình vuông (tròn) thu được cho hàm phân bố đều (Gauss).

Như trong hình (2.1.3) có thể thấy, ở miền U nhỏ ($U < \sqrt{3}/2$), trong khi giá trị trung bình nhân của LDOS, ở miền kim loại, giảm dần khi độ mất trật tự tăng, và triệt tiêu tại một giá trị tối hạn của độ mất trật tự thì giá trị trung bình cộng được tìm thấy có giá trị bằng với trung bình nhân ở miền Δ nhỏ, nhưng sau đó giảm chậm hơn và vẫn còn hữu hạn tại điểm tối hạn của trung bình nhân. Ngoài ra, giá trị tối hạn của giá trị trung bình nhân với phân bố Gauss lớn hơn so với giá trị tối hạn của trung bình nhân với phân bố đều. Hành vi của $\rho_{geom}(0)$ cho cả hai hàm phân bố ở miền tương tác trung bình ($\sqrt{3}/2 < U < 2.3$ đối với phân bố đều, $\sqrt{3}/2 < U < 1.7$ đối với phân bố Gauss) được thể hiện trên hình (2.1.4 (a)) ($U = 1.2$): Khi Δ tăng dần từ không đến giá trị tối hạn ρ_{geom} tăng đột ngột từ không, đạt giá trị cực đại, sau đó giảm gần về không lần tiếp theo. Cụ thể, khi mất trật tự tăng, tại giá trị $U = 1.2$, hệ trải qua hai loại điện môi, đầu tiên là điện môi Mott, và lần triệt tiêu tiếp theo tương ứng với điện môi Anderson.

Chúng tôi cũng vẽ giá trị trung bình cộng LDOS ρ_{arith} như hàm của U tại giá trị $\Delta = 0.6$ cho hai loại phân bố ở hình (2.1.4 (b)). Hai đường này có cùng hành vi và chỉ có sự khác biệt một chút ở miền tương tác U nhỏ và lớn. Sự khác biệt định lượng giữa hai hàm phân bố đều và Gauss có thể do sự khác biệt về hàm số mũ của phân bố Gauss. Ngoài ra, chúng



Hình 2.1.4: (a) Giá trị trung bình nhân của LDOS tại tâm vùng ($\omega = 0$) khi $U = 1.2$ như hàm của Δ cho phân bố đều và phân bố Gauss. Đường với các điểm hình vuông (tròn) thu được từ phân bố đều (Gauss). (b) Giá trị trung bình cộng của LDOS tại tâm vùng ($\omega = 0$) khi $\Delta = 0.6$ như hàm của U cho phân bố đều và phân bố Gauss. Đường nét đứt với các điểm hình vuông (tròn) thu được từ phân bố đều (Gauss).

tôi so sánh kết quả thu được cho phân bố Gauss với phương pháp khác. Trong tài liệu [27], giản đồ pha ở trạng thái cơ bản của mô hình Anderson - Hubbard tại nhiệt độ không với cùng hàm DOS bán nguyệt được đưa ra. Phương pháp DMFT được áp dụng, tuy nhiên năng lượng riêng không thu được bằng cách lấy trung bình nhân. Thực tế, các tác giả tính đến đóng góp trung bình mất trật tự, hoàn toàn bỏ qua những đóng góp tương quan giữa mất trật tự tương tác. Kết quả, giá trị tới hạn của mất trật tự Anderson $\Delta(U)$ không phụ thuộc vào giá trị của U . Sự khác biệt mà chúng tôi chỉ ra là chỉ có một sự chuyển từ pha điện môi này sang pha điện môi khác mà không thông qua một miền kim loại trung gian tại vùng mất trật tự nhỏ như trong [27], lưu ý rằng phương sai trong [27] là Δ^2 . Tiếp theo, giản đồ pha cho phân bố Gauss được đem so sánh với mô hình AH có mất trật tự theo phân bố Gauss nhưng cho mạng vuông tại lớp đầy một nửa sử dụng một gần đúng Hartree - Fock không hạn chế trong [26]. Kết quả định tính là phù hợp tốt. Đặc biệt, ở cả hai giản đồ pha quá trình chuyển đổi trực tiếp kim loại - điện môi Mott được giới hạn ở miền nhỏ của mặt phẳng (U, Δ) , ở đó cả tương tác và độ mất trật tự đều yếu. Như vậy, nhìn một cách tổng thể giản đồ pha thu được cho mô hình AH tại lớp đầy một nửa chỉ ra rằng theo một cách định tính giản đồ pha không phụ thuộc vào cách chọn hàm phân bố (đều hay Gauss) cho biến mất trật tự.

2.2 Mô hình Anderson - Falicov - Kimball (AFK)

Mô hình Falicov - Kimball (FK) là một trường hợp đơn giản của mô hình Hubbard (HM), ở đó một spin sẽ bị đóng băng (tham số nhảy nút bằng không). Tương tự với HM, chuyển pha kim loại - điện môi Mott theo tương tác Coulomb U cũng được tìm thấy trong FK tại lấp đầy một nửa [103]. Mô hình FK thực sự thú vị vì nó có thể được giải chính xác trong chiều vô hạn [104]. Bên cạnh đó, nó có nhiều khía cạnh vật lý quan trọng của hệ tương quan, ví dụ như chuyển pha trật tự - mất trật tự trong hệ hợp kim nhị phân [105], vận chuyển điện tích [106]. Mặt khác, xem xét các tính chất vận chuyển của các điện tử tự do trên một mạng có năng lượng riêng ngẫu nhiên trên nút, Anderson đã kết luận rằng với độ mất trật tự lớn hơn giá trị tới hạn, ban đầu điện tử sẽ cư trú ở bất kỳ một nút nào đó, sau đó nó không thể lan truyền vô hạn, nhưng tiếp tục lan truyền ở một vùng giới hạn xung quanh vị trí đó, nghĩa là nó bị định xứ hóa [2]. Một sự kết hợp giữa hai mô hình FK và mô hình Anderson gọi là mô hình Anderson - Falicov - Kimball (AFK). Do đó, so với FK, AFK bao gồm một thế năng địa phương, làm cản trở sự khuếch tán của các điện tử tự do. Thế năng này là một đại lượng ngẫu nhiên, tuân theo một hàm phân bố nào đó như phân bố đều, Gauss, phân bố nhị phân. Có thể nhận thấy rõ ràng rằng giản đồ pha cho AFK thú vị và thu hút hơn so với giản đồ pha cho FK bởi vì xuất hiện định xứ Anderson ngoài điện môi Mott. Hơn nữa, trong AFK người ta có thể khảo sát sự tương hỗ giữa mất trật tự và tương quan.

Cũng tương tự như phần trên, mô hình AFK có thể được giải bằng TMT-DMFT. Trong TMT-DMFT giản đồ pha cho AFK tại lấp đầy một nửa, ở đó thế địa phương được giả sử là các biến độc lập, tuân theo hàm phân bố đều được khảo sát bởi nhóm Byczuk [20] và Gusmao [107]. Hơn nữa, mới đây AFK còn được khảo sát với một thế Coulomb mất trật tự, cụ thể tương tác Coulomb giữa điện tử tự do và điện tử bị đóng băng trên mỗi nút được coi là biến ngẫu nhiên, đã được xem xét bởi Carvalho và các cộng sự [108]. Ở đây, họ chỉ ra rằng độ mất trật tự Coulomb đóng vai trò đáng kể trong hành vi chuyển pha, cụ thể là hệ sẽ hướng tới một pha điện môi khi độ mất trật tự Coulomb tăng.

Trong phần này, chúng tôi tập trung khảo sát giản đồ pha của mô hình AFK tại lấp đầy một nửa với hàm phân bố Gauss cho tạp (khác so với hàm phân bố đều cho tạp ở [108])

và hàm phân bố đều cho tương tác Coulomb thông qua TMT-DMFT. Kết quả cho thấy miền kim loại và miền điện môi Mott bị thu hẹp khi độ mất trật tự Coulomb tăng lên. Sự ảnh hưởng của các hàm phân bố khác nhau (đều, Gauss) cũng được xem xét.

2.2.1 Mô hình và phương pháp tính toán

Chúng tôi xem xét mô hình Anderson - Falikov - Kimball với Hamiltonian như sau

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle} t_{ij} c_i^\dagger c_j + \sum_i \varepsilon_i c_i^\dagger c_i + \sum_i U_i f_i^\dagger f_i c_i^\dagger c_i - \mu \sum_i c_i^\dagger c_i, \quad (2.2.1)$$

với $c_i^\dagger(c_i)$ và $f_i^\dagger(f_i)$ là các toán tử sinh (hủy) cho điện tử linh động và không linh động tại i . t_{ij} là biên độ tham số nhảy nút giữa hai nút i và j , U_i là tương tác Coulomb giữa điện tử linh động và điện tử định xứ tại cùng một nút i . Năng lượng tạp tại các nút i là ε_i . Có hai biến ngẫu nhiên trong mạng, chúng tôi giả sử một phân bố Gauss cho năng lượng tạp với $P(\varepsilon_i) = \sqrt{\frac{6}{\pi\Delta^2}} \exp(-6\varepsilon_i^2/\Delta)$ và một phân bố đều cho tương tác Coulomb trên nút $\tilde{P}(U_i) = \theta(\delta/2 - |U_i - U|)/\delta$, với θ là hàm bậc thang, $\Delta(\delta)$ đặc trưng cho độ mất trật tự Anderson (Coulomb), và U là giá trị trung bình của tương tác Coulomb. Ở đây, chúng tôi khảo sát chỉ có tương tác đẩy, $U_i \geq 0$, dẫn tới $U \geq \delta/2$. Số hạt trung bình cho điện tử linh động và định xứ tại nút thứ i lần lượt cho bởi $n_i = \langle c_i^\dagger c_i \rangle$ và $p_i = \langle f_i^\dagger f_i \rangle$, và chúng độc lập với nhau.

AFK được giải bằng DMFT kết hợp với TMT. Phương trình chuyển động cho Hamiltonian (2.2.1) được diễn giải trong [109] và [8]:

$$(\omega + \mu - \varepsilon_i)G_{ij}(\omega) - \sum_l t_{il}G_{lj}(\omega) = \delta_{ij} + U\Gamma_{il}(\omega), \quad (2.2.2)$$

$$(\omega + \mu - \varepsilon_i - U_i)\Gamma_{ij}(\omega) - \sum_l t_{il}\Gamma_{lj}(\omega) = \delta_{ij}p_i, \quad (2.2.3)$$

ở đây $G_{ij}(\omega) = \langle\langle c_i | c_j^\dagger \rangle\rangle_\omega$ và $\Gamma_{ij}(\omega) = \langle\langle f_i f_i^\dagger c_i | c_j \rangle\rangle_\omega$ là các hàm Green cho đơn hạt và hai hạt, δ_{ij} là hàm delta Kronecker. Năng lượng riêng tại nút được định nghĩa như sau

$$\Sigma_i(\omega) \equiv U \frac{\Gamma_{ij}}{G_{ij}(\omega)}. \quad (2.2.4)$$

Hàm lai hóa $\eta(\omega)$ được xác định thông qua

$$\sum_l t_{il} G_{lj}(\omega) \equiv \eta(\omega) G_{ij}(\omega), \quad (2.2.5)$$

$$\sum_l t_{il} \Gamma_{lj}(\omega) \equiv \eta(\omega) \Gamma_{ij}(\omega). \quad (2.2.6)$$

Thay hai phương trình (2.2.5) và (2.2.6) vào hai phương trình (2.2.2) và (2.2.3) ta thu được hàm Green địa phương $G_{ii}(\omega)$ và năng lượng riêng $\Sigma_i(\omega)$ lần lượt như sau (ở đây chúng tôi giả sử mạng đồng nhất, tức là $p_i = p$ với $p \in [0, 1]$)

$$G_{ii}(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon_i - \eta(\omega) - \Sigma_i(\omega)} \equiv G(\omega, \varepsilon_i), \quad (2.2.7)$$

$$\Sigma_i(\omega) = pU_i + \frac{p(1-p)U^2}{\omega + \mu - \varepsilon_i - (1-p)U_i - \eta(\omega)}. \quad (2.2.8)$$

Hàm mật độ trạng thái địa phương LDOS được cho bởi

$$\rho_i(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{ii}(\omega)]. \quad (2.2.9)$$

Cuối cùng, các hàm trung bình của LDOS được tính như sau

$$\rho_{arith}(\omega) = \int dU_i \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \tilde{P}(U_i) \rho(\omega, \varepsilon_i, U_i), \quad (2.2.10)$$

$$\rho_{geom}(\omega) = \exp \left[\int dU_i \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \tilde{P}(U_i) \ln \rho(\omega, \varepsilon_i, U_i) \right]. \quad (2.2.11)$$

Hàm Green mạng bất biến với phép biến đổi tịnh tiến, thu được từ biến đổi Hilbert như sau

$$G_{\alpha, \text{typ}}(\omega) = \int d\omega' \frac{\rho_\alpha(\omega')}{\omega - \omega'}, \quad (2.2.12)$$

với α tương ứng với trung bình nhân "geom" và trung bình cộng "arith".

Trong phần này cũng như toàn bộ luận án, chúng tôi khảo sát mạng Bethe với số kết nối vô hạn, $\rho_0(\varepsilon) = 4\sqrt{1 - 4(\varepsilon/W)^2}$, tương ứng với điều kiện tự hợp cho hàm lai hóa $\eta(\omega) = W^2 G(\omega)/16$. Ngoài ra, chúng tôi xét ở giới hạn tại lấp đầy một nửa, cụ thể, $\langle n_i \rangle = \langle n \rangle = 1/2$ và $p = 1/2$, $\mu = U/2$.

Tiếp theo, các pha trong giản đồ được xác định từ hai hàm $\rho_{arith}(\omega)$ và $\rho_{geom}(\omega)$ tại ($\omega = 0$): (i) $\rho_{geom}(0) > 0$ xác định pha kim loại, (ii) $\rho_{arith}(0) = 0$ tương ứng pha Mott.

(iii) $\rho_{arith}(0) > 0$ and $\rho_{geom}(0) = 0$ tương ứng với pha định xứ Anderson (không có khe). Ngoài ra, hàm Green tại mức Fermi là hàm thuần ảo, $G(0) = -i\pi\rho_\alpha(0)$, tương tự như phần trên cho mô hình AH (2.1.11). Các phương trình tuyến tính hóa DMFT cũng được xây dựng tương tự như phần 2.1. Tiệm cận miền kim loại gần với chuyển pha, giá trị của $\rho_\alpha(0)$ là nhỏ. Trước tiên, thay $p = \frac{1}{2}$, $\mu = \frac{U}{2}$, $\omega = 0$ và $\eta(\omega) = ic$, c là số thực nhỏ vào phương trình (2.2.8) và (2.2.7) thu được hàm Green $G(0, \varepsilon_i, U_i)$ như sau

$$\begin{aligned} G(0, \varepsilon_i, U) &= \frac{1}{\frac{U}{2} - \varepsilon_i - ic - \frac{U}{2} + \frac{U^2}{4(\varepsilon_i + ic)}} \\ &= -\frac{1}{\varepsilon_i + ic - \frac{U^2}{4(\varepsilon_i + ic)}} \\ &\text{(Tách thành phần thực và phần ảo)} \\ &= -\frac{4(\varepsilon_i + ic)}{4(\varepsilon_i + ic)(\varepsilon_i + ic) - U^2} \\ &= -\frac{\varepsilon_i + ic}{(\varepsilon_i^2 + i2\varepsilon_i c - c^2) - U^2/4} \\ &\text{(Bỏ qua số hạng bậc cao của } c\text{)} \\ &= -\frac{(\varepsilon_i + ic)(\varepsilon_i^2 - U^2/4 - 2i\varepsilon_i c)}{(U^2/4 - \varepsilon_i^2)^2} \\ &= \frac{\varepsilon_i(\varepsilon_i^2 - U^2/4) + ic(\varepsilon_i^2 + U^2/4)}{(U^2/4 - \varepsilon_i^2)^2}. \end{aligned}$$

Suy ra

$$\Im G(0, \varepsilon_i, U_i) = \frac{\varepsilon_i^2 + U_i^2/4}{(U_i^2/4 - \varepsilon_i^2)^2}. \quad (2.2.13)$$

Do điều kiện tự hợp của phương pháp DMFT, ta cũng có phương trình đệ quy tương tự phương trình (2.1.12) như sau

$$\rho_\alpha^{(n+1)}(0, \varepsilon_i, U_i) = \frac{W^2}{16} \rho_\alpha^{(n)}(0) Z(\varepsilon_i), \quad (2.2.14)$$

với

$$Z(\varepsilon_i, U_i) = \frac{\varepsilon_i^2 + U_i^2/4}{[\varepsilon_i^2 - U_i^2/4]^2}. \quad (2.2.15)$$

Tại biên vùng kim loại - điện môi ta có gần đúng $\rho_\alpha^{(n+1)}(0) = \rho_\alpha^{(n)}(0)$, $\alpha = \text{"arith"}$ hoặc "geom" . Thay vào phương trình (2.2.10) và (2.2.11) thu được mối quan hệ $\Delta(U)$ tương

ứng cho trung bình cộng và trung bình nhân lần lượt

$$\rho_{arith}^{(n+1)}(0) = \frac{W^2}{16} \rho_{arith}^{(n)}(0) \int_{-\delta/2+U}^{\delta/2+U} dU_i \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \frac{\varepsilon_i^2 + (U_i/2)^2}{[\varepsilon_i^2 - (U_i/2)^2]^2}, \quad (2.2.16)$$

$$\rho_{geom}^{(n+1)}(0) = \frac{W^2}{16} \rho_{geom}^{(n)}(0) \exp \left[\int_{-\delta/2+U}^{\delta/2+U} dU_i \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \ln \frac{\varepsilon_i^2 + (U_i/2)^2}{[\varepsilon_i^2 - (U_i/2)^2]^2} \right]. \quad (2.2.17)$$

Khi đó hai phương trình (2.2.16) và (2.2.17) viết lại như sau

$$1 = \frac{W^2}{16} \frac{1}{\delta} \int_{-\delta/2+U}^{\delta/2+U} dU_i \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \frac{\varepsilon_i^2 + (U_i/2)^2}{[\varepsilon_i^2 - (U_i/2)^2]^2}, \quad (2.2.18)$$

$$1 = \frac{W^2}{16} \exp \left[\frac{1}{\delta} \int_{-\delta/2+U}^{\delta/2+U} dU_i \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \ln \frac{\varepsilon_i^2 + (U_i/2)^2}{[\varepsilon_i^2 - (U_i/2)^2]^2} \right]. \quad (2.2.19)$$

Áp dụng $\int dx \frac{x^2 + a^2}{(x^2 - a^2)^2} = -\frac{x}{x^2 - a^2}$, biến đổi phương trình (2.2.18).

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{W^2}{16} \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \frac{1}{\delta} \int_{U-\delta/2}^{U+\delta/2} dU_i \frac{\varepsilon_i^2 + U_i^2/4}{(\varepsilon_i^2 - U_i^2/4)^2} \\ & \text{(Đặt } x = \frac{U_i}{2} \text{)} \\ &= \frac{W^2}{16} \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \left. \frac{2}{\delta} \left(-\frac{x}{x^2 - \varepsilon_i^2} \right) \right|_{U/2-\varepsilon/4}^{U/2+\delta/4} \\ &= \frac{W^2}{16} \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \frac{2}{\delta} \left[\frac{U/2 - \delta/4}{(U/2 - \delta/4)^2 - \varepsilon_i^2} - \frac{U/2 + \delta/4}{(U/2 + \delta/4)^2 - \varepsilon_i^2} \right]. \end{aligned}$$

Với $P(\varepsilon_i)$ là hàm phân bố Gauss thì phương trình tuyến tính hóa DMFT theo trung bình cộng viết lại như sau

$$\begin{aligned} 1 &= \frac{W^2}{4} \int_0^\infty d\varepsilon_i \sqrt{\frac{6}{\pi \Delta}} \frac{1}{\delta} \left[\frac{U/2 - \delta/4}{(U/2 - \delta/4)^2 - \varepsilon_i^2} - \frac{U/2 + \delta/4}{(U/2 + \delta/4)^2 - \varepsilon_i^2} \right] e^{-\frac{6\varepsilon_i^2}{\Delta^2}} \\ &= \sqrt{\frac{6}{\pi}} \frac{1}{4\Delta\delta} \int_0^\infty d\varepsilon_i \left[\frac{U/2 - \delta/4}{(U/2 - \delta/4)^2 - \varepsilon_i^2} - \frac{U/2 + \delta/4}{(U/2 + \delta/4)^2 - \varepsilon_i^2} \right] e^{-\frac{6\varepsilon_i^2}{\Delta^2}}. \quad (2.2.20) \end{aligned}$$

Tương tự, ta sẽ biến đổi phương trình (2.2.19).

$$1 = \frac{W^2}{16} \exp \left[\int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \frac{1}{\delta} \int_{U-\delta/2}^{U+\delta/2} dU_i \ln \frac{\varepsilon_i^2 + U_i^2/4}{(\varepsilon_i^2 - U_i^2/4)^2} \right].$$

Áp dụng tương tự như phương trình (2.1.25) ta nhận được phương trình tuyến tính hóa DMFT cho giá trị trung bình nhân

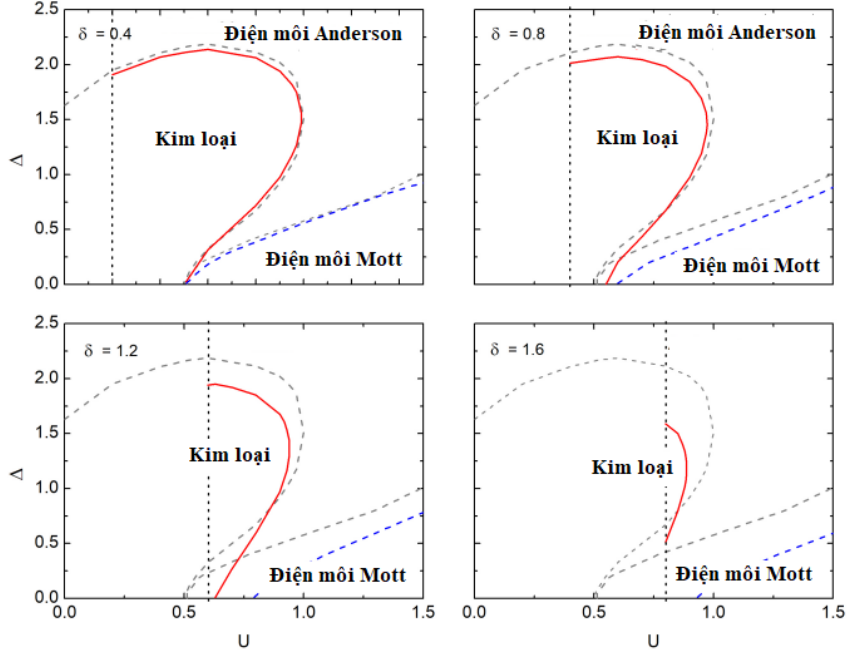
$$1 = \frac{W^2}{16} \exp \left[\frac{4}{\Delta\delta} \sqrt{\frac{6}{\pi}} \int_0^\infty d\varepsilon_i f(\delta, U, \varepsilon_i) e^{-\frac{6\varepsilon_i^2}{\Delta^2}} \right], \quad (2.2.21)$$

với $f(\delta, U, \varepsilon_i) = t \ln[t^2 + \varepsilon^2] - 2t \ln|t^2 - \varepsilon^2| + 2t + 2\varepsilon \left(\arctan \frac{t}{3} + \ln \left| \frac{t - \varepsilon}{t + \varepsilon} \right| \right) \Big|_{t_1}^{t_2}$, với $t_1 = \frac{U}{2} - \frac{\delta}{4}$, $t_2 = \frac{U}{2} + \frac{\delta}{4}$.

Với mỗi trị của δ các phương trình từ (2.2.20) và (2.2.21) sẽ xác định được giản đồ pha $\Delta - U$.

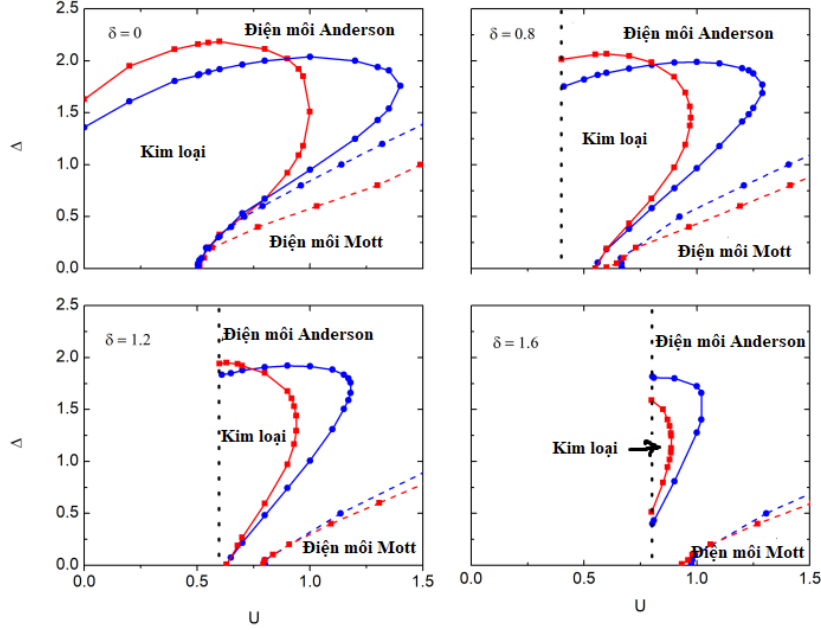
2.2.2 Kết quả và thảo luận

Tương tự như phần 2.1, độ rộng của vùng W được đặt làm đơn vị năng lượng. Đầu tiên chúng tôi khảo sát cho trường hợp không có mất trật tự của tương tác Coulomb ($\delta = 0$), giản đồ pha $U - \Delta$ cho mô hình AFK tại lấp đầy một nửa với phân bố Gauss cho tạp được thể hiện trên hiện trên hình (2.2.1) (đường nét đứt màu xám) cũng như trong hình (2.2.2) (góc trên bên trái). Như trong trường hợp phân bố đều cho tạp trong [3], chúng tôi tìm thấy rằng pha kim loại xuất hiện ở miền giá trị nhỏ của U và Δ , điện môi Mott xác định ở miền U lớn và điện môi Anderson ở miền Δ lớn. Điều này được thể hiện một cách rõ ràng trên hình (2.2.1) khi có mất trật tự (đường màu đỏ) và không có mất trật tự Coulomb (đường nét đứt màu xám). Trong trường hợp không có mất trật tự Coulomb ($\delta = 0$), có thể chia làm ba miền tương tác khác nhau liên quan đến đường biên giữa kim loại và điện môi: (1) miền tương tác nhỏ ($0 < U < 0.505$), (2) miền tương tác trung bình ($0.505 < U < 1.0$) và (3) miền tương tác mạnh ($U \geq 1.0$). Khi $\delta \neq 0$, những miền này vẫn tồn tại nhưng với các giá trị tới hạn khác, cụ thể miền trung gian bị co lại khi δ tăng. Ở đây, chúng tôi chỉ khảo sát với tương tác đẩy, $U_i \geq 0$, dẫn tới $U \geq \delta/2$, tức là chúng tôi chỉ xem xét đường bên tay phải của đường chấm thẳng đứng $U = \delta/2$ trong hình (2.2.1).



Hình 2.2.1: Giản đồ pha cho mô hình AFK với phân bố Gauss cho tập tại các giá trị khác nhau của mật trật tự Coulomb. Đường nét liền màu đỏ (nét đứt màu xanh) xác định từ trung bình nhân (trung bình cộng) so sánh với trường hợp $\delta = 0$ (đường nét đứt màu xám). Đường chấm chấm thẳng đứng đứng $U = \delta/2$ chia miền của U thành hai miền gồm miền $U < \delta/2$ (miền bên tay trái, không xét) và miền $U \geq \delta/2$. W là đơn vị năng lượng.

Do vậy, kết quả chính được chỉ ra trong hình (2.2.1) là sự thu hẹp của miền kim loại và miền điện môi Mott khi độ mất trật tự Coulomb tăng lên. Chúng tôi thu được các kết quả trong hình (2.2.1) trực tiếp từ các phương trình (2.2.20) - (2.2.21), các kết quả này là trùng khớp với các kết quả tính số thu được từ các phương trình tự hợp DMFT. Trong hình (2.2.2) chúng tôi so sánh kết quả của chúng tôi và kết quả thu được trong [108], tại đó AFK được khảo sát với phân bố đều cho tập $P(\varepsilon_i) = \theta(\Delta/2 - |\varepsilon_i|)/\Delta$ và phân bố đều cho tương tác Coulomb $\tilde{P}(U_i) = \theta(\delta/2 - |U_i + U|)$. Để có thể so sánh giữa phân bố đều và phân bố Gauss, chúng tôi chọn phương sai của chúng là như nhau. Không có nhiều sự khác nhau giữa hai giản đồ pha khi $\delta = 0$: đối với cả hai hàm phân bố chúng tôi tìm thấy một pha kim loại ở miền cả mật trật tự và tương tác nhỏ và trung bình. Hình dáng của miền kim loại ở cả hai hàm phân bố là tương tự nhau. Tuy nhiên, các giá trị tới hạn khác nhau ở mức định lượng. Chúng tôi thấy rằng tại miền U nhỏ, các giá trị tới hạn cho độ mất trật tự của phân bố Gauss lớn hơn so với phân bố đều. Ví dụ, trong miền không có tương tác giá trị tới hạn ($\Delta_c(U = 0) \approx 1.63$) cho phân bố Gauss lớn hơn so với ($\Delta_c(U = 0) \approx 1.36$) cho phân bố đều. Hơn nữa, đối với phân bố Gauss miền tương tác trung bình ($0.50 < U < 1.0$) là hẹp hơn so với phân bố đều ($0.50 < U < 1.36$). Ngoài ra,



Hình 2.2.2: Giản đồ pha cho AFK với phân bố Gauss cho tạp và phân bố đều cho tương tác Coulomb (kết quả của chúng tôi, đường màu đỏ nối các hình vuông) so sánh với kết quả thu được của AFK với phân bố đều cho cả tạp và tương tác Coulomb ở Ref.[108] (đường màu xanh nối các hình tròn).

đường biên giữa điện môi Mott và điện môi Anderson cho hệ này với phân bố Gauss ở vị trí thấp hơn trên mặt phẳng (U, Δ) so với phân bố đều. Kết quả này tương tự như đối với mô hình Anderson - Hubbard trên phần 2.1. Cũng như đã nhận xét trong phần trên, các mất trật tự cao hơn liên quan đến bản chất của hàm e mũ trong phân bố Gauss có thể là nguyên nhân dẫn tới sự khác nhau về định lượng. Khi $\delta \neq 0$, bức tranh tương tự vẫn tồn tại, với miền trung gian co lại khi δ tăng và khi $\delta > 1.2$ ranh giới giữa điện môi Mott và điện môi Anderson cho hệ hầu như không phụ thuộc vào loại phân bố mà ta chọn.

2.3 Kết luận

Như vậy, trong phần nghiên cứu này, chúng tôi đã khảo sát sự ảnh hưởng của phân bố Gauss của biến mất trật tự lên giản đồ pha trạng thái cơ bản cho hai mô hình AH và AFK tại lấp đầy một nửa bằng phương pháp TMT-DMFT sử dụng phương pháp EOM cho tạp.

Đối với mô hình AH, kết quả của chúng tôi cho phân bố đều phù hợp với các kết quả thu được từ các phương pháp DMFT thống kê và TMT-DMFT với NRG và SB4. Giản đồ pha cho phân bố Gauss phù hợp khá tốt với kết quả thu được bằng phương pháp Hattie-

Fock không hạn chế ở [26] và khắc phục thiếu sót chính trong [27]. Một cách tổng thể giản đồ pha thu được cho mô hình AH tại lấp đầy một nửa chỉ ra rằng một cách định tính giản đồ pha không phụ thuộc vào cách chọn hàm phân bố của biến mất trật tự. Tuy nhiên, đây là kết quả thu được từ phương pháp TMT-DMFT với phương pháp phương trình chuyển động cho bài toán tạp.

Đối với mô hình AFK với phân bố Gauss cho tạp và phân bố đều cho tương tác Coulomb, khi cố định mất trật tự Coulomb, các phương trình xác định các giá trị tới hạn giữa biên của kim loại tương quan và điện môi Mott, điện môi Anderson được dẫn ra. Chúng tôi chỉ ra rằng miền kim loại và điện môi Mott thu hẹp khi độ lớn mất trật tự của tương tác Coulomb tăng. Thêm nữa, giá trị tới hạn liên quan đến chuyển pha MIT thay đổi khi cường độ tương quan thay đổi. Chúng tôi cũng chỉ ra rằng trong TMT-DMFT giản đồ pha của AFK với phân bố đều và phân bố Gauss cho tạp là giống nhau về định tính.

Chương 3

MÔ HÌNH AH BẤT ĐỐI XỨNG VÀ MÔ HÌNH AH CÓ TƯƠNG TÁC PHỤ THUỘC VÀO NÚT

Trong chương này, chúng tôi khảo sát mô hình AH với một thông số bổ sung ở hai trường hợp: (1) Mô hình AH với mất cân bằng khối lượng; (2) Mô hình AH có tương tác phụ thuộc vào nút, cụ thể, thể tương tác là biến ngẫu nhiên hoặc thể tương tác xen kẽ trên mạng. Nội dung của chương này đã được chúng tôi công bố trong Ref.[110] năm 2021 và Ref.[111] năm 2022.

3.1 Mô hình AH bất đối xứng (mất cân bằng khối lượng)

Ở phần đầu chương này, chúng tôi khảo sát sự ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng lên giản đồ pha cho mô hình Anderson - Hubbard tại lấp đầy một nửa bằng phương pháp TMT-DMFT sử dụng phương pháp EOM cho bài toán tạp. Giản đồ pha cho trạng thái cơ bản không từ tính cho hệ với mất cân bằng khối lượng được xây dựng bằng tính số.

Ngày nay, sự phát triển thí nghiệm vật lý với các nguyên tử cực lạnh trở thành một công cụ nhiều hứa hẹn để khảo sát hệ có tương tác và mất trật tự trong lĩnh vực vật lý hệ cô đặc. So với các hệ cô đặc, khí nguyên tử cực lạnh đưa ra rất nhiều lợi thế như mức độ

kiểm soát và khả năng điều chỉnh. Cụ thể, tương tác giữa các nguyên tử có thể được kiểm soát bằng cộng hưởng Feshbach [112]-[113], và lực lưỡng cực có thể sử dụng tạo ra thế quang học mất trật tự, kết quả là mô hình AH được tạo ra [114]. Ngoài ra, đối xứng spin SU(2) có thể bị phá vỡ bởi sự kết cặp với từ trường ngoài [115] hoặc bằng việc sử dụng hai loại nguyên tử với khối lượng khác nhau [36]-[37]. Điều này dẫn tới sự khác nhau về tham số nhảy nút t_\uparrow và t_\downarrow trong mô hình AH và cho phép chúng ta tạo ra một mô hình AH mất cân bằng khối lượng được định nghĩa như sau

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_\sigma (a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + h.c.) + \sum_{i\sigma} (\varepsilon_i - \mu_\sigma) n_{i\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (3.1.1)$$

với t_σ và μ_σ là tham số tham số nhảy nút giữa hai nút lân cận gần nhất và thế hóa học cho điện tử có spin σ . Năng lượng tại mỗi nút ε_i là biến ngẫu nhiên, mô tả mất trật tự địa phương của các điện tử linh động. Trong phạm vi nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng ε_i tuân theo hàm phân bố đều $P(\varepsilon_i) = \theta(\Delta/2 - |\varepsilon_i|)/\Delta$, Δ đặc trưng cho độ mất trật tự. Sự mất cân bằng khối lượng được xác định thông qua $r = t_\downarrow/t_\uparrow$ với hai giới hạn $r = 0$ tương ứng với mô hình AFK và $r = 1$ tương ứng với AH. Chú ý rằng sự mất cân bằng khối lượng ảnh hưởng mạnh mẽ tới chuyển pha kim loại - điện môi Mott (MIT) trong mô hình HM, ví dụ, cả hai thành phần spin định xứ đồng thời tại cùng một giá trị tới hạn của tương tác Coulomb, các giá trị tới hạn này giảm đơn điệu khi sự mất cân bằng khối lượng tăng [116] - [119]. So với giản đồ pha của HM, giản đồ pha của AH sẽ phong phú và hấp dẫn hơn bởi vì sẽ xuất hiện pha điện môi Anderson bên cạnh điện môi Mott. Do đó, sẽ rất thú vị khi khảo sát sự ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng lên giản đồ pha của AH. Tuy nhiên, AH sẽ khó giải quyết hơn so với HM, và do đó người ta phải thực hiện một số gần đúng.

Gần đúng trường trung bình động kết hợp với lý thuyết môi trường điển hình như chúng tôi đề cập ở Chương 1 và Chương 2 của luận án đã được áp dụng và thành công trong việc khảo sát giản đồ pha cho AH [98], [95], [6], AFK [3]. Trong phần nghiên cứu này, chúng tôi sử dụng gần đúng TMT-DMFT để tìm giản đồ pha cho mô hình AH có mất cân bằng khối lượng. Lưu ý rằng giản đồ pha không từ tính của AFK và AH lấp đầy một nửa có sự tương đồng: Có hai pha điện môi (điện môi Mott và Anderson) bao quanh một pha kim loại tương quan. Tuy nhiên, miền kim loại trong AFK nhỏ hơn so với trong HM [3], [97]. Mới đây, phương pháp này đã được nhóm của Byczuk [121], [122] khảo sát giản

đồ pha điện tử và từ tính của AH tại lấp đầy một nửa với mất trật tự chéo phụ thuộc spin. Bên cạnh pha điện môi Mott, định xứ Anderson, pha kim loại tương quan, họ tìm thấy một trạng thái mới, ở đó điện tử có spin hướng lên định xứ trong khi đó điện tử với spin hướng xuống vẫn còn linh động và gọi nó là pha định xứ chọn lọc spin. Điều này là có thể vì đối xứng điện tử - lỗ trống và đối xứng spin $SU(2)$ bị phá vỡ thông qua thành phần chéo mất trật tự dẫn tới các điện tử với spin hướng lên di chuyển trên một mạng có một thể ngẫu nhiên trong khi các điện tử có spin hướng xuống lan truyền trên một mạng đồng nhất [121]-[122]. Tuy nhiên, sự tồn tại của pha định xứ chọn lọc spin khi đối xứng $SU(2)$ bị phá vỡ ngoài nguyên nhân do mất trật tự chéo phụ thuộc spin trong khi đối xứng điện tử - lỗ trống vẫn được bảo toàn còn nhiều điều chưa được làm rõ.

Trong luận án này, DMFT cùng phương trình chuyển động (EOM) như một phương pháp giải cho mô hình đơn tạp với trung bình nhân trên tất cả các cấu hình của tạp được sử dụng để nghiên cứu giản đồ pha trạng thái cơ bản cho AH tại lấp đầy một nửa với mất cân bằng khối lượng. Trong DMFT, bài toán hệ nhiều hạt được ánh xạ lên một mô hình đơn tạp. Trong khi các bài toán mạng không có lời giải tổng quát và khó giải quyết thì mô hình đơn tạp thường được giải quyết thông qua một số phương pháp gần đúng như phương pháp Monte Carlo lượng tử (QMC), phương pháp nhóm số tái chuẩn hóa (NRG), lý thuyết lặp nhiễu loạn (IPT), phương pháp chéo hóa chính xác (ED), và phương pháp phương trình chuyển động (EOM). Tuy nhiên, mỗi phương pháp có một lợi thế và hạn chế của nó. Ví dụ, hạn chế lớn nhất của QMC (đối với các hạt fermion) là vấn đề dấu tại nhiệt độ thấp khi nó phụ thuộc vào cơ sở được sử dụng để viết lại hàm phân hoạch. Thêm nữa, QMC phải làm việc với thời gian ảo mà sau đó sẽ cần mở rộng giải tích cho hàm phổ. Điều này cũng xảy ra với ED. Phương pháp NRG có thể mô tả tốt đỉnh tần số thấp của chuẩn hạt liên quan đến các kích thích ở năng lượng thấp nhưng nó có độ chính xác kém hơn trong các vùng Hubbard. Mặc dù QMC, ED, NRG có thể giải chính xác bài toán tạp bằng tính số, nhưng chúng cần bộ xử lý tính toán rất lớn, với các ứng dụng của chúng bị giới hạn mạnh mẽ bởi các tài nguyên máy tính có sẵn. Mặt khác, IPT và EOM đáng tin cậy khi tài nguyên máy tính bị hạn chế. Trong IPT, người ta phải đưa vào một tiếp cận để nội suy giới hạn kết cặp yếu và mạnh. Ngoài ra, IPT không tốt ở trường hợp lấp đầy khác một nửa khi cường độ tương tác Coulomb lớn hơn nhiều so với độ rộng vùng nên không phải lúc nào cũng phù hợp. EOM bị giới hạn bởi các sơ đồ ngắt chuỗi của chúng, tuy nhiên EOM thể hiện giá trị của nó khi làm việc trực tiếp trên tần

số thực và ở nhiệt độ rất thấp. Nó có thể là ứng viên tốt để giải các bài toán tạp một cách nhanh chóng và đáng tin cậy bằng việc chọn sơ đồ ngắt chuỗi phù hợp [123]. Cũng như đã lưu ý trong Ref.[6], trong trường hợp cân bằng khối lượng, giản đồ pha thu được bằng TMT-DMFT là phù hợp với các kết quả thu được từ gần đúng DMFT thống kê và TMT-DMFT sử dụng NRG và SB4. Chúng tôi tìm thấy rằng khi tăng độ mất cân bằng khối lượng cả hai miền điện môi Anderson và Mott đều được mở rộng. Ngoài ra, đối với tham số mất cân bằng $0 < r < 1$ xuất hiện một đường của pha định xứ chọn lọc spin, với các hạt spin hướng xuống định xứ, trong khi các hạt có spin hướng lên vẫn linh động.

3.1.1 Mô hình và phương pháp tính toán

Hamiltonian của mô hình AH được giải bằng DMFT [95], [8]. Mô hình Anderson - Hubbard một tạp với năng lượng phụ thuộc nút ε_i có dạng

$$H_{imp} = \sum_{\sigma} (\varepsilon_i - \mu_{\sigma}) n_{i\sigma} + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \left(V_{k\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} + V_{k\sigma}^* a_{i\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \right), \quad (3.1.2)$$

với $c_{k\sigma}^{\dagger}$ ($c_{k\sigma}$) là các toán tử sinh, hủy điện tử trong bể điện tử có spin σ . Yếu tố ma trận của hàm lai hóa $V_{k\sigma}$ và tham số $\varepsilon_{k\sigma}$ có mối quan hệ như sau

$$\eta(\omega) = \sum_k \frac{|V_{k\sigma}|^2}{\omega - \varepsilon_{k\sigma}}. \quad (3.1.3)$$

Tương tự như định nghĩa trong Chương 2, $\rho_{\sigma}(\omega, \varepsilon_i) = -\Im G_{\sigma}(\omega, \varepsilon_i)/\varepsilon_i$ và các giá trị trung bình cộng và trung bình nhân theo biến ε_i thu được lần lượt $\rho_{geom} = \exp[\langle \ln \rho(\omega, \varepsilon_i) \rangle]$ và $\rho_{arith} = \langle \rho(\omega, \varepsilon_i) \rangle$, với $\langle O(\varepsilon_i) \rangle = \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) O(\varepsilon_i)$. Hàm Green phụ thuộc spin thu lại được từ biến đổi Hilbert

$$G_{\alpha\sigma}(\omega) = \int d\omega' \frac{\rho_{\alpha\sigma}(\omega')}{\omega - \omega'}, \quad (3.1.4)$$

với α kí hiệu cho "arith" hoặc "geom". Hàm mật độ trạng thái không tương tác có dạng bán nguyệt $\rho_{0\sigma}(\varepsilon) = \frac{1}{2\pi t_{\sigma}} \sqrt{4t_{\sigma}^2 - \varepsilon^2}$, khi đó hàm lai hóa được xác định thông qua mối quan hệ

$$\eta_{\sigma}(\omega) = t_{\sigma}^2 G_{\sigma}(\omega). \quad (3.1.5)$$

Sau đó chúng tôi sử dụng phương pháp phương trình chuyển động cho mô hình Anderson một tạp (3.1.2), xét tại lấp đầy một nửa, $\langle n_{i\uparrow} \rangle = \langle n_{i\downarrow} \rangle = \langle n_i/2 \rangle$ và $\mu_{\uparrow} = \mu_{\downarrow} = U/2$, thu được phương trình tương tự như phương trình (2.1.8)

$$G_{\sigma}(\omega, \varepsilon_i) = \frac{1 - \langle n_i \rangle / 2}{\omega - \varepsilon_i + U/2 - \eta_{\sigma}(\omega) + U\eta_{\bar{\sigma}}(\omega)[\omega - \varepsilon_i - U/2 - \eta_{\sigma}(\omega) - 2\eta_{\bar{\sigma}}(\omega)]^{-1}} \quad (3.1.6)$$

$$+ \frac{\langle n_i \rangle / 2}{\omega - \varepsilon_i - U/2 - \eta_{\sigma}(\omega) - U\eta_{\bar{\sigma}}(\omega)[\omega - \varepsilon_i - U/2 - \eta_{\sigma}(\omega) - 2\eta_{\bar{\sigma}}(\omega)]^{-1}}.$$

Phương trình (3.1.6) có thể thu lại được kết quả cho AFK trong [3] khi $r = 0$ và trường hợp AH cân bằng khối lượng $r = 1$ ($t_{\uparrow} = t_{\downarrow}$) trong [6]. Ở giới hạn không mất trật tự $\varepsilon_i = 0$, phương trình 3.1.6 quy về phương trình HM cân bằng khối lượng trong [118] và [124].

Lưu ý rằng đối với trường hợp cân bằng khối lượng do tính đối xứng điện tử - lỗ trống $\rho_{\alpha\sigma}(\omega) = \rho_{\alpha\sigma}(-\omega)$, thay vào phương trình (3.1.4) thu được phần thực là bằng 0, tức là hàm Green hoàn toàn ảo $G_{\alpha\sigma}(0) = -i\pi\rho_{\alpha\sigma}(0)$. Do đó ta dễ dàng thu được giá trị trung bình của LDOS. Cũng giống như phần 2.1, chúng tôi đơn giản bài toán bằng cách sử dụng giới hạn nguyên tử cho số hạt trung bình $\langle n_i \rangle$ như phương trình (2.1.8).

Tiếp theo, chúng tôi cũng sẽ xác định các phương trình tuyến tính hóa DMFT giữa biên của điện môi và kim loại tương tự như Chương 2 (xem chi tiết tại phụ lục D). Đó là hệ hai phương trình tuyến tính cho $\rho_{\uparrow\alpha}$ và $\rho_{\downarrow\alpha}$, α kí hiệu $a(g)$ ứng với giá trị trung bình cộng (nhân). Cặp phương trình tuyến tính hóa cho giá trị trung bình cộng như sau

$$\begin{cases} [t_{\uparrow}^2 I_1(U, \Delta) - 1] \rho_{\uparrow a}(0) + U I_2(U, \Delta) t_{\downarrow}^2 \rho_{\downarrow a}(0) = 0 \\ U I_2(U, \Delta) t_{\uparrow}^2 \rho_{\uparrow a}(0) + [t_{\downarrow}^2 I_1(U, \Delta) - 1] \rho_{\downarrow a}(0) = 0, \end{cases} \quad (3.1.7)$$

với

$$I_1(U, \Delta) = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} d\varepsilon \frac{\varepsilon^2 + U^2/4 + (1 - n_i)U\varepsilon}{[\varepsilon^2 - U^2/4]^2}, \quad (3.1.8)$$

$$I_2(U, \Delta) = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} d\varepsilon \frac{U/2 + (1 - n_i)\varepsilon}{[\varepsilon^2 - U^2/4]^2}. \quad (3.1.9)$$

Hệ phương trình tuyến tính (3.1.7) có nghiệm không tầm thường khi thỏa mãn phương

trình

$$\begin{vmatrix} t_{\uparrow}^2 I_1(U, \Delta) - 1 & UI_2(U, \Delta) t_{\downarrow}^2 \\ UI_2(U, \Delta) t_{\uparrow}^2 & t_{\downarrow}^2 I_1(U, \Delta) - 1 \end{vmatrix} = 0 \quad (3.1.10)$$

Chọn $t_{\uparrow} = 1$ là đơn vị năng lượng tức $t_{\downarrow} = r$, khi đó phương trình (3.1.10) trở thành

$$[I_1(U, \Delta) - 1][r^2 I_1(U\Delta - 1)] - [UI_2(U, \Delta)r^2]^2 = 0 \quad (3.1.11)$$

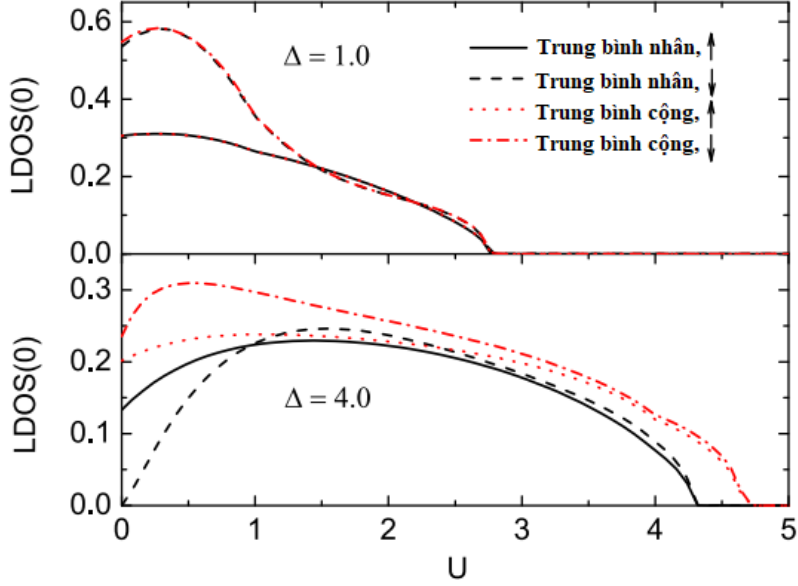
Chú ý rằng trong hai giới hạn $r = 0$ và $r = 1$ phương trình (3.1.11) lần lượt trở thành phương trình (15) trong Ref.[3] và phương trình (13) trong Ref.[6].

Cặp phương trình cho $\rho_{\uparrow g}(0)$ và $\rho_{\downarrow g}(0)$ thu được hệ (xem phụ lục D)

$$\rho_{\uparrow g}(0) = \exp \left[\frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} \ln \left(\frac{t_{\uparrow}^2 [\varepsilon^2 + U^2/4 + (1 - n_i)U\varepsilon] \rho_{\uparrow g}(0)}{[\varepsilon^2 - U^2/4]^2} + \frac{Ut_{\downarrow}^2 [U/2 + (1 - n_i)\varepsilon] \rho_{\downarrow g}(0)}{[\varepsilon^2 - U^2/4]^2} \right) d\varepsilon \right] \quad (3.1.12)$$

$$\rho_{\downarrow g}(0) = \exp \left[\frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} \ln \left(\frac{Ut_{\downarrow}^2 [U/2 + (1 - n_i)\varepsilon] \rho_{\uparrow g}(0)}{[\varepsilon^2 - U^2/4]^2} + \frac{t_{\uparrow}^2 [\varepsilon^2 + U^2/4 + (1 - n_i)U\varepsilon] \rho_{\downarrow g}(0)}{[\varepsilon^2 - U^2/4]^2} \right) d\varepsilon \right]. \quad (3.1.13)$$

Tương tự, ở giới hạn $r = 0$ và $r = 1$ phương trình (3.1.12) và (3.1.13) rút gọn được về phương trình (14) trong Ref.[3] và phương trình (11) trong [6]. Tuy nhiên, ở giới hạn $0 < r < 1$, chúng ta chưa có phương trình xác định đường biên $\Delta = \Delta(U)$ cho chuyển pha Anderson như phương trình (3.1.11) cho chuyển pha Mott. Mặt khác, từ các phương trình tuyến tính hóa (3.1.7) cho $\rho_{\uparrow a}(0)$ và $\rho_{\downarrow a}(0)$ cũng như hai phương trình (3.1.12) và (3.1.13) cho $\rho_{\uparrow g}(0)$ và $\rho_{\downarrow g}(0)$ mà cả $\rho_{\sigma a}(0)$ đồng thời triệt tiêu tại cùng một điểm tới hạn của cả tương tác và mất trật tự, điều này cũng xảy ra với $\rho_{\sigma g}(0)$. Những giá trị tới hạn cho $\rho_{\sigma a}(0)$ và $\rho_{\sigma g}(0)$ sẽ được trình bày chi tiết ở phần tiếp theo. Ngoài ra, ở trường hợp không tương tác $U = 0$ mỗi thành phần spin định xứ bởi một giá trị mất trật tự tới hạn khác nhau.

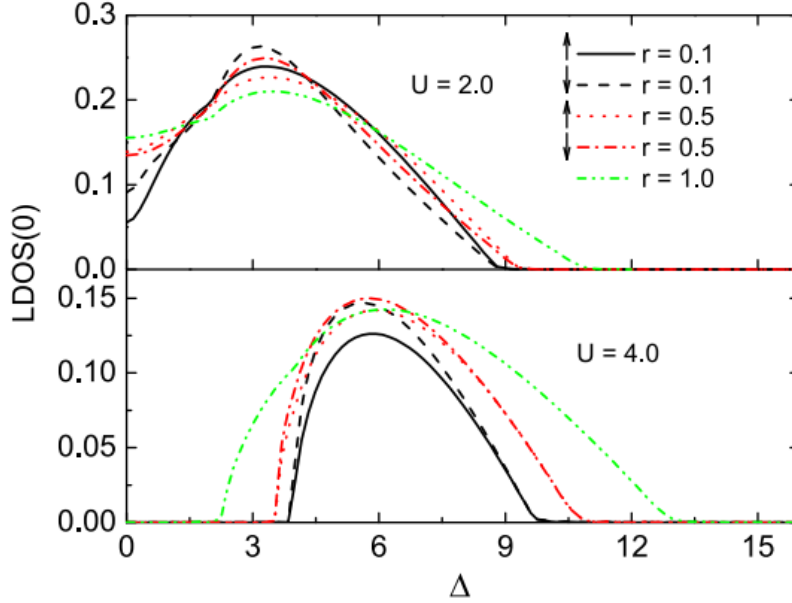


Hình 3.1.1: Giá trị trung bình nhân và trung bình cộng của LDOS cho hai thành phần spin tại tâm vùng ($\omega = 0$) với $r = 0.5$, $\Delta = 1$ (phía trên) và $\Delta = 4.0$ (phía dưới) như hàm của U . Đường nét liền (chấm) xác định cho giá trị trung bình nhân (cộng) cho thành phần spin hướng lên. Đường nét đứt (nét đứt với chấm) xác định giá trị trung bình nhân (cộng) cho thành phần spin hướng xuống.

3.1.2 Kết quả và thảo luận

Trong phần này, chúng tôi thảo luận các kết quả tính số sử dụng t_{\uparrow} là đơn vị năng lượng. Trong TMT, sự triệt tiêu của giá trị trung bình cộng tại mức Fermi $\rho_{\sigma a}(0)$ chỉ ra một pha điện môi Mott trong khi đó $\rho_{\sigma g}(0)$ sự triệt tiêu tại điểm tới hạn cho định xứ Anderson cho loại spin σ . Hình (3.1.1) cho giá trị trung bình cộng và trung bình nhân của LDOS tại tâm vùng ($\omega = 0$) với $r = 0.5$, $\Delta = 1.0$ (phía trên) và $\Delta = 4.0$ (phía dưới) như là hàm của U . Chúng ta có thể thấy rằng cả hai $\rho_{\sigma a}(0)$ và $\rho_{\sigma g}(0)$ đồng thời cùng triệt tiêu tại một điểm tới hạn của U như tiên đoán từ các phương trình tuyến tính hóa DMFT. Như chúng ta đã biết ở mô hình HM trong trường hợp mất cân bằng khối lượng, cả hai thành phần spin đồng thời triệt tiêu tại cùng một giá trị tương tác tới hạn [116]-[119]. Ở đây, chúng tôi chỉ ra rằng khi có sự hiện diện của mất trật tự, tính chất này vẫn tồn tại trong hệ này. Hơn nữa, tại miền mất trật tự nhỏ của Δ ($\Delta = 1.0$), U tăng làm cho giá trị trung bình của LDOS tại tâm vùng cho hai thành phần spin giảm, và cả hai giá trị trung bình cộng và nhân đều đưa ra gần như cùng một giá trị tới hạn của tương tác. Điều đó có nghĩa rằng, ở miền Δ nhỏ một chuyển pha trực tiếp kim loại - điện môi Mott được tìm thấy. Mặt khác, tại miền mất trật tự lớn ($\Delta = 4.0$) hành vi của LDOS trung bình

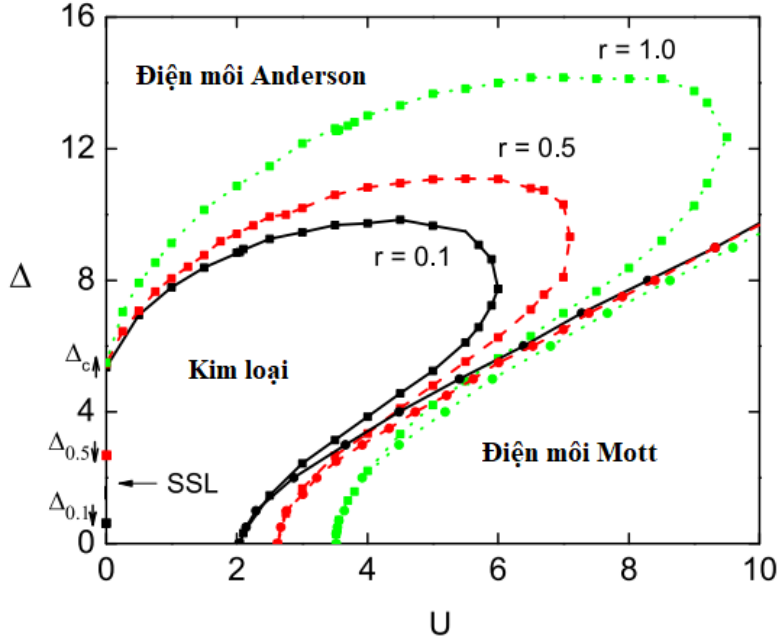
phức tạp hơn, $\rho_{\sigma g}(0)$ tiến tới không tại giá trị tương tác nhỏ hơn so với $\rho_{\sigma a}(0)$, điều đó có nghĩa là chuyển pha trực tiếp kim loại - điện môi Anderson được tìm thấy. Thêm nữa, ở giản đồ phía dưới khi $U = 0$ ta thấy rằng giá trị trung bình nhân của LDOS(0) đối với điện tử spin hướng xuống bằng không, trong khi đối với spin hướng lên là hữu hạn, do đó với $U = 0, \Delta = 4.0$ hệ ở trạng thái định xứ một phần. Điều này sẽ được thảo luận chi tiết hơn ở đoạn sau.



Hình 3.1.2: Giá trị trung bình nhân của LDOS tại tâm vùng ($\omega = 0$) với $r = 0.1, 0.5, 1.0$ cho $U = 2.0$ (phía trên) và $U = 4.0$ (phía dưới) như hàm của Δ . Các đường nét liền (đứt) được tính cho $r = 0.1$ cho thành phần spin hướng lên (xuống). Các đường chấm (đứt chấm) tính cho $r = 0.5$ cho thành phần spin hướng lên (xuống). Đường đứt chấm chấm cho trường hợp cân bằng $r = 1.0$.

Trong hình (3.1.2), chúng tôi tính trung bình nhân của LDOS tại tâm vùng ($\omega = 0$) với $r = 0.1, 0.5, 1.0$ cho $U = 2.0$ (phía trên) và cho $U = 4.0$ (phía dưới) như hàm của Δ . Ở phía trên, chúng có hành vi tương tự nhau khi tăng độ mất trật tự: tăng dần tới giá trị cực đại, sau đó giảm tới không tại một giá trị tới hạn Δ_c . Tiếp theo, khi cố định tham số mất cân bằng $\rho_{\sigma g}(0)$ cho cả hai loại thành phần spin đồng thời triệt tiêu tại cùng một giá trị Δ_c , tuy nhiên giá trị tới hạn này tăng khi r tăng. Điều này có nghĩa là khi cố định r và U nhỏ chuyển pha Anderson MIT xảy ra một lần duy nhất khi độ mất trật tự đạt giá trị tới hạn. Hành vi của $\rho_{\sigma g}(0)$ ở nửa dưới của đồ thị khác với nửa trên ở chỗ khi độ mất trật tự tăng hệ trải qua hai lần chuyển pha Anderson MIT như sau: tại giá trị Δ_{c1} hệ trải qua từ định xứ Anderson sang pha kim loại, tức là mất trật tự ổn định pha kim loại, tại giá trị Δ_{c2} lớn hơn hệ chuyển từ kim loại sang pha Anderson tiếp theo. Chúng ta có thể

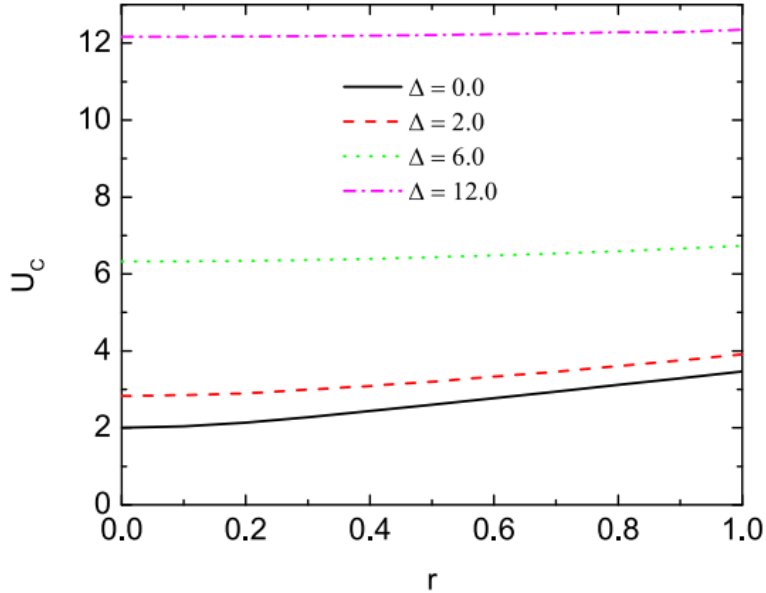
thấy rằng với việc tăng sự mất cân bằng (r giảm) thì Δ_{c1} tăng trong khi đó Δ_{c2} giảm, tức là vùng Anderson được mở rộng.



Hình 3.1.3: Giản đồ pha trạng thái cơ bản không từ tính cho mô hình AH tại lấp đầy một nửa với mất cân bằng khối lượng cho $r = 0.1, 0.5$ so sánh với kết quả thu được ở trường hợp cân bằng khối lượng $r = 1.0$. Đường nét liền với hình vuông (tròn) được xác định từ giá trị trung bình nhân (cộng) cho $r = 0.1$. Đường nét đứt với hình vuông (nét đứt với hình tròn) được xác định từ giá trị trung bình nhân (cộng) cho $r = 0.5$. Các đường chấm chấm với hình vuông (tròn) xác định từ giá trị trung bình nhân (cộng) cho trường hợp cân bằng $r = 1.0$. Pha định xứ chọn lọc spin (SSL) là đường tại $U = 0, \Delta_{r\downarrow} < \Delta < \Delta_{c\uparrow}$.

Kết quả chính trong khảo sát này là giản đồ pha trạng thái cơ bản không từ tính của mô hình AH có mất cân bằng khối lượng tại lấp đầy một nửa (3.1.3) cho $r = 0.1, 0.5, 1.0$. Kết quả của chúng tôi ở giới hạn $r = 0$ (không đưa ra ở đây) trùng với kết quả cho mô hình AFK trong [3], trong khi đó kết quả cho $r = 1$ được đưa vào để so sánh với $r \neq 1$. Đối với $0 < r < 1$ trên giản đồ pha cho ta bốn pha: (1) Pha điện môi Anderson được xác định từ điều kiện $\rho_{\sigma g}(0) = 0, \rho_{\sigma a}(0) > 0$. Trong hệ không tương tác ($U = 0$) giá trị tối hạn của độ mất trật tự $\Delta_{c\uparrow}(U = 0) = 2e$ ở tất cả giá trị của r . Tương tự như trường hợp của cân bằng khối lượng, khi Δ lớn hệ hướng tới pha định xứ Anderson. Ngoài ra, miền định xứ Anderson được mở rộng khi tăng sự mất cân bằng khối lượng (r giảm) bởi vì khi t_{\uparrow} cố định, sự khác biệt càng lớn (r giảm) tức là t_{\downarrow} càng nhỏ, sự định xứ càng dễ xảy ra trong hệ. (2) Pha điện môi Mott được xác định bởi $\rho_{\sigma a}(0) = 0$. Trong hệ không có mất trật tự, giá trị tối hạn có thể tính toán giải tích từ hệ phương trình tuyến tính

DMFT: $U_c(\Delta = 0, r) = [2(1 + r^2 + \sqrt{1 + 14r^2 + r^4})]^{1/2}$, là hàm đơn điệu tăng theo r , và $U_c(\Delta = 0, r = 0) = 2, U_c(\Delta = 0, r = 1) = 2\sqrt{3}$ như trong AFK [3] và AH [6], lưu ý rằng trong các kết quả của Ref.[6] và Ref.[3] thì $W(= 4t_{\uparrow})$ là đơn vị năng lượng. Giống như ở trường hợp cân bằng, pha điện môi Mott ổn định khi U tăng. Hơn nữa, miền này mở rộng khi mất cân bằng khối lượng tăng (r giảm) với cùng một lý do như trong miền điện môi Anderson. (3) Pha kim loại được xác định bởi $\rho_{\sigma g}(0) > 0$ và được tìm thấy ở miền U và Δ nhỏ. Hình dáng của giản đồ pha là tương tự như trong trường hợp cân bằng khối lượng, tuy nhiên miền này giảm khi sự mất cân bằng tăng lên (r giảm) bởi vì hai miền điện môi được mở rộng đồng thời. (4) là pha định xứ chọn lọc spin, ở đó các điện tử có spin hướng xuống bị định xứ hóa ($\rho_{\downarrow g}(0) = 0$) trong khi đó điện tử có spin hướng lên vẫn còn linh động ($\rho_{\uparrow g}(0) > 0$). Pha này có nguồn gốc từ sự mất cân bằng khối lượng trong hệ này và diễn ra tại $U = 0$ và $2er = \Delta_{r\downarrow}(U = 0) < \Delta < \Delta_{c\uparrow}(U = 0) = 2e$. Chú ý rằng khi không có tương tác ($U = 0$) hai loại spin là độc lập, và pha chọn lọc spin có thể được tìm thấy, nhưng ngay khi có tương tác Coulomb ($U \neq 0$) thì hai loại spin trở nên kết cặp, kết quả là $\rho_{\uparrow g}(0)$ và $\rho_{\downarrow g}(0)$ là đồng thời triệt tiêu và pha định xứ chọn lọc spin không còn tồn tại nữa. Đây là hiệu ứng tương quan vì sự triệt tiêu của độ cư trú đôi của hai thành phần spin trong trạng thái điện môi phải thỏa mãn đồng thời.



Hình 3.1.4: Giá trị tới hạn U_c xác định cho chuyển pha Mott như hàm đơn điệu của r cho $\Delta = 0, 2.0, 6.0, 12.0$. Rõ ràng sự khác biệt giữa $U_c(r = 1)$ và $U_c(r = 0)$ giảm khi Δ tăng.

Trong hình (3.1.4), chúng tôi vẽ đồ thị U_c như hàm của r với $\Delta = 0.0, 2.0, 6.0$ và 12.0 . Lưu ý là trong trường hợp mô hình HM mất cân bằng khối lượng ($\Delta = 0$) giá trị tới hạn U_c là hàm tăng đơn điệu của r đã được thiết lập ở [116]-[119]. Điều này được thể hiện một cách rõ ràng trên hình (3.1.4) rằng U_c tăng khi Δ tăng và tại một giá trị hữu hạn Δ , U_c vẫn tăng một cách đơn điệu theo r . Tuy nhiên, khi Δ tăng thì sự khác nhau giữa $U_c(r = 1)$ và $U_c(r = 0)$ giảm, và khi Δ lớn ($\Delta > 12$) chúng tôi tìm thấy rằng $U_c(r)$ tiến tới giá trị Δ với mọi giá trị r . Điều đó có nghĩa là trong gần đúng chúng tôi sử dụng ở miền giới hạn Δ lớn, đường biên giữa hai loại điện môi trong hệ mất cân bằng khối lượng xảy ra tại $U_c \approx \Delta$ như trong trường hợp cân bằng khối lượng trong [98] và [6]. Tuy nhiên, điều này mâu thuẫn với kết quả chính xác hơn cho AFK trong [3] với đường biên giữa hai loại điện môi $\Delta(U) \approx 2e\sqrt{2}$ được ước lượng cho $r = 0$ và $U \gg 4$. Nó có thể hiểu rằng gần đúng của chúng tôi đã sử dụng phù hợp hơn với miền U và Δ nhỏ.

Như vậy, ngoài ba pha xuất hiện trong trường hợp cân bằng khối lượng, giản đồ pha khi có mất cân bằng khối lượng xuất hiện thêm pha định xứ chọn lọc spin, ở đó một thành phần spin là pha kim loại, trong khi thành phần khác là điện môi. Chúng tôi tìm thấy rằng khi độ mất cân bằng tăng lên thì miền kim loại co lại, trong khi miền điện môi Mott và điện môi Anderson được mở rộng.

3.2 Mô hình AH có tương tác phụ thuộc vào nút

Trong phần cuối của chương này, chúng tôi xem xét định xứ Anderson trong mô hình AH lấp đầy một nửa có thể Coulomb phụ thuộc vào nút ở hai trường hợp đơn giản nhất: (1) Thế Coulomb trên nút là biến ngẫu nhiên, (2) Thế Coulomb có độ lớn xen kẽ trong mạng. Sử dụng phương pháp TMT-DMFT với EOM giải cho bài toán tạp, thông qua giá trị trung bình cộng và trung bình nhân của hàm mật độ trạng thái địa phương, chúng tôi dẫn ra các phương trình xác định các đường biên giữa pha kim loại, điện môi Anderson và điện môi Mott. Giảm đồ pha trạng thái cơ bản không từ tính được xây dựng bằng tính số.

Trong mạng quang học, các nguyên tử cực lạnh tương tự như các điện tử trong vật lý hệ cô đặc, hiểu theo nghĩa chúng có thể hiện thực hóa mô hình Hamiltonian, chẳng hạn như mô hình Anderson và mô hình Hubbard. Nhiều hiện tượng đáng chú ý đã được quan sát về vấn đề này ví dụ như chuyển pha Mott trong hệ Boson [127]-[113] và Fermion [125]-[126]. Các nguyên tử cực lạnh có lợi thế hơn các hệ nguyên tử cô đặc như khả năng kiểm soát cao các thông số như cường độ tương tác, số lượng hạt, dạng hình học của mạng tinh thể và một vài thông số khác. Các thí nghiệm điển hình thường được thực hiện trên mạng không mất trật tự. Tuy nhiên, mất trật tự có thể được đưa vào bằng nhiều phương pháp khác nhau, bao gồm cả việc sử dụng chùm laser quang học lổm đổm hoặc chồng chập hai chùm laser có tần số không tương thích [5], [4]. Ngoài việc có thể kiểm soát thế giam cầm, tương tác giữa các hạt có thể kiểm soát bằng cộng hưởng Feshbach [128] - [129]. Hơn nữa, độ lớn tương tác giữa các nguyên tử có thể thay đổi trong không gian như trong hệ khí ^{174}Yb [130] cũng như sự mất trật tự có thể được kiểm soát trong các nguyên tử cực lạnh dựa vào cộng hưởng Feshbach [131]-[132]. Mặc dù các nghiên cứu lý thuyết và thực hành trên hệ Boson bằng hệ quang học với tương tác trên nút mất trật tự đã được thực hiện [131]-[133], hệ fermion với thế Coulomb địa phương ngẫu nhiên hầu như chưa được thảo luận cho tới nay. Hiện nay, mô hình Hubbard liên quan đến ba loại mất trật tự khác nhau như năng lượng ion trên mỗi nút, cường độ tương tác tại chỗ, biến độ nhảy nút đã được đề xuất và sự ảnh hưởng của mỗi loại của mất trật tự đến tính chất nhiệt động của hệ đã được nghiên cứu [134]. Mặt khác, mất trật tự luôn luôn tồn tại trong các vật liệu thực, nhưng cho đến nay, trong hầu hết các nghiên cứu chỉ hạn chế thế ngẫu nhiên ở các nút

trong khi tương tác Coulomb được giả thiết là như nhau ở các nút. Điều đó không đúng với thực tế và các mô hình HM và AH có thể Coulomb phụ thuộc vào nút cần được xem xét khi phân tích môi trường ngẫu nhiên gây ra định xứ Anderson [134]-[136].

Trong AH lấp đầy một nửa, khi một thể ngẫu nhiên được đưa vào (chúng tôi gọi đó là mất trật tự Anderson), trạng thái cơ bản thuận từ cho tương tác và độ mất trật tự bất kỳ bao gồm pha kim loại tương quan, pha điện môi Mott (MI) và pha điện môi Anderson (AI). Cụ thể, pha kim loại xuất hiện ở miền tương tác Coulomb U và độ mất trật tự nhỏ, điện môi Mott ở miền U lớn trong khi điện môi Anderson ở miền mất trật tự lớn [19] - [98]. Bên cạnh mất trật tự Anderson, tính không đồng nhất của phân bố điện tích thông qua các tạp nền và các tạp chất tích điện không mong muốn tạo ra các liên kết điện tử - điện tử với cường độ ngẫu nhiên (chúng tôi gọi là mất trật tự Coulomb) [134] - [136]. Do đó, để nghiên cứu mô hình thực tế hơn, chúng tôi xem xét cả hai nguồn gây ra mất trật tự, gồm mất trật tự Anderson và mất trật tự Coulomb phân bố ngẫu nhiên trên mạng. Từ đó mô hình AH tại lấp đầy một nửa với tương tác phụ thuộc vào nút mạng, cụ thể nó là biến ngẫu nhiên trong không gian hoặc xen kẽ trên toàn mạng được chúng tôi đề xuất nghiên cứu.

3.2.1 Mô hình và phương pháp tính toán

Hamiltonian của mô hình AH có tương tác phụ thuộc vào nút có dạng như sau

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (a_{i\sigma}^\dagger a_{j\sigma} + \text{h.c.}) + \sum_{i\sigma} (\varepsilon_i - \mu) n_{i\sigma} + \sum_i U_i \left[n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \right], \quad (3.2.1)$$

với ε_i là biến ngẫu nhiên tuân theo hàm phân bố đều

$$P(\varepsilon_i) = \frac{1}{\Delta} \theta(\Delta/2 - |\varepsilon_i|), \quad (3.2.2)$$

Δ đặc trưng cho độ mất trật tự cấu trúc. Trong nghiên cứu này chúng tôi khảo sát hai trường hợp của thể tương tác Coulomb U_i :

(i) U_i là biến ngẫu nhiên và tuân theo hàm phân bố đều trong khoảng $[U - \delta/2; U + \delta/2]$, cụ thể

$$P(U_i) = \frac{1}{\delta} \Theta(\delta/2 - |U_i - U|), \quad (3.2.3)$$

U là độ lớn tương tác trung bình trên nút, δ là độ lớn mất trật tự Coulomb. Ở đây chỉ xem xét tương tác đầy $U_i \geq 0$, tức là $U \geq \delta/2$.

(ii) U_i xen kẽ trong không gian mạng lồng nhau, tức là $U_i = U_s$ với $s = A, B$.

Trong khuôn khổ DMFT [95] - [8], Hamiltonian (3.2.1) được ánh xạ vào mô hình Anderson một tạp như sau

$$H_{imp} = \sum_{\sigma} (\varepsilon_i - \mu) n_{i\sigma} + U_i \left[n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} (n_{i\uparrow} + n_{i\downarrow}) \right] + \sum_{k,\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \quad (3.2.4)$$

$$+ \sum_{k\sigma} \left(V_k c_{k\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} + V_k^* a_{i\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \right).$$

Ở đây, $c_{k\sigma}^{\dagger}$ và $c_{k\sigma}$ lần lượt là các toán tử sinh và hủy điện tử trong bể với spin σ . V_k , ε_k lần lượt là yếu tố ma trận lai hóa và hệ thức tán sắc của điện tử trong bể. Chúng tôi sử dụng phương trình chuyển động như một gần đúng giải cho bài toán tạp [6], [110], [8] cho mô hình (3.2.4). Đối với mô hình này, chúng tôi xem xét ở giới hạn không từ tính tại lấp đầy một nửa, tức là $\langle n_{i\uparrow} \rangle = \langle n_{i\downarrow} \rangle = \langle n_i \rangle / 2$ và $\mu = 0$. Sử dụng phương trình chuyển động ngắt chuỗi đến bậc hai, hàm Green của tạp được tính bằng phương trình sau

$$G_{\sigma}(\omega, \varepsilon_i) = \frac{1 - \langle n_i \rangle / 2}{\omega - \varepsilon_i + U_i/2 - \eta_i(\omega) + U_i \eta_i(\omega) [\omega - \varepsilon_i - U_i/2 - 3\eta_i(\omega)]^{-1}} \quad (3.2.5)$$

$$+ \frac{\langle n_i \rangle / 2}{\omega - \varepsilon_i - U_i/2 - \eta_i(\omega) - U_i \eta_i(\omega) [\omega - \varepsilon_i + U_i/2 - 3\eta_i(\omega)]^{-1}},$$

với $\eta_i(\omega)$ là hàm lai hóa, mô tả sự kết cặp của điện tử ở nút i với điện tử khác trong hệ. Ở đây $U_i = U_s$, $\eta_i = \eta_s$ nếu i thuộc mạng con s trong trường hợp tương tác xen kẽ, trong khi η_i không phụ thuộc vào nút i cho trường hợp tương tác ngẫu nhiên. Trong trường hợp không có mất trật tự $\varepsilon_i = 0$, $U_i = U$, phương trình (3.2.5) trở về phương trình gần đúng Hubbard III cho mô hình Hubbard tại lấp đầy một nửa [49].

Cho mỗi năng lượng ionic ε_i và tương tác Coulomb U_i , LDOS được xác định bởi

$$\rho(\omega, \varepsilon_i, U_i) = -\frac{1}{\pi} \Im G(\varepsilon_i, U_i, \omega). \quad (3.2.6)$$

Từ phương trình (3.2.6), ta có thể tính giá trị trung bình cộng và trung bình nhân của LDOS. Chú ý rằng, giá trị trung bình cộng LDOS để mô tả cả trạng thái định xứ và trạng thái lan truyền, trong khi đó giá trị trung bình nhân chỉ tính cho các trạng thái lan

truyền. Tại chuyển pha kim loại - điện môi Mott, giá trị trung bình cộng của LDOS đưa ra một khe tại tâm vùng, trong khi đó giá trị trung bình nhân LDOS triệt tiêu tại định xứ Anderson. Do đó, để đánh giá được hai loại chuyển pha này người ta dùng cả hai loại giá trị trung bình của LDOS [95]-[120], [110].

(i) *Tương tác ngẫu nhiên trên nút*

Giá trị trung bình cộng và trung bình nhân của LDOS được xác định lần lượt

$$\rho_{arith}(\omega) = \int dU_i \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \tilde{P}(U_i) \rho(\omega, \varepsilon_i, U_i), \quad (3.2.7)$$

$$\rho_{geom}(\omega) = \exp \left[\int dU_i \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \tilde{P}(U_i) \ln \rho(\omega, \varepsilon_i, U_i) \right]. \quad (3.2.8)$$

Hàm Green mạng tương ứng với $\rho_\alpha(\omega)$, với α là "geom" hoặc "arith", được tính thông qua biến đổi Hilbert

$$G_\alpha(\omega) = \int d\omega' \frac{\rho_\alpha(\omega')}{\omega - \omega'}. \quad (3.2.9)$$

Chúng tôi sử dụng hàm mật độ trạng thái bán nguyệt, tương ứng với mạng Bethe vô số lân cận, $\rho_0(z) = \frac{4}{\pi W} \sqrt{1 - 4(z/W)^2}$ với độ rộng vùng W . Điều kiện tự hợp được cho bởi

$$\eta(\omega) = \frac{W^2}{16} G(\omega). \quad (3.2.10)$$

Để giải các phương trình (3.2.5)-(3.2.10) thu được các giá trị trung bình cộng và trung bình nhân của LDOS, độ cư trú tại nút i ở nhiệt độ không độ tuyệt đối $\langle n_i \rangle$ được xác định một cách tự hợp như sau

$$\langle n_i \rangle = 2 \int_{-\infty}^0 \rho(\omega, \varepsilon_i, U_i) d\omega. \quad (3.2.11)$$

Tiếp theo chúng tôi dẫn ra các phương trình tuyến tính hóa DMFT. Lưu ý rằng, tại lấp đầy một nửa, trạng thái cơ bản được xác định bởi giá trị trung bình của LDOS tại tâm vùng ($\omega = 0$). Ngoài ra, hàm Green tại tâm vùng là số thuần ảo, $G_\alpha(0) = -i\pi\rho_\alpha(0)$. Tại vùng lân cận chuyển pha MIT $\rho_\alpha(0)$ tiệm cận tới 0, từ đó ta có thể tìm được các giá trị tới hạn cho chuyển pha từ kim loại sang trạng thái điện môi Mott hoặc trạng thái Anderson bằng các phương trình tuyến tính hóa DMFT [3], [6], [110]. Các phương trình tuyến tính hóa DMFT với giá trị trung bình cộng và trung bình nhân, với định nghĩa

đường biên giữa pha kim loại và điện môi, thu được như sau

$$1 = \frac{W^2}{16\Delta\delta} \int dU_i \int d\varepsilon_i Y(\varepsilon_i, U_i), \quad (3.2.12)$$

$$1 = \frac{W^2}{16} \exp \left[\frac{1}{\Delta\delta} \int dU_i \int d\varepsilon_i \ln Y(\varepsilon_i, U_i) \right]. \quad (3.2.13)$$

với

$$Y(\varepsilon_i, U_i) = \frac{\varepsilon_i^2 + 3U_i^2/4 + 2\varepsilon_i U_i(1 - \langle n_i \rangle)}{[\varepsilon_i^2 - U_i^2/4]^2}. \quad (3.2.14)$$

(ii) *Tương tác xen kẽ giữa các nút*

Giá trị trung bình cộng và trung bình nhân của LDOS cho mạng con s lần lượt

$$\rho_{s,arith}(\omega) = \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \rho(\omega, \varepsilon_i, U_s), \quad (3.2.15)$$

$$\rho_{s,geom}(\omega) = \exp \left[\int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \ln \rho(\omega, \varepsilon_i, U_s) \right]. \quad (3.2.16)$$

Hàm Green cho mạng con s thu được từ biến đổi Hilbert. Sau đó sử dụng cùng một hàm DOS không tương tác, điều kiện tự hợp thỏa mãn

$$\eta_s(\omega) = \frac{W^2}{16} G_{\bar{s}}(\omega), \quad (3.2.17)$$

với $\bar{s} = B, A$ nếu $s = A, B$.

Bằng một thuật toán tương tự như khi thu được phương trình tuyến tính hóa DMFT cho tương tác ngẫu nhiên ở trên, ta nhận được

$$1 = \frac{W^2}{16} \exp [I_{geom}(U_A, U_B, \Delta)], \quad (3.2.18)$$

với

$$I_{geom}(U_A, U_B, \Delta) = \frac{1}{2\Delta} \int d\varepsilon_i \ln [Y_A(\varepsilon_i) Y_B(\varepsilon_i)], \quad (3.2.19)$$

là phương trình tuyến tính hóa DMFT với giá trị trung bình nhân, và

$$1 = \frac{W^2}{16} I_{arith}(U_A, U_B, \Delta), \quad (3.2.20)$$

với

$$I_{arith}(U_A, U_B, \Delta) = \frac{1}{\Delta} \left[\int d\varepsilon_i Y_A(\varepsilon_i) \int d\varepsilon Y_B(\varepsilon_i) \right]^{1/2}, \quad (3.2.21)$$

là phương trình tuyến tính hóa DMFT với giá trị trung bình cộng. Ở đây (tương tự phương trình (2.1.17))

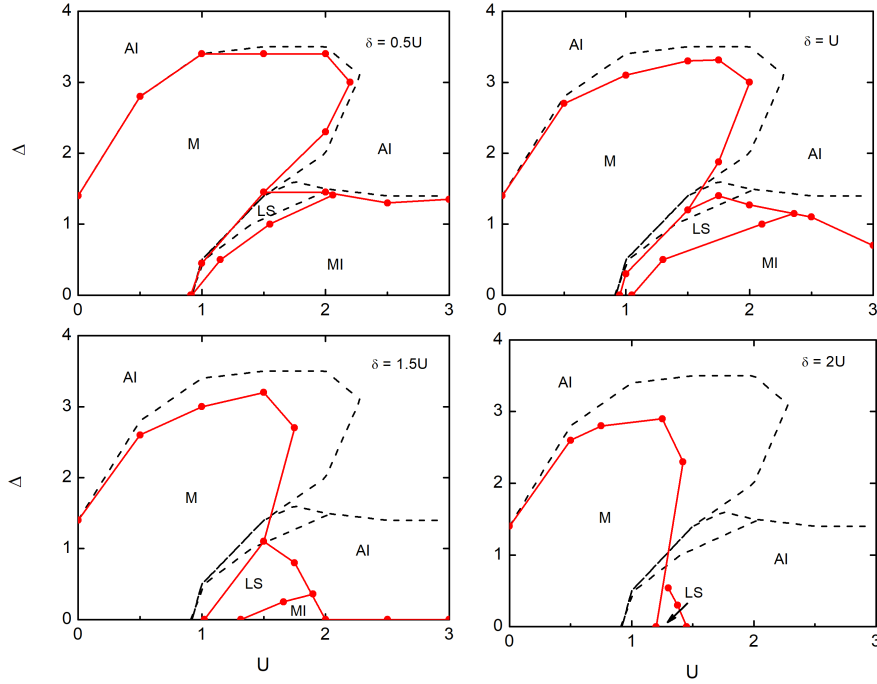
$$Y_s(\varepsilon_i) = \frac{\varepsilon_i^2 + 3U_s^2/4 + 2\varepsilon_i U_s(1 - \langle n_i \rangle)}{[\varepsilon_i^2 - U_s^2/4]^2}, \quad (3.2.22)$$

Với $\langle n_i \rangle$ cho bởi phương trình (3.2.11) với việc thay thế U_i bằng U_s .

3.2.2 Kết quả và thảo luận

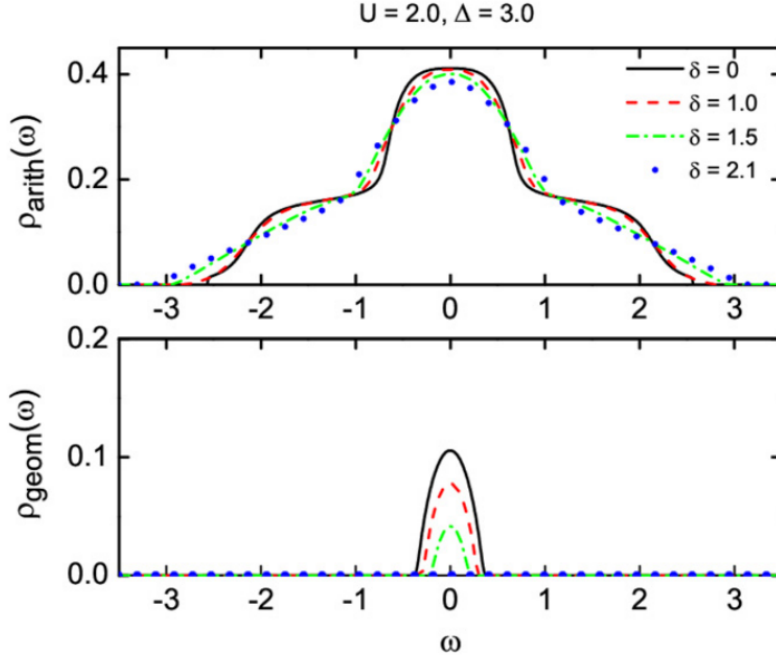
Trong phần này, chúng tôi chọn độ rộng vùng W là đơn vị năng lượng. Các pha trong giản đồ pha được định nghĩa như sau: (1) $\rho_{arith}(0) \neq 0$ và $\rho_{geom}(0) \neq 0$ tương ứng với pha kim loại, (2) $\rho_{arith}(0) = 0$, $\rho_{geom}(0) = 0$ và $\int \rho_{geom}(\omega) d\omega \neq 0$ chỉ ra pha điện môi Mott, (3) $\int \rho_{geom}(\omega) d\omega = 0$ xác định pha định xứ Anderson, (4) $\rho_{arith}(0) \neq 0$, $\rho_{geom}(0) = 0$ và $\int \rho_{geom}(\omega) d\omega \neq 0$ tương ứng với trạng thái định xứ trong khe Mott. Lưu ý rằng các tiêu chí pha điện môi Mott trong mô hình Anderson - Hubbard và mô hình AFK tại lớp đầy một nửa trong khuôn khổ TMT-DMFT là không giống nhau. Ví dụ, trọng số của chuẩn hạt giảm tới không ở tất cả các nút [98]; $\rho_{geom}(0) = 0$ và $\int \rho_{geom}(\omega) d\omega \neq 0$ trong [3], [95],[97], và pha này được gọi là pha MI (pha có khe); $\rho_{geom}(0) = 0$, $\int \rho_{geom}(\omega) d\omega \neq 0$ và $\langle n_i \rangle = 1$ cho tất cả các nút [139]. Để làm rõ hiệu ứng của mất trật tự Coulomb trên giản đồ pha này, trong phần này chúng tôi phân biệt pha điện môi Mott (với một khe cho cả hai loại giá trị trung bình của LDOS, tức là một khe Mott thực sự) với trạng thái định xứ trong khe Mott (chỉ quan sát khe ở giá trị trung bình nhân [107]).

(i) *Tương tác ngẫu nhiên trên nút.* Trên hình (3.2.1) mô tả giản đồ pha không từ tính trạng thái cơ bản của mô hình AH cho một vài giá trị của mất trật tự Coulomb. Hệ có thể ở pha kim loại, điện môi Mott, định xứ trong khe Mott hoặc là pha định xứ Anderson. Kết quả cho thấy pha kim loại và điện môi Mott chỉ được kết nối với nhau khi $\delta = 0$. Khi có mất trật tự Coulomb $\delta \neq 0$, nhìn vào giản đồ ta có thể thấy miền kim loại và miền điện môi Mott tách nhau bởi trạng thái định xứ trong khe Mott. Các trạng thái lan truyền (pha kim loại) và trạng thái thực sự có khe không trực tiếp tiếp xúc với nhau vì có miền trạng thái định xứ ở giữa. Nếu như độ mất trật tự Coulomb tăng, miền kim loại và miền



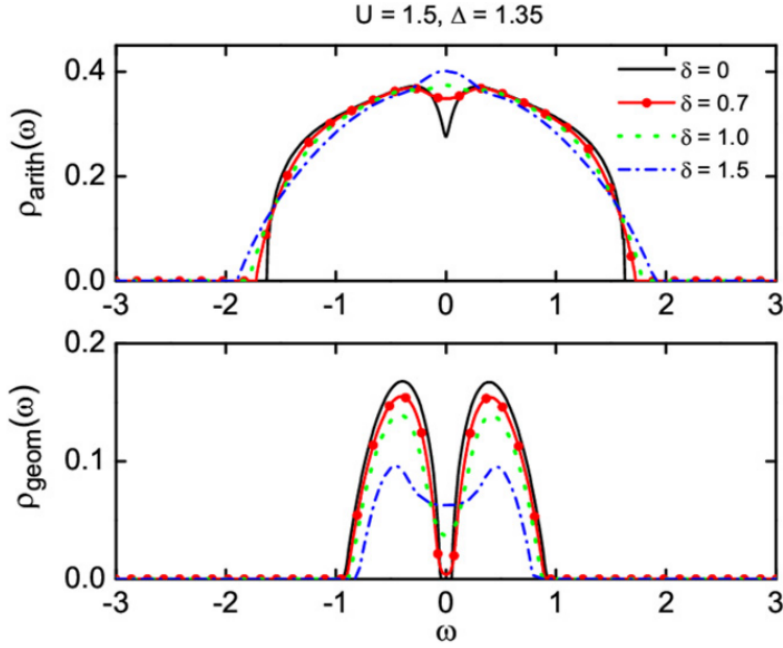
Hình 3.2.1: Giản đồ pha cho mô hình AH với độ mất trật tự Coulomb (nét liền) so sánh với trường hợp $\delta = 0$ (nét đứt). M, AI, MI và LS kí hiệu lần lượt cho pha kim loại, định xứ Anderson, điện môi Mott và định xứ trong khe Mott. Đơn vị năng lượng $W = 1$.

điện môi Mott thu hẹp lại, trong khi đó miền định xứ Anderson mở rộng. Khi độ mất trật tự Coulomb đạt giá trị cực đại, $\delta = 2U$, miền điện môi Mott biến mất, hệ chỉ còn có thể ở pha kim loại, điện môi Anderson hoặc định xứ trong khe Mott. Khi $\delta = 2U$, độ lớn tương tác U_i nhận giá trị từ 0 đến $2U$; do đó, khi ta lấy trung bình cộng LDOS, sẽ luôn có một phân bố cho các điện tử không tương tác ($U_i = 0$) ngăn cản sự hình thành pha điện môi Mott. Trong khi đó, ở miền $\delta < 2U$, U_i tại mỗi nút sẽ nhận giá trị từ $U - \delta/2 > 0$ đến $U + \delta/2$, pha kim loại sẽ bị thu hẹp, một pha có khe Mott được hình thành khi U tăng. Cả mất trật tự Anderson và mất trật tự Coulomb đều dẫn tới một pha định xứ Anderson và ngăn chặn sự hình thành pha kim loại cũng như pha điện môi Mott. Nhưng chỉ có mất trật tự Coulomb mới ngăn chặn sự hình thành của điện môi Mott một cách hoàn toàn. Ngoài việc thu hẹp hai miền kim loại và điện môi Mott, mất trật tự Coulomb còn dẫn tới một miền mới, ở đó hệ ở trạng thái định xứ cục bộ. Đó là khu vực mà xuất hiện định xứ Anderson ngay cả khi không có mất trật tự Anderson ($\Delta = 0$). mất trật tự Coulomb đóng một vai trò quan trọng trong mật độ trạng thái, như trong hình (3.2.2) và (3.2.3) ứng với các giá trị cố định Δ và U . Hiệu ứng chính của mất trật tự Coulomb là gây



Hình 3.2.2: Giá trị trung bình cộng (nhân) cho $\delta = 0, 1.0, 1.5$ và 2.1 khi $U = 2.0, \Delta = 3.0$ ở phía trên (dưới). Mất trật tự Coulomb dẫn hệ chuyển từ pha kim loại tương quan tới pha AI khi δ tăng.

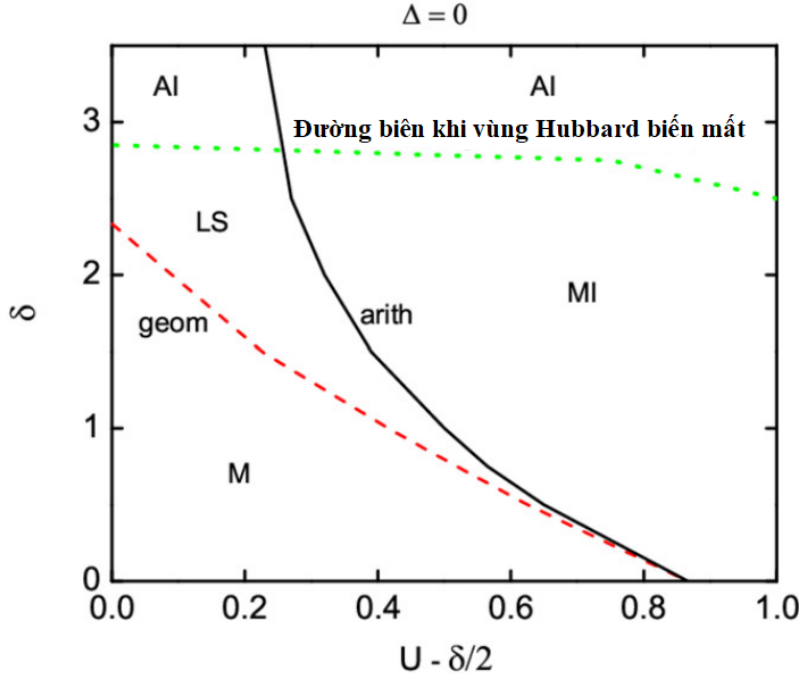
ra một pha định xứ Anderson. Đầu tiên, mất trật tự Coulomb δ dẫn hệ chuyển từ pha kim loại sang một pha định xứ Anderson khi Δ và U tăng. Trong hình (3.2.2) chúng tôi vẽ giá trị trung bình cộng (trung bình nhân) của LDOS khi $U = 2.0, \Delta = 3.0$ ở phía trên (dưới) cho $\delta = 0, 1.0, 1.5$ và 2.1 . Ta có thể thấy rằng khi δ tăng thì độ rộng vùng của giá trị trung bình cộng (trung bình nhân) bắt đầu tăng lên (giảm đi). Thêm nữa, khi δ nhỏ ($= 0.0, 1.0, 1.5$) cả hai giá trị trung bình cộng và trung bình nhân tại tâm vùng là hữu hạn, tương ứng với một pha kim loại. Khi tăng δ xu hướng tự nhiên dẫn tới một định xứ hóa được nhìn thấy rõ ràng. Đối với δ lớn ($= 2.1$) giá trị trung bình cộng LDOS tại tâm vùng $\rho_{arith}(0) > 0$ nhưng $\int \rho_{geom}(\omega)d\omega = 0$ chỉ ra một pha định xứ Anderson không có khe Mott. Do đó, trong trường hợp này, mất trật tự Coulomb dẫn hệ từ pha kim loại sang pha định xứ Anderson. Thứ hai, mất trật tự Coulomb có thể dẫn hệ từ pha định xứ trong khe Mott sang pha kim loại khi Δ nhỏ và U lớn. Ví dụ khi $\delta < 0.7$ (ví dụ $\delta = 0$), hệ đang ở pha định xứ trong khe Mott vì $\rho_{arith} \neq 0, \rho_{geom}(0) = 0$ và $\int \rho_{geom}(\omega)d\omega \neq 0$, nhưng khi $\delta > 0.7$ ($\delta = 1.0, 1.5$) hệ ở pha kim loại như trong hình (3.2.3) với $U = 1.5, \Delta = 1.35$. Khi tăng δ , hệ có xu hướng chuyển thành pha kim loại khi khe biến mất. Do đó trong trường hợp này, mất trật tự Coulomb dẫn hệ từ trạng thái định xứ trong khe Mott sang một pha kim loại.



Hình 3.2.3: Giá trị trung bình cộng (nhân) cho $\delta = 0, 1.0, 1.5$ và 2.1 khi $U = 1.5$, $\Delta = 1.35$ ở phía trên (dưới). Mật trật tự Coulomb dẫn hệ chuyển từ pha định xứ trong khe Mott sang pha kim loại khi δ tăng.

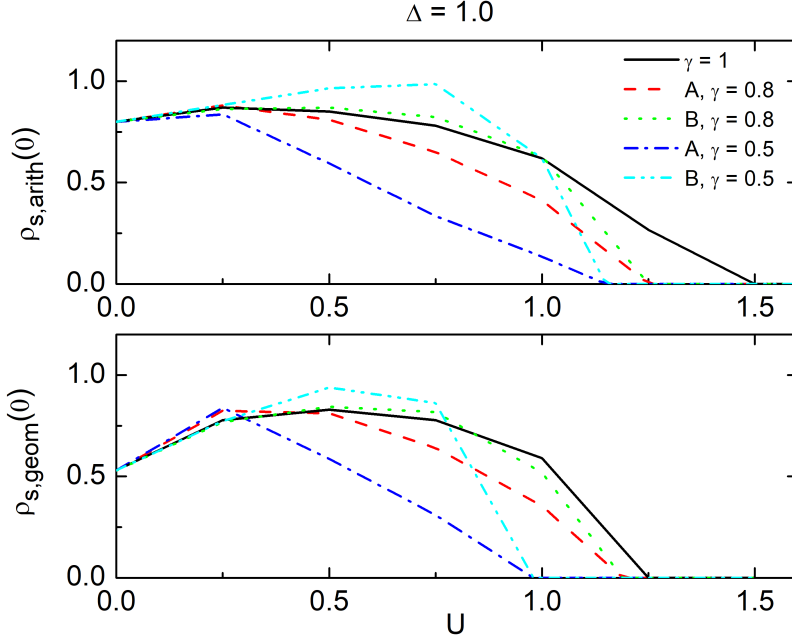
Trong hình (3.2.4), chúng tôi biểu diễn giản đồ pha δ , $(U - \delta/2)$ khi $\Delta = 0$. Đồ thị cho thấy khi $\delta = 0$, hệ có thể ở hai pha kim loại và điện môi Mott, nhưng ngay khi có mật trật tự Coulomb ($\delta \neq 0$) trạng thái định xứ trong khe Mott bắt đầu xuất hiện. Cụ thể, khi $\delta \neq 0$ phương trình (3.2.12) và (3.2.13) không cho cùng một nghiệm. Khi δ tăng dần tới thu hẹp miền kim loại và mở rộng miền điện môi Mott. Khi $\delta > 2.32$ miền kim loại biến mất, các trạng thái kim loại không còn vì hệ luôn tồn tại một khe [3], [99]. Một điều thú vị đáng chú ý đó là miền AI mới xuất hiện khi không có mật trật tự Anderson đã được tìm thấy trong mô hình Bose - Hubbard [131], [132], cũng như trong mô hình Anderson - Falicov - Kimball với tương tác phụ thuộc nút [108], và bây giờ là lần đầu tiên tìm thấy trong mô hình Anderson - Hubbard có mật trật tự Coulomb.

(ii) *Tương tác xen kẽ giữa các nút.* Các phương trình (3.2.18) - (3.2.22) được giải bằng phương pháp tính số. Khi không có mật trật tự Anderson, $\Delta = 0$, từ phương trình (3.2.20) chúng ta thu được giá trị Coulomb tối hạn trong mô hình Hubbard với tương tác phụ thuộc vào nút $U_A U_B = 3W^2/4$, phù hợp với kết quả trong [138]. Đối với AH thông thường $U_A = U_B$ các phương trình (3.2.18)-(3.2.21) đưa lại được về các phương trình (11)-(14) trong [6]. Để trình bày kết quả trong trường hợp có thế Coulomb xen kẽ, chúng tôi đặt $U_B = U$ và $\gamma = U_B/U_A$ sử dụng tham số γ thỏa mãn: $0 < \gamma < 1$. Trong hình (3.2.5) mô



Hình 3.2.4: Giản đồ pha của hệ khi không có mất trật tự Anderson ($\Delta = 0$) như hàm của δ và $U - \delta/2$. Pha định xứ trong khe Mott (LS) và định xứ Anderson (AI) xuất hiện khi có sự hiện diện của mất trật tự Coulomb.

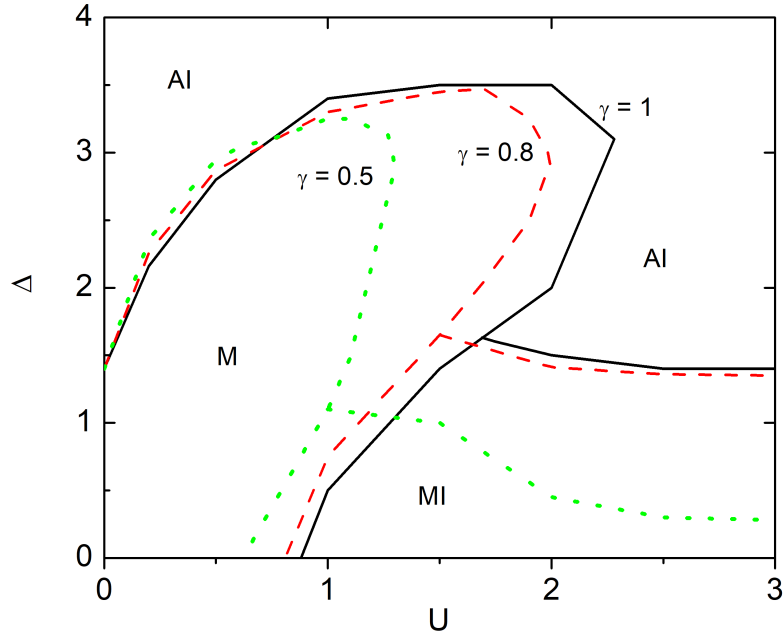
tả giá trị trung bình cộng (trung bình nhân) của LDOS tại tâm vùng $\omega = 0$ cho hai mạng con với $\gamma = 1.0, 0.8$ và 0.5 như là hàm của U khi cố định $\Delta = 1.0$. Ta có thể thấy cả giá trị $\rho_{A,arith}(0)$ và $\rho_{B,arith}(0)$ cũng như cả $\rho_{A,geom}(0)$ và $\rho_{B,geom}(0)$ đồng thời triệt tiêu tại cùng một điểm tới hạn ở tất cả các quá trình chuyển pha. Kết quả này đã được quan sát thấy ở $\rho_{A,arith}(0)$ và $\rho_{B,arith}(0)$ trong mô hình Hubbard có thể Coulomb xen kẽ trong không gian [140] - [142]. Đặc điểm này vẫn tồn tại khi hệ có mất trật tự như ở trên. Hơn thế nữa, cả $\rho_{A,geom}(0)$ và $\rho_{B,geom}(0)$ cũng đồng thời triệt tiêu tại cùng một điểm tới hạn tại chuyển pha Anderson. Điều này có nghĩa rằng tại một giá trị r cố định một sự chuyển pha đơn cũng xảy ra trong hệ có mất trật tự khi tương tác và độ lớn mất trật tự tiệm cận tới giá trị tới hạn. Giản đồ pha trạng thái cơ bản không từ tính là kết quả chính của trường hợp thế Coulomb xen kẽ được thể hiện trên hình (3.2.6) cho $\gamma = 0.5, 0.8$ và 1.0 . Trong giản đồ pha này chúng tôi không phân biệt giữa pha điện môi Mott và định xứ trong khe Mott, mà ở đây chúng tôi đơn giản gọi chúng là pha điện môi Mott mất trật tự. Kết quả cho giới hạn $\gamma = 1.0$ là hoàn toàn phù hợp với các kết quả thu được bằng TMT-DMFT trong [98], [6]-[120] và từ DMFT thống kê [94]. Với $0 < \gamma < 1$ ba pha khác nhau (kim loại, MI, AI) có thể nhìn thấy trên giản đồ như $\gamma = 1.0$, nhưng các miền này đã bị thay đổi. Trong trường hợp $\Delta = 0$ và cố định U_B , γ càng nhỏ thì $U_A (= U_B/\gamma)$ càng



Hình 3.2.5: Giá trị trung bình cộng (nhân) của LDOS tại tâm vùng ($\omega = 0$) cho hai mạng con s với $\gamma = 1.0, 0.8, 0.5$ như hàm của U khi $\Delta = 1.0$ ở nửa phía trên (phía dưới). Cả $\rho_{A,arith}(0)$, $\rho_{B,arith}(0)$ cũng như $\rho_{A,geom}(0)$, $\rho_{B,geom}(0)$ đều cùng triệt tiêu tại cùng một giá trị tới hạn của U với mỗi trường hợp của γ .

lớn và hệ càng dễ dàng định xứ hơn. Kết quả tính toán cho thấy điều này cũng đúng cho miền Δ nhỏ ($\Delta < \Delta_c(U = 0) = e/2$) và bất kỳ giá trị nào của U , và nó cũng đúng cho miền U lớn khi Δ lớn. Kết quả là miền kim loại bị thu hẹp, miền AI được mở rộng khi giảm γ . Đáng chú ý pha MI không quan sát trên hệ cho bất kỳ một giá trị U_A nào khi $\gamma = 0$, bởi vì không có tương tác Coulomb trên mạng B. Trong trường hợp này hệ đang ở pha nào (kim loại hay AI) phụ thuộc vào độ lớn mất trật tự Anderson Δ . Để minh họa cho các kết quả chính, chúng tôi tính toán giá trị trung bình cộng (trung bình nhân) của LDOS cho hai mạng con với $\Delta = 1.0$, $U = 1.0$ và cho $\gamma = 0.5, 0.8, 1.0$ ở nửa trên (dưới) của đồ thị. Như trong hình (3.2.7), với $\gamma = 1.0$ và 0.8 hệ là kim loại (giá trị của cả hai giá trị trung bình LDOS tại tâm vùng đều khác 0), trong khi đó $\gamma = 0.5$ nó trở thành pha MI mất trật tự (giá trị trung bình cộng LDOS khác 0 tại tâm vùng, trong khi giá trị trung bình nhân LDOS tại tâm vùng bằng 0 và $\int \rho_{geom}(\omega)d\omega \neq 0$). Do vậy, trong trường hợp Δ nhỏ, tương tác xen kẽ tăng cường pha có khe. Tuy nhiên, khi Δ và U lớn tương tác xen kẽ có thể tăng cường định xứ Anderson như trong 3.2.8, ở đó $\Delta = 2.0$ và $U = 1.5$ hệ ở pha kim loại với $\gamma = 1.0, 0.8$, nhưng nó trở thành pha AI khi $\gamma = 0.5$.

Như vậy, đối với mô hình AH tại lấp đầy một nửa, trong trường hợp tương tác là biến



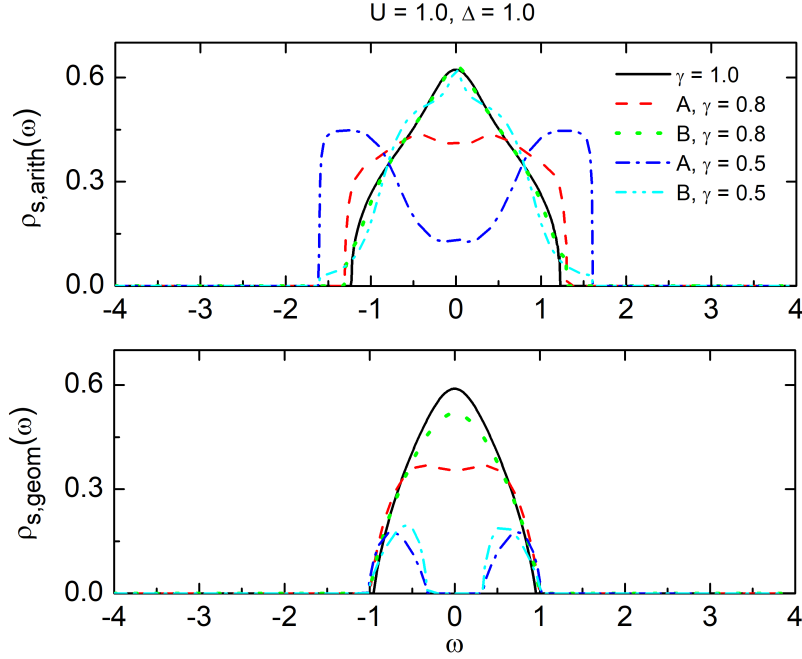
Hình 3.2.6: Giản đồ pha cho mô hình AH tại lấp đầy một nửa có thể tương tác xen kẽ nút mạng khi $\gamma = 0.5, 0.8$ so sánh với $\gamma = 1.0$. M, AI và MI kí hiệu lần lượt cho các pha kim loại, điện môi Anderson và điện môi Mott.

ngẫu nhiên tuân theo hàm phân bố đều, hiệu ứng chính của mất trật tự Coulomb là dẫn hệ chuyển từ pha kim loại sang một pha định xứ Anderson ngay cả khi không có mất trật tự Anderson (mất trật tự cấu trúc). Trong khi đó, ở trường hợp thể tương tác xen kẽ nút, miền kim loại bị thu hẹp lại, miền AI được mở rộng khi γ giảm.

3.3 Kết luận

Trong chương 3, chúng tôi nghiên cứu giản đồ pha trạng thái cơ bản của mô hình AH tại lấp đầy một nửa với một thông số bổ sung: (1) Mô hình AH mất cân bằng khối lượng; (2) Mô hình AH có tương tác phụ thuộc vào nút bằng phương pháp TMT-DMFT sử dụng EOM làm gần đúng giải bài toán tạp.

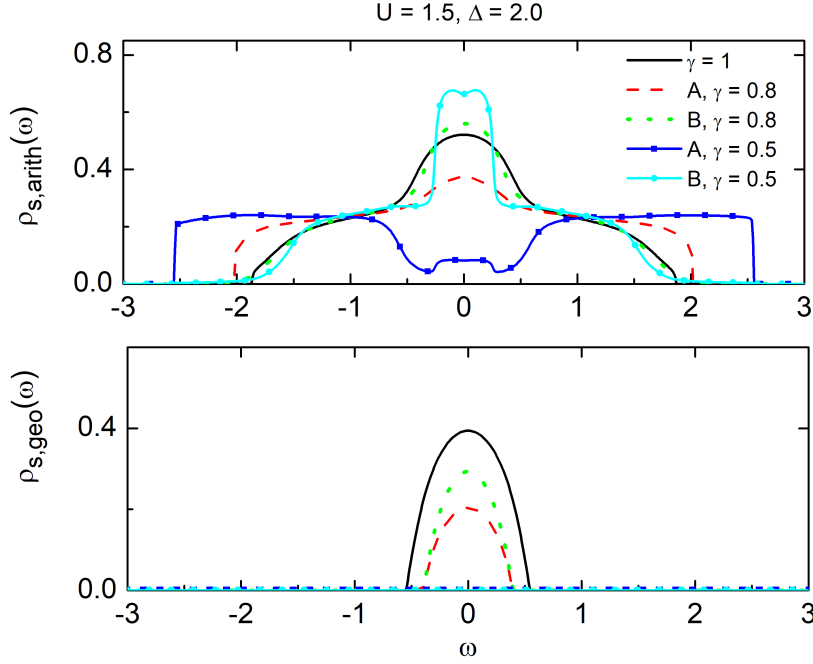
Đối với bài toán thứ nhất, ngoài ba pha đã xuất hiện như trong trường hợp cân bằng khối lượng, giản đồ pha cho mô hình AH mất cân bằng khối lượng còn chứa thêm pha định xứ chọn lọc spin. Lưu ý rằng nguồn gốc của pha định xứ chọn lọc spin không phải là duy nhất, nó có nguồn gốc từ mất cân bằng khối lượng trong nghiên cứu này hoặc từ sự mất



Hình 3.2.7: Giá trị trung bình cộng (nhân) của mạng con - s khi $\Delta = 1.0$, $U_B = 1.0$ với $\gamma = 0.5, 0.8, 1.0$ ở nửa trên (dưới) của đồ thị. Trong trường hợp Δ nhỏ sự chênh lệch thế tương tác dẫn tới sự xuất hiện của pha định xứ trong khe Mott.

trật tự phụ thuộc spin trong [121] và [122]. Chúng tôi thảo luận tính chất của hệ với một vài giá trị mất cân bằng khối lượng r . Trong giới hạn $r = 0.0, 1.0$ kết quả của chúng tôi thu lại được lần lượt cho AFK trong [3] và AH trong [100]. Đối với trường hợp $0 < r < 1$ chúng tôi thấy rằng ngoại trừ trường hợp không tương tác, chuyển pha xảy ra đồng thời cho hai loại spin, cả hai miền điện môi Anderson và Mott đều được mở rộng, đồng thời miền kim loại thu hẹp khi mất cân bằng khối lượng tăng lên (r giảm). Giản đồ pha khi có mất cân bằng khối lượng cũng khác so với trường hợp cân bằng khối lượng khi có sự xuất hiện của pha định xứ chọn lọc spin xuất hiện xuất hiện ở đường $U = 0$, $\Delta_{r\downarrow} < \Delta < \Delta_{c\uparrow}$. Với một giá trị cố định Δ giá trị tới hạn tương tác cho điện môi Mott tăng lên khi mất cân bằng giảm, ở miền Δ lớn cả hai loại điện môi kết nối với nhau. Trong nghiên cứu của chúng tôi, tất cả các chuyển pha điện môi tại nhiệt độ không độ tuyệt đối là liên tục. Các thí nghiệm kiểm chứng cho nghiên cứu này có thể được thực hiện trên hệ nguyên tử trơ, ví dụ như ${}^6\text{Li}$, ${}^{40}\text{K}$ đưa lên mạng quang học mất trật tự.

Đối với bài toán thứ hai, mô hình AH có tương tác phụ thuộc vào nút, hai loại tương tác phụ thuộc đơn giản nhất được xem xét: tương tác là biến ngẫu nhiên và tương tác xen kẽ trong không gian mạng tinh thể. Chúng tôi tính giá trị trung bình cộng và trung



Hình 3.2.8: Giá trị trung bình nhân của LDOS cho hai mạng con tại $\Delta = 2.0$, $U = 1.5$. Trong trường hợp Δ và U lớn sự chênh lệch thể tương tác lớn dẫn tới hệ xuất hiện pha định xứ Anderson.

bình nhân LDOS trong lý thuyết trung bình động DMFT với phương pháp phương trình chuyển động EOM giải cho bài toán tạp. Trong trường hợp tương tác là biến ngẫu nhiên tuân theo hàm phân bố đều, chúng tôi đã chỉ ra rằng hiệu ứng chính của mất trật tự Coulomb là dẫn hệ chuyển từ pha kim loại sang pha định xứ Anderson ngay cả khi không có mất trật tự Anderson (mất trật tự cấu trúc). Điều đáng chú ý phương pháp của chúng tôi sử dụng là TMT-DMFT dùng phương trình chuyển động EOM giải bài toán tạp. Do đó, nhiều phương pháp gần đúng phức tạp và chính xác hơn cần được áp dụng và khảo sát để hiểu được hiện tượng này. Chúng tôi cũng tìm thấy rằng, khi độ lớn mất trật tự tăng, miền kim loại và miền điện môi MI bị co lại. Đối với trường hợp tương tác Coulomb xen kẽ, ở giới hạn $\gamma = 0$ chúng tôi phát hiện ra rằng hệ hoạt động giống như một mô hình Anderson không phụ thuộc vào U_A . Có ba pha khác nhau (kim loại, MI, AI) được tìm thấy ở giới hạn $0 < \gamma < 1$, nhưng các miền này đã thay đổi: miền kim loại bị thu hẹp lại, miền AI được mở rộng khi γ giảm. Các kết quả của chúng tôi liên quan đến các nghiên cứu hiện tại trên khí lượng tử cực lạnh và mạng quang học hỗn hợp. Chúng tôi hy vọng rằng một số kết quả tiên đoán bằng lý thuyết của chúng tôi sẽ được kiểm tra bằng thực nghiệm trong tương lai gần bởi vì hàm phổ trong của các nguyên tử cực lạnh trong thể mất trật tự có thể đo được [143].

KẾT LUẬN

Trong luận án này, chúng tôi đã khảo sát sự ảnh hưởng của mất trật tự và tương quan trong hai mô hình AH và AFK thông qua bốn bài toán ở Chương 2 và Chương 3:

(1)-(2) Khảo sát ảnh hưởng của phân bố Gauss lên giản đồ pha của hai mô hình AH và AFK. Kết quả từ giản đồ pha thu được cho mô hình AH và AFK tại lấp đầy một nửa chỉ ra rằng các kiểu phân bố đều hay phân bố Gauss với mất trật tự chỉ dẫn đến sự sai khác về định lượng, chứ không đưa đến một sự khác biệt định tính nào ở đó.

Ngoài ra, ở mô hình AFK khi có thêm mất trật tự Coulomb, kết quả tính toán cho thấy khi độ lớn của nó tăng miền điện môi Anderson trên giản đồ pha được mở rộng thêm.

(3) Khảo sát ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng (đặc trưng bởi đại lượng $r = t_{\downarrow}/t_{\uparrow}$) đến giản đồ pha cho mô hình AH. Ngoài ba pha đã xuất hiện trong trường hợp cân bằng khối lượng, giản đồ pha cho mô hình AH mất cân bằng khối lượng còn chứa thêm pha định xứ chọn lọc spin. Đối với trường hợp $0 < r < 1$ chúng tôi thấy rằng ngoại trừ trường hợp không tương tác, chuyển pha xảy ra đồng thời cho hai loại spin, cả hai miền điện môi Anderson và Mott đều được mở rộng, đồng thời miền kim loại thu hẹp khi mất cân bằng khối lượng tăng lên (r giảm).

(4) Sự ảnh hưởng của tương tác phụ thuộc vào nút cho mô hình AH. Hai loại tương tác phụ thuộc đơn giản nhất được xem xét là mất trật tự tương tác và tương tác xen kẽ (hai mạng con A,B có $U_A \neq U_B$) trong không gian mạng tinh thể. Trong trường hợp tương tác là biến ngẫu nhiên tuân theo hàm phân bố đều, chúng tôi đã chỉ ra rằng hiệu ứng chính của mất trật tự Coulomb là nó dẫn hệ chuyển từ pha kim loại sang một pha định xứ Anderson và các trạng thái định xứ Anderson xuất hiện ngay cả khi không có mất trật tự Anderson (mất trật tự cấu trúc). Khi độ lớn mất trật tự Coulomb tăng miền kim loại và miền điện môi Mott trên giản đồ bị thu hẹp. Đối với trường hợp tương tác Coulomb

xen kẽ giữa các nút (đặc trưng cho sự chênh lệch thế Coulomb giữa hai nút mạng liền kề là $\gamma = U_B/U_A$), ở giới hạn $\gamma = 0$ chúng tôi thấy rằng hệ hoạt động giống như một mô hình Anderson không phụ thuộc vào U_A . Có ba pha khác nhau (kim loại, điện môi Mott, điện môi Anderson) được tìm thấy ở giới hạn $0 < \gamma < 1$, nhưng các miền này đã thay đổi: miền kim loại bị thu hẹp lại, miền điện môi Anderson và điện môi Mott được mở rộng khi γ giảm.

Các nguyên tử siêu lạnh trên mạng quang học có thể mô phỏng các mô hình lý thuyết được xem xét trong luận án. Do đó những kết quả của luận án có thể được kiểm chứng bằng thực nghiệm. Kết quả thu được từ luận án trong một số trường hợp giới hạn phù hợp với kết quả khi áp dụng các gần đúng khác phức tạp hơn như DMFT thống kê. Do vậy có thể kết luận lý thuyết môi trường điển hình dùng phương trình chuyển động giải cho bài toán một tạp là một phương pháp thích hợp cho nhiều bài toán liên quan đến hệ tương quan và mất trật tự.

Danh mục các công trình khoa học thuộc luận án đã công bố

1. T. H. Y. Nguyen, D. A. Le and A. T. Hoang, 2022, Anderson localization in the Anderson - Hubbard model with site-dependent interactions, *New Journal of Physics*, 24, 053054.
2. T. H. Y. Nguyen, A. T. Hoang, D. A. Le, 2022, Influence of Coulomb disorder on the phase diagrams of the Anderson - Hubbard model, *Journal of Physics: Conference Series*, 2269, 012004.
3. A. T. Hoang, T. H. Y. Nguyen, D. A. Le, 2021, Metal-insulator transitions of fermionic mixtures with mass imbalance in disordered optical lattice, *Modern Physics Letters B*, 35, 2150357.
4. T. H. Y. Nguyen, A. T. Hoang, 2021, Phase diagram of the half-filled Anderson-Falicov- Kimball model with Coulomb disorder, *Journal of Physics: Conference Series*, 1932, 012013.
5. A. T. Hoang, T. H. Y. Nguyen, D. A. Le, 2019, Metal-insulator phase diagram of the half-filled Anderson - Hubbard model, *Physica B: Condensed Matter*, 570, 320-323.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] N. F. Mott, 1949, The basis of the electron theory of metals, with special reference to the transition metals, *Proceedings of the Physical Society, Section A*, 62, 416-422.
- [2] P. W. Anderson, 1958, Absence of diffusion in certain random lattices, *Physical Review Journals*, 109, 1492.
- [3] K. Byczuk, 2005, Metal-insulator transitions in the Falicov - Kimball model with disorder, *Physical Review B*, 71, 205105.
- [4] L. Fallani, J. E. Lye, V. Guarrera, C. Fort and M. Inguscio, 2007, Ultracold atoms in a disordered crystal of light: towards a bose glass, *Physical Review Letters*, 98, 130404.
- [5] M. Pasienski, D. McKay, M. White and B. A. DeMarco, 2010, A disordered insulator in an optical lattice, *Nature Physics*, 6, 667.
- [6] A. T. Hoang, T. H. Y. Nguyen, D. A. Le, 2019, Metal-insulator phase diagram of the half-filled Anderson - Hubbard model, *Physica B: Condensed Matter*, 570, 320-323.
- [7] E. H. Lieb and F. Y. Wu, 1968, Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension, *Physical Review Letters* 20, 1445.
- [8] A. Georges, G. Kotliar, W. Krauth, and M. J. Rosenberg, 1996, Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems and the limit of infinite dimensions, *Reviews of Modern Physics*, 68, 13.
- [9] J. K. Freericks and V. Zlatic, 2003, Exact dynamical mean-field theory of the Falicov - Kimball model, *Reviews of Modern Physics*, 75, 1333.

- [10] E. Abrahams, P. W. Anderson, D. C. Licciardello, and T. V. Ramakrishnan, 1979, Scaling Theory of Localization: Absence of Quantum Diffusion in Two Dimensions, *Physical Review Letters*, 42, 673.
- [11] S. N. Mott, 1976, The mobility edge since, *World Scientific Series in 20th Century Physics*, pp 657-684.
- [12] A. H. Wilson, 1931, The theory of electronic semi-conductors, *Proceedings of the royal society A*, 133, 458.
- [13] R. Abou-Chacral and D. J. Thouless, 1974, Self-consistent theory of localization: Localization near the band edges, *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 6(10), 1734.
- [14] G. A. Thomas, M. A. Paalanen, 1985, Localization, interaction, and transport phenomena, *Conference paper, Berlin, Heidelberg, New York: Springer*, p. 77-89.
- [15] G. A. Thomas, 1986, in *Localisation and Interactions in Disordered and Doped Semi-conductors*, Edited by D. M. Finlayson (SUSSP, Edinburgh), p. 172.
- [16] S. Katsumoto, 1991, in *Localization 1990*, edited by K. A. Benedict and J. T. Chalker, Institute of Physics Conference Series Number 108 (Techno House, Bristol, 1991), p. 17.
- [17] B. Karamer and A. Mackinnon, 1993, Localization: theory and experiment, *Reports on Progress in Physics*, 56, 1469.
- [18] A. D. Mirlin and Y. V. Fyodorov, 1994, Distribution of local densities of states, order parameter function, and critical behavior near the Anderson transition, *Physical Review Letters*, 72, 526.
- [19] V. Dobrosavljevic et al., 2003, Typical medium theory of Anderson localization: A local order parameter approach to strong-disorder effects, *Europhysics Letters*, 62, 76.
- [20] K. Byczuk et al., 2005, Mott-Hubbard Transition versus Anderson Localization in Correlated Electron Systems with Disorder, *Physical Review Letters*, 94, 056404.
- [21] V. Dobrosavljevic, 2010, Typical-medium theory of Mott–Anderson localization, *International Journal of Modern Physics B*, 24, 1680.

- [22] H. Bragana et al., 2015, Anderson localization effects near the Mott metal-insulator transition, *Physical Review B*, 92, 125143.
- [23] V. Dobrosavljevic and G. Kotliar, 1997, Hubbard models with random hopping in $d = \infty$, *Physical Review Letters*, 78, 3943.
- [24] Philosophical Transactions: Mathematical, Physical and Engineering Sciences, 1998, *Mathematical, Physical and Engineering Sciences*, 356, 57.
- [25] D. Semmler, K. Byczuk, and W. Hofstetter, 2010, Mott-Hubbard and Anderson metal-insulator transitions in correlated lattice fermions with binary disorder, *Physical Review B*, 81, 115111.
- [26] M. A. Tusch and D. E. Logan, 1993, Interplay between disorder and electron interactions in a $d = 3$ site-disordered Anderson - Hubbard model: A numerical mean-field study, *Physical Review B*, 48, 14843.
- [27] E. Z. Kuchinskii, I. A. Nekrasov, M. V. Sadovskii, 2008, Mott - Hubbard Transition and Anderson Localization: Generalized Dynamical Mean-Field Theory Approach , *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, 106, 581.
- [28] J. Skomlimowski, D. Vollhardt, and K. Byczuk, 2015, Spin-selective localization of correlated lattice fermions, *Physical Review B*, 92, 094202.
- [29] K. Byczuk et al., 2009, Competition between Anderson Localization and Antiferromagnetism in Correlated Lattice Fermion Systems with Disorder, 2009, *Physical Review Letters*, 102, 146403.
- [30] J. G. Massey and M. Lee, 1995, Direct Observation of the Coulomb Correlation Gap in a Nonmetallic Semiconductor, Si:B, *Physical Review Letters*, 75, 4266.
- [31] H. von Lohneysen, 1998, Philosophical Transactions of The Royal Society A Mathematical Physical and Engineering Sciences, *The Royal Society*, Ser. A, 356, 139.
- [32] D. D. Sarma, A. Chainani et al., 1998, Disorder Effects in Electronic Structure of Substituted Transition Metal Compounds, *Physical Review Letters*, 80, 4004 ; A. Chainani, D. D. Sarma, I. Das, and E. V. Sampathkumaran, 1996, Low-temperature

- electrical conductivity of $\text{LaNi}_{1-x}\text{Fe}_x\text{O}_3$, *Journal of Physics: Condensed Matter*, 8, L631.
- [33] K. W. Kim et al., 2005, Metal-insulator transition in a disordered and correlated $\text{SrTi}_{1-x}\text{Ru}_x\text{O}_3$ system: Changes in transport properties, optical spectra, and electronic structure, *Physical Review B*, 71, 125104.
- [34] R. Pablo-Pedro et al., 2020, Understanding Disorder in 2D Materials: The Case of Carbon Doping of Silicene, *Nano Letter* 20(9), 6336–6343.
- [35] R. Joerdens et al., 2008, A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice, *Nature*, 455, 204.
- [36] E. Wille et al., 2008, Exploring an Ultracold Fermi-Fermi Mixture: Interspecies Feshbach Resonances and Scattering Properties of ^6Li and ^{40}K , *Physical Review Letters*, 100, 053201.
- [37] M. Taglieber et al., 2008, Quantum Degenerate Two-Species Fermi-Fermi Mixture Coexisting with a Bose-Einstein Condensate, *Physical Review Letters*, 100, 010401.
- [38] H. Bethe, 1928, Theorie der Beugung von Elektronen an Kristallen, *Annalen der Physik*, 87, 55.
- [39] A. Sommerfeld, 1928, Zur Elektronentheorie der Metalle auf Grund der Fermischen Statistik, *Zeitschrift fur Physik*, 47, 1.
- [40] F. Bloch, 1929, Bemerkung zur Elektronentheorie des Ferromagnetismus und der elektrischen Leitfähigkeit, *Zeitschrift fur Physik*, 57, 545.
- [41] G. A. Sawatzky and J. W. Allen, 1984, Magnitude and Origin of the Band Gap in NiO , *Physical Review Letter*, 53, 24.
- [42] N. F. Mott and R. Peierls, 1937, Discussion of the paper by de Boer and Verwey, *Proceedings of the Physical Society*, 49, 72.
- [43] E. Wigner, 1938, Effects of the Electron Interaction on the Energy Levels of Electrons in Metals, *Transactions of the Faraday Society*, 34, 678-685.
- [44] N. F. Mot, 1967, Electrons in disordered structures, *Advances in Physics*, 16, 49.

- [45] W. F. Brinkman, and T. M. Rice, 1970, Application of Gutzwiller's Variational Method to the Metal-Insulator Transition, *Physical Review B*, 2, 4302.
- [46] M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura, 1998, *Metal-insulator transitions*, The American Physical Society, 70, 1039.
- [47] J. Hubbard, 1964, Electron Correlations in Narrow Energy Bands, *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 276, 238-257.
- [48] J. Hubbard, 1964, Electron Correlations in Narrow Energy Bands (The Degenerate Band Case), *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 277, 237-259.
- [49] J. Hubbard, 1964, Electron correlations in narrow energy bands (An Improved Solution) , *Proceedings of the Royal Society of London. Series A. Mathematical and Physical Sciences*, 281, 401-419.
- [50] J. Kondo, 1964, Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys, *Progress of Theoretical Physics*, 32, 37-49.
- [51] Y. Okimoto, T. Katsufuji, Y. Okada, T. Arima, and Y. Tokura, 1995, Optical spectra in (La,Y)TiO₃: Variation of Mott-Hubbard gap features with change of electron correlation and band filling, *Physical Review B*, 51, 15.
- [52] Y. Tokura, 1993, *Japanese Journal of Applied Physics*, 32, 209.
- [53] J. B. Torrance, P. Lacorre, A. I. Nazzari, E. J. Ansaldo, and Ch. Niedermayer, 1992, Systematic study of insulator-metal transitions in perovskites RNiO₃ (R=Pr,Nd,Sm,Eu) due to closing of charge-transfer gap, *Physical Review B*, 45, 8209.
- [54] F. Inaba et al., 1995, Change of electronic properties on the doping-induced insulator-metal transition in La_{1-x}Sr_xVO₃, *Physical Review B*, 52, R2221.
- [55] C. Guan, X. Guan, 2019, A brief introduction to Anderson Localization.
- [56] A. Aspect and M. Inguscio, 2009, Anderson localization of ultracold atoms, *Physics Today*, 62, 30-35.
- [57] F. Bloch, 1928, Electron Dynamics in Solids, *Zeitschrift fur Physik*, 52, 555.

- [58] J. Billy, V. Josse, Z. Zuo, A. Bernard, B. Hambrecht, P. Lugan, D. Clement, L. Sanchez-Palencia, P. Bouyer, and A. Aspect, 2008, Direct observation of Anderson localization of matter waves in a controlled disorder, *Nature*, 453, 891.
- [59] D. Vollhardt, K. Byczuk and M. Kollar, 2011, *Dynamical Mean-Field Theory*, Springer Series in Solid-State Sciences, 171.
- [60] S. Lellouch, 2014, in thesis "*Collective localization transitions in interacting disordered and quasiperiodic bose superfluid*", Institut D'optique Graduate School.
- [61] L. Sanchez-Palencia, D. Clément, P. Lugan, P. Bouyer, G. V. Shlyapnikov, and A. Aspect, 2007, Anderson Localization of Expanding Bose-Einstein Condensates in Random Potentials, *Physical Review Letters*, 98, 210401.
- [62] D. Bruns, R. Haenel, and G. Tom, 2019, *Anderson Localization*, in book "Modern Condensed Matter Physics", pp 252-300.
- [63] M. Kardar, 2013, *Statistical physics of fields*, 6th edition, Cambridge University Press, Cambridge.
- [64] C. A. Mueller, D. Delande, 2016, *Disorder and interference: localization phenomena*, chapter 9, 441-533.
- [65] D. S. Wiersma, P. Bartolini, A. Lagendijk and R. Righini, 1997, Localization of light in a disordered medium, *Nature*, 390, 671–673.
- [66] Y. Lahini et al., 2008, Anderson localization and nonlinearity in one-dimensional disordered photonic lattices, *Physical Review Letters*, 100, 013906.
- [67] R. Dalichaouch, J. P. Armstrong, S. Schultz, P. M. Platzman, S. L. McCall, 1991, Microwave localization by two-dimensional random scattering, *Nature*, 354, 53–55.
- [68] A. A. Chabanov, M. Stoytchev, Genack, A. Z. Statistical, 2000, Signatures of photon localization, *Nature*, 404, 850–853.
- [69] G. Lemarie, B. Gremaud and D. Delande, 2009, Universality of the Anderson transition with the quasiperiodic kicked rotor, *Europhysics Letters*, 87, 37007.
- [70] R. L. Weaver, 1990, Anderson localization of ultrasound, *Wave Motion*, 12, 129–142.

- [71] E. Akkermans, G. Montambaux, 2006, *Mesoscopic Physics of Electrons and Photons*, Cambridge University Press.
- [72] R. Vlaming, D. Vollhardt, 1992, Controlled mean-field theory for disordered electronic systems: Single-particle properties, *Physical Review B*, 45, 4637.
- [73] V. Janis, D. Vollhardt, 1992, Coupling of quantum degrees of freedom in strongly interacting disordered electron systems, *Physical Review B*, 46, 15712.
- [74] R. J. Elliot et al., 1974, The theory and properties of randomly disordered crystals and related physical systems, *Reviews of Modern Physics*, 46, 465.
- [75] M. Janssen, 1998, Statistics and scaling in disordered mesoscopic electron systems, *Physics Reports*, 295, 1.
- [76] A. D. Mirlin, 2000, Statistics of energy levels and eigenfunctions in disordered systems, *Physics Reports*, 326, 259.
- [77] S. Stenholm, 1986, The semiclassical theory of laser cooling, *Reviews of Modern Physics*, 58, 699.
- [78] W. D. Phillips, 1998, Nobel Lecture: laser cooling and trapping of neutral atoms, *Reviews of Modern Physics*, 70, 721.
- [79] D. J. Wineland, J. C. Bergquist, J. J. Bollinger, and W. M. Itano , 1995, Sympathetic cooling of trapped ions: A laser-cooled two-species nonneutral ion plasma, *Physical Review Letters*, 57, 70.
- [80] D. E. Pritchard, E. L. Raab, V. S. Bagnato, C. E. Wieman, and R. N. Watts, 1986, Light Traps Using Spontaneous Forces, *Physical Review Letters*, 57, 310.
- [81] A. L. Migdall, J. V. Prodan, W. D. Phillips , T. H. Bergemann, and H. J. Metcalf, 1985, First Observation of Magnetically Trapped Neutral Atoms, *Physical Review Letters*, 54, 2596.
- [82] S. Will, 2012, in *From Atom Optics to Quantum Simulation*, pages 31-34.
- [83] E. Tiesinga, B. J. Verhaar, and H. T. C. Stoof, 1993, Threshold and resonance phenomena in ultracold ground-state collisions, *Phys. Rev. A*, 47, 4114.

- [84] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H. J. Miesner, D. M. Stamper-Kurn, W. Ketterle, 1998, Observation of Feshbach resonances in a Bose–Einstein condensate, *Nature*, 392, pages 151–154.
- [85] C. Chin, R. Grimm, P. Julienne and E. Tiesinga, 2010, Feshbach Resonances in Ultracold Gases, *Reviews of Modern Physics* 82, 1225-1286.
- [86] P. D. Lett, W. D. Phillips, S. L. Rolston, C. E. Tanner, R. N. Watts, C. I. Westbrook, 1989, Observation of Atoms laser Cooled below the Doppler Limit, *Journal of the Optical Society of America B*, 6 (11), 2084–2107.
- [87] H. Metcalf, and P. van der Straten, 1994, Cooling and trapping of neutral atoms, *Physics Reports*, 244, 203.
- [88] R. Grimm, M. Weidemuller, and Y. B. Ovchinnikov, 2000, Optical dipole traps for neutral atoms, *Molecular and Optical Physics*, 42, 95.
- [89] D. Clement, A. F. Varon, J. A. Retter, L. Sanchez-Palencia, A. Aspect and P. Bouyer, 2006, Suppression of Transport of an Interacting Elongated Bose-Einstein Condensate in a Random Potential, *New Journal of Physics*, 8, 165.
- [90] J. W. Goodman, 1985, *Statistical Optics*, New York: Wiley-Interscience.
- [91] T. H. Y. Nguyen, A. T. Hoang, 2021, Phase diagram of the half-filled Anderson-Falicov- Kimball model with Coulomb disorder, *Journal of Physics: Conference Series*, 1932, 012013.
- [92] P. A. Lee, T. V. Ramakrishnan, 1985, Disordered electronic systems, *Reviews of Modern Physics*, 57, 287.
- [93] D. Belitz, T.R. Kirkpatrick, 1994, The Anderson-Mott transition, *Reviews of Modern Physics*, 66, 261.
- [94] D. Semmler, et al., 2011, Anderson - Hubbard model with box disorder: Statistical dynamical mean-field theory investigation, *Physical Review B*, 84, 115113.
- [95] K. Byczuk, W. Hofstetter, D. Vollhardt, 2010, Anderson localization vs. Mott-Hubbard metal-insulator transition in disordered, interacting lattice fermion systems, *International Journal of Modern Physics B*, 24, 1727.

- [96] S. S. Kondov, et al., 2015, Disorder-Induced Localization in a Strongly Correlated Atomic Hubbard Gas, *Physical Review Letters*, 114, 083002.
- [97] K. Byczuk, W. Hofstetter, D. Vollhardt, 2005, Mott-Hubbard Transition versus Anderson Localization in Correlated Electron Systems with Disorder, *Physical Review Letters*, 94, 056404.
- [98] M. C. O. Aguiar, V. Dobrosavljevic, E. Abrahams, G. Kotliar, 2009, Critical Behavior at the Mott-Anderson Transition: A Typical-Medium Theory Perspective, *Physical Review Letters*, 102, 156402.
- [99] R. D. B. Carvalho, M. A. Gusmao, 2013, Effects of band filling in the Anderson - Falicov - Kimball model, *Physical Review B*, 87, 085122.
- [100] A. T. Hoang, T. H. Y. Nguyen, 2018, Constructing electronic phase diagram for the half-filled Hubbard Model with disorder, *Communication in Physics*, 28, 163.
- [101] R. Bulla, M. Potthoff, 2000, "Linearized" dynamical mean-field theory for the Mott-Hubbard transition, *The European Physical Journal B*, 13, 257.
- [102] E. Ekuma, C. Moore, H. Terletska et al., 2015, Finite-cluster typical medium theory for disordered electronic systems, *Physical Review B*, 92, 014209.
- [103] L. M. Falicov, J. C. Kimball, 1969, Simple Model for Semiconductor-Metal Transitions: SmB6 and Transition-Metal Oxides, *Physical Review Letters*, 22, 997.
- [104] U. Brand and C. Mielsch, 1989, Thermodynamics and correlation functions of the Falicov - Kimball model in large dimensions, *Zeitschrift fur Physik B Condensed Matter*, 75, 365-370.
- [105] J. K. Freericks, 1993, Spinless Falicov - Kimball model (annealed binary alloy) from large to small dimensions, *Physical Review B*, 47, 9263.
- [106] J. K. Freericks, P. Miller, 2000, Dynamical charge susceptibility of the spinless Falicov - Kimball model, *Physical Review B*, 62, 10022.
- [107] M. A. Gusmao, 2008, Phase diagram of the Anderson - Falicov - Kimball model at half filling, *Physical Review B*, 77, 245116.

- [108] R. D. B. Carvalho, G. M. A. Almeida and M. C. Souza, 2014, Anderson localisation on the Falicov - Kimball model with Coulomb disorder, *The European Physical Journal B*, 87, 160.
- [109] W. Metzner, D. Vollhardt, 1989, Correlated Lattice Fermions in $d = \infty$ Dimensions, *Physical Review Letters*, 62, 324.
- [110] A. T. Hoang, T. H. Y. Nguyen, D. A. Le, 2021, Metal-insulator transitions of fermionic mixtures with mass imbalance in disordered optical lattice, *Modern Physics Letters B*, 35, 2150357.
- [111] T. H. Y. Nguyen, D. A. Le and A. T. Hoang, 2022, Anderson localization in the Anderson - Hubbard model with site-dependent interactions, *New Journal of Physics*, 24, 053054.
- [112] Q. Chen, J. Stajic, S. Tan and K. Levin, 2008, BCS-BEC crossover: From high temperature superconductors to ultracold superfluids, *Physics Reports*, 412, 1-88.
- [113] R. Jordens et al., 2008, A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice, *Nature*, 455, 204-207.
- [114] S. S. Kondov et al., 2011, Three-Dimensional Anderson Localization of Ultracold Matter, *Science*, 334, 66.
- [115] M. V. Zwierlein, A. Schirotzek, C. H. Schunck and W. Ketterle, 2006, Fermionic Superfluidity with Imbalanced Spin Populations, *Science*, 311, 492-496.
- [116] E. A. Winograd, R. Chitra and M. J. Rozenberg, 2011, Orbital-selective crossover and Mott transitions in an asymmetric Hubbard model of cold atoms in optical lattices, *Physical Review B*, 84, 233102.
- [117] T. L. Dao, M. Ferrero, P. S. Cornaglia and M. Capone, 2012, Mott transition of fermionic mixtures with mass imbalance in optical lattices, *Physical Review A*, 85, 013606.
- [118] A. T. Hoang, T. T. T. Tran and D. A. Le, 2016, Mott Transition in the Asymmetric Hubbard Model at Half-filling: Equation of Motion Approach, *Journal of the Korean Physical Society*, 68, 238-242.

- [119] A. T. Hoang and D. A. Le, 2016, Critical behavior near the Mott transition in the half-filled asymmetric Hubbard model, *Physica B*, 485, 121-126.
- [120] W. S. Oliveira, M. C. O. Aguiar and V. Dobrosavljevic, 2014, Mott-Anderson transition in disordered charge transfer model: insights from typical medium theory, *Physical Review B*, 89, 165138.
- [121] J. Skolimowski, D. Vollhardt and K. Byczuk, 2015, Spin-selective localization of correlated lattice fermions, *Physical Review B*, 92, 09402.
- [122] J. Skolimowski et al., 2018, Multitude of phases in correlated lattice fermion systems with spin dependent disorder, *Journal of Physics Communications*, 2, 025031.
- [123] Q. Feng, 2009, *Study of single impurity Anderson model and dynamical mean field theory based on equation of motion method*, Ph.D. thesis, Goethe Universitat Frankfurt, Frankfurt am Main, Germany.
- [124] I. V. Stasyuk and O. B. Hera, 2005, Mott transition in the asymmetric Hubbard model at half-filling within dynamical mean-field theory, *The European Physical Journal B*, 48, 339-348.
- [125] B. P. Anderson and M. A. Kasevich, 1998, Macroscopic Quantum Interference from Atomic Tunnel Arrays, *Science*, 282, 1686-1689.
- [126] F. S. Cataliotti, S. Burger, C. Fort, P. Maddaloni, F. Minardi, A. Trombettoni, A. Smerzi and M. Inguscio, 2001, Josephson junction arrays with Bose-Einstein condensates, *Science*, 293, 843.
- [127] M. Greiner, O. Mandel, T. Esslinger, T. W. Hansch and I. Bloch, 2002, Quantum phase transition from a superfluid to a Mott insulator in a gas of ultracold atoms, *Nature*, 415 39.
- [128] E. Tiesinga, B. J. Verhaar and H. T. C. Stoof, 1993, Threshold and resonance phenomena in ultracold ground-state collisions, *Physical Review A*, 47(5), 4114-4122.
- [129] S. Inouye, M. R. Andrews, J. Stenger, H. J. Miesner, D. M. Stamper Kurn and W. Ketterle, 1998, Observation of Feshbach resonances in a Bose-Einstein condensate, *Nature*, 392(6672), 151-154.

- [130] R. Yamazaki, S. Taie, S. Sugawa and Y. Takahashi, 2010, Submicron Spatial Modulation of an Interatomic Interaction in a Bose-Einstein Condensate, *Physical Review Letters*, 105, 050405.
- [131] H. Gimpferlein, S. Wessel, J. Schmiedmayer and L. Santos, 2005, Ultracold Atoms in Optical Lattices with Random On-Site Interactions, *Physical Review Letters*, 95, 170401.
- [132] H. Gimpferlein, S. Wessel, J. Schmiedmayer and L. Santos, 2006, Random on-site interactions versus random potential in ultra cold atoms in optical lattices, *Applied Physics B*, 82, 217-224.
- [133] Y. C. Zang, W. M. Liu and H. Hu, 2014, Tuning a magnetic Feshbach resonance with spatially modulated laser light, *Physical Review A*, 90, 052722.
- [134] J. Park and E. Khatami, 2021, Thermodynamics of the disordered Hubbard model studied via numerical linked-cluster expansions, *Physical Review B*, 104, 165102.
- [135] P. Lombardo, J. C. Guisiano and R. Hayn, 2008, Full diagonal disorder in a strongly correlated system, *Physica B*, 403, 3485.
- [136] W. Morong, S. R. Muleady, I. Kimchi, W. Xu, R. M. Nandkishore, A. M. Rey and B. DeMarco, 2021, Disorder-controlled relaxation in a three-dimensional Hubbard model quantum simulator, *Physical Review Research*, 3, L012009.
- [137] N. Giovanni, M. Civelli and M. C. O. Aguiar, 2021, Any axion insulator must be a bulk three-dimensional topological insulator, *Physical Review B*, 103, 245134.
- [138] D. A. Le, T. T. T. Tran, A. T. Hoang, T. T. Nguyen and M. T. Tran, 2018, Mass-imbalanced Hubbard model in optical lattice with site-dependent interactions, *Physica B*, 532, 204.
- [139] H. Braganca, M. C. O. Aguiar, J. Vucicevic, D. Tanaskovic and V. Dobrosavljevic, 2015, Anderson localization effects near the Mott metal-insulator transition, *Physical Review B*, 92, 125143.
- [140] T. Saitou, A. Koga and A. Yamamoto, 2013, Metal-Insulator Transition in Optical Lattice System with Site-Dependent Interactions, *Journal of Superconductivity and Novel Magnetism*, 26, 1771.

- [141] A. Koga, T. Saitou and A. Yamamoto, 2013, Mott Transitions in the Hubbard Model with Spatially Modulated Interactions, *Journal of the Physical Society of Japan*, 82, 024401.
- [142] A. T. Hoang, T. H. Y. Nguyen, T. T. T. Tran and D. A. Le, 2016, Two-component Fermions in Optical Lattice with Spatially Alternating Interactions, *Journal of the Physical Society of Japan*, 85, 104702.
- [143] V. V. Volchkov, M. Pasek, V. Denechaud, M. Mukhtar, A. Aspect, D. Delande and V. Josse, 2018, Measurement of Spectral Functions of Ultracold Atoms in Disordered Potentials, *Physical Review Letters*, 120, 060404.

PHỤ LỤC

Phụ lục A

Phương trình chuyển động của hàm Green

Các hệ thức phản giao hoán

$$\{d_{i,\sigma}, d_{j,\bar{\sigma}}^+\} = d_{i,\sigma}d_{j,\bar{\sigma}}^+ + d_{j,\bar{\sigma}}^+d_{i,\sigma} = \delta_{ij}\delta_{\sigma\bar{\sigma}} \quad (\text{A.1})$$

$$\{n_{d\bar{\sigma}}d_{\sigma}, d_{\sigma}^+\} = d_{\bar{\sigma}}^+d_{\bar{\sigma}}d_{\sigma}d_{\sigma}^+ + d_{\sigma}^+d_{\bar{\sigma}}^+d_{\bar{\sigma}}d_{\sigma} = d_{\bar{\sigma}}^+d_{\bar{\sigma}} - d_{\bar{\sigma}}^+d_{\bar{\sigma}}d_{\sigma}^+d_{\sigma} + d_{\bar{\sigma}}^+d_{\bar{\sigma}}d_{\sigma}^+d_{\sigma} = n_{d\bar{\sigma}} \quad (\text{A.2})$$

$$\{n_{d\bar{\sigma}}c_{k\sigma}, d_{\sigma}^+\} = d_{\bar{\sigma}}^+d_{\bar{\sigma}}c_{k\sigma}d_{\sigma}^+ + d_{\sigma}^+d_{\bar{\sigma}}^+d_{\bar{\sigma}}c_{k\sigma} = 0 \quad (\text{A.3})$$

$$\{d_{\bar{\sigma}}^+c_{k\bar{\sigma}}d_{\sigma}, d_{\sigma}^+\} = d_{\bar{\sigma}}^+c_{k\bar{\sigma}}d_{\sigma}d_{\sigma}^+ + d_{\sigma}^+d_{\bar{\sigma}}^+c_{k\bar{\sigma}}d_{\sigma} = d_{\bar{\sigma}}^+c_{k\bar{\sigma}}\{d_{\sigma}d_{\sigma}^+ + d_{\sigma}^+d_{\sigma}\} = d_{\bar{\sigma}}^+c_{k\bar{\sigma}} \quad (\text{A.4})$$

$$\{c_{k\bar{\sigma}}^+d_{\bar{\sigma}}d_{\sigma}; d_{\sigma}^+\} = c_{k\bar{\sigma}}^+d_{\bar{\sigma}}d_{\sigma}d_{\sigma}^+ + d_{\sigma}^+c_{k\bar{\sigma}}^+d_{\bar{\sigma}}d_{\sigma} = c_{k\bar{\sigma}}^+d_{\bar{\sigma}}\{d_{\sigma}d_{\sigma}^+ + d_{\sigma}^+d_{\sigma}\} = c_{k\bar{\sigma}}^+d_{\bar{\sigma}} \quad (\text{A.5})$$

Các hệ thức giao hoán

$$\begin{aligned} H_{imp} &= \sum_{\sigma} (\varepsilon_{\sigma} - \mu)n_{i\sigma} + Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \\ &\quad + \sum_{k\sigma} \left(V_k c_{k\sigma}^{\dagger} d_{i\sigma} + V_k^* d_{i\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \right), \\ &= H_1 + H_2 + H_3 + H_4 + H_5. \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\begin{aligned} [d_{\bar{\sigma}}, H_1] &= [d_{\bar{\sigma}}, -\sum_{\sigma} \mu_{\sigma} n_{\sigma}] = -\sum_{\sigma} \mu_{\sigma} [d_{\bar{\sigma}}, d_{\sigma}^{\dagger} d_{\sigma}] \\ &= -\sum_{\sigma} \mu_{\sigma} ([d_{\bar{\sigma}}, d_{\sigma}^{\dagger}] d_{\sigma} + d_{\sigma}^{\dagger} [d_{\bar{\sigma}}, d_{\sigma}]) \\ &= -\sum_{\sigma} \mu_{\sigma} (\delta_{\bar{\sigma}\sigma} d_{\sigma} - 2d_{\sigma}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} + 2d_{\sigma}^{\dagger} d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma}) = -\mu_{\bar{\sigma}} d_{\bar{\sigma}} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
[d_{\bar{\sigma}}, H_2] &= [d_{\bar{\sigma}}, \frac{U}{2} \sum_{\sigma} n_{d\sigma} n_{d\bar{\sigma}}] = \frac{U}{2} \sum_{\sigma} [d_{\bar{\sigma}}, n_{d\sigma} n_{d\bar{\sigma}}] \\
&= \frac{U}{2} \sum_{\sigma} ([d_{\bar{\sigma}}, n_{d\sigma}] n_{d\bar{\sigma}} + n_{d\sigma} [d_{\bar{\sigma}}, n_{d\bar{\sigma}}]) \\
&= \frac{U}{2} \sum_{\sigma} (\delta_{\bar{\sigma}\sigma} d_{\sigma} n_{d\bar{\sigma}} + n_{d\sigma} \delta_{\bar{\sigma}\bar{\sigma}} d_{\bar{\sigma}}) \\
&= \frac{U}{2} (d_{\bar{\sigma}} n_{\bar{\sigma}} + n_{\bar{\sigma}} d_{\bar{\sigma}}) = U n_{\bar{\sigma}} d_{\bar{\sigma}} \\
[d_{\bar{\sigma}}, H_3] &= [d_{\bar{\sigma}}, \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}] = \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} [d_{\bar{\sigma}}, c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}] \\
&= \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} ([d_{\bar{\sigma}}, c_{k\sigma}^+] c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^+ [d_{\bar{\sigma}}, c_{k\sigma}]) \\
&= \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} (2d_{\bar{\sigma}} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + 2c_{k\sigma}^+ d_{\bar{\sigma}} c_{k\sigma}) = 0 \\
[d_{\bar{\sigma}}, H_4] &= [d_{\bar{\sigma}}, \sum_{k\sigma} V_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ d_{\sigma}] = \sum_{k\sigma} V_{k\sigma} [d_{\bar{\sigma}}, c_{k\sigma}^+ d_{\sigma}] \\
&= \sum_{k\sigma} V_{k\sigma} ([d_{\bar{\sigma}}, c_{k\sigma}^+] d_{\sigma} + c_{k\sigma}^+ [d_{\bar{\sigma}}, d_{\sigma}]) \\
&= \sum_{k\sigma} V_{k\sigma} (2d_{\bar{\sigma}} c_{k\sigma}^+ d_{\sigma} + 2c_{k\sigma}^+ d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma}) = 0 \\
[d_{\bar{\sigma}}, H_5] &= [d_{\bar{\sigma}}, \sum_{k\sigma} V_{k\sigma}^* d_{\sigma}^+ c_{k\sigma}] = \sum_{k\sigma} V_{k\sigma}^* [d_{\bar{\sigma}}; d_{\sigma}^+ c_{k\sigma}] \\
&= \sum_{k\sigma} V_{k\sigma}^* ([d_{\bar{\sigma}}, d_{\sigma}^+] c_{k\sigma} + d_{\sigma}^+ [d_{\bar{\sigma}}, c_{k\sigma}]) \\
&= \sum_{k\sigma} V_{k\sigma}^* (\delta_{\bar{\sigma}\sigma} c_{k\sigma} - 2d_{\sigma}^+ d_{\bar{\sigma}} c_{k\sigma} + 2d_{\sigma}^+ d_{\bar{\sigma}} c_{k\sigma}) = \sum_k V_{k\bar{\sigma}}^* c_{k\bar{\sigma}} \\
\Rightarrow [d_{\sigma}, H] &= \sum_k V_{k\sigma}^* c_{k\sigma} - \mu_{\sigma} d_{\sigma} + U n_{\sigma} d_{\sigma}. \tag{A.7}
\end{aligned}$$

Tương tự:

$$[c_{k\sigma}, H] = \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma} + V_{k\sigma} d_\sigma \quad (\text{A.8})$$

$$[d_\sigma^+, H] = - \sum_k V_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ + \mu_\sigma d_\sigma^+ - U n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma^+ \quad (\text{A.9})$$

$$[c_{k\sigma}^+, H] = -\varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ - V_{k\sigma}^* d_\sigma^+ \quad (\text{A.10})$$

$$[n_{d\sigma}, H] = - \sum_k V_{k\sigma}^* d_\sigma^+ c_{k\sigma} - \sum_k V_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ d_\sigma \quad (\text{A.11})$$

$$[n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma, H] = \sum_k V_{k\sigma}^* n_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma} - \sum_k V_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ d_\sigma d_\sigma + \sum_k V_{k\bar{\sigma}}^* d_\sigma^+ c_{k\bar{\sigma}} d_\sigma - (\mu_\sigma - U) n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma \quad (\text{A.12})$$

$$[n_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma}, H] = \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}}^* d_\sigma^+ c_{k'\bar{\sigma}} c_{k\sigma} - \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}} c_{k'\bar{\sigma}}^+ d_\sigma c_{k\sigma} + n_{d\bar{\sigma}} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma} + V_{k\sigma} n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma \quad (\text{A.13})$$

$$[d_\sigma^+ c_{k\bar{\sigma}} d_\sigma, H] = \sum_{k'} V_{k'\sigma}^* d_\sigma^+ c_{k\bar{\sigma}} c_{k'\sigma} - \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}} c_{k'\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_\sigma + V_{k\bar{\sigma}} n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma + (\varepsilon_{k\bar{\sigma}} + \mu_{\bar{\sigma}} - \mu_\sigma + U - U n_{d\sigma} - U n_{d\bar{\sigma}}) d_\sigma^+ c_{k\bar{\sigma}} d_\sigma \quad (\text{A.14})$$

$$[c_{k\bar{\sigma}}^+ d_\sigma d_\sigma, H] = \sum_{k'} V_{k'\sigma}^* c_{k\bar{\sigma}}^+ d_\sigma c_{k'\sigma} + \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}}^* c_{k\bar{\sigma}}^+ c_{k'\bar{\sigma}} d_\sigma - V_{k\bar{\sigma}}^* n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma - (\varepsilon_{k\bar{\sigma}} + \mu_{\bar{\sigma}} + \mu_\sigma - U - U n_{d\sigma} + U n_{d\bar{\sigma}}) c_{k\bar{\sigma}}^+ d_\sigma d_\sigma. \quad (\text{A.15})$$

Gần đúng Zubarev

$$\ll d_\sigma^+ c_{k'\bar{\sigma}} c_{k\sigma} | d_\sigma^+ \gg_\omega \simeq \langle d_\sigma^+ c_{k'\bar{\sigma}} \rangle \ll c_{k\sigma} | d_\sigma^+ \gg_\omega \quad (\text{A.16})$$

$$\ll c_{k'\bar{\sigma}}^+ d_\sigma c_{k\sigma} | d_\sigma^+ \gg_\omega \simeq \langle c_{k'\bar{\sigma}}^+ d_\sigma \rangle \ll c_{k\sigma} | d_\sigma^+ \gg_\omega \quad (\text{A.17})$$

$$\ll c_{k'\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \simeq \langle c_{k'\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle \ll d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \quad (\text{A.18})$$

$$\ll n_{d\sigma} d_\sigma^+ c_{k\bar{\sigma}} d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \simeq \langle n_{d\sigma} \rangle \ll d_\sigma^+ c_{k\bar{\sigma}} d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \quad (\text{A.19})$$

$$\ll n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma^+ c_{k\bar{\sigma}} d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \simeq \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle \ll d_\sigma^+ c_{k\bar{\sigma}} d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \quad (\text{A.20})$$

$$\ll n_{d\sigma} c_{k\bar{\sigma}}^+ d_\sigma d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \simeq \langle n_{d\sigma} \rangle \ll c_{k\bar{\sigma}}^+ d_\sigma d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \quad (\text{A.21})$$

$$\ll n_{d\bar{\sigma}} c_{k\bar{\sigma}}^+ d_\sigma d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \simeq \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle \ll c_{k\bar{\sigma}}^+ d_\sigma d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \quad (\text{A.22})$$

Tính Hàm Green bằng phương pháp phương trình chuyển động

$$G_d^\sigma(\omega) = \ll d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega .$$

Phương trình chuyển động cho hàm Green tạp

$$\omega G_d^\sigma(\omega) = \langle \{d_\sigma, d_\sigma^+\} \rangle + \ll [d_\sigma, H] | d_\sigma^+ \gg_\omega .$$

$$\begin{aligned} (A.1, A.7) \Rightarrow \omega G_d^\sigma(\omega) &= 1 + \sum_k V_{k\sigma}^* \ll c_{k\sigma} | d_\sigma^+ \gg_\omega - \mu_\sigma \ll d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \\ &\quad + U \ll n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \\ \Rightarrow (\omega + \mu_\sigma) G_d^\sigma(\omega) &= 1 + \sum_k V_{k\sigma}^* G_{cd}^{k\sigma}(\omega) + U G_d^{2\sigma}(\omega). \end{aligned} \quad (A.23)$$

Hàm Green $G_{cd}^{k\sigma}(\omega) = \ll c_{k\sigma} | d_\sigma^+ \gg_\omega$

$$\omega G_{cd}^{k\sigma}(\omega) = \langle \{c_{k\sigma}, d_\sigma^+\} \rangle + \ll [c_{k\sigma}, H] | d_\sigma^+ \gg_\omega$$

$$\begin{aligned} (A.2, A.8) \Rightarrow \omega G_{cd}^{k\sigma}(\omega) &= \varepsilon_{k\sigma} \ll c_{k\sigma} | d_\sigma^+ \gg_\omega + V_{k\sigma} \ll d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega \\ \Rightarrow (\omega - \varepsilon_{k\sigma}) G_{cd}^{k\sigma}(\omega) &= V_{k\sigma} G_d^\sigma(\omega) \\ \Rightarrow G_{cd}^{k\sigma}(\omega) &= \frac{V_{k\sigma}}{\omega - \varepsilon_{k\sigma}} G_d^\sigma(\omega) \end{aligned} \quad (A.24)$$

$$\begin{aligned} (A.23, A.24) \Rightarrow (\omega + \mu_\sigma) G_d^\sigma(\omega) &= 1 + \sum_k \frac{|V_{k\sigma}|^2}{\omega - \varepsilon_{k\sigma}} G_d^\sigma(\omega) + U G_d^{2\sigma}(\omega) \\ \Rightarrow (\omega + \mu_\sigma - \Delta_\sigma(\omega)) G_d^\sigma(\omega) &= 1 + U G_d^{2\sigma}(\omega), \end{aligned} \quad (A.25)$$

trong đó: $\Delta_\sigma(\omega) = \sum_k \frac{|V_{k\sigma}|^2}{\omega - \varepsilon_{k\sigma}}$.

Hàm Green $G_d^{k2\sigma}(\omega) = \ll n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma | d_\sigma^+ \gg_\omega$ Phương trình chuyển động

$$\omega G_d^{2\sigma}(\omega) = \langle \{n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma, d_\sigma^+\} \rangle + \ll [n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma, H] | d_\sigma^+ \gg_\omega$$

$$\begin{aligned}
(A.3, A.12) \Rightarrow \omega G_d^{2\sigma}(\omega) &= \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle + \sum_k V_{k\sigma}^* \ll n_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma} |d_\sigma^+ \gg_\omega \\
&\quad - \sum_k V_{k\sigma} \ll c_{k\sigma}^+ d_{\bar{\sigma}} d_\sigma |d_\sigma^+ \gg_\omega + \sum_k V_{k\bar{\sigma}}^* \ll d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_\sigma |d_\sigma^+ \gg_\omega \\
&\quad - (\mu_\sigma - U) \ll n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma |d_\sigma^+ \gg_\omega \\
\Rightarrow (\omega + \mu_\sigma - U) G_d^{2\sigma}(\omega) &= \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle + \sum_k V_{k\sigma}^* \ll n_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma} |d_\sigma^+ \gg_\omega \\
&\quad + \sum_k V_{k\bar{\sigma}}^* \ll d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_\sigma |d_\sigma^+ \gg_\omega - \sum_k V_{k\sigma} \ll c_{k\sigma}^+ d_{\bar{\sigma}} d_\sigma |d_\sigma^+ \gg_\omega
\end{aligned} \tag{A.26}$$

Xét số hạng thứ 2 trong (A.26), từ phương trình chuyển động:

$$\omega \ll n_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma} |d_\sigma^+ \gg_\omega = \langle \{n_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma}, d_\sigma^+\} \rangle + \ll [n_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma}, H] |d_\sigma^+ \gg_\omega$$

$$\begin{aligned}
(A.3, A.13) \Rightarrow \omega \ll n_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma} |d_\sigma^+ \gg_\omega &= \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}}^* \ll d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k'\bar{\sigma}} c_{k\sigma} |d_\sigma^+ \gg_\omega \\
&\quad - \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}} \ll c_{k'\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} c_{k\sigma} |d_\sigma^+ \gg_\omega + \varepsilon_{k\sigma} \ll n_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma} |d_\sigma^+ \gg_\omega \\
&\quad + V_{k\sigma} \ll n_{d\bar{\sigma}} d_\sigma |d_\sigma^+ \gg_\omega
\end{aligned}$$

$$(A.16, A.17) \Rightarrow (\omega - \varepsilon_{k\sigma}) \ll n_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma} |d_\sigma^+ \gg_\omega \simeq V_{k\sigma} G_d^{2\sigma}(\omega) \tag{A.27}$$

$$+ \left(\sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}}^* \langle d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k'\bar{\sigma}} \rangle - \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}} \langle c_{k'\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} \rangle \right) G_{cd}^{k\sigma}(\omega) \tag{A.28}$$

$$\Rightarrow \sum_k V_{k\sigma}^* \ll n_{d\bar{\sigma}} c_{k\sigma} |d_\sigma^+ \gg_\omega = \sum_k \frac{V_{k\sigma}^* I_1}{\omega - \varepsilon_{k\sigma}} G_{cd}^{k\sigma}(\omega) + \sum_k \frac{|V_{k\sigma}|^2}{\omega - \varepsilon_{k\sigma}} G_d^{2\sigma}(\omega) \tag{A.29}$$

$$= \sum_k \frac{|V_{k\sigma}|^2 I_1}{(\omega - \varepsilon_{k\sigma})^2} G_d^\sigma(\omega) + \sum_k \frac{|V_{k\sigma}|^2}{\omega - \varepsilon_{k\sigma}} G_d^{2\sigma}(\omega). \tag{A.30}$$

trong đó: $I_1 = \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}}^* \langle d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k'\bar{\sigma}} \rangle - \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}} \langle c_{k'\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} \rangle$.

Xét số hạng thứ 3 trong (A.26), từ phương trình chuyển động:

$$\omega \ll d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} = \langle \{d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_{\sigma}, d_{\sigma}^+\} \rangle + \ll [d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_{\sigma}, H] |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega}$$

$$\begin{aligned} (A.5, A.14) \Rightarrow \omega \ll d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} &= \langle d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle + \sum_{k'} V_{k'\sigma}^* \ll d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} c_{k'\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} \\ &- \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}} \ll c_{k'\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} + V_{k\bar{\sigma}} \ll n_{d\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} \\ &+ (\varepsilon_{k\bar{\sigma}} + \mu_{\bar{\sigma}} - \mu_{\sigma} + U) \ll d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} \\ &- U \ll n_{d\sigma} d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} - U \ll n_{d\bar{\sigma}} d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} \end{aligned}$$

Từ các phương trình (A.16, A.18, A.19, A.20)

$$\begin{aligned} \Rightarrow M_{k\sigma}^+(\omega) \ll d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} &= \langle d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle + \sum_{k'} V_{k'\sigma}^* \langle d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle G_{cd}^{k'\sigma}(\omega) \\ &- \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}} \langle c_{k'\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle G_d^{\sigma}(\omega) + V_{k\bar{\sigma}} G_d^{2\sigma}(\omega) \\ &= \langle d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle + \left(\sum_{k'} \frac{|V_{k'\sigma}|^2}{\omega - \varepsilon_{k'\sigma}} \langle d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle - \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}} \langle c_{k'\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle \right) G_d^{\sigma}(\omega) \\ &+ V_{k\bar{\sigma}} G_d^{2\sigma}(\omega), \end{aligned} \tag{A.31}$$

với $M_{k\sigma}^+(\omega) = \omega - \varepsilon_{k\bar{\sigma}} - \mu_{\bar{\sigma}} + \mu_{\sigma} + U(\langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle + \langle n_{d\sigma} \rangle - 1)$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow \sum_k V_{k\bar{\sigma}}^* \ll d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} &= \sum_k \frac{V_{k\bar{\sigma}}^*}{M_{k\sigma}^+(\omega)} \langle d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle \\ &+ \sum_k \frac{V_{k\bar{\sigma}}}{M_{k\sigma}^+(\omega)} \langle d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle \Delta_{\sigma}(\omega) G_d^{\sigma}(\omega) - \sum_{kk'} \frac{V_{k\bar{\sigma}}^* V_{k'\bar{\sigma}}}{M_{k\sigma}^+(\omega)} \langle c_{k'\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle G_d^{\sigma}(\omega) \\ &+ \sum_k \frac{|V_{k\bar{\sigma}}|^2}{M_{k\sigma}^+(\omega)} G_d^{2\sigma}(\omega) \end{aligned} \tag{A.32}$$

Xét số hạng thứ 4 trong (A.26), từ phương trình chuyển động:

$$\omega \ll c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} = \langle \{c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma}, d_{\sigma}^+\} \rangle + \ll [c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma}, H] |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega}$$

Từ các phương trình (A.5, A.15)

$$\begin{aligned}
\Rightarrow \omega \ll c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} &= \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} \rangle + \sum_{k'} V_{k'\sigma}^* \ll c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} c_{k'\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} \\
&+ \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}}^* \ll c_{k'\bar{\sigma}}^+ c_{k'\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} - V_{k\bar{\sigma}}^* \ll n_{d\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} \\
&- (\varepsilon_{k\bar{\sigma}} + \mu_{\bar{\sigma}} + \mu_{\sigma} - U) \ll c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} + U \ll n_{d\sigma} c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} \\
&- U \ll n_{d\bar{\sigma}} c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega}
\end{aligned}$$

Từ các phương trình (A.17, A.18, A.21, A.22)

$$\begin{aligned}
\Rightarrow M_{k\sigma}^-(\omega) \ll c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} &= \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} \rangle + \sum_{k'} V_{k'\sigma}^* \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} \rangle G_{cd}^{k'\sigma}(\omega) \\
&+ \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}}^* \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ c_{k'\bar{\sigma}} \rangle G_d^{\sigma}(\omega) - V_{k\bar{\sigma}}^* G_d^{2\sigma}(\omega) \\
&= \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} \rangle - V_{k\bar{\sigma}}^* G_d^{2\sigma}(\omega) \\
&+ \left(\sum_{k'} \frac{|V_{k'\sigma}|^2}{\omega - \varepsilon_{k'\sigma}} \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} \rangle + \sum_{k'} V_{k'\bar{\sigma}}^* \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ c_{k'\bar{\sigma}} \rangle \right) G_d^{\sigma}(\omega)
\end{aligned} \tag{A.33}$$

với $M_{k\sigma}^-(\omega) = \omega + \varepsilon_{k\bar{\sigma}} + \mu_{\bar{\sigma}} + \mu_{\sigma} + U(\langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle - \langle n_{d\sigma} \rangle - 1)$.

$$\begin{aligned}
\Rightarrow - \sum_k V_{k\sigma} \ll c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} d_{\sigma} |d_{\sigma}^+ \gg_{\omega} &= \sum_k \frac{V_{k\bar{\sigma}}^*}{M_{k\sigma}^-(\omega)} \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} \rangle \\
&- \sum_k \frac{V_{k\bar{\sigma}}}{M_{k\sigma}^-(\omega)} \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} \rangle \Delta_{\sigma}(\omega) G_d^{\sigma}(\omega) - \sum_{kk'} \frac{V_{k\bar{\sigma}} V_{k'\bar{\sigma}}^*}{M_{k\sigma}^-(\omega)} \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ c_{k'\bar{\sigma}} \rangle G_d^{\sigma}(\omega) \\
&+ \sum_k \frac{|V_{k\bar{\sigma}}|^2}{M_{k\sigma}^-(\omega)} G_d^{2\sigma}(\omega)
\end{aligned} \tag{A.34}$$

Kết hợp (A.26, A.30, A.32, A.34)

$$\begin{aligned}
\Rightarrow (\omega + \mu_\sigma - U)G_d^{2\sigma}(\omega) &= \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle + \sum_k \frac{|V_{k\sigma}|^2 I_1}{(\omega - \varepsilon_{k\sigma})^2} G_d^\sigma(\omega) + \sum_k \frac{|V_{k\sigma}|^2}{\omega - \varepsilon_{k\sigma}} G_d^{2\sigma}(\omega) \\
&+ \sum_k \frac{V_{k\bar{\sigma}}^*}{M_{k\sigma}^+(\omega)} \langle d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle + \sum_k \frac{V_{k\bar{\sigma}}^*}{M_{k\sigma}^+(\omega)} \langle d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle \Delta_\sigma(\omega) G_d^\sigma(\omega) \\
&- \sum_{kk'} \frac{V_{k\bar{\sigma}}^* V_{k'\bar{\sigma}}}{M_{k\sigma}^+(\omega)} \langle c_{k'\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle G_d^\sigma(\omega) + \sum_k \frac{|V_{k\bar{\sigma}}|^2}{M_{k\sigma}^+(\omega)} G_d^{2\sigma}(\omega) \\
&+ \sum_k \frac{V_{k\bar{\sigma}}^*}{M_{k\sigma}^-(\omega)} \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} \rangle - \sum_k \frac{V_{k\bar{\sigma}}}{M_{k\sigma}^-(\omega)} \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} \rangle \Delta_\sigma(\omega) G_d^\sigma(\omega) \\
&- \sum_{kk'} \frac{V_{k\bar{\sigma}} V_{k'\bar{\sigma}}^*}{M_{k\sigma}^-(\omega)} \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ c_{k'\bar{\sigma}} \rangle G_d^\sigma(\omega) + \sum_k \frac{|V_{k\bar{\sigma}}|^2}{M_{k\sigma}^-(\omega)} G_d^{2\sigma}(\omega).
\end{aligned}$$

Nếu gần đúng coi $\langle d_{\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle = \langle c_{k\bar{\sigma}}^+ d_{\bar{\sigma}} \rangle = 0$, ta rút gọn được

$$\left[\omega + \mu_\sigma - U - \Delta_\sigma(\omega) - \sum_k |V_{k\bar{\sigma}}|^2 \left(\frac{1}{M_{k\sigma}^+(\omega)} + \frac{1}{M_{k\sigma}^-(\omega)} \right) \right] G_d^{2\sigma}(\omega) \quad (\text{A.35})$$

$$= \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle - \left[- \sum_{kk'} V_{k\bar{\sigma}}^* V_{k'\bar{\sigma}} \langle c_{k'\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle \left(\frac{1}{M_{k\sigma}^+(\omega)} + \frac{1}{M_{k\sigma}^-(\omega)} \right) \right] G_d^\sigma(\omega) \quad (\text{A.36})$$

* Hàm Green $\ll c_{k\bar{\sigma}} | c_{k'\bar{\sigma}}^+ \gg_\omega$

$$\begin{aligned}
\omega \ll c_{k\bar{\sigma}} | c_{k'\bar{\sigma}}^+ \gg_\omega &= \langle \{c_{k\bar{\sigma}}, c_{k'\bar{\sigma}}^+\} \rangle + \ll [c_{k\bar{\sigma}}, H] | c_{k'\bar{\sigma}}^+ \gg_\omega \\
&= \delta_{kk'} + \varepsilon_{k\bar{\sigma}} \ll c_{k\bar{\sigma}} | c_{k'\bar{\sigma}}^+ \gg_\omega + V_{k\bar{\sigma}} \ll d_\sigma | c_{k'\bar{\sigma}}^+ \gg_\omega.
\end{aligned}$$

Nếu bỏ qua $\ll d_\sigma | c_{k'\bar{\sigma}}^+ \gg_\omega$ thì

$$\omega \ll c_{k\bar{\sigma}} | c_{k'\bar{\sigma}}^+ \gg_\omega = \frac{\delta_{kk'}}{\omega - \varepsilon_{k\bar{\sigma}}}.$$

$$\begin{aligned}
\langle c_{k'\bar{\sigma}}^+ c_{k\bar{\sigma}} \rangle &= \frac{i}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} (\langle\langle c_{k\bar{\sigma}} | c_{k'\bar{\sigma}}^+ \rangle\rangle_{E+i\varepsilon} - \langle\langle c_{k\bar{\sigma}} | c_{k'\bar{\sigma}}^+ \rangle\rangle_{E-i\varepsilon}) f(E) dE \\
&= \frac{i}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} f(E) dE \delta_{kk'} \left(\frac{1}{E+i\varepsilon - \varepsilon_{k\bar{\sigma}}} - \frac{1}{E-i\varepsilon - \varepsilon_{k\bar{\sigma}}} \right) \\
&= \frac{i}{2\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} f(E) dE \delta_{kk'} \frac{-2i\varepsilon}{(E - \varepsilon_{k\bar{\sigma}})^2 + \varepsilon^2} \\
&= \delta_{kk'} \int_{-\infty}^{+\infty} f(E) dE \left[\frac{1}{\pi} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \frac{\varepsilon}{(E - \varepsilon_{k\bar{\sigma}})^2 + \varepsilon^2} \right] \\
&= \delta_{kk'} \int_{-\infty}^{+\infty} f(E) dE \delta(E - \varepsilon_{k\bar{\sigma}}) \\
&= \delta_{kk'} f(\varepsilon_{k\bar{\sigma}}). \tag{A.37}
\end{aligned}$$

Từ (A.36, A.37)

$$\Rightarrow \left[\omega + \mu_\sigma - U - \Delta_\sigma(\omega) - \sum_k |V_{k\bar{\sigma}}|^2 \left(\frac{1}{M_{k\sigma}^+(\omega)} + \frac{1}{M_{k\sigma}^-(\omega)} \right) \right] G_d^{2\sigma}(\omega) \tag{A.38}$$

$$= \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle - \left[- \sum_{kk'} V_{k\bar{\sigma}}^* V_{k'\bar{\sigma}} \left(\frac{1}{M_{k\sigma}^+(\omega)} + \frac{1}{M_{k\sigma}^-(\omega)} \right) \delta_{kk'} f(\varepsilon_{k\bar{\sigma}}) \right] G_d^\sigma(\omega) \tag{A.39}$$

$$= \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle - \left[- \sum_k |V_{k\bar{\sigma}}|^2 \left(\frac{1}{M_{k\sigma}^+(\omega)} + \frac{1}{M_{k\sigma}^-(\omega)} \right) f(\varepsilon_{k\bar{\sigma}}) \right] G_d^\sigma(\omega) \tag{A.40}$$

Đặt

$$\Pi_{i\sigma}(\omega) = \sum_k |V_{k\bar{\sigma}}|^2 \left(\frac{1}{M_{k\sigma}^+(\omega)} + \frac{1}{M_{k\sigma}^-(\omega)} \right) F^{(i)}(\varepsilon_{k\bar{\sigma}}),$$

với

$$F^{(1)}(\varepsilon_{k\bar{\sigma}}) = f(\omega) = \frac{1}{1 + e^{\beta\omega}} \tag{A.41}$$

$$F^{(2)}(\varepsilon_{k\bar{\sigma}}) = 1 - f(\omega) \tag{A.42}$$

$$F^{(3)}(\varepsilon_{k\bar{\sigma}}) = 1 \tag{A.43}$$

Từ (A.25, A.40, A), thực hiện biến đổi ta được:

$$[\omega + \mu_\sigma - U - \Delta_\sigma(\omega) - \Pi_{3\sigma}(\omega)] G_d^{2\sigma}(\omega) = \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle - \Pi_{1\sigma}(\omega) G_d^\sigma(\omega). \tag{A.44}$$

$$\begin{aligned}
G_d^\sigma(\omega) [\omega + \mu_\sigma - \Delta_\sigma(\omega)] &= 1 + \frac{U \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle}{\omega + \mu_\sigma - U - \Delta_\sigma(\omega) - \Pi_{3\sigma}(\omega)} \\
&\quad - \frac{U \Pi_{1\sigma}(\omega) G_d^\sigma(\omega)}{\omega + \mu_\sigma - U - \Delta_\sigma(\omega) - \Pi_{3\sigma}(\omega)} \\
\Rightarrow G_d^\sigma(\omega) &= \frac{1 + \frac{U \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle}{\omega + \mu_\sigma - U - \Delta_\sigma(\omega) - \Pi_{3\sigma}(\omega)}}{\omega + \mu_\sigma - \Delta_\sigma(\omega) + \frac{U \Pi_{1\sigma}(\omega)}{\omega + \mu_\sigma - U - \Delta_\sigma(\omega) - \Pi_{3\sigma}(\omega)}} \\
&= \frac{1 - \langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle}{\omega + \mu_\sigma - \Delta_\sigma(\omega) + \frac{U \Pi_{1\sigma}(\omega)}{\omega + \mu_\sigma - U - \Delta_\sigma(\omega) - \Pi_{3\sigma}(\omega)}} \\
&\quad + \frac{\langle n_{d\bar{\sigma}} \rangle}{\omega + \mu_\sigma - U - \Delta_\sigma(\omega) - \frac{U \Pi_{2\sigma}(\omega)}{\omega + \mu_\sigma - \Delta_\sigma(\omega) - \Pi_{3\sigma}(\omega)}}. \quad (\text{A.45})
\end{aligned}$$

Phụ lục B

Phương trình tuyến tính hóa DMFT

Tính tích phân phương trình (2.1.24). Xét

$$I = \int dx \ln \frac{x^2 + 3a^2}{(x^2 - a^2)^2} = \int dx [\ln(x^2 + 3a^2) - 2 \ln|x^2 - a^2|].$$

Đặt $b = a\sqrt{3}$. Tính

$$I_1 = \int dx \ln(x^2 + 3a^2).$$

Tích phân từng phần với $u = \ln(x^2 + b^2)$, $du = \frac{2xdx}{x^2 + b^2}$, $dv = dx$, $v = x$.

$$\begin{aligned} \Rightarrow I_1 &= x \ln(x^2 + b^2) - \int dx \frac{2x^2}{x^2 + b^2} \\ &= x \ln(x^2 + b^2) - \int dx \frac{2(x^2 + b^2) - 2b^2}{x^2 + b^2} \\ &= x \ln(x^2 + b^2) - 2x + 2b^2 \int \frac{dx}{x^2 + b^2} \\ &= x \ln(x^2 + b^2) - 2x + 2b \int \frac{d(\frac{x}{b})}{(\frac{x}{b})^2 + 1} \\ &= x \ln(x^2 + b^2) - 2x + 2b \arctan \frac{x}{b}. \end{aligned} \tag{B.1}$$

$$\begin{aligned}
I_2 &= \int dx \ln |x^2 - a^2| \\
&(u = \ln(x^2 - a^2); du = \frac{2x dx}{x^2 - a^2}; dv = dx; v = x) \\
&= x \ln |x^2 - a^2| - \int \frac{2x^2 dx}{x^2 - a^2} \\
&= x \ln |x^2 - a^2| - \int dx \frac{2(x^2 - a^2) + 2a^2}{x^2 - a^2} \\
&= x \ln |x^2 - a^2| - 2x - a \int dx \left(\frac{1}{x - a} - \frac{1}{x + a} \right) \\
&= x \ln |x^2 - a^2| - 2x - a \ln \left| \frac{x - a}{x + a} \right|. \tag{B.2}
\end{aligned}$$

Cuối cùng thu được

$$\begin{aligned}
I &= \int dx \ln \frac{x^2 + 3a^2}{(x^2 - a^2)^2} = x \ln(x^2 + 3a^2) - 2x + 2\sqrt{3}a \arctan \frac{x}{\sqrt{3}a} \\
&\quad - 2 \left[x \ln |x^2 - a^2| - 2x - a \ln \left| \frac{x - a}{x + a} \right| \right]. \tag{B.3}
\end{aligned}$$

Phụ lục C

Phương trình tuyến tính hóa DMFT

Tính tích phân phương trình (2.1.20) khi $\Delta > U$. Tích phân (2.1.20) có thể viết lại

$$\begin{aligned}
I_{geom}(U, \Delta) &= \int_{-\Delta/2}^{-U/2} d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \ln Z(\varepsilon_i, \langle n_i \rangle = 2) + \int_{-U/2}^{U/2} d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \ln Z(\varepsilon_i, \langle n_i \rangle = 1) \\
&+ \int_{U/2}^{\Delta/2} d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \ln Z(\varepsilon_i, \langle n_i \rangle = 0) \\
&= \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{-U/2} d\varepsilon_i \ln \frac{\varepsilon_i^2 + 3U^2/4 - 2\varepsilon_i U}{(\varepsilon_i^2 - U^2/4)^2} + \frac{1}{\Delta} \int_{-U/2}^{U/2} d\varepsilon_i \ln \frac{\varepsilon_i^2 + 3U^2/4}{(\varepsilon_i^2 - U^2/4)^2} \\
&+ \frac{1}{\Delta} \int_{U/2}^{\Delta/2} d\varepsilon_i \ln \frac{\varepsilon_i^2 + 3U^2/4 + 2\varepsilon_i U}{(\varepsilon_i^2 - U^2/4)^2} \\
&= 2 \frac{1}{\Delta} \int_{U/2}^{\Delta/2} d\varepsilon_i \ln \frac{\varepsilon_i^2 + 3U^2/4 + 2\varepsilon_i U}{(\varepsilon_i^2 - U^2/4)^2} + \frac{1}{\Delta} \int_{-U/2}^{U/2} d\varepsilon_i \ln \frac{\varepsilon_i^2 + 3U^2/4}{(\varepsilon_i^2 - U^2/4)^2} \quad (C.1)
\end{aligned}$$

Đặt $x = \varepsilon_i$, $a = U/2$, khi đó

$$\begin{aligned}
\int dx \ln(x^2 + 3a^2 + 4ax) &= \int dx \ln [(x + 2a)^2 - a^2] \\
&= \int d(x + 2a) \ln [(x + 2a)^2 - a^2] \\
&\text{(Sử dụng kết quả của phương trình (B.2))} \\
&= (x + 2a) \ln(x^2 + 3a^2 + 4ax) - 2(x + 2a) - a \ln \frac{x + a}{x + 3a}. \\
\int dx \ln(x^2 - a^2)^2 &= 2 \int dx \ln(x^2 - a^2) \text{ (Tương tự dạng (B.2))} \\
&= 2 \left[x \ln(x^2 - a^2) - 2x - a \ln \left| \frac{x - a}{x + a} \right| \right].
\end{aligned}$$

Như vậy

$$\int dx \ln \frac{x^2 + 3a^2 + 4ax}{(x^2 - a^2)^2} = (x + 2a) \ln(x^2 + 3a^2 + 4ax)^2 + 2(x - 2a) - a \ln \frac{x + a}{x + 3a} - 2x \ln(x^2 - a^2) + 4x + 2a \ln \left| \frac{x - a}{x + a} \right|. \quad (\text{C.2})$$

Sử dụng kết quả phương trình (B.3), (C.2) và thay cận vào phương trình (C.1) thu được

$$\begin{aligned} I_{geom}(U, \Delta) = & -\frac{4U}{\Delta} \ln 2U + \left(1 + \frac{2U}{\Delta}\right) \ln \left[\left(\frac{\Delta}{2} + \frac{U}{2}\right)^2 - \frac{U^2}{4} \right] \\ & + \frac{U}{\Delta} \ln \frac{\Delta + 3U}{\Delta + U} + \frac{\pi U}{\sqrt{3}\Delta} + 2 - 2 \ln \left| \left(\frac{U}{2}\right)^2 - \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \right| \\ & - \frac{2U}{\Delta} \ln \frac{\Delta + U}{|\Delta - U|}, \text{ với } \Delta > U. \end{aligned} \quad (\text{C.3})$$

Phụ lục D

Phương trình tuyến tính hóa DMFT

$$G_{\uparrow(\downarrow)} = -i\pi\rho_{\uparrow(\downarrow)}$$

$$\eta_{\uparrow}(0) = ic_1; \eta_{\downarrow}(0) = ic_2; a = U/2 + \varepsilon_i; b = U/2 - \varepsilon_i.$$

Tính $G_{\downarrow}(0, \varepsilon_i)$.

$$\begin{aligned} G_{\uparrow}(0, \varepsilon_i) &= \frac{1 - \langle n_i \rangle / 2}{(b - ic_1) + Uic_2(-a - ic_1 - 2ic_2)^{-1}} + \frac{\langle n_i \rangle / 2}{-a - ic_1 - Uic_2(b - ic_1 - 2ic_2)^{-1}} \\ &= \frac{(1 - \langle n_i \rangle / 2)(a + ic_1 + 2ic_2)}{(a + ic_1 + 2ic_2)(b - ic_1) - iUc_2} - \frac{\langle n_i \rangle / 2(b - ic_1 - 2ic_2)}{(b - ic_1 - 2ic_2)(a + ic_1) + iUc_2}. \end{aligned}$$

Tương tự

$$G_{\downarrow}(0, \varepsilon_i) = \frac{(1 - \langle n_i \rangle / 2)(a + ic_2 + 2ic_1)}{(a + ic_2 + 2ic_1)(b - ic_2) - iUc_1} - \frac{\langle n_i \rangle / 2(b - ic_2 - 2ic_1)}{(b - ic_2 - 2ic_1)(a + ic_2) + iUc_1}.$$

Xét

$$\begin{aligned} G_{\uparrow}(0, \varepsilon_i) &= \frac{(1 - \langle n_i \rangle / 2)(a + i(c_1 + 2c_2))[ab + c_1(c_1 + 2c_2) + i[Uc_2 + ac_1 - b(c_1 + c_2)]]}{[ab + c_1(c_1 + 2c_2)]^2 + [uc_2 + ac_1 - b(c_1 + 2c_2)]^2} \\ &\quad - \frac{\langle n_i \rangle / 2[b - i(c_1 + 2c_2)][ab + c_1(c_1 + 2c_2) - i[Uc_2 + bc_1 - a(c_1 + 2c_2)]]}{[ab + c_1(c_1 + 2c_2)]^2 + [Uc_2 - bc_1 + a(c_1 + 2c_2)]^2}. \end{aligned}$$

Bỏ qua các số hạng bậc lớn hơn 2 của c_1 và c_2 ta nhận được

$$\begin{aligned} G_{\uparrow}(0, \varepsilon_i) &\simeq \frac{[1 - \langle n_i \rangle / 2][a^2b + ac_1(c_1 + 2c_2) + ia(Uc_2 + ac_1 - b(c_1 + 2c_2) + b(c_1 + 2c_2))]}{a^2b^2} \\ &\quad - \frac{\langle n_i \rangle / 2[ab^2 - ib(Uc_2 + bc_2 + bc_1 - a(c_1 + 2c_2) + a(c_1 + 2c_2))]}{a^2b^2} \\ &= \frac{(1 - \langle n_i \rangle / 2)[a^2b + ia(Uc_2 + ac_1)] - \langle n_i \rangle / 2[ab^2 - ib(Uc_2 + bc_1)]}{a^2b^2}. \end{aligned}$$

Suy ra

$$\Im G_{\uparrow}(0, \varepsilon_i) = \frac{(1 - \langle n_i \rangle / 2)a(Uc_2 + ac_1) + \langle n_i \rangle / 2b(Uc_2 + bc_1)}{a^2b^2}. \quad (\text{D.1})$$

Tương tự thay c_1 thành c_2 nhận được

$$\Im G_{\downarrow}(0, \varepsilon_i) = \frac{(1 - \langle n_i \rangle / 2)a(Uc_1 + ac_2) + \langle n_i \rangle / 2b(Uc_1 + bc_2)}{a^2b^2}. \quad (\text{D.2})$$

Với

$$\begin{aligned} a^2b^2 &= \left(\frac{U}{2} + \varepsilon_i\right)^2 \left(\frac{U}{2} - \varepsilon_i\right)^2 = \left(\varepsilon_i^2 - \frac{U^2}{4}\right)^2 \\ \langle O \rangle &= \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} O(\varepsilon_i) d\varepsilon_i. \end{aligned}$$

Đặt

$$\begin{aligned} t_{\uparrow} &= 1; t_{\downarrow} = r; r = \frac{t_{\downarrow}}{t_{\uparrow}}; \\ ic_1 &= \eta_{\uparrow} = G_{\uparrow}(0) = -i\pi\rho_{\uparrow} \Rightarrow ic_1 = -\pi t_{\uparrow}^2 \rho_{\uparrow}; \\ ic_2 &= \eta_{\downarrow} = G_{\downarrow}(0) = -i\pi\rho_{\downarrow} \Rightarrow ic_1 = -\pi t_{\downarrow}^2 \rho_{\downarrow}. \end{aligned}$$

Lấy trung bình cộng hai vế của phương trình (D.1) và (D.2) ta thu được hệ phương trình tuyến tính hóa DMF cho giá trị trung bình cộng

$$\left\{ \begin{array}{l} \rho_{\uparrow a}(0) = t_{\uparrow}^2 \rho_{\uparrow a} a_{11} + t_{\downarrow}^2 U \rho_{\downarrow a} a_{12} \\ \rho_{\downarrow a}(0) = U t_{\uparrow}^2 \rho_{\uparrow a} a_{21} + t_{\downarrow}^2 \rho_{\downarrow a} a_{22} \end{array} \right. \Rightarrow \left\{ \begin{array}{l} \rho_{\uparrow a}(0)(t_{\uparrow}^2 a_{11} - 1) + t_{\downarrow}^2 U a_{12} \rho_{\downarrow a}(0) = 0 \\ \rho_{\uparrow a}(0) U a_{21} t_{\uparrow}^2 + (t_{\downarrow}^2 a_{22} - 1) \rho_{\downarrow a}(0) = 0 \end{array} \right. \quad (\text{D.3})$$

với

$$a_{11} = a_{22} = I_1 = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} \frac{(1 - \langle n_i \rangle / 2)a^2 + \langle n_i \rangle / 2b^2}{a^2b^2} d\varepsilon_i$$

$$a_{12} = a_{21} = I_2 = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} \frac{(1 - \langle n_i \rangle / 2)a + \langle n_i \rangle / 2b}{a^2b^2} d\varepsilon_i.$$

Từ hai phương trình (D.1) và (D.2) ta có

$$\ln \rho_{\uparrow a}(0) = \ln \frac{t_{\uparrow}^2 \rho_{\uparrow} [(1 - \langle n_i \rangle / 2)a^2 + \langle n_i \rangle / 2b^2] + Ut_{\downarrow}^2 [(1 - \langle n_i \rangle / 2)a + \langle n_i \rangle / 2b] \rho_{\downarrow}}{a^2b^2}$$

$$\ln \rho_{\downarrow a}(0) = \ln \frac{Ut_{\uparrow}^2 \rho_{\uparrow} [(1 - \langle n_i \rangle / 2)a + \langle n_i \rangle / 2b] + t_{\downarrow}^2 [(1 - \langle n_i \rangle / 2)a^2 + \langle n_i \rangle / 2b^2] \rho_{\downarrow}}{a^2b^2}$$

Tương tự, lấy trung bình nhân cho hai vế của phương trình (D.1) và (D.2) ta được hệ

$$\rho_{\uparrow g}(0) = \exp \left[\frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} d\varepsilon_i \ln \frac{t_{\uparrow}^2 \rho_{\uparrow} [(1 - \langle n_i \rangle / 2)a^2 + \langle n_i \rangle / 2b^2] + Ut_{\downarrow}^2 [(1 - \langle n_i \rangle / 2)a + \langle n_i \rangle / 2b] \rho_{\downarrow}}{a^2b^2} \right] \quad (D.4)$$

$$\rho_{\downarrow g}(0) = \exp \left[\frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} d\varepsilon_i \ln \frac{Ut_{\uparrow}^2 \rho_{\uparrow} [(1 - \langle n_i \rangle / 2)a + \langle n_i \rangle / 2b] + t_{\downarrow}^2 [(1 - \langle n_i \rangle / 2)a^2 + \langle n_i \rangle / 2b^2] \rho_{\downarrow}}{a^2b^2} \right] \quad (D.5)$$

Hệ này không còn là hệ hai phương trình tuyến tính cho $\rho_{\uparrow g}(0)$ và $\rho_{\downarrow g}(0)$ nữa. Tuy nhiên hệ này có hai ẩn số có thể giải tính số.