

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**

Chuyên ngành: Vật lý lý thuyết và Vật lý toán

Mã số: 9 44 01 03

**TÓM TẮT LUẬN ÁN TIẾN SĨ**

**Hà Nội - 2024**

Công trình được hoàn thành tại: Học viện Khoa học và Công nghệ - Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam.

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

Phản biện 1:

Phản biện 2:

Phản biện 3:

Luận án sẽ được bảo vệ trước Hội đồng đánh giá luận án tiến sĩ cấp Học viện, họp tại Học viện Khoa học và Công nghệ - Viện Hàn lâm Khoa học và Công nghệ Việt Nam vào hồi ... giờ ..', ngày ... tháng ... năm 201....

Có thể tìm hiểu luận án tại:

- Thư viện Học viện Khoa học và Công nghệ
- Thư viện Quốc gia Việt Nam

# 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 trong vật lý các chất cô đặc trong nhiều thập kỷ qua. 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 quan điện tử gọi là chuyển pha Mott – Hubbard, trong khi đó mất trật tự gây nên định xứ Anderson. 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, nơi mà các thông số của hệ được dễ dàng kiểm soát và thay đổi. Do vậy, việc nghiên cứu lý thuyết các tính chất điện tử của các vật liệu mất trật tự với tương tác Coulomb khác nhau ở hai loại nút xen kẽ là quan trọng và cần thiết. Về mặt lý thuyết, có hai mô hình chủ yếu mô tả đồng thời hai hiệu ứng kể trên là mô hình Anderson-Hubbard (AH) và mô hình Anderson-Falicov-Kimball (AFK). Khi nghiên cứu với hệ có mất trật tự thì giá trị điển hình của biến ngẫu nhiên đóng vai trò quan trọng cho chuyển pha Anderson. Dobrosavljevec và các cộng sự đã phát triển lý thuyết môi trường điển hình (Typical Medium Theory: TMT) để nghiên cứu các hệ không trật tự, trong đó mật độ trạng thái điển hình (TDOS) được xấp xỉ bằng cách lấy theo trung bình nhân các cấu hình không trật tự, thay cho mật độ trạng thái lấy theo trung bình cộng. 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). Giải 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 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. 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  $\Delta$  cùng bậc với  $U$  trong cấu trúc điện tử của nó. Năm 2005, nhóm thực nghiệm ở Hàn Quốc đã nghiên cứu chuyển pha ở hệ có mất trật tự và tương quan trên vật liệu  $\text{SrTi}_{1-x}\text{Ru}_x\text{O}_3$ , kết quả nhóm đã tìm ra hàng loạt pha khác

nhau tùy thuộc vào nồng độ pha tạp. Những khó khăn khi tiến hành nghiên cứu các hiệu ứng của mất trật tự và tương quan điện tử trên vật liệu thực tế có thể được khắc phục nhờ sự phát triển của các thí nghiệm với các nguyên tử siêu lạnh trên mạng quang học. 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 và 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.

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 phụ thuộc vào nút là quan trọng và cần thiết.

## Phương pháp nghiên cứu

Để mô tả chuyển pha kim loại điện môi trong các mô hình nói trên chúng tôi sử dụng lý thuyết trường trung bình động (DMFT) cụ thể sử dụng phương pháp phương trình chuyển động (EOM) giải cho bài toán tạp, kết hợp với lý thuyết môi trường điển hình (TMT).

## Nội dung nghiên cứu

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 mất cân bằng khối lượng tại lớp đầy một nửa và mô hình AH có thể tương tác phụ thuộc vào nút.

## Bố cục của luận án

Bố cục của luận án bao gồm phần mở đầu và ba chương chính: Chương 1: Điện môi Mott, điện môi Anderson; Lý thuyết môi trường điển hình (TMT) và lý thuyết trường trung bình động DMFT; Mạng quang học. Chương 2: Nghiên cứu chuyển pha MIT trong hệ AFK và AH có mất trật tự phân bố theo hàm phân bố Gauss. Chương 3: Nghiên cứu giản đồ pha cho mô hình AH tại lớp đầy một nửa có mất cân bằng khối lượng và giản đồ pha cho mô hình AH tại lớp đầy 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 quan học

### 1.1 Điện môi Mott và điện môi Anderson

#### 1.1.1 Điện môi Mott

Để phân biệt chất rắn thành kim loại, điện môi và bán dẫn tại nhiệt độ không độ tuyệt đối, người ta dựa vào lý thuyết 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. Mặc dù bức 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, CO<sub>2</sub>, V<sub>2</sub>O<sub>3</sub>). 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 nguồn gốc dẫn tới biểu hiện của chúng là điện môi. 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 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.

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

$$H = -t \sum_{\langle ij \rangle} \left( c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + H.c. \right) + U \sum_i \left( n_{i\uparrow} - \frac{1}{2} \right) \left( n_{i\downarrow} - \frac{1}{2} \right) - \mu N, \quad (1.1.1)$$

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  $\sigma$ . Sự cạnh tranh giữa  $U$  và  $t$  sẽ quyết định hệ ở pha điện môi hay pha kim loại.

### 1.1.2 Điện môi Anderson

Mất trật tự tồn tại rất phổ biến trong tinh thể rắn. Tuy nhiên, trong thực tế 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. Năm 1958, Anderson đã đưa ra một cái nhìn mới về mất trật tự, theo đó chỉ cần một lượng nhỏ mất trật tự có thể ảnh hưởng một cách định tính và đáng kể đến tính chất vật lý của hệ. 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). Ở số chiều  $d = 1, 2$ , bằng phương pháp ma trận chuyển và gần đúng nhóm tái chuẩn hóa (RG) nhóm Abrahams đã chỉ ra rằng ở nhiệt độ không độ tuyệt đối, với độ mất trật tự bất kỳ, hệ ở pha định xứ Anderson, không có sự chuyển pha và bắt đầu có sự chuyển pha ở số chiều  $d = 3$ .

Vấn đề này có thể được hiểu trong khuôn khổ của một lý thuyết truyền dẫn lượng tử. Tuy nhiên các đặc điểm định tính chính của nó, giữa định xứ yếu và mạnh có thể thu được thông qua bức tranh tán xạ nhiều lần, nó cung cấp một cái nhìn trực quan để đánh giá ảnh hưởng của mất trật tự. Sóng đến được giả định lan truyền tự do trong không gian và chịu sự tán xạ đàn hồi từ mỗi tạp chất. 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. Kết quả là giao thoa lượng tử làm tăng xác suất trở về vị trí ban đầu (đóng góp của các quỹ đạo vòng), mặc dù chuyển động vẫn là khuếch tán nhưng hằng số khuếch tán và độ dẫn điện giảm. Khi không có mất trật tự, hàm sóng của điện tử trong mạng tinh thể tuần hoàn chính 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 hạn chế 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  $\xi$  (gọi là độ dài định xứ).

## 1.2 Lý thuyết môi trường điện hình

### 1.2.1 Lý thuyết trường trung bình động (DMFT)

Lý thuyết trường trung bình động được xây dựng để tiếp cận các vấn đề liên quan đến hệ tương quan mạnh, dựa trên ý tưởng chủ yếu là thay thế một mạng bằng một bài toán một nút lượng tử nhúng vào một môi trường hiệu dụng được xác định tự hợp. 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. Hàm tác động DMFT có thể được biểu diễn thông qua trường trung bình "Weiss"  $\mathcal{G}(\tau_1 - \tau_2)$  như sau

$$S_{loc} = - \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_\sigma \sum_{j,k \neq 0} c_\sigma^*(\tau_1) \mathcal{G}_\sigma^{-1}(\tau_1 - \tau_2) c_{0\sigma}(\tau_2) + U \int_0^\beta d\tau c_\uparrow^*(\tau) c_\uparrow(\tau) c_{0\downarrow}^*(\tau) c_{0\downarrow}(\tau). \quad (1.2.1)$$

Ta có mối quan hệ giữa hàm Green  $G_{ij\sigma}^{(0)}(\tau - \tau')$  với nút  $i = 0$  được đưa ra và hàm Green của toàn mạng

$$G_{ij\sigma}^{(0)} = G_{ij\sigma} - G_{i0\sigma} G_{00\sigma}^{-1} G_{0j\sigma}, \quad (1.2.2)$$

công thức dùng cho một mạng tổng quát. 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

$$G_\sigma^{-1}(i\omega_n) = \mathcal{G}_\sigma^{-1}(i\omega_n) - \Sigma_\sigma(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta_\sigma(i\omega_n) - \Sigma_\sigma(i\omega_n).$$

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

$$G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \varepsilon_{\mathbf{k}} + \mu - \Sigma_\sigma(i\omega_n)}. \quad (1.2.3)$$

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

$$G_\sigma(i\omega_n) = \sum_{\mathbf{k}\sigma} G_{\mathbf{k}\sigma}(i\omega_n) = \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{\rho_0(\omega)}{i\omega_n - \varepsilon + \mu - \Sigma_\sigma(i\omega_n)},$$

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

$$G_\sigma(i\omega_n) = -\frac{1}{Z} \int \prod_{\sigma} Dc_{0\sigma}^* Dc_{0\sigma} [c_\sigma(i\omega_n) c_{0\sigma}^*(i\omega_n)] \exp[-S_{loc}], \quad (1.2.4)$$

với  $Z = \int \prod_{\sigma} Dc_{i\sigma}^* Dc_{i\sigma} \exp[-S_{loc}]$ . Các phương trình (1.2.1)-(1.2.4) tạo thành hệ phương trình tự hợp cho hàm Green địa phương  $G_\sigma(i\omega_n)$  và năng lượng riêng  $\Sigma_\sigma(i\omega_n)$ . Tuy vậy, việc giải bài toán một tạp vẫn là một bài toán khó, không thể giải tổng quát.

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

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

$$\hat{H} = -t \sum_{ij,\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_i n_{i\sigma} + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (1.2.5)$$

năng lượng ionic  $\varepsilon_i$  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 có thể được xác định thông qua giá trị trung bình của LDOS, khi không có tương tác ( $U = 0$ ) phương pháp trở thành gần đúng CPA, nó không mô tả được tính chất vật lý của định xứ Anderson. Để khắc phục được điều này Dobrosavljevic 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 tham số trật tự cho chuyển pha Anderson. Lý thuyết đó gọi là lý thuyết môi trường điển hình (TMT).



Giá trị điển hình của LDOS được lấy gần đúng bằng giá trị trung bình nhân của LDOS.

Hàm mật độ trạng thái điển hình TDOS được cho bởi

$$\rho_{\text{typ}}(\omega) = \exp \left\{ \int d\varepsilon_i P(\varepsilon_i) \ln \rho(\omega, \varepsilon_i) \right\}, \quad (1.2.6)$$

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

$$G_{\text{typ}} = \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega' \frac{\rho_{\text{typ}}(\omega')}{\omega - \omega'}. \quad (1.2.7)$$

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

$$G_{\text{em}}(\omega) = G_0(\omega - \Sigma(\omega)) = G_{\text{typ}}(\omega). \quad (1.2.8)$$

Ở đây, các bước được xác định bởi các phương trình (1.2.6)-(1.2.8) là không chỉ giành 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.

## 1.3 Các nguyên tử lạnh trên mạng quang học

### 1.3.1 Mạng quang học trật tự

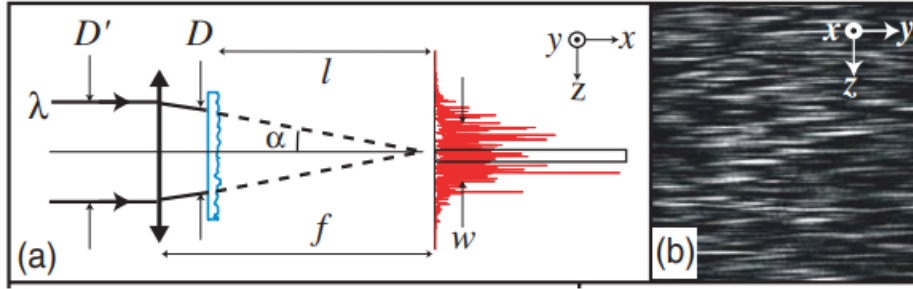
Phương pháp để lưu trữ và bẫy các nguyên tử trung hòa hay các hạt điện tích được được dùng trong các thí nghiệm là chìa khóa cho những tiến bộ khoa học từ phạm vi hạt cơ bản cho tới các nguyên tử cực lạnh. Ở đây, chúng tôi tập trung vào bẫy nguyên tử trung hòa dùng lưỡng cực quang. Muốn tạo thành mạng 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 thì ta có thể tạo nên mạng hai chiều, nếu dùng ba cặp chùm sóng thì ta có thể tạo mạng ba chiều.

### 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. Một cách hiệu quả để tạo ra thế ngẫu nhiên là dựa trên lực lưỡng cực gây ra bởi trường điện từ của nguyên tử. Khi đưa vào một trường điện từ  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  chẳng hạn như laser, một nguyên tử sẽ trải qua một lưỡng cực điện là kết quả của sự liên kết giữa điện trường và lưỡng cực điện nguyên tử cảm ứng và dẫn ra một thế gọi là thế lưỡng cực

$$V(\mathbf{r}) = \frac{3\pi c^2 \Gamma I(r)}{2\omega_0^3 \Delta}, \quad (1.3.1)$$

trong đó  $I(r)$  là cường độ của trường,  $\Gamma$  là tốc độ phân rã của trạng thái kích thích.  $\Delta$  là sự chênh lệch giữa tần số của chùm laser  $\omega_L$  và tần số riêng của nguyên tử  $\omega_0$ : nếu  $\Delta < 0$  (laser điều chỉnh ánh sáng đỏ), thế năng là hút, còn  $\Delta > 0$ , laser điều chỉnh ánh sáng xanh, thế là thế đẩy.



**Hình 1.3.1:** (a) Hiện thực hóa thí nghiệm mô tả tạo thế ngẫu nhiên lốm đốm. Một chùm tia laser có đường kính  $D$  và bước sóng  $\lambda$  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  $Oz$  [?].

## 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 lên giản đồ pha cho hai mô hình AH và AFK: (1) Giản đồ pha cho mô hình Anderson Hubbard tại lấp đầy một nửa với phân bố đều và phân bố Gauss cho biến ngẫu nhiên; (2) Giản đồ pha cho mô hình Anderson-Falicov-Kimball tại lấp đầy một nửa có phân bố Gauss cho tạp và phân bố đều cho thế tương tác Coulomb.

## 2.1 Mô hình Anderson Hubbard (AH)

### 2.1.1 Mô hình và phương pháp tính toán

Hamiltonian của mô hình Anderson - Hubbard có dạng

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

Năng lượng tại mỗi nút  $\varepsilon_i$  là biến ngẫu nhiên phân bố 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  $\varepsilon_i$  lần lượt như sau  $P_{Bo} = \frac{1}{\Delta_{Bo}} \theta \left( \frac{\Delta_{Bo}}{2} - |\varepsilon_i| \right)$ ,  $P_{Ga} = \sqrt{\frac{6}{\pi \Delta_{Ga}^2}} \exp(-6\varepsilon_i^2 / \Delta_{Ga}^2)$  với  $\theta$  là hàm bậc thang,  $\Delta$  là độ lớn mất trật tự. Để có thể so sánh hai hàm phân bố khác nhau, giá trị  $\Delta_{Ga}$  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  $\varepsilon_i$  được nhúng trong bể điện tử không tương tác được biểu diễn như sau

$$H_{imp} = \sum_{\sigma} (\varepsilon_i - \mu) n_{i\sigma} + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \left( V_k c_{k\sigma}^\dagger a_{i\sigma} + V_k^* a_{i\sigma}^\dagger c_{k\sigma} \right), \quad (2.1.2)$$

Hàm lai hóa được xác định thông qua thành phần ma trận  $V_k$  và tham số  $\varepsilon_k$

$$\eta(\omega) = \sum_k \frac{|V_k|^2}{\omega - \varepsilon_k}. \quad (2.1.3)$$

Với mỗi một năng lượng  $\varepsilon_i$ , 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  $\rho_{tbn} = \exp[\langle \ln \rho(\omega, \varepsilon_i) \rangle]$  cũng như giá trị trung bình cộng của LDOS  $\rho_{tbc} = \langle \rho(\omega, \varepsilon_i) \rangle$ , 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  $G_\alpha(\omega) = \int d\omega' \frac{\rho_\alpha(\omega')}{\omega - \omega'}$ , với  $\alpha$  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 động rộng vùng, với điều kiện tự hợp tương ứng là  $\eta(\omega) = W^2 G(\omega)/16$ . Chúng tôi sử dụng phương pháp phương trình chuyển động. Bài toán xét 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 như sau

$$G(\omega, \varepsilon_i) = \frac{1 - \langle n_i \rangle / 2}{\omega - \varepsilon_i + U/2 - \eta(\omega) + U\eta(\omega)[\omega - \varepsilon_i - U/2 - 3\eta(\omega)]^{-1}} + \frac{\langle n_i \rangle / 2}{\omega - \varepsilon_i - U/2 - \eta(\omega) - U\eta(\omega)[\omega - \varepsilon_i + U/2 - 3\eta(\omega)]^{-1}}. \quad (2.1.4)$$

Gần chuyển pha, tiệm cận miền kim loại, hàm Green là hàm thuần ảo dẫn tới mối quan hệ đệ qui  $G(0)^{(n+1)} = -i\pi\rho_\alpha^{(n)}$ , ở đó bên trái là giá trị ở vòng lặp thứ  $(n+1)$  được xác định thông qua giá trị thứ  $(n)$ . Ở tiệm cận pha kim loại gần chuyển pha LDOS là rất nhỏ, ta thu được các phương trình tuyến tính hóa DMFT như sau

$$I_{tbn}(U, \Delta) = 2 + \ln \left[ 3 \left( \frac{U}{2} \right)^2 + \left( \frac{\Delta}{2} \right)^2 \right] + \frac{2\sqrt{3}U}{\Delta} \arctan \left( \frac{\Delta}{\sqrt{3}U} \right) - 2 \ln \left[ \left( \frac{U}{2} \right)^2 - \left( \frac{\Delta}{2} \right)^2 \right] - \frac{2U}{\Delta} \ln \frac{\Delta + U}{|\Delta - U|}, \text{ với } \Delta < U. \quad (2.1.5)$$

$$\begin{aligned}
I_{tbn}(U, \Delta) = & -\frac{4U}{\Delta} \ln 2U + \left(1 + \frac{2U}{\Delta}\right) \ln \left[ \left(\frac{\Delta}{2} + \frac{U}{2}\right)^2 - \frac{U^2}{4} \right] \\
& + \frac{U}{\Delta} \ln \frac{\Delta + 3U}{\Delta + U} + \frac{\pi U}{\sqrt{3}\Delta} + 2 - 2 \ln \left| \left(\frac{U}{2}\right)^2 - \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2 \right| \\
& - \frac{2U}{\Delta} \ln \frac{\Delta + U}{|\Delta - U|}, \text{ với } \Delta > U.
\end{aligned} \tag{2.1.6}$$

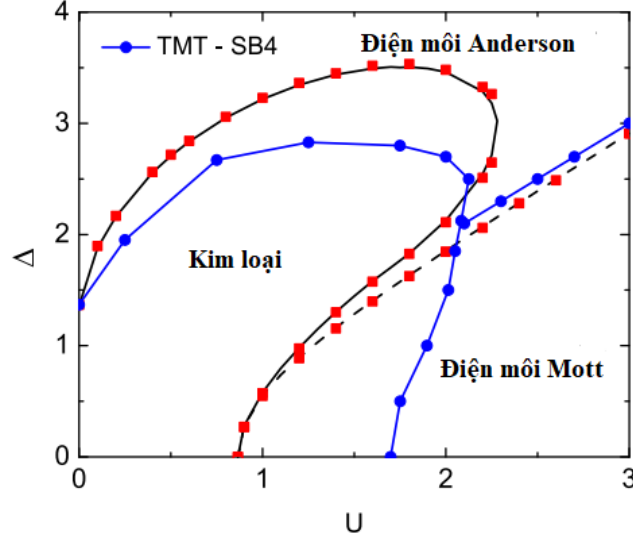
Và tính hóa DMFT với giá trị trung bình cộng. Ta thấy phương trình này chỉ hội tụ (vé phải nhận giá trị khác 0) khi  $\Delta < U$  với  $\langle n_i \rangle = 1$  và trong trường hợp này

$$\begin{aligned}
I_{tbc} = & \frac{1}{\Delta} \left[ -\frac{2x}{x^2 - a^2} - \frac{1}{2a} \ln \left| \frac{x - a}{x + a} \right| \right] \Big|_{-\Delta/2}^{\Delta/2} \\
= & \frac{2}{\left(\frac{U}{2}\right)^2 - \left(\frac{\Delta}{2}\right)^2} + \frac{2}{\Delta U} \ln \frac{\Delta + U}{|\Delta - U|}
\end{aligned} \tag{2.1.7}$$

Như vậy, các phương trình (2.1.5), (2.1.6) và (2.1.7) là các phương trình tuyến tính hóa DMFT để xác định các giá trị tới hạn của  $U$  và  $\Delta$  tại miền giữa điện môi Anderson - kim loại và Mott - kim loại.

## 2.1.2 Kết quả và thảo luận

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). Chúng tôi so sánh kết quả thu được với kết quả từ phương pháp TMT-DMFT có lời giải tạp bằng phương pháp boson cầm tù (TMT-SB4). 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  $\Delta$  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  $U \geq 2$ . 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.



**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 (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  $U$ ,  $\Delta$  được xác định theo đơn vị năng lượng  $W = 1$ .

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  $\Delta_c(U = 0) \approx 1.36$ . Từ hình (2.1.2) có thể thấy đường biên giữa điện môi Mott và điện môi Anderson đối với phân bố Gauss là thấp hơn so với phân bố đều trên mặt phẳng  $(U, \Delta)$ .

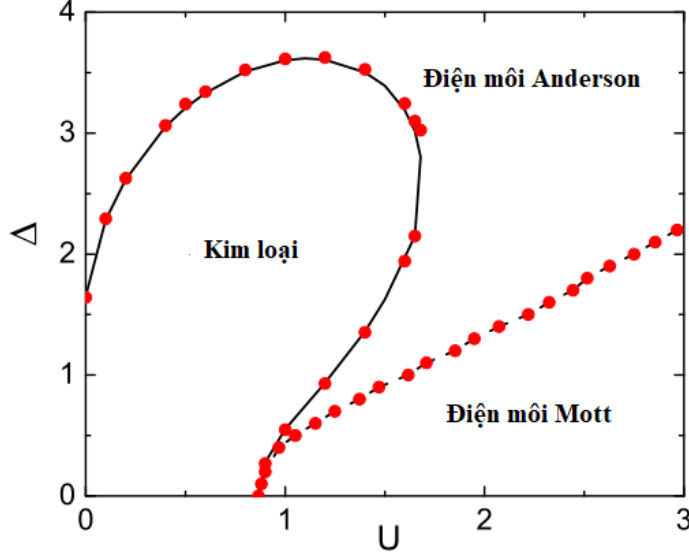
## 2.2 Mô hình Anderson Falicov-Kimball (AFK)

### 2.2.1 Mô hình và phương pháp tính toán

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

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

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 tích phân 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  $\varepsilon_i$ .



**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.

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  $\tilde{P} = \theta(\delta/2 - |U_i - U|)/\delta$ , với  $\theta$  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. 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  $p \in [0, 1]$ )

$$G_{ii}(\omega) = \frac{1}{\omega + \mu - \varepsilon_i - \eta(\omega) - \Sigma_i(\omega)} \equiv G(\omega, \varepsilon_i), \quad (2.2.2)$$

$$\Sigma_i(\omega) = pU_i + \frac{p(1-p)U^2}{\omega + \mu - \varepsilon_i - (1-p)U_i - \eta(\omega)}. \quad (2.2.3)$$

Hàm mật độ trạng thái địa phương LDOS được cho bởi  $\rho_i(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}[G_{ii}(\omega)]$ . Cuối cùng,

các hàm trung bình của LDOS được tính như sau

$$\rho_{tbc}(\omega) = \int dU_i \int d\varepsilon P(\varepsilon_i) \tilde{P}(U_i) \rho(\omega, \varepsilon_i, U_i), \quad (2.2.4)$$

$$\rho_{tbn}(\omega) = \exp \left[ \int dU_i \int d\varepsilon P(\varepsilon_i) \tilde{P}(U_i) \ln \rho(\omega, \varepsilon_i, U_i) \right]. \quad (2.2.5)$$

Hàm Green mạng bất biến với phép biến đổi tịnh tiến, thu được từ biến đổi Hilbert như sau  $G_{\alpha, \text{typ}}(\omega) = \int d\omega' \frac{\rho_{\alpha}(\omega')}{\omega - \omega'}$ , với  $\alpha$  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  $\rho_{tbc}(\omega)$  và  $\rho_{tbn}(\omega)$  tại  $(\omega = 0)$ : (i)  $\rho_{tbn}(0) > 0$  xác định pha kim loại, (ii)  $\rho_{tbc}(0) = 0$  tương ứng pha Mott. (iii)  $\rho_{tbc}(0) > 0$  and  $\rho_{tbn}(0) = 0$  tương ứng với pha định xứ Anderson (không có khe). Ngoài ra, hàm Green tại mức Fermi là hàm thuần ảo,  $G(0) = -i\pi\rho_{\alpha}(0)$ . Phương trình tuyến tính hóa DMFT theo trung bình cộng và trung bình nhân lần lượt như sau

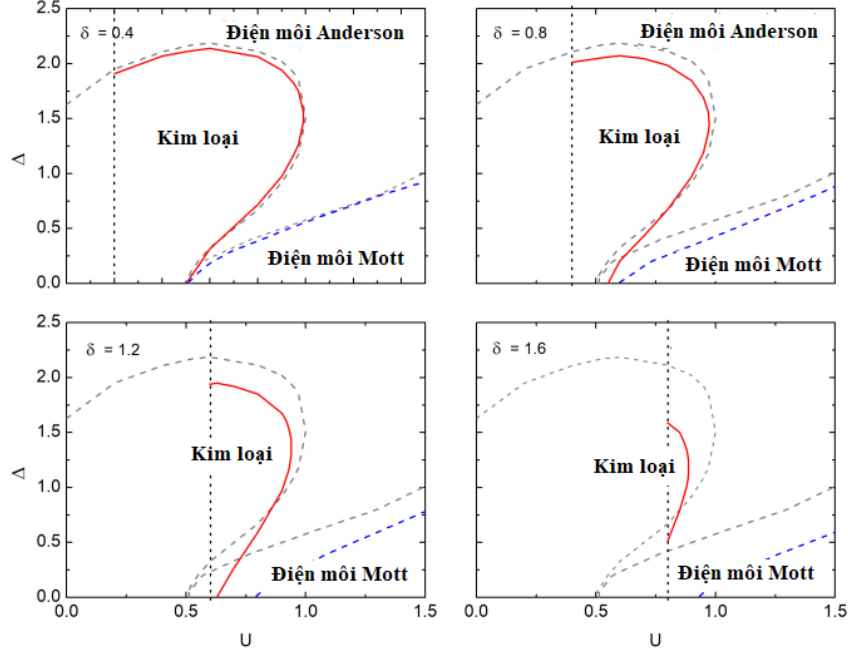
$$\begin{aligned} 1 &= \frac{W^2}{4} \int_0^{\infty} d\varepsilon_i \sqrt{\frac{6}{\pi\Delta}} \frac{1}{\delta} \left[ \frac{U/2 - \delta/4}{(U/2 - \delta/4)^2 - \varepsilon_i^2} - \frac{U/2 + \delta/4}{(U/2 + \delta/4)^2 - \varepsilon_i^2} \right] e^{-\frac{6\varepsilon_i^2}{\Delta^2}} \\ &= \sqrt{\frac{6}{\pi}} \frac{1}{4\Delta\delta} \int_0^{\infty} d\varepsilon_i \left[ \frac{U/2 - \delta/4}{(U/2 - \delta/4)^2 - \varepsilon_i^2} - \frac{U/2 + \delta/4}{(U/2 + \delta/4)^2 - \varepsilon_i^2} \right] e^{-\frac{6\varepsilon_i^2}{\Delta^2}}. \end{aligned} \quad (2.2.6)$$

$$1 = \frac{W^2}{16} \exp \left[ \frac{4}{\Delta\delta} \sqrt{\frac{6}{\pi}} \int_0^{\infty} d\varepsilon_i f(\delta, U, \varepsilon_i) e^{-\frac{6\varepsilon_i^2}{\Delta^2}} \right], \quad (2.2.7)$$

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  $\delta$  các phương trình từ (2.2.6) và (2.2.7) sẽ xác định được giản đồ pha  $\Delta - U$ .

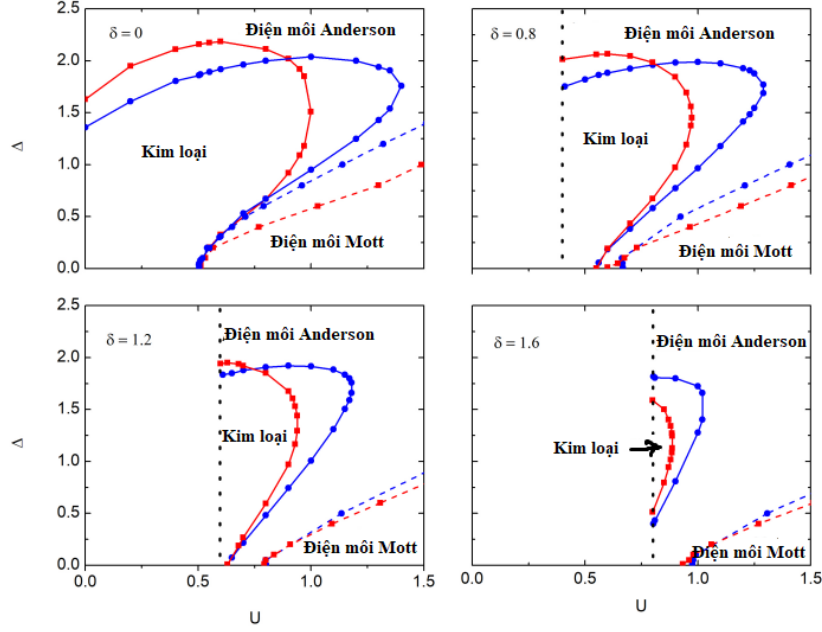




**Hình 2.2.1:** Giản đồ pha cho mô hình AFK cho các giá trị khác nhau của mất trật tự Coulomb. Đường nét liền màu đỏ (nét đứt màu xanh) xác định từ trung bình nhân (trung bình cộng) so sánh với trường hợp  $\delta = 0$  (đường nét đứt màu xám). Đường chấm chấm thẳng đứng  $U = \delta/2$  chia miền của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

## 2.2.2 Kết quả và thảo luận

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, chúng tôi tìm thấy rằng pha kim loại xuất hiện ở miền giá trị nhỏ của  $U$  và  $\Delta$ , điện môi Mott xác định ở miền  $U$  lớn và điện môi Anderson ở miền  $\Delta$  lớn. 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 (2.2.6) - (2.2.7), 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 Carvalho (The European Physical Journal B, 87, 160), tại đó AFK được khảo sát với phân bố đều cho tạp  $P(\varepsilon_i) = \theta(\Delta/2 - |\varepsilon_i|)/\Delta$  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



**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 trong *Carvalho R. D. B., Almeida G. M. A. and Souza M. C., 2014, The European Physical Journal B, 87, 160.* (đường màu xanh nối các hình tròn).

khi  $\delta = 0$ : đối với cả hai hàm phân bố chúng tôi tìm thấy một pha kim loại ở miền cả mất 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.

## 2.3 Kết luận

Như vậy, 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 và AFK một cách tổng thể giản đồ pha thu được 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. Đối với mô hình AFK, 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.

## Chương 3

# Mô hình AH mất cân bằng khối lượng 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.

### 3.1 Mô hình AH mất cân bằng khối lượng

#### 3.1.1 Mô hình và phương pháp tính toán

Hamiltonian của mô hình AH được giải bằng DMFT. Mô hình Anderson Hubbard một tạp với năng lượng phụ thuộc nút  $\varepsilon_i$  có dạng

$$H_{imp} = \sum_{\sigma} (\varepsilon_i - \mu_{\alpha}) n_{i\sigma} + U n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} + \sum_{k\sigma} \varepsilon_{k\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \left( V_{k\sigma} c_{k\sigma}^{\dagger} a_{i\sigma} + V_{k\sigma}^* a_{i\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} \right), \quad (3.1.1)$$

Sau đó chúng tôi sử dụng phương pháp phương trình chuyển động cho mô hình Anderson một tạp (3.1.1) thu được phương trình tương tự như phương trình (2.1.4)

$$G_{\sigma}(\omega, \varepsilon_i) = \frac{1 - \langle n_i \rangle / 2}{\omega - \varepsilon_i + U/2 - \eta_{\sigma}(\omega) + U\eta_{\bar{\sigma}}(\omega)[\omega - \varepsilon_i - U/2 - \eta_{\sigma}(\omega) - 2\eta_{\bar{\sigma}}(\omega)]^{-1}} + \frac{\langle n_i \rangle / 2}{\omega - \varepsilon_i - U/2 - \eta_{\sigma}(\omega) - U\eta_{\bar{\sigma}}(\omega)[\omega - \varepsilon_i - U/2 - \eta_{\sigma}(\omega) - 2\eta_{\bar{\sigma}}(\omega)]^{-1}}, \quad (3.1.2)$$

với  $\eta_{\sigma}(\omega) = t_{\sigma}^2 G_{\sigma}(\omega)$ . Phương trình (3.1.2) có thể thu lại được kết quả cho AFK trong K. Byczuk, 2005 (Metal-insulator transitions in the Falicov-Kimball model with disorder,

Physical Review B, 71, 205105). khi  $r = 0$  và trường hợp AH cân bằng khối lượng  $r = 1$  ( $t_\uparrow = t_\downarrow$ ) trong A. T. Hoang, T. H. Y. Nguyen, D. A. Le, 2019 (Physica B: Condensed Matter, 570, 320-323). Ở giới hạn không mất trật tự  $\varepsilon_i = 0$ , phương trình 3.1.2 quy về phương trình HM cân bằng khối lượng trong A. T. Hoang, T. T. T. Tran and D. A. Le, 2016 (Journal of the Korean Physical Society, 68, 238-242) và I. V. Stasyuk and O. B. Hera, 2005 (The European Physical Journal B, 48, 339-348). Các phương trình tuyến tính hóa DMFT giữa biên của điện môi và kim loại tương tự như chương 2. Đó là hệ hai phương trình tuyến tính cho  $\rho_{\uparrow\alpha}$  và  $\rho_{\downarrow\alpha}$ ,  $\alpha$  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

$$[I_1(U, \Delta) - 1][r^2 I_1(U\Delta - 1)] - [UI_2(U, \Delta)r]^2 = 0 \quad (3.1.3)$$

với  $t_{\uparrow\alpha} = 1$  là đơn vị năng lượng tức  $t_{\downarrow\alpha} = r$ .

$$I_1(U, \Delta) = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} d\varepsilon \frac{\varepsilon^2 + U^2/4 + (1 - n_i)U\varepsilon}{[\varepsilon^2 - U^2/4]^2}, \quad (3.1.4)$$

$$I_2(U, \Delta) = \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} d\varepsilon \frac{U/2 + (1 - n_i)\varepsilon}{[\varepsilon^2 - U^2/4]^2}. \quad (3.1.5)$$

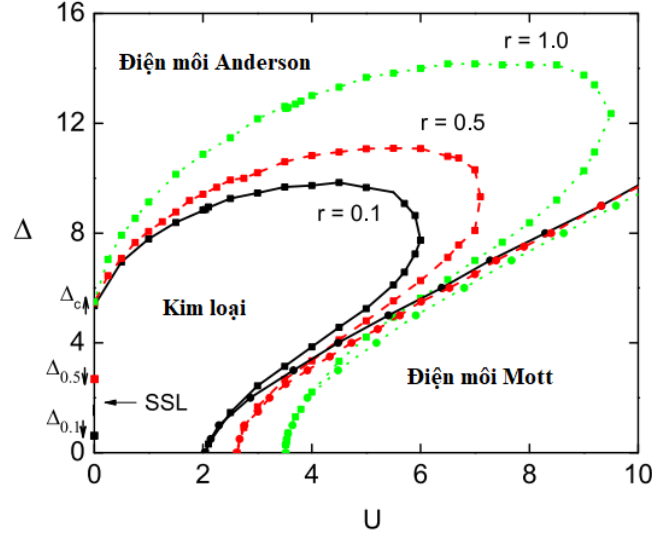
Cặp phương trình cho  $\rho_{\uparrow g}(0)$  và  $\rho_{\downarrow g}(0)$  thu được hệ (xem phụ lục A5)

$$\rho_{\uparrow g}(0) = \exp \left[ \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} \ln \left( \frac{t_\uparrow^2 [\varepsilon^2 + U^2/4 + (1 - n_i)U\varepsilon] \rho_{\uparrow g}(0)}{[\varepsilon^2 - U^2/4]^2} + \frac{Ut_\downarrow^2 [U/2 + (1 - n_i)\varepsilon] \rho_{\downarrow g}(0)}{[\varepsilon^2 - U^2/4]^2} \right) d\varepsilon \right] \quad (3.1.6)$$

$$\rho_{\downarrow g}(0) = \exp \left[ \frac{1}{\Delta} \int_{-\Delta/2}^{\Delta/2} \ln \left( \frac{Ut_\downarrow^2 [U/2 + (1 - n_i)\varepsilon] \rho_{\uparrow g}(0)}{[\varepsilon^2 - U^2/4]^2} + \frac{t_\uparrow^2 [\varepsilon^2 + U^2/4 + (1 - n_i)U\varepsilon] \rho_{\downarrow g}(0)}{[\varepsilon^2 - U^2/4]^2} \right) d\varepsilon \right]. \quad (3.1.7)$$

### 3.1.2 Kết quả và thảo luận

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 (3.1.1) cho  $r = 0.1, 0.5, 1.0$ . 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 tới hạn của độ mất



**Hình 3.1.1:** 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 là đường tại  $U = 0, \Delta_{r\downarrow} < \Delta < \Delta_{c\downarrow}$ .

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  $\Delta$  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  $\rho_{\sigma a}(0) = 0$ . 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  $\Delta$  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.

## 3.2 Mô hình AH có tương tác phụ thuộc vào nút

### 3.2.1 Mô hình và phương pháp tính toán

Hamiltonian của mô hình AH như sau

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

với  $\varepsilon_i$  là biến ngẫu nhiên phân bố theo hàm phân bố đều với  $\Delta$  là độ mất trật tự. 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  $[U - \delta/2; U + \delta/2]$ ,  $U$  là độ lớn tương tác trung bình trên nút,  $\delta$  là độ lớn mất trật tự Coulomb. Ở đây chỉ xem xét tương tác đây  $U_i \geq 0$ , tức là  $U \geq \delta/2$ .

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

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

$$G_\sigma(\omega, \varepsilon_i) = \frac{1 - \langle n_i \rangle / 2}{\omega - \varepsilon_i + U_i/2 - \eta_i(\omega) + U_i \eta_i(\omega) [\omega - \varepsilon_i - U_i/2 - 3\eta_i(\omega)]^{-1}} \quad (3.2.2)$$

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

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  $\eta_i$  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 (3.2.2) trở về phương trình gần đúng Hubbard III cho mô hình Hubbard tại lấp đầy một nửa.

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

$$\rho(\omega, \varepsilon_i, U_i) = -\frac{1}{\pi} \Im G(\varepsilon_i, U_i, \omega). \quad (3.2.3)$$

(i) *Tương tác ngẫu nhiên trên nút*

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

$$\rho_{tbc}(\omega) = \int dU_i \int d\varepsilon P(\varepsilon_i) \tilde{P}(U_i) \rho(\omega, \varepsilon_i, U_i), \quad (3.2.4)$$

$$\rho_{tbn}(\omega) = \exp \left[ \int dU_i \int d\varepsilon P(\varepsilon_i) \tilde{P}(U_i) \ln \rho(\omega, \varepsilon_i, U_i) \right]. \quad (3.2.5)$$

Tiếp theo chúng tôi dẫn ra các phương trình tuyến tính hóa DMFT. 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

$$1 = \frac{W^2}{16\Delta\delta} \int dU_i \int d\varepsilon Y(\varepsilon, U_i), \quad (3.2.6)$$

$$1 = \frac{W^2}{16} \exp \left[ \frac{1}{\Delta\delta} \int dU_i \int d\varepsilon \ln Y(\varepsilon, U_i) \right]. \quad (3.2.7)$$

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

(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

$$\rho_{s,tbc}(\omega) = \int d\varepsilon P(\varepsilon_i) \rho(\omega, \varepsilon_i, U_s), \quad (3.2.8)$$

$$\rho_{s,tbn}(\omega) = \exp \left[ \int d\varepsilon P(\varepsilon_i) \ln \rho(\omega, \varepsilon_i, U_s) \right]. \quad (3.2.9)$$

Hàm Green cho mạng con  $s$  thu được từ biến đổi Hilbert. 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

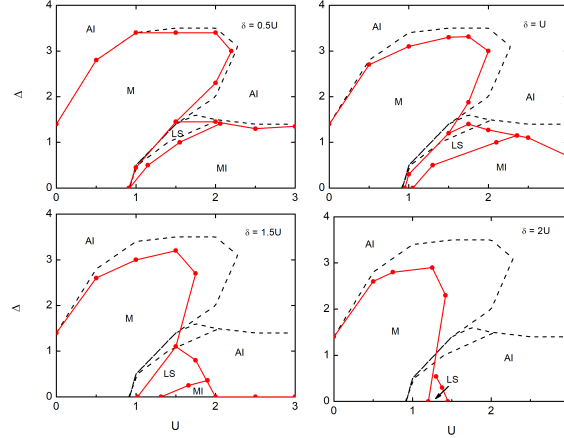
$$1 = \frac{W^2}{16} \exp [I_{tbn}(U_A, U_B, \Delta)], \quad (3.2.10)$$

với  $I_{tbn}(U_A, U_B, \Delta) = \frac{1}{2\Delta} \int d\varepsilon_i \ln [Y_A(\varepsilon_i)Y_B(\varepsilon_i)]$ , là phương trình tuyến tính hóa DMFT với giá trị trung bình nhân, và

$$1 = \frac{W^2}{16} I_{tbc}(U_A, U_B, \Delta), \quad (3.2.11)$$

với  $I_{tbc}(U_A, U_B, \Delta) = \frac{1}{\Delta} [\int d\varepsilon_i Y_A(\varepsilon_i) \int d\varepsilon Y_B(\varepsilon_i)]^{1/2}$ , là phương trình tuyến tính hóa DMFT với giá trị trung bình cộng,  $Y_s(\varepsilon_i) = \frac{\varepsilon_i^2 + 3U_s^2/4 + 2\varepsilon_i U_s(1 - \langle n_i \rangle)}{[\varepsilon_i^2 - U_s^2/4]^2}$ .

### 3.2.2 Kết quả và thảo luận



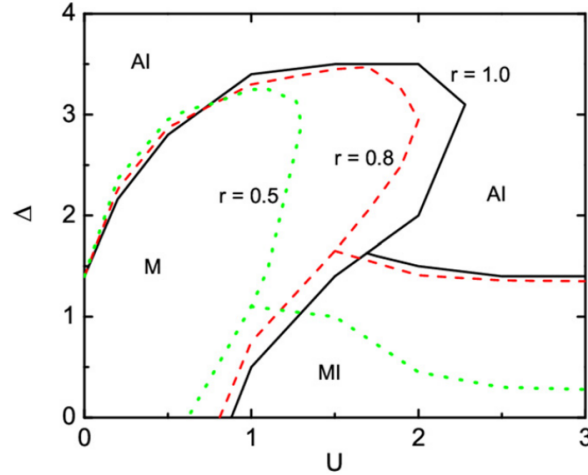
**Hình 3.2.1:** Giản đồ pha cho mô hình AH với độ mất trật tự Coulomb (nét liền) so sánh với trường hợp  $\delta = 0$  (nét đứt). M, AI, MI và LS kí hiệu lần lượt cho pha kim loại, định xứ Anderson, điện môi Mott và định xứ trong khe Mott. Đơn vị năng lượng  $W = 1$ .

(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 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. 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.

(ii) *Tương tác xen kẽ giữa các nút.* Để trình bày kết quả trong trường hợp có thể Coulomb xen kẽ, chúng tôi đặt  $U_B = U$  và  $r = U_B/U_A$  sử dụng tham số  $r$  thỏa mãn:  $0 < r < 1$ . Giản



**Hình 3.2.2:** Giản đồ pha cho mô hình AH tại lấp đầy một nửa có thể tương tác xen kẽ nút mạng khi  $r = 0.5, 0.8$  so sánh với  $r = 1.0$ . M, AI và MI kí hiệu lần lượt cho các pha kim loại, điện môi Anderson và điện môi Mott.

đồ pha trạng thái cơ bản không từ tính là kết quả chính của trường hợp thể Coulomb xen kẽ được thể hiện trên hình (3.2.2) cho  $r = 0.5, 0.8$  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  $r = 1.0$  là hoàn toàn phù hợp với các kết quả thu được bằng TMT-DMFT trong M.C.O. Aguiar, 2009 (Physical Review Letters, 102, 156402), A. T. Hoang, T. H. Y. Nguyen, D. A. Le, 2019 (Physica B: Condensed Matter, 570, 320-323), W. S. Oliveira, M. C. O. Aguiar and V. Dobrosavljevic, 2014 (Physical Review B, 89, 165138) và từ DMFT thống kê D. Semmler, et al., 2011 (Physical Review B, 84, 115113). Có ba pha khác nhau (kim loại, MI, AI) được tìm thấy ở giới hạn  $0 < r < 1$ , nhưng các miền này đã thay đổi: miền kim loại bị thu hẹp lại, miền AI được mở rộng khi  $r$  giảm.

### 3.3 Kết luận

Trong chương 3, (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. Đối với trường hợp  $0 < r < 1$ , 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 bài toán thứ hai, mô hình AH có tương tác phụ thuộc vào nút, chúng tôi cũng tìm thấy rằng, khi độ lớn mất trật tự tăng, miền kim loại và miền điện môi MI bị co lại.

## KẾT LUẬN CHUNG

Trong luận án này, chúng tôi 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 cho thấy giản đồ pha thu được cho mô hình AH và AFK tại lớp đầy một nửa chỉ ra rằng một cách định tính giản đồ pha không phụ thuộc vào cách chọn hàm phân bố cho biến mất trật tự. (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 phân bố 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 ( $r = U_B/U_A$ ), có ba pha khác nhau (kim loại, điện môi Mott, điện môi Anderson) được tìm thấy ở giới hạn  $0 < r < 1$ , 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  $r$  giảm.

# Danh mục các công trình khoa học liên quan đến luận án

1. 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.
2. 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.
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, 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.
5. 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.