

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM
HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ



NGUYỄN DƯƠNG BỘ

HIỆU ỨNG TƯƠNG QUAN ĐA THÀNH PHẦN
TRONG MỘT SỐ MẠNG QUANG HỌC

LUẬN ÁN TIẾN SĨ KHOA HỌC VẬT CHẤT

Hà Nội - Năm 2025

BỘ GIÁO DỤC VÀ ĐÀO TẠO VIỆN HÀN LÂM KHOA HỌC
VÀ CÔNG NGHỆ VIỆT NAM
HỌC VIỆN KHOA HỌC VÀ CÔNG NGHỆ

HIỆU ỨNG TƯƠNG QUAN ĐA THÀNH PHẦN TRONG MỘT SỐ MẠNG QUANG HỌC

Ngành: Vật lý lý thuyết và vật lý toán
Mã số: 9440103

LUẬN ÁN TIẾN SĨ KHOA HỌC VẬT CHẤT

NGƯỜI HƯỚNG DẪN KHOA HỌC
PGS.TS. Trần Minh Tiến

Hà Nội - Năm 2025

LỜI CAM ĐOAN

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

Hà Nội, ngày ... tháng ... năm 2025

Tác giả

Nguyễn Dương Bộ

LỜI CẢM ƠN

Người đầu tiên tôi muốn được bày tỏ lòng biết ơn sâu sắc đến là người thầy tận tâm PGS.TS. Trần Minh Tiến - người đã đưa tôi đến với vật lý của hệ điện tử tương quan mạnh và dẫn dắt tôi trên con đường nghiên cứu khoa học. Thầy là người rất nghiêm khắc trong khoa học, nghiêm túc trong công việc, thân thiện trong cuộc sống và yêu thương học trò bằng cách động viên, chia sẻ khó khăn với học trò, giúp học trò dần tháo gỡ vướng mắc.

Tôi xin cảm ơn PGS.TS. Nguyễn Hồng Quang, cũng là người thầy dẫn dắt tôi từ bước đầu làm nghiên cứu thạc sỹ. Khi làm NCS thầy đã chỉ dẫn và có những gợi ý, động viên trong quá trình viết và hoàn thành luận án.

Tôi xin cảm ơn PGS. TS. Phan Văn Nhâm người bạn đã gắn bó cùng tôi từ những năm 2012 ở Viện Vật lý, bạn đã đọc kỹ lưỡng, đã góp ý chi tiết một số mục trong luận án, để luận án được sát thực và chính xác hơn, hướng dẫn những câu hỏi trong khi trao đổi khoa học. PGS.TS. Phan Văn Nhâm là người tận tâm, chu đáo và có trách nhiệm rất cao với công việc.

Tôi xin cảm ơn TS. Đỗ Thị Hồng Hải, người bạn cùng nghiên cứu từ những năm 2015, TS Hải đã hướng dẫn tỉ mỉ và giúp đỡ trong công tác soạn thảo LaTeX, TS Hải rất chu đáo, tận tình trong công việc, giúp đỡ hết mình trong bất kỳ thời gian nào.

Tôi xin cảm ơn tới Dương Thị Mân cán bộ Trung tâm Vật lý Quốc tế, Trần Thị Thanh Mai cán bộ Trung tâm Vật lý lý thuyết, đã hỗ trợ rất nhiều trong công việc, để tôi dành nhiều thời gian hoàn thành tốt nhất luận án.

Tôi xin cảm ơn Ban Giám đốc, phòng đào tạo Học viện Khoa học và Công nghệ. Phòng sau đại học Viện Vật lý. Trung tâm Vật lý lý thuyết, đã hỗ trợ và tạo điều kiện thuận lợi nhất để tôi hoàn thành các thủ tục bảo vệ luận án.

Tôi xin dành lời biết ơn sâu sắc tới gia đình hai bên nội, ngoại và gia đình nhỏ gồm vợ và các con đã luôn sát cánh bên tôi!

MỤC LỤC

DANH MỤC CHỮ VIẾT TẮT	6
DANH MỤC HÌNH VẼ	10
MỞ ĐẦU	11
1. Tương quan điện tử và lý do chọn đề tài	11
2. Mục tiêu và nội dung nghiên cứu	15
3. Đối tượng nghiên cứu	16
4. Phương pháp nghiên cứu	16
5. Ý nghĩa khoa học và thực tiễn của đề tài	17
6. Những đóng góp mới của luận án	17
7. Cấu trúc của luận án	18
8. Quy ước	18
Chương 1. MÔ PHỎNG LƯỢNG TỬ BẰNG MẠNG QUANG HỌC CỦA CÁC NGUYÊN TỬ CỰC LẠNH.....	19
1.1. Các khí cực lạnh trong mạng quang học	19
1.1.1. Thế năng quang học tuần hoàn	19
1.1.2. Các nguyên tử không tương tác trong mạng tuần hoàn ...	20
1.2. Mô phỏng lượng tử	23
1.2.1. Mô phỏng lượng tử mô hình Hubbard	24
1.2.2. Mô phỏng lượng tử mô hình Falicov-Kimball	27
1.2.3. Ưu điểm và nhược điểm của mô phỏng lượng tử	28
1.3. Kết luận	28
Chương 2. LÝ THUYẾT TRƯỜNG TRUNG BÌNH ĐỘNG ...	30
2.1. Lý thuyết trường trung bình tĩnh	30
2.1.1. Mô hình Hubbard	30
2.1.2. Gần đúng trường trung bình tĩnh	32

2.2. Lý thuyết trường trung bình động.....	33
2.2.1. Giới hạn số chiều không gian vô cùng.....	33
2.2.2. Phương pháp chéo hóa chính xác.....	37
2.2.3. Phương pháp chéo hóa chính xác trong thuật toán giải số DMFT	39
2.3. Kết luận.....	43
Chương 3. CHUYỂN PHA KIM LOẠI-ĐIỆN MÔI MOTT TRONG	
MÔ HÌNH FALICOV-KIMBALL BA THÀNH PHẦN....	44
3.1. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu.....	44
3.2. Mô hình Falicov-Kimball ba thành phần và lý thuyết trường trung bình động.....	47
3.3. Chuyển pha kim loại-điện môi.....	53
3.3.1. Trường hợp cho mật độ số hạt tổng quát.....	53
3.3.2. Trường hợp mật độ số hạt toàn phần bằng $3/2$	58
3.3.3. Trường hợp mật độ số hạt toàn phần bằng 1.....	63
3.4. Kết luận.....	65
Chương 4. CHUYỂN PHA KIM LOẠI-ĐIỆN MÔI TRONG MÔ	
HÌNH HUBBARD BA THÀNH PHẦN KHI CÓ MẤT CÂN	
BẰNG KHỐI LƯỢNG CÁC THÀNH PHẦN.....	68
4.1. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu.....	68
4.2. Mô hình Hubbard ba thành phần và lý thuyết trường trung bình động.....	72
4.3. Chuyển pha kim loại-điện môi.....	76
4.4. Kết luận.....	87
Chương 5. HIỆU ỨNG KONDO TRONG HỆ ĐA THÀNH	
PHẦN CÓ DẢI NĂNG LƯỢNG PHẪNG.....	89
5.1. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu.....	89
5.2. Mô hình.....	91
5.3. Kết quả tính số.....	92

5.4. Kết luận.....	100
5.5. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu.....	101
5.6. Mô hình Anderson tuần hoàn (PAM) trên mạng tinh thể Lieb và gần đúng trường trung bình "boson cầm tù".....	101
5.7. Mạng tinh thể suy giảm.....	107
5.8. Lai hoá đồng đều.....	110
5.8.1. Trường hợp $ \varepsilon_A \geq \varepsilon_B = \varepsilon_C $	111
5.8.2. Trường hợp $ \varepsilon_A < \varepsilon_B = \varepsilon_C $	112
5.8.3. Trường hợp $ \varepsilon_A < \varepsilon_B < \varepsilon_C $	113
5.8.4. Trường hợp $ \varepsilon_B < \varepsilon_A < \varepsilon_C $	113
5.8.5. Trường hợp $ \varepsilon_B < \varepsilon_C \leq \varepsilon_A $	114
5.9. Kết luận.....	114
KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ.....	116
DANH MỤC CÔNG TRÌNH CỦA TÁC GIẢ.....	121
TÀI LIỆU THAM KHẢO.....	122

DANH MỤC CHỮ VIẾT TẮT

Viết tắt	Tiếng Anh	Tiếng Việt
DOS	density of states	mật độ trạng thái
DMFT	dynamical mean field theory	lý thuyết trường trung bình động
ED	exact diagonalization	chéo hoá chính xác
FKM	Falicov-Kimball model	mô hình Falicov-Kimball
FO	free orbital	quỹ đạo tự do
FLM	full local moment	mô men cục bộ toàn phần
FSC	full strong coupling	liên kết mạnh toàn phần
MIT	Metal-insulator transition	chuyển pha kim loại-điện môi
NRG	numerical renormalization group	nhóm tái chuẩn hóa tính số
LDOS	local density of states	mật độ trạng thái cục bộ
LM	local moment	mô men từ cục bộ
QMC	quantum Monte Carlo	mô phỏng Monte Carlo lượng tử
PAM	Anderson model	mô hình Anderson
SC	strong coupling	liên kết mạnh
A-SSC	A - selective strong coupling	Liên kết mạnh chọn lọc loại A
B-SSC	B - selective strong coupling	Liên kết mạnh chọn lọc loại B
C-SSC	C - selective strong coupling	Liên kết mạnh chọn lọc loại C
AB-SSC	AB - selective strong coupling	Liên kết mạnh chọn lọc loại A, B
BC-SSC	BC - selective strong coupling	Liên kết mạnh chọn lọc loại B, C

DANH SÁCH HÌNH VẼ

1.1	Chùm sóng đứng định vị các nguyên tử trong không gian một chiều và ba chiều [15].	20
1.2	Các vùng năng lượng tính cho thể tuần hoàn (1.3) với các giá trị V_0 khác nhau (giá trị V_0 ở phía trên hình vẽ) [16]. . . .	23
1.3	Mô hình Hubbard với các nguyên tử cực lạnh.	25
1.4	Sơ đồ các pha khác nhau có thể tồn tại trong mô hình Hubbard mô phỏng mạng quang học [18]	27
2.1	Giản đồ pha cho mô hình Hubbard tính toán bằng lý thuyết trường trung bình động, ở đây T là nhiệt độ, U là thế tương tác Coulomb, D là nửa độ rộng vùng năng lượng [27].	43
3.1	Giản đồ mật độ số hạt cho MIT. Nét liền biểu thị các giá trị mật độ số hạt của (n, n_f) tăng, mà tại đó MIT có thể xảy ra và nét chấm biểu thị các giá trị mật độ số hạt của (n, n_f) cho sự xuất hiện của MIT nghịch đảo. Điểm chấm đen cho biết giá trị lấp đầy ($n = 3/2, n_f = 1/2$) đối với MIT tái nhập.	54
3.2	Mật độ số hạt linh động nco như là một hàm của thế hóa học μ tại $n_f = 1/2$ đối với các giá trị khác nhau của U_{cc} và $U_{cf} = 2$. Nét chấm biểu thị $n_{c\sigma} = 1/4$, $n_{c\sigma} = 1/2$, và $n_{c\sigma} = 3/4$ ($T = 0.01, D = 1$).	57
3.3	Mật độ số hạt linh động là một hàm của thế hóa μ tại $n_f = 1/2$ đối với các giá trị khác nhau của U_{cc} và $U_{cf} = 0.8$. Nét chấm biểu thị $n_{c\sigma} = 1/2$ ($T = 0.01, D = 1$).	57
3.4	Phần ảo của năng lượng riêng của các hạt nhẹ tại mật độ số hạt toàn phần $n = 3/2$ với các giá trị khác nhau U_{cc} và cố định $U_{cf} = 1.6$. ($T = 0.01, D = 1$).	59

3.5	DOS tại mức độ lấp đầy một nửa cho các giá trị khác nhau của U_{cc} và $U_{cf} = 1.6$. (Hình bên trên) DOS ở mức năng lượng lấp đầy. (Hình bên dưới) DOS ở mức năng lượng thấp ($T = 0.01, D = 1$).	60
3.6	Giải đồ pha tại mật độ số hạt $n_{c\sigma} = n_f = 1/2$. Trong vùng màu xám, cả hai pha kim loại và điện môi cùng tồn tại.	62
3.7	Giải đồ pha ở tại mật độ số hạt $n_{c\sigma} = n_f = 1/3$. ($T = 0.01, D = 1$)	63
3.8	DOS của các hạt nhẹ ở mật độ số hạt $n_{c\sigma} = n_f = 1/3$ với các giá trị khác nhau của U_{cc} và cố định $U_{cf} = 2$. ($T = 0.01, D = 1$).	65
3.9	Mật độ số hạt linh động $n_{c\sigma}$ là một hàm của thế hóa học μ đối với các giá trị khác nhau U_{cc} gần với giá trị chuyển pha U_c và cố định $U_{cf} = 2$. Nét chấm là $n_{c\sigma} = 1/3$. ($T = 0.01, D = 1$).	66
4.1	Tổng mật độ số hạt n , được tính bằng DMFT+ED (các đường liền nét) và bằng DMFT + QMC ($\Delta, 0$) dưới dạng hàm số thế hóa μ đối với các giá trị khác nhau của U trong trường hợp khối lượng cân bằng $\Delta t = 0$, ($T = 0.025t$).	77
4.2	Độ cứ trú đôi dưới dạng hàm số của thế hóa μ , được tính bằng DMFT + ED (các đường liền nét) và bằng DMFT + QMC ($\Delta, 0$) đối với các giá trị tương tác khác nhau của U trong trường hợp khối lượng cân bằng $\Delta t = 0$, ($T = 0.025t$) [19].	78
4.3	Hàm mật độ trạng thái (DOS), được tính bằng DMFT+ED (các đường liền nét) và bằng <i>DMFT+QMC</i> (các dấu tròn) đối với các thế hóa μ khác nhau trong trường hợp khối lượng cân bằng $\Delta t = 0$ ($U = 3t, T = 0.05t$).	79
4.4	Tổng mật độ số hạt n dưới dạng một hàm của thế hóa μ đối với sự mất cân bằng khối lượng dương ($\Delta t > 0$) tại tương tác cố định $U = 4t$ ($T = 0.02t$).	80
4.5	Tổng mật độ hạt số n dưới dạng hàm thế số của thế hóa μ đối với sự mất cân bằng khối lượng âm ($\Delta t < 0$) tại tương tác cố định $U = 2.5t$ ($T = 0.02t$).	81

4.6	Hàm mật độ trạng thái (DOS) của các hạt hai thành phần (đường liền nét màu xanh lam) và của các hạt một thành phần (đường chấm màu đỏ) đối với sự mất cân bằng khối lượng dương ($\Delta t > 0$) tại tổng mật độ số hạt cố định $n = 1$ và tương tác $U = 4t(T = 0.02t)$	82
4.7	Hàm mật độ các trạng thái (DOS) của các hạt hai thành phần (đường liền nét màu xanh lam) và của các hạt một thành phần (đường chấm màu đỏ) đối với sự mất cân bằng khối lượng âm ($\Delta t < 0$) ở tổng mật độ hạt cố định $n = 1$ và tương tác $U = 2.5t(T = 0.02t)$	83
4.8	Số cư trú đôi cùng loại D_{intra} (hình tròn màu đỏ) và số cư trú đôi khác loại D_{inter} (ô vuông màu xanh lam) ở mật độ tổng số hạt cố định $n = 1(T = 0.02t)$	84
4.9	Số cư trú đôi cùng loại D_{intra} (hình tròn màu đỏ) và số cư trú đôi khác loại D_{inter} (ô vuông màu xanh lam) ở mật độ tổng số hạt cố định $n = 1$ và sự mất cân bằng khối lượng khác nhau ($T = 0.02t$).	86
4.10	Giản đồ pha tại tổng mật độ số hạt $n = 1(T = 0.02)$	87
5.1	Cấu trúc mạng tinh thể Lieb.	91
5.2	Đồ thị entropy của tập đóng vai trò như một hàm số đo của nhiệt độ đối với các giá trị khác nhau của α . $U = 0.5, \Gamma = 0.001, \eta = 10^{-9}$	97
5.3	Đồ thị entropy của tập như một hàm số của nhiệt độ đối với các giá trị khác nhau của η . Ở đây xét với $U = 0.5, \Gamma = 0.001, \alpha = -1$	98
5.4	Độ cảm ứng của spin tập như một hàm số của nhiệt độ đối với các giá trị khác nhau của η . Ở đây xét với $U = 0.5, \Gamma = 0.001, \alpha = -1$	99
5.5	Độ cảm ứng của spin tập như một hàm số của nhiệt độ đối với các giá trị khác nhau của α . Ở đây xét với $U = 0.5, \Gamma = 0.001, \eta = 10^{-9}$	99
5.6	Cấu trúc mạng tinh thể Lieb	102

- 5.7 Mạng tinh thể suy giảm có $V_A \equiv V$ và $V_B = V_C = 0$. Hình bên trái: Giảm đồ pha cho các giá trị khác nhau của ε_A (các đường liền nét, đường chấm và nét đứt lần lượt biểu thị cho $\varepsilon_A = -0.05, -0.1$ và -0.2). Hình bên phải: LDOS của các điện tử dẫn (đường liền nét) và tạp từ (đường chấm) tại nút A trong pha SC cho $V^2 = 0.25$ và $\varepsilon_A = -0.1 (T = 0.1)$. Tham số mở rộng $\eta = 10^{-4}$ 107
- 5.8 Mạng tinh thể suy giảm với $V_A = 0$ và $V_B = V_C \equiv V$. Hình bên trái: Giảm đồ pha cho $\varepsilon_B = -0.2, \varepsilon_C = -0.1$. Hình bên phải: LDOS của các điện tử dẫn (đường liền nét) và của tạp chất từ tính (đường chấm) ở nút C trong pha FSC và các pha SSC cho $V^2 = 0.15, \varepsilon_B = -0.2, \varepsilon_C = -0.1$ 109
- 5.9 Lai hoá đồng đều $V_A = V_B = V_C = V$. Hình bên trái: Giảm đồ pha cho $\varepsilon_A = -0.2, \varepsilon_B = \varepsilon_C = -0.1$ (đường liền nét). Đường chấm là ranh giới pha giữa FSC và BC-SSC khi $\varepsilon_A = \varepsilon_B = \varepsilon_C = -0.1$. Hình bên phải: LDOS của điện tử dẫn (đường liền nét) và của tạp từ (đường chấm) tại các nút A và B trong pha FSC cho $V^2 = 0.25, \varepsilon_A = -0.2, \varepsilon_B = \varepsilon_C = -0.1 (T = 0.1)$. Thông số mở rộng $\eta = 10^{-4}$ 110
- 5.10 Giảm đồ pha cho lai hóa đồng đều $V_A = V_B = V_C = V$. Hình bên trái: trường hợp $\varepsilon_A = -0.1, \varepsilon_B = \varepsilon_C = -0.2$. Hình bên phải: trường hợp $\varepsilon_A = -0.05, \varepsilon_B = -0.1, \varepsilon_C = -0.15$ 112
- 5.11 Giảm đồ pha cho lai hóa đồng đều $V_A = V_B = V_C = V$. Hình bên trái: trường hợp $\varepsilon_A = -0.1, \varepsilon_B = -0.05, \varepsilon_C = -0.15$. Hình bên phải: trường hợp $\varepsilon_A = -0.15, \varepsilon_B = -0.05, \varepsilon_C = -0.1$. 113

MỞ ĐẦU

1. Tương quan điện tử và lý do chọn đề tài

Tương quan điện tử là một trong những vấn đề trọng tâm nghiên cứu của vật lý thế kỷ 21 [1-5]. Nếu như điện tử trong kim loại có thể đơn giản được mô tả trong khuôn khổ mô hình điện tử tự do như lý thuyết Sommerfeld cho chất khí Fermi [6] thì các vật liệu đang được quan tâm nghiên cứu hiện nay không thể được mô tả như thế nữa, ví dụ như các chất siêu dẫn nhiệt độ cao, các chất fermion nặng, các chất lỏng spin... [3,4]. Trong các chất như thế tương quan điện tử được cho là đóng vai trò then chốt trong định hình các tính chất vật lý của vật liệu. Các vật liệu tương quan điện tử thể hiện những môi trường phong phú cho các hiện tượng vật lý khác nhau rất hấp dẫn cho các nghiên cứu cơ bản và hứa hẹn đầy triển vọng ứng dụng trong công nghệ vật liệu mới [1-5].

Tương quan điện tử là thể hiện các điện tử có ảnh hưởng với nhau, trong các chất điện môi ở trên, tương quan điện tử không đóng vai trò thiết yếu. Tương quan điện tử thể hiện tính chất giải kết (disentanglement) của hệ. Một hệ điện tử có thể giải kết được là khi hàm mật độ hạt của hai hạt của hệ bằng tích số của các hàm mật độ hạt của từng hạt, khi hai thành phần A và B của một hệ vật lý nào đó tương quan với nhau khi $\langle AB \rangle = \langle A \rangle \langle B \rangle$, trong đó ký hiệu $\langle \dots \rangle$ thể hiện giá trị trung bình của đại lượng vật lý. Hệ điện tử có tương quan là hệ điện tử không giải kết được. Tương quan điện tử mạnh hay yếu tùy thuộc vào mức độ giải kết của hệ. Ví dụ hệ điện tử tương quan như trường hợp gần đúng Hartree-Fock cho chất khí Fermi. Khi đó các điện tử trong gần đúng Hartree-Fock trở nên độc lập với nhau và tương quan với nhau, tựa như trong trường hợp không có tương tác [4]. Do vậy, trong nhiều trường hợp, tương tác Coulomb đủ mạnh cũng tương đương với tương quan điện tử [3,4]. Vật liệu tương quan điện tử là vật liệu mà tương quan điện tử không thể bỏ qua khi xác định các tính chất vật lý của hệ.

Tương quan điện tử được các nhà nghiên cứu vật lý quan tâm, từ giữa thế kỷ 20 khi nghiên cứu về từ tính trong vật liệu và tính chất điện môi, khi lý thuyết dải năng lượng không thể giải thích được [5,7-10]. Khi chất siêu dẫn nhiệt độ cao được khám phá, các nhà nghiên cứu tin tưởng rằng tương quan điện tử là yếu tố quan trọng trong hình thành tính chất vật lý đặc biệt của các chất siêu dẫn nhiệt độ cao [4]. Gần đây, hệ graphene hai lớp xoắn cũng cho thấy vai trò quan trọng của tương quan điện tử [11,12]. Cho đến nay hiệu ứng tương quan điện tử vẫn chưa được hiểu một cách đầy đủ và rõ ràng và vẫn đang là vấn đề được nghiên cứu rất nhiều trên thế giới và ở Việt Nam [1,5].

Về khái niệm đa thành phần ở đây chúng tôi đề cập đến như thành phần spin, thành phần quỹ đạo hay moment góc toàn phần. Tương quan đa thành phần ở đây chúng tôi đề cập đến tương quan của các hạt có số bậc tự do nhiều, dẫn đến nhiều hiệu ứng thú vị. Có thể hiểu chi tiết như sau. Trước đây khi nói đến tương quan điện tử là chủ yếu nói đến tương quan giữa các điện tử với hai thành phần spin, bởi vì trong mạng tinh thể tương tác Coulomb lớn nhất giữa các điện tử là tương tác cục bộ của các điện tử với thành phần spin khác nhau [4]. Tương tác Coulomb cục bộ này là nguyên nhân chính yếu gây ra tương quan điện tử [4]. Tuy nhiên, bên cạnh bậc tự do spin, điện tử còn có các bậc tự do khác như quỹ đạo, hay moment góc toàn phần. Tương tác Coulomb giữa các thành phần quỹ đạo hay moment góc toàn phần cũng dẫn đến hiệu ứng tương quan điện tử [13]. Nhưng do số thành phần của quỹ đạo hay moment góc toàn phần có thể lớn hơn số thành phần spin, do đó tương quan điện tử giữa các thành phần quỹ đạo hay moment góc toàn phần được gọi là tương quan đa thành phần. Tương quan đa thành phần cũng có thể xuất hiện một cách hiệu dụng trong các mạng tinh thể khi có nhiều nguyên tử trong một ô cơ sở. Ví dụ, trong mạng tinh thể tổ ong, ô cơ sở nguyên thủy có hai nguyên tử. Hai nguyên tử trong ô cơ sở nguyên thủy này dẫn đến điện tử biểu hiện như là có thêm bậc tự do quỹ đạo. Trong các nghiên cứu về graphene, bậc tự do có thêm này thường được gọi là "thung lũng" [14]. Về bản chất, nó giống như điện tử thêm bậc tự do quỹ đạo với 2 thành phần do tính chất

đối xứng không gian của mạng và đối xứng đảo ngược thời gian. Nếu như ô cơ sở có n nguyên tử thì điện tử chuyển động trong mạng tinh thể đó tựa như có thêm bậc tự do quỹ đạo n thành phần. Tương tác Coulomb của điện tử giữa các quỹ đạo này cũng tạo ra tương quan điện tử đa thành phần. Gần đây, kỹ thuật làm lạnh nguyên tử ở nhiệt độ cực thấp đạt được nhiều tiến bộ lớn, dẫn đến khả năng chế tạo các mạng tinh thể nhân tạo mà có thể mô phỏng các mô hình tương quan điện tử với số thành phần có thể lớn hơn 2 [15,16]. Từ đây mở ra khả năng nghiên cứu hiệu ứng tương quan đa thành phần. Khác với tương quan đa thành phần của điện tử với bậc tự do quỹ đạo hay trong mạng tinh thể có nhiều nguyên tử trong một ô cơ sở, thông thường có số thành phần là chẵn do luôn có bậc tự do spin bằng 2, số thành phần trong mạng quang học có thể là số lẻ [15,16]. Do vậy hiệu ứng tương quan đa thành phần trong mạng quang học có thể là số lẻ hay số chẵn, tùy theo mục tiêu nghiên cứu.

Chúng ta biết rằng tương quan điện tử có thể tạo ra các hiệu ứng vật lý khác nhau như trạng thái điện môi Mott, hiệu ứng Kondo, các trạng thái có trật tự tầm xa [1-5]. Các hiệu ứng đó trong các hệ tương quan đa thành phần cũng được quan tâm nghiên cứu rất nhiều [15]. Chuyển pha kim loại-điện môi Mott do tương quan đa thành phần trong hệ tương quan ba thành phần đã được quan tâm nghiên cứu ngay sau khi chuyển pha kim loại-điện môi Mott trong mạng quang học hai thành phần được nghiên cứu [17-20]. Khác với chuyển pha kim loại-điện môi Mott trong hệ hai thành phần, chuyển pha kim loại-điện môi Mott trong hệ ba thành phần có các loại khác nhau, xảy ra cả ở mật độ số hạt thông ước lẫn không thông ước, phụ thuộc vào đặc điểm của hệ như tương tác Coulomb cục bộ giữa các thành phần bằng nhau hay khác nhau [19-20] (mật độ số hạt được gọi là thông ước (commensurate) khi trạng thái mà các hạt sắp xếp theo một trật tự tuần hoàn với chu kỳ tỉ lệ với hằng số mạng. Mật độ số hạt không thông ước (incommensurate) là trạng thái mà các hạt sắp xếp không có một chu kỳ hoặc có chu kỳ không tỉ lệ với hằng số mạng). Tuy vậy các nghiên cứu chuyển pha kim loại-điện môi Mott này chưa nghiên cứu ở các hệ có khối lượng của các thành phần khác nhau. Hiệu ứng của

mất cân bằng khối lượng lên chuyển pha kim loại-điện môi Mott là một vấn đề được quan tâm nghiên cứu khá nhiều, đặc biệt trong hệ hai thành phần, nhưng vẫn chưa được nghiên cứu trong hệ ba thành phần. Do vậy, một trong những nội dung nghiên cứu của luận án là nghiên cứu hiệu ứng của mất cân bằng khối lượng lên chuyển pha kim loại-điện môi trong hệ tương quan ba thành phần.

Bên cạnh trạng thái điện môi Mott, hiệu ứng Kondo là trường hợp kinh điển khác của hiệu ứng tương quan điện tử [4,21-26]. Do có tương quan điện tử mà điện tử linh động với tạp từ tạo thành cặp đơn tuyến Kondo, và dẫn đến hiệu ứng Kondo, thể hiện điện trở của hệ có điểm cực tiểu theo nhiệt độ, tức là khi nhiệt độ giảm, điện trở của hệ đầu tiên giảm theo nhiệt độ, nhưng đến một nhiệt độ nhất định, điện trở ngừng giảm và bắt đầu tăng khi nhiệt độ giảm [4,22]. Hiệu ứng Kondo đóng vai trò quan trọng trong các kim loại có pha tạp từ, trong các hệ fermion nặng, trong các chấm lượng tử và trong cả lý thuyết chuyển pha kim loại-điện môi Mott. Lý thuyết chuyển pha kim loại-điện môi Mott dựa trên cơ sở của lý thuyết trường trung bình động, trong đó hiệu ứng Kondo đóng vai trò then chốt [27-29]. Trong lý thuyết chuyển pha kim loại-điện môi Mott vòng, cặp đơn tuyến Kondo được hình thành và biến mất tại điểm chuyển pha. Do vậy để hiểu rõ hơn về bản chất chuyển pha kim loại-điện môi Mott trong hệ tương quan đa thành phần, hiệu ứng Kondo trong hệ tương quan đa thành phần cũng cần được nghiên cứu. Về lý thuyết, hiệu ứng Kondo có thể giải chính xác [21] chẳng hạn bằng phương pháp nhóm tái chuẩn hóa tính số [23-24]. Hiệu ứng Kondo gần như đã được nghiên cứu gần hết trong các hệ kim loại có pha tạp từ mà hệ thức tán sắc của điện tử linh động phụ thuộc vào động lượng theo các bậc lũy thừa khác nhau [25].

Gần đây hiệu ứng Kondo phân tử được khám phá ra trong các hệ có hệ thức tán sắc không phụ thuộc vào động lượng [26]. Các hệ như vậy có dải năng lượng phẳng và hiệu ứng Kondo trong hệ như vậy có tính chất như hiệu ứng Kondo trong phân tử [4]. Tuy vậy, trong hệ có dải năng lượng phẳng, hệ không phải chỉ có một thành phần tạo ra dải năng lượng phẳng, mà còn có các thành phần khác, tạo ra các dải năng lượng khác có hệ thức

tán sắc kiểu khác [26]. Trong hệ đa thành phần như vậy, hiệu ứng Kondo của các thành phần khác nhau có thể cạnh tranh lẫn nhau và bức tranh hiệu ứng Kondo có thể rất khác nhau. Đây cũng chính là nội dung nghiên cứu khác của luận án. Ở nội dung này, luận án nghiên cứu hiệu ứng Kondo trong hệ đa thành phần, và hiệu ứng Kondo trên mạng tạp từ vì có thể tạo ra bằng mạng quang học.

Tóm lại trong luận án này chúng tôi nghiên cứu hiệu ứng tương quan đa thành phần trong mạng quang học, nhưng chủ yếu tập trung nghiên cứu hiệu ứng mất cân bằng khối lượng lên chuyển pha kim loại-điện môi do tương quan điện tử trong hệ ba thành phần và hiệu ứng Kondo trong hệ ba thành phần trong mạng quang học.

2. Mục tiêu và nội dung nghiên cứu

Mục tiêu nghiên cứu của luận án tập trung vào ba vấn đề chính về hiệu ứng tương quan đa thành phần trong mạng quang học. Cụ thể ba mục tiêu chính đó là:

1. Nghiên cứu chuyển pha kim loại-điện môi Mott trong hệ tương quan ba thành phần khi mất cân bằng khối lượng đạt cực đại. Hệ tương quan ba thành phần như vậy có thể được mô tả bằng mô hình Falicov-Kimball ba thành phần. Luận án sẽ nghiên cứu điều kiện tồn tại cho chuyển pha kim loại-điện môi, và các đặc điểm của chuyển pha đó.
2. Nghiên cứu chuyển pha kim loại-điện môi Mott trong hệ tương quan ba thành phần khi có mất cân bằng khối lượng. Khác với nội dung nghiên cứu trước, mất cân bằng khối lượng ở nội dung này là hữu hạn. Mô hình mô tả hệ tương quan ba thành phần như vậy là mô hình Hubbard ba thành phần với thông số nhảy nút khác nhau. Luận án sẽ nghiên cứu điều kiện tồn tại và tính chất của chuyển pha kim loại-điện môi khi có sự mất cân bằng khối lượng.
3. Nghiên cứu hiệu ứng Kondo một tạp từ và nhiều tạp từ trong hệ ba thành phần thể hiện qua mạng Lieb có thể tạo ra nhờ quang học.

Luận án sẽ nghiên cứu sự cạnh tranh lẫn nhau giữa hiệu ứng Kondo phân tử và hiệu ứng Kondo khe mềm có thể tồn tại trong mạng Lieb, cũng như các hiệu ứng liên kết mạnh có thể xảy ra khi các tạp từ có mặt trong toàn bộ mạng Lieb.

3. Đối tượng nghiên cứu

Đối tượng nghiên cứu là các mô hình lượng tử ba thành phần với tương tác cục bộ giữa chúng có thể được mô phỏng lượng tử bằng mạng quang học.

4. Phương pháp nghiên cứu

Chuyển pha kim loại-điện môi trong hệ tương quan ba thành phần được nghiên cứu bằng lý thuyết trường trung bình động. Lý thuyết trường trung bình động là một dạng lý thuyết trường trung bình [27-29] khác với trường trung bình thông thường, hay còn gọi là lý thuyết trường trung bình tĩnh. Lý thuyết trường trung bình động tính được đầy đủ tương quan điện tử cục bộ, nhưng nó không tính được hết tương quan điện tử phi cục bộ [27-29]. Ở giới hạn số chiều không gian vô cùng, lý thuyết trường trung bình động cho kết quả chính xác đối với tương tác Coulomb cục bộ [27-29]. Lý thuyết trường trung bình động rất thành công trong nghiên cứu chuyển pha kim loại-điện môi Mott, cũng như trong nghiên cứu các hiệu ứng tương quan điện tử [27-29].

Đối với hiệu ứng Kondo trong mô hình ba thành phần thể hiện qua mạng Lieb, khi có một tạp từ, luận án sử dụng phương pháp tái chuẩn hóa tính số [24-26]. Đây là phương pháp tính toán có thể nói là chính xác. Do vậy nó cho kết quả tin cậy. Nhưng trong trường hợp có nhiều tạp từ, phương pháp này cho đến nay vẫn chưa áp dụng được. Do vậy khi nghiên cứu nhiều tạp từ trong mạng Lieb chúng tôi sử dụng phương pháp Boson cầm tù và gần đúng trường trung bình tĩnh [4]. Phương pháp Boson cầm tù là phương pháp được sử dụng rộng rãi trong nghiên cứu tương quan điện

tử ở giới hạn tương tác Coulomb cục bộ lớn [4]. Về nguyên tắc, phương pháp Boson cầm tù cho kết quả chính xác nếu điều kiện ràng buộc thỏa mãn. Tuy vậy, trong gần đúng trường trung bình tĩnh, điều kiện ràng buộc chỉ thỏa mãn ở gần đúng trung bình [4]. Do vậy, kết quả nghiên cứu sẽ chỉ ở mức độ gần đúng trường trung bình. Gần đúng này cũng được thường xuyên sử dụng khi nghiên cứu hiệu ứng Kondo trong mạng tinh thể.

5. Ý nghĩa khoa học và thực tiễn của đề tài

Tương quan điện tử là vấn đề nghiên cứu trọng tâm của vật lý thế kỷ 21 với kỳ vọng khám phá ra bản chất của các hiệu ứng vật lý khác nhau do tương quan điện tử điều khiển [1-5]. Thế giới kỳ vọng rằng, các hiệu ứng tương quan điện tử sẽ đóng vai trò then chốt trong nghiên cứu và ứng dụng phát triển các linh kiện điện tử thế hệ mới, thay thế cho các linh kiện điện tử truyền thống của thế kỷ 20. Luận án đóng góp hiểu biết về các hiệu ứng tương quan đa thành phần trong các mạng quang học. Các mô hình nghiên cứu trong luận án về bản chất có thể mô phỏng lượng tử thông qua chế tạo các mạng quang học. Do vậy các kết quả nghiên cứu trong luận án cũng có thể thu hút sự chú ý của các nghiên cứu thực nghiệm để mô phỏng lượng tử các hiệu ứng tương quan tìm thấy trong luận án. Tuy vậy, đó cũng là những thách thức không đơn giản đối với nghiên cứu thực nghiệm.

6. Những đóng góp mới của luận án

Luận án có những đóng góp mới sau:

- Luận án đã tìm ra điều kiện tồn tại của chuyển pha kim loại-điện môi trong mô hình Falicov-Kimball ba thành phần. Đặc biệt, luận án đã tìm ra ba loại chuyển pha kim loại-điện môi khác nhau phụ thuộc vào mật độ số hạt và tương tác Coulomb cục bộ giữa các thành phần. Đó là chuyển pha kim loại-điện môi chọn lọc loại hạt, chuyển pha kim loại-điện môi thông ước và chuyển pha kim loại-điện môi nghịch đảo.

- Luận án đã tìm ra tác động của mất cân bằng khối lượng lên chuyển pha kim loại-điện môi trong hệ tương quan ba thành phần. Đặc biệt, luận án đã khám phá ra chuyển pha kim loại-điện môi do mất cân bằng khối lượng điều khiển.
- Luận án đã tìm ra các loại liên kết mạnh khác nhau trong hệ Kondo đa thành phần và sự cạnh tranh lẫn nhau giữa chúng. Cụ thể, tùy thuộc vào thông số của mô hình, các trạng thái liên kết mạnh chọn lọc một loại thành phần hay hai loại thành phần có thể xảy ra. Tuy vậy, ở nhiệt độ thấp chỉ có trạng thái liên kết mạnh chọn lọc hai thành phần hay toàn bộ các thành phần là có thể xảy ra. Luận án này cũng chỉ ra cơ chế xảy ra hiệu ứng Kondo liên kết mạnh chọn lọc là do hiệu ứng Kondo phân tử, do dải năng lượng phẳng chi phối ở nhiệt độ thấp.

7. Cấu trúc của luận án

Trong luận án này, ngoài phần mở đầu và phần kết luận thì sẽ có 5 chương. Ở chương 1 chúng tôi trình bày tổng quan về mạng quang học và khả năng sử dụng mạng quang học mô phỏng các mô hình tương quan hai hoặc nhiều thành phần. Chương 2 trình bày phương pháp nghiên cứu trong luận án. Đó là phương pháp gần đúng trường trung bình ở hai dạng: trường trung bình tĩnh và trường trung bình động. Chương 3 trình bày nghiên cứu về chuyển pha kim loại-điện môi trong mô hình FalicovKimball ba thành phần. Trong chương 4 trình bày về chuyển pha kim loại-điện môi khi có mất sự mất cân bằng khối lượng trong mô hình Hubbard ba thành phần. Chương 5 là nghiên cứu về hiệu ứng liên kết Kondo mạnh, chọn lọc trong mô hình Anderson ba thành phần thể hiện qua mạng Lieb.

8. Quy ước

Trong luận án này chúng tôi sử dụng hệ đơn vị tự nhiên với các hằng số cơ bản $c = \hbar = k_B = 1$ [30,31].

Chương 1

MÔ PHỎNG LƯỢNG TỬ BẰNG MẠNG QUANG HỌC CỦA CÁC NGUYÊN TỬ CỰC LẠNH

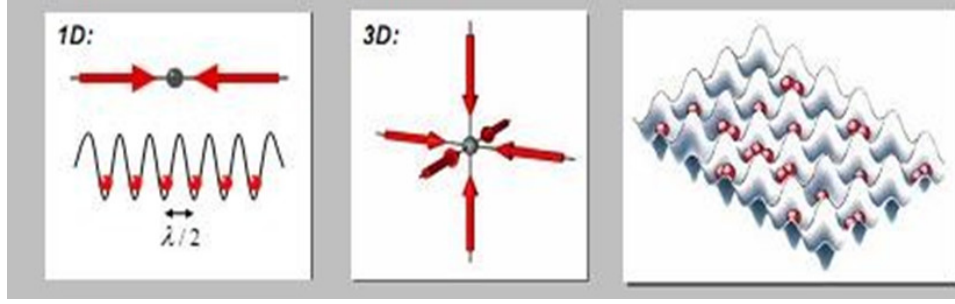
Trong chương này, chúng tôi trình bày về lý thuyết khí cực lạnh trong mạng quang học, các thể năng quang học, các mô phỏng lượng tử, những nội dung nghiên cứu đặt ra trong luận án. Có nhiều tài liệu viết tổng quan về mô hình Hubbard và mô hình Falicov-Kimball chúng tôi tham khảo các tài liệu đó khi viết chương này [16].

1.1. Các khí cực lạnh trong mạng quang học

1.1.1. Thể năng quang học tuần hoàn

Mạng quang học là một cấu trúc ánh sáng, được sử dụng để giữ và điều khiển các nguyên tử trung hòa đã được làm lạnh, trước tiên dùng một bẫy quang tử và sau đó sử dụng các kỹ thuật laser khác, tiếp tục làm lạnh xuống nhiệt độ cực thấp khoảng μK hay thấp hơn, để tạo ra cấu trúc tuần hoàn giống như mạng tinh thể [15]. Một trong các kỹ thuật đó là sử dụng giao thoa của hai chùm tia laser ngược chiều. Sự giao thoa của hai chùm tia laser ngược chiều tạo thành sóng đứng quang học với khoảng cách giữa hai đỉnh sóng liên tiếp bằng nửa bước sóng ($\lambda_L/2$), có thể bẫy và định vị các nguyên tử trong không gian theo một cấu trúc tuần hoàn. Bằng cách sử dụng nhiều cặp các chùm tia laser, người ta có thể tạo ra được mạng tuần hoàn một, hai và ba chiều (Hình 1.1).

Thể tuần hoàn trong mạng quang học thu được từ hiệu ứng Stark [15]. Khi có một điện trường phụ thuộc tuần hoàn trong không gian, điện tử trong nguyên tử dịch chuyển và tạo thành một moment lưỡng cực d_i theo chiều i ($i = x, y, z$),



Hình 1.1: Chùm sóng đứng định vị các nguyên tử trong không gian một chiều và ba chiều [15].

$$d_i = \sum_{j=x,y,z} \alpha_{ij}(\omega_L) E_j(\vec{r}, t), \quad (1.1)$$

trong đó ω_L là tần số của laser, $\alpha_{ij}(\omega_L)$ là tensor phân cực và $E_j(\vec{r}, t)$ là điện trường của laser theo chiều j . Moment lưỡng cực này lại tương tác với chính điện trường của laser và tạo ra sự dịch chuyển năng lượng

$$\Delta E(\vec{r}) = \sum_{i,j=x,y,z} \alpha_{i,j}(\omega_L) \langle E_j(\vec{r}, t) E_i(\vec{r}, t) \rangle \alpha \frac{I(\vec{r})}{\Delta}. \quad (1.2)$$

Trong đó Δ được gọi là sự điều hướng laser và $I(\vec{r})$ chính là cường độ laser. $\langle E_j(\vec{r}, t) E_i(\vec{r}, t) \rangle$ là trung bình theo thời gian. Thế tuần hoàn trong mạng mà các nguyên tử cảm nhận chính là $V(\vec{r}) = \Delta E(\vec{r})$, và tính tuần hoàn của thế trong không gian chính là tính chất tuần hoàn của chùm laser tạo thành mạng quang học.

1.1.2. Các nguyên tử không tương tác trong mạng tuần hoàn

Để đơn giản ta xét trường hợp một chiều. Giả sử thế tuần hoàn trong mạng quang học một chiều có dạng:

$$V(x) = V_0 \sin^2(k_L x) = \frac{V_0}{2} (1 - \cos(2k_L x)) = \frac{V_0}{2} - \frac{V_0}{4} e^{i2k_L x} - \frac{V_0}{4} e^{-i2k_L x}. \quad (1.3)$$

Trong đó, $k_L = \frac{2\pi}{\lambda_L}$ là vector sóng của laser, được sử dụng để tạo thành các sóng đứng quang học, còn V_0 đặc trưng cho độ sâu của thế. V_0 thường được tính bằng đơn vị E_r được gọi là năng lượng giật (recoil energy), tức

là năng lượng mà nguyên tử thu được khi nó hấp thụ một photon có vector sóng k_L và năng lượng $E_r = \frac{k_L^2}{2m}$ (m là khối lượng nguyên tử). Chuyển động của các nguyên tử trong các thể tuần hoàn có thể được mô tả bằng hàm sóng Bloch với vector q và chỉ số vùng năng lượng. Tính chất tuần hoàn của thế $V(x)$ xác định cấu trúc tuần hoàn của mạng. Chu kỳ tuần hoàn của mạng chính là thông số mạng $a = \frac{\lambda_L}{2} = \frac{\pi}{k_L}$. Vùng Brillouin đầu tiên dải từ $-k_L$ đến k_L , khi đó vector sóng được giới hạn $-k_L \leq q \leq k_L$. Theo định lý Bloch, hàm sóng của nguyên tử trong thể tuần hoàn có dạng

$$\psi_{\vec{q}}(\vec{r}) = u_{\vec{q}}(\vec{r})e^{i\vec{q}\vec{r}}, \quad (1.4)$$

trong đó $u_{\vec{q}}(\vec{r})$ là một hàm sóng tuần hoàn trong không gian $u_{\vec{q}}(\vec{r}) = u_{\vec{q}}(\vec{r} + n\vec{a})$, với $\vec{a}$ là các vector cơ sở tuần hoàn của thể tuần hoàn, $\vec{q}$ là vector sóng, xác định trong không gian mạng đảo. Trong hệ đơn vị tự nhiên $\vec{q}$ cũng là động lượng tinh thể, hay gọi tắt là động lượng. Phương trình Schrodinger cho nguyên tử trong hệ tuần hoàn khi áp dụng định lý Bloch có dạng

$$\left[\frac{(\hat{p} + \hat{q})^2}{2m} + V(x) \right] u_{n,\vec{q}} = E_n(\vec{q})u_{n,\vec{q}}. \quad (1.5)$$

Ở đây, chỉ số n chỉ các nghiệm khác nhau có thể tồn tại của phương trình trị riêng. $E_n(\vec{q})$ được gọi là dải năng lượng của nguyên tử trong thể tuần hoàn.

Trước tiên, chúng ta xét cấu trúc dải năng lượng của nguyên tử trong thể tuần hoàn ở một số giới hạn.

a. Trường hợp tầm thường $V_0 = 0$

Khi không có thể tuần hoàn phương trình (1.5) cho nghiệm

$$E_n(q) = \frac{p^2}{2m} = \frac{(q + j2k_L)^2}{2m},$$

trong đó $j = \pm n$.

Ví dụ một vài trường hợp đầu

$$\begin{aligned} n = 0 & \quad E_0(q) = \frac{p^2}{2m} = \frac{p^2}{k_L^2} E_n; U_{0,q}(x) = 1, \\ n = 1 & \quad E_1(q) = \frac{(q \pm 2k_L)^2}{2m}; U_{1,q}(x) = e^{\pm 2ik_L x}, \\ n = 2 & \quad E_2(q) = \frac{(q \pm 4k_L)^2}{2m}; U_{2,q}(x) = e^{\pm 4ik_L x}. \end{aligned}$$

b. Trường hợp không tầm thường $V_0 > 0$

Chúng ta tìm nghiệm dưới dạng

$$\psi_q(x) = \sum_j \alpha_j \cdot e^{i(q+j\frac{2\pi}{a})x} = \sum_j \alpha_j(q) e^{i(q+j2k_L)x}, \quad (1.6)$$

từ phương trình (1.5) ta thu được

$$\left[\frac{(q+2jk_L)^2}{2m} + \frac{V_0}{2} - E_n(q) \right] \alpha_j(q) - \frac{V_0}{4} \alpha_{j-1}(q) - \frac{V_0}{4} \alpha_{j+1}(q) = 0, \quad (1.7)$$

phương trình này không phải là phương trình giải tích được, nhưng nếu ($V_0 \ll E_r$), nghiệm của phương trình gần với trường hợp nghiệm tự do khi $V_0 = 0$, ngoại trừ ở lân cận các điểm giao cắt giữa các dải năng lượng tự do. Khi đó $E_n(q) = \frac{(q \pm 2k_L)^2}{2m}$ khi $q \neq \pm 2k_L$, xét trường hợp $n = 0$ và $n = 1$ khi $q = \pm 2k_L$, chúng ta có Hamiltonian sau.

$$H = \begin{pmatrix} E_r + \frac{V_0}{2} & -\frac{V_0}{4} \\ -\frac{V_0}{4} & E_r + \frac{V_0}{2} \end{pmatrix} = \left(E_r + \frac{V_0}{2} \right) \hat{1} - \frac{V_0}{4} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (1.8)$$

với $V(r)$ là thế liên kết trạng thái có động lượng p với trạng thái có động lượng $p \pm 2k_L$. Hamiltonian trên cho nghiệm $\psi_{0k_L} \sim \cos(k_L x)$ và $\psi_1(x) \sim \sin(k_L x)$ với các trị riêng

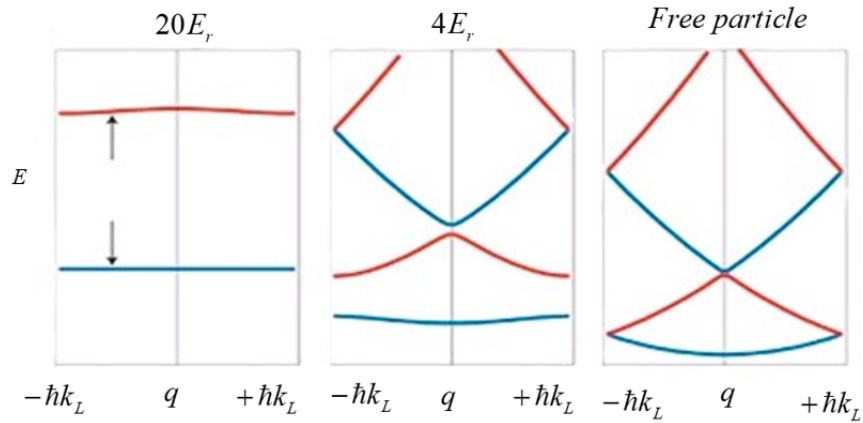
$$\begin{aligned} E &= E_r + \frac{V_0}{2} \pm \frac{V_0}{4}, \\ E_0 &= E_r + \frac{V_0}{4}, \\ E_1 &= E_r + \frac{3V_0}{4}. \end{aligned}$$

Trong trường hợp thế tuần hoàn rất sâu ($V_0 \gg E_r$), hàm sóng sẽ định xứ quanh các nút mạng tuần hoàn và dải này là dải năng lượng đầu tiên, giống như năng lượng trạng thái tại đáy của dao động tử điều hòa quanh mỗi hố thế của mạng. Khi x gần 0 chúng ta có

$$V(x) = V_0 \sin^2(k_L x) \approx V_0 k_L^2 x^2 = \frac{1}{2} m \omega_0^2 x^2, \quad (1.9)$$

trong đó $\omega_0 = \sqrt{2 \frac{V_0}{2m}} = 2\sqrt{V_0 E_r}$ là tần số điều hòa. Dải năng lượng thu được gần như phẳng, tức là không phụ thuộc vào động lượng, với

$E_n(q) \approx (n + \frac{1}{2}) \omega_0$. Hàm sóng Bloch là chồng chập của các hàm tại mỗi nút mạng. Tuy nhiên, trong thực nghiệm bên cạnh thể tuần hoàn còn có thể giam cầm, để giữ các nguyên tử trong mạng quang học. Mặc dù thể giam cầm này thường là nhỏ so với thể tuần hoàn tại một nút mạng, nhưng nó vẫn tạo ra sự không đồng đều trong mạng quang học. Đây là điểm cần lưu ý khi so sánh kết quả thực nghiệm với tính toán lý thuyết, khi chỉ có thể tuần hoàn được tính tới. Từ Hình 1.2 chúng ta có thể thấy rằng đối với một thể tuần hoàn có biên độ V_0 lớn cỡ vài chục E_r ($20E_r$) các dải năng lượng thấp, tách hẳn ra và trạng thái riêng của các hạt trở nên định xứ trong mỗi nút mạng. Với V_0 cỡ vài E_r , các dải năng lượng nằm bên dưới V_0 tách ra khỏi các dải khác. Do vậy, chỉ có nguyên tử ở dải thấp nhất có thể xem là định xứ.



Hình 1.2: Các vùng năng lượng tính cho thể tuần hoàn (1.3) với các giá trị V_0 khác nhau (giá trị V_0 ở phía trên hình vẽ) [16].

1.2. Mô phỏng lượng tử

Mô phỏng lượng tử là tạo ra một hệ vật lý bằng thực nghiệm mà các trạng thái của nó là các trạng thái lượng tử của một mô hình lý thuyết cho trước [15]. Ví dụ, mô phỏng lượng tử mô hình Hubbard, là tạo ra một hệ vật lý bằng thực nghiệm, mà các trạng thái của hệ được mô tả bằng mô hình Hubbard. Mô phỏng lượng tử khác với mô phỏng thông thường

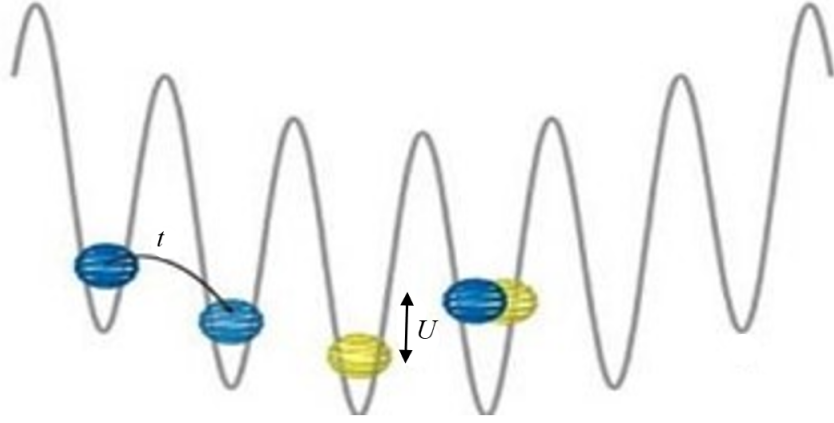
trên máy tính như mô phỏng Monte Carlo, hay mô phỏng động lực học phân tử, ở chỗ các mô phỏng thông thường dùng máy tính để mô tả động lực học của hệ bằng các quá trình ngẫu nhiên hay tuân theo các phương trình động lực học của hệ. Mô phỏng lượng tử là các hệ vật lý thực thụ với các trạng thái lượng tử được xác định trước.

Mô phỏng lượng tử bằng mạng quang học có thể mô phỏng hệ các hạt fermion, boson hay hỗn hợp của chúng. Các hạt fermion được mô phỏng bằng các nguyên tử có spin bán nguyên, còn các hạt boson được mô phỏng bằng các nguyên tử có spin nguyên. Ví dụ đồng vị nguyên tử ${}^6\text{Li}$ có spin hạt nhân bằng 1 và một điện tử ở ngoài lớp vỏ nguyên tử, do vậy spin của đồng vị ${}^6\text{Li}$ là bán nguyên và nó có thể dùng để mô phỏng hạt fermion. Ngược lại đồng vị ${}^7\text{Li}$ có spin nguyên vì spin hạt nhân của ${}^7\text{Li}$ bằng $3/2$, và có thể dùng để mô phỏng hạt boson. Số thành phần của hạt mô phỏng phụ thuộc vào số các đa tuyến (multiplet) trong cấu trúc siêu tinh tế của nguyên tử được sử dụng để mô phỏng. Ví dụ, đồng vị của nguyên tử ${}^{40}\text{K}$ có spin bán nguyên có thể sử dụng để mô phỏng hạt fermion. Có thể sử dụng hai trạng thái siêu tinh tế ở trạng thái $|F = 9/2, m_F = -9/2\rangle$ và $|F = 9/2, m_F = -7/2\rangle$ để mô phỏng hạt fermion hai thành phần, tương tự như điện tử có hai thành phần spin. Khi tải các nguyên tử fermion với hai trạng thái đa tuyến vào mạng quang học, chúng ta có thể mô phỏng lượng tử mạng tinh thể cho các điện tử chuyển động trong đó.

1.2.1. Mô phỏng lượng tử mô hình Hubbard

Gần đây, người ta có thể tạo ra mô hình Hubbard cho các hạt fermion bằng cách tải các nguyên tử fermion vào một trường thế tuần hoàn của mạng quang học [15-19]. Điều này giúp vật lý nghiên cứu nguyên tử và vật lý các hệ đông đặc tương hỗ lẫn nhau trong nghiên cứu. Đối với hố thế đủ lớn, các nguyên tử có thể định xứ tại các điểm cực tiểu của thế quang học và sự chuyển động của các nguyên tử giữa các điểm cực tiểu đó là do hiệu ứng xuyên hầm (xem Hình 1.3).

Khí nguyên tử có hai thành phần, và hai nguyên tử có thành phần khác nhau cư trú trong một điểm cực tiểu của thế tuần hoàn chúng sẽ tương tác



Hình 1.3: Mô hình Hubbard với các nguyên tử cực lạnh.

với nhau. Nguyên tử fermion bị giam giữ trong hố thế ở mức năng lượng thấp nhất của mạng quang học, t là xác suất nhảy nút. Theo nguyên lý Pauli, nhảy nút chỉ có thể xảy ra nếu nguyên tử được nhảy đến ở trạng thái không có spin hoặc có một spin ngược chiều với spin của điện tử nhảy tới. Hai nguyên tử có spin ngược nhau định xứ tại một nút mạng tương tác nhau với thế năng tương tác U , tương tác đó có thể là tương tác đẩy hoặc tương tác hút. Sự tương quan giữa t và U xác định tính kim loại hoặc điện môi của hệ [7-10]. Như vậy Hamiltonian cho mô hình Hubbard mô phỏng bằng khí nguyên tử fermion trong mạng quang học có dạng [5].

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} \left(c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + h.c \right) + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}, \quad (1.10)$$

trong đó $c_{i\sigma}^\dagger, c_{j\sigma}$ là các toán sinh hủy một hạt fermion trong trạng thái spin σ ($\uparrow$ hoặc $\downarrow$) tại nút mạng $i, n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma}$. Số hạng đầu tiên là động năng và t là biên độ nhảy nút, $\langle i, j \rangle$ biểu thị các nút mạng lân cận gần nhất. Số hạng thứ hai là thế năng của hạt với tương tác U . Ở đây trong Hamiltonian này thế giam cầm đã được loại bỏ. Biên độ nhảy nút t được xác định bởi

$$t = - \int d\vec{r} w_0(\vec{r} - \vec{r}_i) \left(-\frac{\nabla}{2m} + V(\vec{r}) \right) w_0(\vec{r} - \vec{r}_i), \quad (1.11)$$

với i, j là hai nút lân cận gần nhất và $w_0(\vec{r} - \vec{r}_i)$ là hàm Wannier định xứ quanh nút i và cho vùng năng lượng thấp nhất. Thế tương tác U có thể

xác định bằng

$$U = g \int d\vec{r} |w_0(\vec{r})|^4, \quad (1.12)$$

trong đó $g = \frac{4\pi a_s}{m}$, với a_s là độ dài tán xạ và m khối lượng nguyên tử. Đối với mạng lập phương, hàm thế tuần hoàn tạo bởi các cặp laser có dạng:

$$V_p(x, y, z) = V_0 (\sin^2 k_L x + \sin^2 k_L y + \sin^2 k_L z). \quad (1.13)$$

Trong đó V_0 được gọi là biên độ, và k_L là vector sóng của laser. Khi đó d là hằng số mạng $d = \pi/k_L$. Trong giới hạn $V_0 \gg E_r$, các mức năng lượng cách nhau một khoảng $\omega_0 = \sqrt{4\pi V_0 E_r}$. Tại nhiệt độ thấp, các nguyên tử được hạn chế dao động quanh nút mạng ở mức năng lượng thấp nhất. Phần động năng của nó sau đó bị đóng băng, ngoại trừ một phần nhỏ xuyên hầm đến những vị trí lân cận. Chuyển động của các nguyên tử trong các thế tuần hoàn có thể được mô tả bằng hàm sóng Bloch với vector q và năng lượng của nguyên tử đang cư trú được cho bởi

$$\varepsilon_0(q) = \frac{3}{2}\omega_0 - 2t (\cos(q_x d) + \cos(q_y d) + \cos(q_z d)), \quad (1.14)$$

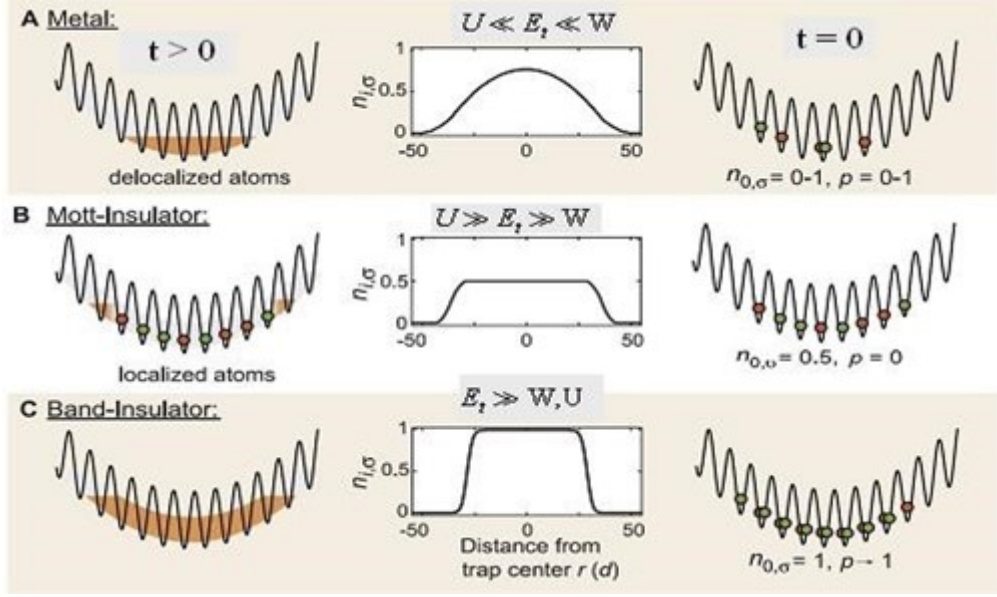
trong đó tham số t được gọi là thông số chui ngầm tới những nút lân cận, và nó có thể được tính xấp xỉ theo công thức (1.15)

$$t \approx \frac{4}{\sqrt{\pi}} E_r \left(\frac{V_0}{E_r} \right)^{\frac{3}{4}} \exp \left[-3 \left(\frac{V_0}{E_r} \right) \right], \quad (1.15)$$

Tham số U có thể được tính xấp xỉ bằng

$$U = \sqrt{\frac{f}{u}} k_L a_s E_r \left(\frac{V_0}{E_r} \right)^{\frac{3}{4}}. \quad (1.16)$$

Từ biểu thức (1.15) và (1.16) ta có thể thấy các tham số của mô hình Hubbard có thể dễ dàng thay đổi bằng chiều sâu của thế quang học, bước sóng laser, khối lượng nguyên tử và độ dài tán xạ. Như vậy việc thay đổi tần số và cường độ của các chùm laser dẫn tới việc thay đổi t và U . Điều này thực nghiệm đã làm được. Sự thay đổi t và U dẫn đến sự hình thành các pha khác nhau như kim loại, điện môi Mott, điện môi vùng, như mô tả trên Hình 1.4 [17,18].



Hình 1.4: Sơ đồ các pha khác nhau có thể tồn tại trong mô hình Hubbard mô phỏng mạng quang học [18]

1.2.2. Mô phỏng lượng tử mô hình Falicov-Kimball

Mô hình Falicov-Kimball có thể xem là mô hình Hubbard giản lược khi tham số nhảy nút của một thành phần bằng 0 vì tham số nhảy nút tỷ lệ nghịch với khối lượng của nguyên tử nên nếu mạng quang học cho mô hình Hubbard được tạo từ các nguyên tử có khối lượng khác nhau thì khi đó tham số nhảy nút cho các thành phần cũng khác nhau. Ví dụ như chúng ta mô phỏng mô hình Hubbard bằng hỗn hợp ^{40}K và ^6Li hay hỗn hợp ^6Li và ^{171}Yb thì tham số nhảy nút của mỗi thành phần khác nhau. Ở giới hạn lý tưởng tham số nhảy nút cho một thành phần bằng 0, chúng ta thu được mô hình Falicov-Kimball thông thường [32] Hamiltonian của mô hình Falicov-Kimball có dạng

$$H = -t \sum_i c_i^\dagger c_j + E_f \sum_i f_i^\dagger f_j + U \sum_i c_i^\dagger c_i f_i^\dagger f_i. \quad (1.17)$$

Trong đó $c_i^\dagger$ (c_j) là toán tử sinh (hủy) một thành phần nguyên tử fermion (hay nguyên tử fermion trong hỗn hợp hai nguyên tử fermion), và $f_i^\dagger$ (f_j) là toán tử sinh hủy thành phần nguyên tử kia (hay nguyên tử fermion kia). Thành phần nguyên tử c có khối lượng nhẹ nên có thể di chuyển trong

mạng. Thành phần nguyên tử f có khối lượng cực lớn và không di chuyển được, E_f là mức năng lượng của chúng, U là thế tương tác giữa nguyên tử c và nguyên tử f khi ở cùng một nút mạng. Tuy nhiên mô phỏng mô hình Falicov-Kimball ở trên là lý tưởng hóa khối lượng của một nguyên tử này lớn hơn rất nhiều khối lượng của một nguyên tử kia trong hỗn hợp. Do vậy, thực nghiệm vẫn chưa mô phỏng hoàn hảo được mô hình Falicov-Kimball và đây là thách thức trong nghiên cứu thực nghiệm.

1.2.3. Ưu điểm và nhược điểm của mô phỏng lượng tử

Mô phỏng lượng tử bằng mạng quang học có nhiều ưu điểm.

Trước hết các thông số của mô hình mô phỏng khá dễ điều chỉnh.

Thứ hai, cấu trúc hình học các mạng quang học khá dễ tạo ra.

Thứ ba, mạng quang học không có lẫn tạp chất.

Thứ tư, mạng quang học có thể được tạo thành từ các nguyên tử fermion hay boson.

Do vậy, có thể tạo ra các mô hình mô phỏng fermion hay boson hoặc các hỗn hợp giữa chúng. Đây là các ưu điểm nổi trội của mô phỏng lượng tử bằng mạng quang học mà các vật liệu được tạo thành từ các hợp chất hóa học khó có được. Tuy vậy mạng quang học cũng có những nhược điểm. Nhược điểm lớn nhất của mạng quang học là hằng số mạng bằng một nửa bước sóng laser, cho nên hằng số mạng của mạng quang học rất lớn. Điều này dẫn đến tình trạng hiệu ứng đặc trưng của mạng quang học rất nhỏ. Do vậy rất khó đạt được trạng thái cơ bản. Nhược điểm thứ hai của mạng quang học là chỉ ổn định ở nhiệt độ cực thấp, từ μK đến nK . Nhược điểm khác của mạng quang học là rất khó điều chỉnh được nồng độ của hạt trong mạng.

1.3. Kết luận

Trong phần này chúng tôi trình bày về lý thuyết các khí cực lạnh trong mạng quang học, trình bày về các thế năng quang học, các nguyên tử không tương tác trong mạng tuần hoàn. Chúng tôi trình bày các mô phỏng

lượng tử, các mô hình và nêu rõ ưu nhược điểm của mô phỏng lượng tử so với các mô phỏng khác.

Chương 2

LÝ THUYẾT TRƯỜNG TRUNG BÌNH ĐỘNG

Trong chương này, chúng tôi trình bày về lý thuyết trường trung bình động, phương pháp nghiên cứu chủ yếu đặt ra trong luận án. Nghiên cứu lý thuyết về vật liệu lượng tử, chủ yếu dựa trên hai nền tảng là vật lý lượng tử và vật lý thống kê. Hai nền tảng đó kết hợp với nhau tạo ra lĩnh vực nghiên cứu vật lý hệ nhiều hạt. Trong suốt thế kỷ 20, nhiều lý thuyết và phương pháp đã được xây dựng để nghiên cứu vật lý hệ nhiều hạt như lý thuyết hàm Green, lý thuyết nhiễu loạn mật độ, mô phỏng Monte Carlo hay động học phân tử... Lý thuyết nhiễu loạn mật độ đã đạt được những thành tựu xuất sắc trong nghiên cứu và tiên đoán tính chất các vật liệu bán dẫn truyền thống. Thế nhưng đối với những vật liệu mà tương quan điện tử trong đó trung bình hay mạnh thì lý thuyết nhiễu loạn mật độ chưa thể nghiên cứu trọn vẹn các tính chất vật lý của những vật liệu đó, ít nhất như ở dạng hiện nay. Do đó đã xuất hiện những hướng nghiên cứu mới, kết hợp giữa lý thuyết nhiễu loạn mật độ và phương pháp hàm Green trong vật lý hệ nhiều hạt, để giải quyết vấn đề nghiên cứu các tính chất của vật liệu điện tử tương quan mạnh một cách tốt hơn. Một trong những hướng nghiên cứu đó là lý thuyết trường trung bình động (Dynamical Mean Field Theory - DMFT). Những nghiên cứu sử dụng lý thuyết trường trung bình động cho thấy những ưu điểm trong thu nhận và tiên đoán các tính chất vật lý của các vật liệu tương quan điện tử.

2.1. Lý thuyết trường trung bình tĩnh

2.1.1. Mô hình Hubbard

Lý thuyết trường trung bình động là một lý thuyết mở rộng của lý thuyết trường trung bình cổ điển cho tương tác Coulomb cục bộ [27]. Nguyên lý chung của gần đúng trường trung bình là thay thế bài toán

toàn mạng tương tác bằng bài toán một nút hiệu dụng. Nút hiệu dụng đó miêu tả các hạt cư trú trong nút mạng tương tác với trường hiệu dụng. Trường hiệu dụng hay còn gọi là trường Weiss được xác định một cách tự hợp từ điều kiện đồng nhất một đại lượng định xứ xác định từ bài toán một hạt trong trường hiệu dụng với chính đại lượng đó khi có đầy đủ tương tác trong toàn mạng tinh thể.

Trong gần đúng trường trung bình cổ điển thì trường trung bình là một giá trị trung bình, không phụ thuộc vào thời gian. Trong lý thuyết trường trung bình động, trường trung bình được biểu diễn như một hàm Green phụ thuộc vào thời gian. Với tính chất như vậy, lý thuyết trường trung bình động đã tính tới thăng giáng động lực cục bộ. Để thấy rõ sự phát triển của lý thuyết trường trung bình động từ gần đúng trường trung bình cổ điển, chúng tôi xem xét các gần đúng trường trung bình qua một mô hình cụ thể. Ở đây chúng tôi xem xét mô hình Hubbard [7-10].

$$\hat{H} = - \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} = H_t + H_u, \quad (2.1)$$

trong đó t_{ij} là các tham số nhảy nút giữa các nút i và j khác nhau, U là tương tác Coulomb của hai điện tử tại cùng một nút trong mạng tinh thể. Các điện tử chỉ tương tác với nhau khi chúng định xứ trong cùng một nút. Ở đây $n_{i\sigma} = c_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}$ là toán tử số điện tử tại nút i . Mô hình này được Hubbard [7], Gutzwiller [9] và Kanamori [10] độc lập đưa ra. Bây giờ nó được thống nhất gọi là mô hình Hubbard. Phần động năng của Hamiltonian H_t tạo bởi sự giao nhau của quỹ đạo Wannier $\varphi_{i\sigma}(r)$ tại nút i và $\varphi_{j\sigma}(r)$ tại nút j .

$$t_{ij} = \int dr \phi_{i\sigma}^*(r) \frac{1}{2m} \nabla^2 \phi_{j\sigma}(r), \quad (2.2)$$

trong đó m là khối lượng của điện tử. Tương tác cục bộ tại một nút mô tả bằng lực đẩy Coulomb của hai điện tử tại cùng một nút trong mạng:

$$U = \int dr dr' \phi_{i\sigma}^*(r) \frac{e^2}{|r - r'|} \phi_{i\sigma}^*(r') \phi_{j\sigma}(r'). \quad (2.3)$$

Mô hình Hubbard mô tả hệ điện tử tương quan mạnh khi tương tác U lớn hơn so với độ rộng của vùng năng lượng W . Khi $U \gg W$ và hệ lấp

đầy một nửa, cấu hình hai điện tử tại một nút bị loại bỏ, khi hai điện tử chiếm giữ cùng một nút, năng lượng của hệ bị thêm vào một lượng bằng U , trong trường hợp này điện tử định xứ tại các nút mạng và tương tác Coulomb tại một nút sẽ ngăn không cho các điện tử dịch chuyển. Khi đó hệ là điện môi. Người ta còn gọi pha điện môi này là điện môi Mott. Khi $U \rightarrow 0$ ta có hệ điện tử tự do không tương tác. Ở giới hạn này hệ mang tính chất kim loại. Như vậy trong trường hợp lấp đầy một nửa sẽ xảy ra chuyển pha kim loại-điện môi khi U biến đổi. Sự chuyển pha kim loại-điện môi này do tương quan điện tử U thuần túy thường được gọi là chuyển pha kim loại-điện môi Mott-Hubbard.

2.1.2. Gần đúng trường trung bình tĩnh

Trong gần đúng này, tương tác Coulomb cục bộ giữa các điện tử được lấy gần đúng như sau:

$$Un_{i\uparrow}n_{i\downarrow} \approx U \langle n_{i\uparrow} \rangle n_{i\downarrow} + Un_{i\uparrow} \langle n_{i\downarrow} \rangle - U \langle n_{i\uparrow} \rangle \langle n_{i\downarrow} \rangle, \quad (2.4)$$

gần đúng này đã loại bỏ thăng giáng $U(n_{i\uparrow} - \langle n_{i\uparrow} \rangle)(n_{i\downarrow} - \langle n_{i\downarrow} \rangle)$. Với gần đúng như vậy, bài toán động lực học của toàn mạng được đưa về gần đúng động lực học của một hạt. Để đơn giản, chúng ta xét trường hợp trường trung bình đồng nhất, tức là:

$$\begin{aligned} \langle n_{i\uparrow} \rangle &= n_{\uparrow}, \\ \langle n_{i\downarrow} \rangle &= n_{\downarrow}, \end{aligned}$$

khi đó hàm Green cho điện tử có spin σ bằng:

$$G_{\sigma}(k, \omega) = \frac{1}{\omega - \varepsilon_k + \mu - Un_{\sigma}}. \quad (2.5)$$

Trong đó k là vectơ sóng, ω là tần số, ε_k là hệ thức tán sắc, μ là thế hóa học, Giá trị trung bình n_{σ} được xác định một cách tự hợp từ điều kiện n_{σ} cũng chính là đại lượng được tính từ giá trị trung bình $\frac{1}{N} \sum_i \langle n_{i\sigma} \rangle$ của

toàn mạng, trong đó N là số nút mạng tinh thể. Chúng ta có:

$$\begin{aligned} n_\sigma &= \frac{1}{N} \sum_k \langle n_{k\sigma} \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \int \frac{d\varepsilon}{\pi} f(\varepsilon) \text{Im} G_\sigma(k, \omega - i0^+) \\ &= \frac{1}{N} \sum_k f(\varepsilon_k + U n_{-\sigma} - \mu). \end{aligned} \quad (2.6)$$

Trong đó $f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon} + 1}$ là hàm phân bố Fermi-Dirac ở nhiệt độ $T = \frac{1}{\beta}$. Trong gần đúng trung bình cổ điển này, trường trung bình chỉ làm dịch đi mức năng lượng của điện tử và không làm thay đổi tính chất căn bản của điện tử so với trường khi không có tương tác. Tính chất của điện tử như vậy không thay đổi ngay cả khi có tương tác Coulomb giữa chúng. Trong gần đúng trường trung bình này chúng ta không thu được chuyển pha kim loại-điện môi. Đối với pha thuận từ $n_\uparrow = n_\downarrow$ và với thế hóa học $\mu = \frac{U}{2}$, chúng ta thu được nghiệm $n_\uparrow = n_\downarrow = \frac{1}{2}$ ở mọi nhiệt độ, nếu mật độ trạng thái khi không có tương tác là một hàm chẵn theo tần số. Đối với các pha có trật tự từ $n_\uparrow \neq n_\downarrow$, phương trình tự hợp cho $n_\uparrow, n_\downarrow$ phức tạp hơn và các nghiệm có thể tìm được bằng tính số.

2.2. Lý thuyết trường trung bình động

2.2.1. Giới hạn số chiều không gian vô cùng

Chúng ta biết rằng tổng thống kê có thể tính thông qua tích phân phiếm hàm:

$$Z = \int \prod_{i\sigma} \mathcal{D}c_{i\sigma}^* \mathcal{D}c_{i\sigma} \exp[-S], \quad (2.7)$$

trong đó hàm tác động S cho mô hình Hubbard có dạng:

$$\begin{aligned} S &= \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \right) c_{i\sigma} + \sum_{ij\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^*(\tau) c_{j\sigma}(\tau) \right. \\ &\quad \left. + \sum_i U c_{i\uparrow}^*(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{i\downarrow}^*(\tau) c_{i\downarrow}(\tau) \right], \end{aligned} \quad (2.8)$$

ở đây $c_{i\sigma}^*, c_{i\sigma}$ là biến số trong đại số Grassmann tương ứng với các toán tử sinh, hủy điện tử.

Chia hàm tác động thành ba phần:

$$S = S_0 + \Delta S + S^{(0)}, \quad (2.9)$$

trong đó S_0 là phần của hàm tác động tại một nút 0 nào đó của mạng tinh thể.

$$S_0 = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_\sigma c_{0\sigma}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{0\sigma}(\tau) + U c_{0\uparrow}^*(\tau) c_{0\uparrow}(\tau) c_{0\downarrow}^*(\tau) c_{0\downarrow}(\tau) \right], \quad (2.10)$$

ΔS là phần của hàm tác động miêu tả liên kết giữa nút 0 với các nút khác của mạng tinh thể.

$$\Delta S = \int_0^\beta d\tau \sum_{i\sigma} [t_{i0} c_{i\sigma}^*(\tau) c_{0\sigma}(\tau) + t_{0i} c_{0\sigma}^*(\tau) c_{i\sigma}(\tau)], \quad (2.11)$$

và phần còn lại ký hiệu là $S^{(0)}$ là phần của hàm tác động mà nút 0 và các nút liên kết với nó được loại bỏ. Hàm tác động $S^{(0)}$ có thể được gọi là hàm tác động hóc tại nút mạng 0.

$$S^{(0)} = \int_0^\beta d\tau \left[\sum_{i \neq 0\sigma} c_{i\sigma}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{i\sigma}(\tau) + \sum_{ij \neq 0\sigma} t_{ij} c_{i\sigma}^*(\tau) c_{j\sigma}(\tau) + U \sum_{i \neq 0} c_{i\uparrow}^*(\tau) c_{i\uparrow}(\tau) c_{i\downarrow}^*(\tau) c_{i\downarrow}(\tau) \right]. \quad (2.12)$$

Trong mục này lý thuyết trường trung bình động được diễn tả thông qua phương pháp hóc [27]. Nội dung của phương pháp này là chúng ta đi tìm hàm tác động hiệu dụng tại nút mạng 0, sau khi đã lấy tích phân phiếm hàm theo tất cả các biến số tại các nút mạng trừ nút mạng 0. Khi đó vấn đề quy về tính tổng thống kê:

$$Z = \int \prod_\sigma Dc_{0\sigma}^* Dc_{0\sigma} \exp[-S_0] \times \int \prod_{i \neq 0\sigma} Dc_{i\sigma}^* Dc_{i\sigma} \exp[-S^{(0)}] \exp[-\Delta S], \quad (2.13)$$

kí hiệu giá trị trung bình:

$$\langle X \rangle_0 \equiv \frac{1}{Z^{(0)}} \int \prod_{i \neq 0\sigma} Dc_{i\sigma}^* Dc_{i\sigma} X \exp \left[-S^{(0)} \right], \quad (2.14)$$

theo tổng thống kê $Z^{(0)}$ với hàm tác động $S^{(0)}$ tương ứng. Đây là giá trị trung bình của toàn mạng, trừ đi nút 0 và các liên kết với nó. Hay nói cách khác đó là giá trị trung bình theo toàn mạng có một hốc 0. Khi đó tổng thống kê được viết thành:

$$Z \equiv Z^{(0)} \int \prod_{i \neq 0\sigma} Dc_{0\sigma}^* Dc_{0\sigma} \exp \left[-S^{(0)} \right] \langle \exp[-\Delta S] \rangle, \quad (2.15)$$

tiếp theo chúng ta khai triển hàm mũ thứ hai đối với ΔS trong biểu thức trên. Nhận thấy nếu chúng ta chỉ xét nhảy nút của điện tử giữa các nút lân cận gần nhất thì đối với mạng hình vuông d chiều chúng ta có hệ thức tán sắc:

$$\varepsilon_k = -\frac{1}{N} \sum_{ij} t_{ij} e^{-ik(R_i - R_j)} = -2t \sum_{\alpha=1}^d \cos k_i,$$

Khi $d \rightarrow \infty$ ta có thể coi $\cos k_i$ được chọn một cách ngẫu nhiên, do đó $\sum_i^d \cos k_i \sim \sqrt{d}$. Vì vậy khi $d \rightarrow \infty$ thì $\varepsilon_k \sim 0(t\sqrt{d})$. Vì vậy chúng ta phải tiến hành hiệu chỉnh lại t theo d như sau [27].

$$t_{ij} = \frac{t^*}{\sqrt{2d}} = \frac{\text{const}}{\sqrt{2d}},$$

việc hiệu chỉnh lại cho thấy, hàm Green một hạt tương ứng của hệ không tương tác, cũng sẽ phụ thuộc vào d . Khi i và j là hai nút lân cận gần nhất thì:

$$G_{ij,0}^0 \sim \frac{1}{\sqrt{d}}, \quad (2.16)$$

tính chất này của hàm Green không tương tác, chính là lý do để hàm Green đơn giản hơn ở giới hạn khi $d \rightarrow \infty$. Với tính chất của hàm Green như vậy, người ta chứng minh được rằng, tại giới hạn khi $d \rightarrow \infty$ chúng ta thu được [27].

$$\frac{1}{Z_{loc}} e^{-S_{loc}} = \frac{1}{Z} e^{-S}, \quad (2.17)$$

trong đó:

$$\begin{aligned}
S_{loc} = & \left[\int_0^\beta d\tau \sum_{\sigma} c_{0\sigma}^*(\tau) \left(\frac{\partial}{\partial \tau} - \mu \right) c_{0\sigma}(\tau) \right. \\
& + U \int_0^\beta d\tau c_{0\uparrow}^*(\tau) c_{0\uparrow}(\tau) c_{0\downarrow}^*(\tau) c_{0\downarrow}(\tau) \\
& \left. + \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_{\sigma} \sum_{j,k \neq 0} t_{j0}^* t_{k0}^* G_{jk\sigma}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2) c_{0\sigma}^*(\tau_1) c_{0\sigma}(\tau_2) \right].
\end{aligned} \tag{2.18}$$

Ở đây $G_{jk\sigma}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2) = -\langle T_{\tau} c_{j\sigma}(\tau_1) c_{k\sigma}^*(\tau_2) \rangle_{(0)}$ là hàm Green được lấy theo tổng thống kê quanh hốc 0. Như vậy bài toán toàn mạng được đưa về bài toán cục bộ. Kí hiệu hàm lai hóa của nút 0:

$$\Delta_{\sigma}(\tau_1 - \tau_2) = \sum_{i,j \neq 0} t_{i0}^* t_{j0}^* G_{ij\sigma}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2), \tag{2.19}$$

khi đó hàm tác động cục bộ có thể viết thành:

$$\begin{aligned}
S_{loc} = & - \int_0^\beta d\tau_1 \int_0^\beta d\tau_2 \sum_{\sigma} c_{\sigma}^*(\tau_1) \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(\tau_1 - \tau_2) c_{\sigma}(\tau_2) \\
& + U \int_0^\beta d\tau c_{\uparrow}^*(\tau) c_{\uparrow}(\tau) c_{\downarrow}^*(\tau) c_{\downarrow}(\tau),
\end{aligned} \tag{2.20}$$

trong đó:

$$\mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(\tau_1 - \tau_2) = - \left(\frac{\partial}{\partial \tau_1} - \mu \right) \partial_{\tau_1 \tau_2} - \Delta_{\sigma}(\tau_1 - \tau_2), \tag{2.21}$$

cuối cùng, mối quan hệ giữa hàm Green hốc $G_{ij\sigma}^{(0)}(\tau_1 - \tau_2)$ nơi mà nút 0 được lấy ra thỏa mãn phương trình

$$G_{ij\sigma}^{(0)} = G_{ij\sigma} - G_{i0\sigma} G_{00\sigma}^{-1} G_{0j\sigma}. \tag{2.22}$$

Thông thường hàm Green cục bộ và hàm Green thể hiện trường trung bình động được thể hiện thông qua phương trình Dyson.

$$[G_{\sigma}(i\omega_n)]^{-1} = [\mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n)]^{-1} - \sum_{\sigma} (i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \Delta_{\sigma}(i\omega_n) - \sum_{\sigma} (i\omega_n), \tag{2.23}$$

hàm Green cục bộ được xác định từ hàm tác động cục bộ ở trên.

$$G_{\sigma}(i\omega_n) = -\frac{1}{Z_{loc}} \int \prod_{\sigma} Dc_{\sigma}^* Dc_{\sigma} [c_{\sigma}(i\omega_n) c_{\sigma}^*(i\omega_n)] \exp[-S_{loc}], \quad (2.24)$$

$$Z_{loc} = \int \prod_{\sigma} Dc_{\sigma}^* Dc_{\sigma} \exp[-S_{loc}], \quad (2.25)$$

điều kiện tự hợp trong lý thuyết trường trung bình động xác định hàm Green cục bộ trên cũng chính là hàm Green cục bộ của toàn mạng.

$$\begin{aligned} G_{\sigma}(i\omega_n) &= \frac{1}{N} \sum_k G_{k\sigma}(i\omega_n) = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_k - \sum_{\sigma}(i\omega_n)} \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \frac{N_0(\varepsilon)}{i\omega_n + \mu - \varepsilon - \sum_{\sigma}(i\omega_n)}, \end{aligned} \quad (2.26)$$

trong đó $N_0(\varepsilon)$ là mật độ trạng thái trần hay mật độ trạng thái không tương tác. Thông qua phương trình Dyson năng lượng riêng của hàm Green được xác định

$$\Sigma_{\sigma}(\omega) = \mathcal{G}_{\sigma}^{-1}(\omega) - G_{\sigma}^{-1}(\omega). \quad (2.27)$$

Như vậy chúng ta thu được hệ phương trình tự hợp khép kín. Để giải hệ phương trình này chúng ta có thể dùng phương pháp lặp như sau: Xuất phát từ một giá trị ban đầu $\sum_{\sigma}(i\omega_n)$ nào đó, thế vào phương trình (2.27), tính hàm Green cục bộ $G_{\sigma}(i\omega)$. Từ phương trình Dyson (2.23) chúng ta tính được $\mathcal{G}_{\sigma}(i\omega_n)$. Giải (2.24) chúng ta thu được $G_{\sigma}(i\omega)$ và $\sum_{\sigma}(i\omega)$. Sử dụng điều kiện tự hợp chúng ta thu được $\sum_{\sigma}(i\omega)$ và lặp lại quá trình tính toán trên cho đến khi thu được nghiệm hội tụ. Vấn đề chủ yếu trong lý thuyết trường trung bình động là giải bài toán hiệu dụng một nút (2.24). Có rất nhiều phương pháp khác nhau cả về giải tích lẫn tính số, gần đúng hay chính xác để giải bài toán hiệu dụng một nút (2.24) như phương pháp chéo hóa chính xác, phương pháp nhiễu loạn lặp...

2.2.2. Phương pháp chéo hóa chính xác

Vấn đề mấu chốt của lý thuyết trường trung bình động là giải bài toán một tạp. Đây cũng chính là vấn đề chiếm dụng thời gian tính toán nhất trong quá trình giải số của lý thuyết trường trung bình động. Hàm tác động

hiệu dụng thể hiện một tập có tương tác trong một môi trường hiệu dụng. Nó tương đương với bài toán một tập từ tương tác với một bể dẫn. Hay nói cách khác hàm tác động hiệu dụng tương đương với mô hình Anderson sau.

$$H_{\text{And}} = \sum_{l\sigma} E_l a_{l\sigma}^\dagger a_{l\sigma} + \sum_{l\sigma} V_l \left(a_{l\sigma}^\dagger c_\sigma + c_\sigma^\dagger a_{l\sigma} \right) + \varepsilon_c \sum_{\sigma} c_\sigma^\dagger c_\sigma + U n_{\uparrow}^c n_{\downarrow}^c, \quad (2.28)$$

trong đó $a_{l\sigma}^\dagger$ ($a_{l\sigma}$) là toán tử sinh (hủy) fermion của quỹ đạo l của bể dẫn, E_l là mức năng lượng của từng quỹ đạo fermion của bể dẫn, V_l là thừa số lai hóa giữa quỹ đạo fermion của bể dẫn và tập, ε_c là mức năng lượng của tập, thông thường nó bằng đúng mức năng lượng của điện tử tại một nút $\varepsilon_c = -\mu$. Điều kiện để mô hình Anderson (6) tương đương với hàm tác động là:

$$G_\sigma^{-1}(i\omega) = i\omega + \mu - \sum_l \frac{V_l^2}{i\omega - E_l}. \quad (2.29)$$

Do vậy các thông số E_l, V_l của mô hình Anderson (2.22) cần được xác định sao cho điều kiện (2.29) thỏa mãn. Về mặt chính xác, số quỹ đạo của bể dẫn cần phải vô cùng để các mức năng lượng của từng quỹ đạo fermion của bể dẫn liên tục. Nhưng về mặt thực tiễn điều kiện (2.29) sẽ được thỏa mãn một cách gần đúng với số quỹ đạo của bể dẫn hữu hạn. Mô hình Anderson (2.28) có thể giải bằng các phương pháp khác nhau mô phỏng Monte Carlo, chéo hóa chính xác, nhóm tái chuẩn hóa tính số, boson cầm tù, nhiễu loạn lặp... Mỗi phương pháp giải có những ưu khuyết điểm khác nhau, và có thể tùy thuộc vào từng vấn đề nghiên cứu. Chẳng hạn phương pháp mô phỏng Monte Carlo là chính xác, nhưng chỉ làm việc với kích thước bể dẫn là hữu hạn và không thể làm việc ở nhiệt độ quá thấp do vấn đề về dấu của định thức fermion. Phương pháp chéo hóa chính xác cũng là phương pháp chính xác, nhưng kích thước bể dẫn là hữu hạn. Nó có thể làm việc tốt cả ở nhiệt độ không lẫn nhiệt độ hữu hạn bất kỳ. Nhưng nhược điểm của nó là thời gian tính số và yêu cầu về bộ nhớ tăng rất nhanh theo kích thước của bể dẫn, và do vậy xảy ra hiệu ứng kích cỡ hữu hạn. Hiệu ứng này cũng có thể làm mất đi hay thể hiện không trọn vẹn hiệu ứng Kondo ở nhiệt độ thấp khi nhiệt độ này nhỏ hơn độ gián đoạn

của các mức năng lượng của bể dẫn.

2.2.3. Phương pháp chéo hóa chính xác trong thuật toán giải số DMFT

Phương pháp chéo hóa chính xác là một trong những phương pháp hay được sử dụng để giải bài toán một tập trong chuỗi các bước lặp để giải các phương trình tự hợp trong lý thuyết trường trung bình động (DMFT). Phương pháp này lần đầu tiên được Caffarel và Krauth áp dụng trong giải bài toán một tập trong hệ phương trình tự hợp của lý thuyết trường trung bình động [33]. Phương pháp chéo hóa chính xác giới hạn Hamiltonian (2.28) của một tập trong một bể dẫn hữu hạn của n_s quỹ đạo fermion. Khi đó trường trung bình Weiss trở thành

$$[G_\sigma^{n_s}(i\omega)]^{-1} = i\omega + \mu - \sum_{l=1}^{n_s} \frac{V_l^2}{i\omega - E_l}. \quad (2.30)$$

Có thể hình dung giới hạn hữu hạn số mức năng lượng của bể dẫn như là một phép chiếu từ không gian liên tục toàn phần vào một không gian con hữu hạn. Hamiltonian (2.28) với n_s quỹ đạo fermion được chéo hóa chính xác và do vậy chúng ta có thể tính hàm Green $G(i\omega)$, và năng lượng riêng $\Sigma(i\omega)$. Từ điều kiện tự hợp chúng ta lại thu được tiếp trường trung bình Weiss và sau đó gần đúng nó bằng hàm Green tại phương trình (2.30) với những thông số E_l, V_l của mô hình Anderson (2.28). Quá trình lặp cứ tiếp diễn như vậy cho đến khi thu được nghiệm hội tụ trong khoảng sai số cho trước. Như vậy quá trình tính số của bài toán nhân trong chuỗi phương trình tự hợp ở đây gồm hai phần giải số khác nhau: chéo hóa chính xác và làm gần đúng phương trình (2.30). Sau đây chúng ta sẽ đi vào từng phần cụ thể. Không gian Hilbert của Hamiltonian (2.27) với số quỹ đạo hữu hạn có thể khai triển theo các vector cơ sở sau:

$$\left| n_1^\uparrow, n_2^\uparrow, \dots, n_{n_s}^\uparrow \right\rangle \left| n_1^\downarrow, n_2^\downarrow, \dots, n_{n_s}^\downarrow \right\rangle, \quad (2.31)$$

trong đó $n_l^\sigma = 0, 1$, và $\sum_{l=1}^{n_s} n_l^\sigma = n^\sigma$. Hamiltonian (2.27) không trộn lẫn các khối $(n^\uparrow, n^\downarrow)$ khác nhau. Do vậy chúng ta có thể chéo hóa Hamiltonian

(2.28) trong từng khối $(n^\uparrow, n^\downarrow)$ một. Như vậy với n_s quỹ đạo có $C_{n_s}^{n^\uparrow} \times C_{n_s}^{n^\downarrow}$ vector cơ sở (2.31) trong khối $(n^\uparrow, n^\downarrow)$ xác định, và chúng ta phải chéo hóa ma trận có kích thước $(C_{n_s}^{n^\uparrow} \times C_{n_s}^{n^\downarrow}) \times (C_{n_s}^{n^\uparrow} \times C_{n_s}^{n^\downarrow})$. Ví dụ với $n_s = 6$ trong khối $(n^\uparrow = 3, n^\downarrow = 3)$ chúng ta phải chéo hóa ma trận 400×400 , còn với $n_s = 7$ trong khối $(n^\uparrow = 3, n^\downarrow = 3)$ chúng ta phải chéo hóa ma trận 1225×1225 . Kích thước của ma trận phải chéo hóa tăng rất nhanh với n_s . Tuy vậy, vì Hamiltonian không trộn lẫn các khối $(n^\uparrow, n^\downarrow)$ với nhau, do vậy chúng ta có thể chéo hóa Hamiltonian trong từng khối riêng rẽ, và như vậy có thể song song hóa quá trình chéo hóa này. Quá trình chéo hóa bắt đầu bằng thiết lập các vector cơ sở. Quá trình này được thực hiện cho từng khối $(n^\uparrow, n^\downarrow)$ một. Sau khi không gian Hilbert con như vậy được thiết lập, chúng ta cần tính vector $a_j^\dagger|i\rangle$ và $a_j|i\rangle$. Ma trận của Hamiltonian sẽ gồm hai thành phần: thành phần lai hóa thể hiện fermion nhảy từ quỹ đạo của bể dẫn sang tạp và ngược lại, và thành phần các phần tử chéo thể hiện các mức năng lượng của quỹ đạo và tạp, cùng với tương tác Coulomb của tạp. Sau khi ma trận của Hamiltonian được thiết lập, ma trận này được chéo hóa. Sau khi chéo hóa Hamiltonian ở tất cả các khối $(n^\uparrow, n^\downarrow)$ chúng ta thu được toàn bộ các vector riêng và các giá trị riêng của Hamiltonian. Sử dụng biểu diễn Lehmann chúng ta tính được hàm Green

$$G(z) = \frac{1}{Z} \sum_{i,j} \frac{\langle i|c^\dagger|j\rangle \langle j|c|i\rangle}{E_i - E_j - Z} (e^{-\beta E_i} + e^{-\beta E_j}), \quad (2.32)$$

trong đó Z là tổng thống kê và $|i\rangle$ là vector riêng ứng với trị riêng E_i . Công thức (2.32) có thể áp dụng cho cả tần số Matsubara cũng như tần số thực. Chúng ta cũng có thể tính hàm Green ở nhiệt độ không bằng lấy giới hạn công thức (2.32) ở nhiệt độ không. Đây là ưu điểm của phương pháp chéo hóa chính xác, sau khi chéo hóa chính xác chúng ta có thể tính bất kỳ hàm Green nào, ở nhiệt độ hữu hạn hay độ không tuyệt đối. Để tính hàm Green theo công thức (2.32) chúng ta cần tính phần tử $\langle i|c^\dagger|j\rangle$. Sau khi tính được hàm Green của tạp chúng ta thực hiện tiếp vòng lặp trong chuỗi phương trình DMFT và tính được tiếp trường trung bình Weiss. Vấn đề tiếp theo là chúng ta thực hiện gần đúng (2.30), hay nói cách khác là chúng ta xác định lại thông số của mô hình (2.28) cho vòng lặp mới. Thông số

của mô hình được xác định sao cho khoảng cách giữa trường trung bình liên tục và gián đoạn đạt giá trị nhỏ nhất:

$$d = \frac{1}{n_{\max} + 1} \sum_{n=0}^{n_{\max}} \left| [G_{\sigma}(i\omega_n)]^{-1} - [G_{\sigma}^{m_s}(i\omega_n)]^{-1} \right|^2, \quad (2.33)$$

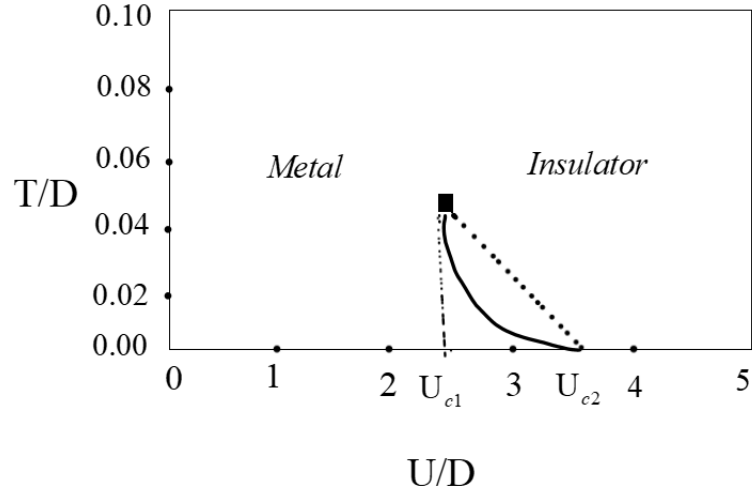
trong đó $n_{\max}$ là số tần số Matsubara được sử dụng. Thông thường số tần số Matsubara cần phải đủ lớn để kết quả không bị mất những tính chất vật lý ở cả hai vùng năng lượng thấp và năng lượng cao. Lưu ý mặc dù công thức (2.32) có thể áp dụng cho cả tần số Matsubara lẫn tần số thực, nhưng điều kiện cực tiểu (2.33) chỉ áp dụng cho tần số Matsubara. Khi các thông số của mô hình được xác định, chúng ta có thể tính tiếp hàm Green cho bất kỳ tần số nào, tùy theo nhu cầu nghiên cứu, nhưng lưu ý rằng để tính hàm Green theo tần số thực, chúng ta phải tính cùng với nó hàm Green theo tần số Matsubara.

Sau khi chéo hóa chính xác Hamiltonian (2.28) và xác định được thông số của mô hình cho vòng lặp mới chúng ta lại tiếp tục thực hiện vòng lặp tiếp theo. Quá trình lặp cứ làm như vậy cho đến khi thu được nghiệm hội tụ. Như vậy có thể thấy quá trình giải DMFT bằng chéo hóa chính xác phức tạp hơn phương pháp chéo hóa đơn thuần, bởi vì quá trình chéo hóa chính xác và xác định thông số của mô hình phải làm cho từng vòng lặp một. Tuy nhiên, cũng cần nhấn mạnh rằng phương pháp DMFT cộng với chéo hóa chính xác hoàn toàn khác phương pháp chéo hóa chính xác đơn thuần ở chỗ phương pháp DMFT cộng với chéo hóa chính xác là nghiên cứu vấn đề ở giới hạn nhiệt động lực cho hệ có kích thước vĩ mô, khác với phương pháp chéo hóa chính xác đơn thuần nghiên cứu cho hệ hữu hạn, và thông thường có kích thước rất nhỏ do hạn chế của máy tính. Kích thước hữu hạn của phương pháp DMFT cộng với chéo hóa chính xác chỉ nằm ở chỗ làm gần đúng trường hiệu dụng Weiss bằng số quỹ đạo fermion hữu hạn. Đây là đặc điểm khác biệt cần phải lưu ý. Do số vòng lặp để giải hệ phương trình tự hợp của DMFT không xác định được trước một cách tiên nghiệm, nên thời gian để giải hệ phương trình tự hợp của DMFT cũng không xác định được trước. Số vòng lặp cần sử dụng để thu được nghiệm khả dĩ phụ thuộc vào sai số khả dĩ mà nghiên cứu cho phép, cũng như vào

từng vấn đề nghiên cứu cụ thể với những thông số của mô hình cụ thể. Nói chung số vòng lặp cho nghiên cứu ở nhiệt độ thấp thông thường thường nhiều hơn cho nghiên cứu ở nhiệt độ cao với cùng một sai số cho phép.

Nghiên cứu ở vùng chuyển pha, hiện tượng tới hạn cũng thường phải sử dụng nhiều vòng lặp hơn để giải hệ phương trình tự hợp DMFT hơn nghiên cứu ở xa vùng chuyển pha, hiện tượng tới hạn. Càng nhiều số vòng lặp thì chúng ta càng phải nhiều lần tiến hành chéo hóa chính xác bài toán nhân, do vậy thời gian tính toán càng lâu. Thậm chí ở một số nghiên cứu hiện tượng tới hạn số vòng lặp quá nhiều và giải hệ phương trình DMFT trở nên không khả thi. Đây cũng là vấn đề được quan tâm trong nghiên cứu các tính chất vật lý của vật liệu lượng tử. Chương trình chéo hóa chính xác trong giải số DMFT đã được Caffarel và Krauth thiết lập và là mã nguồn mở cho phép mọi người sử dụng miễn phí và không cần xin phép [27]. Chương trình này được lập trên ngôn ngữ FORTRAN, có kèm theo các mã nguồn mở khác mà chương trình sử dụng. Khi sử dụng chúng ta chỉ cần thay đổi một chút thích ứng với vấn đề nghiên cứu. Một trong những thành công của lý thuyết trường trung bình động là chỉ ra chuyển pha kim loại-điện môi trong mô hình Hubbard khi lấp đầy một nửa. Kết quả tính toán giản đồ pha bằng lý thuyết trường trung bình động cho mô hình Hubbard thể hiện trên Hình (2.1).

Từ giản đồ pha ở trên chúng ta có thể thấy pha kim loại tồn tại từ giá trị U nhỏ đến giá trị U_{c2} , và pha điện môi tồn tại từ giá trị U lớn đến giá trị U_{c1} . Tính toán theo lý thuyết trường trung bình động cho thấy $U_{c1} < U_{c2}$. Do vậy trong khoảng $U_{c1} < U < U_{c2}$, pha kim loại và pha điện môi song song cùng tồn tại. Chuyển pha kim loại-điện môi như vậy là chuyển pha loại 1. Các thí nghiệm mô phỏng trong mạng quang học của mô hình Hubbard đã tìm ra chuyển pha kim loại-điện môi, nhưng chưa thể chỉ ra có hay không vùng song song cùng tồn tại pha kim loại-điện môi như lý thuyết trường trung bình động tiên đoán [17,18]. Điều này đòi hỏi có thêm những nghiên cứu mới để minh chứng cho điều đó.



Hình 2.1: Giản đồ pha cho mô hình Hubbard tính toán bằng lý thuyết trường trung bình động, ở đây T là nhiệt độ, U là thế tương tác Coulomb, D là nửa độ rộng vùng năng lượng [27].

2.3. Kết luận

Trong chương này chúng tôi trình bày lý thuyết trường trung bình tĩnh. Khắc phục hạn chế đó, chúng tôi giới thiệu lý thuyết trường trung bình động được ứng dụng hiệu quả trong nghiên cứu các hệ tương quan điện tử và các vật liệu tương quan điện tử. Lý thuyết trường trung bình tĩnh được sử dụng để nghiên cứu trong chương 5, còn lý thuyết trường trung bình động được sử dụng để nghiên cứu vấn đề chuyển pha kim loại-điện môi ở chương 3 và chương 4.

Chương 3

CHUYỂN PHA KIM LOẠI-ĐIỆN MÔI MOTT TRONG MÔ HÌNH FALICOV-KIMBALL BA THÀNH PHẦN

Trong chương này chúng tôi nghiên cứu sự chuyển pha kim loại-điện môi trong mô hình Falicov-Kimball (Falicov-Kimball model) (FKM) ba thành phần. Mô hình Falicov-Kimball ba thành phần mô tả hỗn hợp các hạt fermion một thành phần và hai thành phần với các tương tác đẩy cục bộ. Các hạt fermion hai thành phần có chuyển động trong mạng, trong khi các hạt fermion một thành phần định xứ tại các nút mạng. Mô hình này có thể nhân tạo ra bằng cách nhúng các nguyên tử fermion một thành phần và hai thành phần trong mạng quang học. Mô hình được nghiên cứu bằng cách sử dụng lý thuyết trường trung bình động với phương pháp chéo hóa chính xác. Chúng tôi tìm ra các điều kiện và tính chất của chuyển pha kim loại-điện môi Mott trong mô hình nghiên cứu. Các kết quả chính đã được công bố trên tạp chí Physical Review B.

3.1. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu

Quá trình chuyển pha kim loại-điện môi (Metal-insulator transition) (MIT) là một vấn đề được quan tâm nghiên cứu trong vật lý vật chất đông đặc từ khá lâu. Trạng thái điện môi Mott xảy ra khi các điện tử dẫn bị cục bộ hóa và định xứ tại các nút mạng do số cư trú đôi của các điện tử bị tương quan điện tử triệt tiêu [34]. Hầu hết các nghiên cứu về chuyển pha kim loại-điện môi tập trung vào hệ điện tử có tương tác Coulomb cục bộ giữa hai điện tử có spin khác nhau khi cùng tồn tại trên một nút. Thành công trong việc đưa các nguyên tử fermion cực lạnh vào trong mạng quang học đã và đang cung cấp một giai đoạn mới để nghiên cứu sự chuyển pha

Mott [16]. Thật vậy, trạng thái điện môi Mott đã được thực hiện đối với các nguyên tử fermion ^{40}K với hai trạng thái và tương tác đẩy giữa chúng [18,35]. Quá trình chuyển pha chuyển pha kim loại-điện môi này tương tự như hệ các điện tử. Hơn thế nữa, các hỗn hợp nguyên tử fermion có thể mở rộng cả về số lượng thành phần thông qua bội số siêu tinh tế lớn và khối lượng khác nhau. Hỗn hợp ^{40}K ở trạng thái đơn spin có thể nhúng trong các nguyên tử fermion hai thành phần ^6Li hoặc hỗn hợp của trạng thái hai thành phần ^{134}Yb và trạng thái sáu thành phần ^{173}Yb đã được thực nghiệm tạo ra [35,36]. Những kết quả như vậy mang lại khả năng nghiên cứu chuyển pha Mott trong hệ tương quan đa thành phần. Về mặt lý thuyết, người ta đã nghiên cứu các chuyển pha Mott trong các mô hình Hubbard ba thành phần [19,20]. Trong lý thuyết trường trung bình động, người ta quan sát thấy quá trình chuyển pha Mott tại các mật độ hạt thông ước với số thành phần của hạt khi các tương tác Coulomb cục bộ giữa các thành phần có giá trị bằng nhau [19]. Khi các tương tác Coulomb cục bộ giữa các thành phần có giá trị khác nhau, người ta cũng quan sát thấy sự chuyển pha Mott ở mật độ hạt một nửa, không thông ước với số thành phần của hạt [20]. Tuy nhiên, trong các nghiên cứu này, tất cả các thành phần đều có cùng khối lượng như nhau. Hỗn hợp các nguyên tử cực lạnh có thể được thiết lập với khối lượng khác nhau. Sự mất cân bằng khối lượng giữa các thành phần đó có thể ảnh hưởng đến chuyển pha kim loại-điện môi. Thật vậy, nghiên cứu bằng lý thuyết trường trung bình động cho thấy hỗn hợp hai thành phần mất cân bằng khối lượng, các thành phần nhẹ có thể bị ảnh hưởng bởi tương quan hạt nhiều hơn các thành phần nặng [37].

Trong chương này, chúng tôi nghiên cứu chuyển pha Mott trong mô hình Falicov-Kimball ba thành phần. Mô hình này có thể được xem như một phiên bản của mô hình Hubbard [19,20] ba thành phần với sự mất cân bằng khối lượng cực lớn. Trong mô hình, các hạt fermion một thành phần rất nặng và không chuyển động. Chúng được nhúng trong một mạng quang học, nơi các hạt fermion hai thành phần có khối lượng nhẹ có thể di chuyển giữa các nút mạng. Thêm vào đó chúng ta sẽ tính đến tương tác

đẩy cục bộ giữa các trạng thái thành phần của các hạt. Mô hình Falicov-Kimball ba thành phần có thể được hiện thực hoá bằng cách tải hỗn hợp của hai loại nguyên tử fermion vào một mạng tinh thể quang học. Một loại là nguyên tử nặng một thành phần (đơn spin) và loại kia là nguyên tử nhẹ hai thành phần (spin bằng $1/2$). Hỗn hợp nguyên tử cực lạnh như vậy có thể được hiện thực hoá bằng hỗn hợp ^{40}K với ^6Li , hoặc ^6Li hay ^{40}K với đồng vị fermion nặng của Sr hoặc Yb . Khi các hỗn hợp được tải vào một mạng tinh thể quang học với độ sâu của mạng lớn, các nguyên tử nặng thường có tốc độ xuyên hầm giữa các hố thế của mạng quang học ở các nút mạng thấp hơn nhiều so với các nguyên tử nhẹ [38]. Khi độ sâu mạng tinh thể đủ lớn thì có thể bỏ qua khả năng xuyên hầm của các nguyên tử nặng so với nguyên tử nhẹ. Hỗn hợp tương tự của hai loại nguyên tử fermion một thành phần cũng được đề xuất để tạo ra mô hình Falicov-Kimball không spin [39]. Mô hình Falicov-Kimball ba thành phần có thể được xem như là trường hợp bổ sung cho mô hình Hubbard ba thành phần, khi xảy ra sự mất cân bằng khối lượng cực lớn. Thông thường, mô hình Falicov-Kimball được áp dụng để mô tả chuyển pha kim loại-điện môi trong đất hiếm và các hợp chất kim loại chuyển tiếp [40]. Phiên bản không spin của mô hình Falicov-Kimball có giản đồ pha phong phú và đặc biệt, các trạng thái đồng nhất cho thấy khả năng tồn tại chuyển pha kim loại-điện môi do tương quan. Ở nhiệt độ thấp, các trạng thái sóng mật độ điện tích sẽ được thiết lập [41]. Mô hình Falicov-Kimball có thể được mở rộng để nghiên cứu các hiện tượng vật lý khác nhau. Mở rộng đa thành phần của mô hình Falicov-Kimball cũng được xem xét [45,46]. Nhưng các mở rộng này chỉ là một cách mở rộng biến số spin một cách hình thức, trong tương tác Coulomb cục bộ giữa các thành phần linh động không được xem xét đến. Trong luận án này, mô hình Falicov-Kimball ba thành phần mà chúng tôi đề xuất tính đến tất cả các tương tác Coulomb cục bộ giữa các thành phần, bất kể là linh động hay định xứ.

Mô hình Falicov-Kimball ba thành phần cũng có thể được coi là sự kết hợp của mô hình Hubbard hai thành phần linh động và mô hình Falicov-Kimball không spin của các hạt định xứ một thành phần. Khi lấp đầy một

nửa, mô hình Hubbard thể hiện một chuyển pha kim loại-điện môi được điều khiển bởi tương tác Coulomb [8]. Chuyển pha kim loại-điện môi có tính không liên tục [47,48]. Khi lấp đầy một nửa, mô hình Falicov-Kimball không spin cũng hiển thị một chuyển pha kim loại-điện môi, mặc dù chuyển pha kim loại-điện môi này có tính liên tục [32]. Khi tương tác Coulomb đủ lớn, nó sẽ chặn các hạt nhảy nút và làm cho các hạt đó định xứ tại các nút mạng. Kết quả là, trạng thái điện môi được thiết lập. Người ta cho rằng mô hình Falicov-Kimball ba thành phần thể hiện một giản đồ pha phong phú cho chuyển pha kim loại-điện môi.

Chúng tôi nghiên cứu mô hình Falicov-Kimball ba thành phần bằng cách sử dụng lý thuyết trường trung bình động (dynamical mean field theory) (DMFT) với phương pháp chéo hoá chính xác (exact diagonalization) (ED). Lý thuyết trường trung bình động đã được sử dụng rộng rãi và thành công trong việc nghiên cứu các hệ các điện tử tương quan mạnh [27,47-50]. Nó cũng được áp dụng rộng rãi để nghiên cứu mô hình Falicov-Kimball [32,50]. Các nghiên cứu trước đây về chuyển pha kim loại-điện môi trong mô hình Hubbard ba thành phần cũng dựa trên lý thuyết trường trung bình động [19,20]. Ưu điểm của lý thuyết trường trung bình động là chính xác khi số chiều không gian vô hạn và tính được thăng giáng cục bộ đầy đủ theo thời gian. Tuy nhiên, lý thuyết trường trung bình động không tính được các tương quan phi cục bộ giữa các hạt. Chúng tôi sẽ xây dựng lý thuyết trường trung bình động cho mô hình Falicov-Kimball ba thành phần và sử dụng kết quả tính số của nó để khảo sát điều kiện tồn tại và tính chất của chuyển pha kim loại-điện môi có thể xảy ra trong mô hình.

3.2. Mô hình Falicov-Kimball ba thành phần và lý thuyết trường trung bình động

Chúng tôi xét mô hình FKM ba thành phần mô tả một hỗn hợp của các hạt fermion nặng một thành phần và các hạt fermion nhẹ hai thành phần được tải vào trong một mạng quang học. Các hạt nặng được định xứ

tại các nút mạng, trong khi các hạt nhẹ có thể di chuyển vị trí của mình trong mạng tinh thể. Hamiltonian của hệ có dạng như sau:

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + U_{cc} \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} + E_f \sum_i f_i^\dagger f_i + U_{cf} \sum_{i\sigma} f_i^\dagger f_i c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \quad (3.1)$$

trong đó $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) là toán tử sinh (hủy) một hạt fermion có số biến (hoặc spin) σ tại vị trí i , với σ nhận hai giá trị ± 1 và t là tham số nhảy nút của các hạt fermion hai thành phần và chúng tôi chỉ tính đến việc nhảy nút giữa các vị trí lân cận gần nhất. U_{cc} là tương tác Coulomb cục bộ giữa các trạng thái hai thành phần của các hạt đó. $f_i^\dagger$ (f_i) là toán tử sinh (hủy) một hạt fermion một thành phần (hoặc không spin) tại vị trí i . U_{cf} là tương tác Coulomb cục bộ giữa các hạt hai thành phần và các hạt một thành phần. Hạt một thành phần không chuyển động và mức năng lượng của nó là E_f , ở đây E_f cũng có thể được coi là thế hóa học của các hạt định xứ và kiểm soát sự lấp đầy của chúng. Với $n_f = \sum_i \langle f_i^\dagger f_i \rangle / N$, trong đó N là số nút mạng tinh thể. Một thế hóa học chung μ được đưa vào để kiểm soát mật độ số hạt toàn phần $n = \sum_\sigma n_{c\sigma} + n_f$, trong đó $n_{c\sigma} = \sum_i \langle c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma} \rangle / N$. Mô hình Falicov-Kimball ba thành phần có hai trường hợp giới hạn. Khi $U_{cf} = 0$ các hạt hai thành phần và một thành phần độc lập với nhau, Hamiltonian của các hạt hai thành phần chỉ là mô hình Hubbard thông thường, nó thể hiện chuyển pha kim loại-điện môi khi mật độ số hạt bằng 1 (hay còn gọi là lấp đầy một nửa) [27]. Khi $U_{cc} = 0$, mô hình trong biểu thức (3.1) tương đương với mô hình Falicov-Kimball không spin [40]. Trong lý thuyết trường trung bình động pha đồng nhất của nó cũng mô tả được chuyển pha kim loại-điện môi [32]. Tuy nhiên, pha kim loại không phải là chất lỏng Fermi do thế hóa học ghim tại mức năng lượng của các hạt định xứ [51]. Đối với mô hình Falicov-Kimball thì chuyển pha kim loại-điện môi không phải là liên tục. Mô hình trong biểu thức (3.1) cũng có thể được xem như là một phiên bản giản lược của mô hình Hubbard ba thành phần [19,20] với sự mất cân bằng khối lượng cực lớn, trong đó các hạt một thành phần được coi là nặng và định xứ. Mô hình Falicov-Kimball ba thành phần

có thể hiện thực hoá bằng cách nạp các hỗn hợp của các hạt fermion nặng một thành phần và các hạt fermion nhẹ hai thành phần vào một mạng quang học. Trong một mạng có hố thế đủ sâu, tỷ lệ nhảy nút của các hạt nặng nhỏ hơn nhiều so với tỷ lệ nhảy nút của các hạt nhẹ và nó có thể được bỏ qua. Trong mô hình của biểu thức (3.1) chúng tôi cũng bỏ qua các bẫy được tạo ra bởi các hố thế do mạng quang học.

Chúng tôi nghiên cứu mô hình Falicov-Kimball ba thành phần bằng cách sử dụng lý thuyết trường trung bình động. Trong DMFT, năng lượng riêng của hệ là một hàm của tần số và không phụ thuộc vào động lượng. Hàm Green của các hạt hai thành phần khi đó có dạng:

$$G(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu - \varepsilon_{\mathbf{k}} - \sum (i\omega_n)}, \quad (3.2)$$

trong đó ω_n là tần số Matsubara, $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ là hệ thức tán sắc của các hạt hai thành phần, $\sum (i\omega_n)$ là năng lượng riêng. Ở đây, chúng tôi quan tâm đến pha đồng nhất của tất cả các thành phần, do đó chỉ số thành phần σ của năng lượng riêng của hệ được bỏ qua. Năng lượng riêng của hệ được xác định từ bài toán hiệu dụng của hạt hai thành phần được đặt trong một môi trường tự hợp. Hàm tác động mô tả bài toán hiệu dụng có dạng

$$\begin{aligned} S_{\text{imp}} = & - \int_0^\beta \int_0^\beta d\tau d\tau' \sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger}(\tau) \mathcal{G}^{-1}(\tau - \tau') + c_{\sigma}(\tau') \\ & + U_{cc} \int_0^\beta d\tau \left(c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\uparrow} c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\downarrow} \right)(\tau) \\ & + (E_f - \mu) \int_0^\beta d\tau f^{\dagger}(\tau) f(\tau) \\ & + U_{cf} \int_0^\beta d\tau \sum_{\sigma} (c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} f^{\dagger} f)(\tau), \end{aligned} \quad (3.3)$$

trong đó $\mathcal{G}(\tau)$ là một hàm Green đặc trưng cho môi trường trung bình. Nó liên quan đến năng lượng riêng và hàm Green theo phương trình Dyson

$$\mathcal{G}^{-1}(i\omega_n) = G^{-1}(i\omega_n) + \Sigma(i\omega_n). \quad (3.4)$$

Ở đây, hàm Green cục bộ là

$$G(i\omega_n) = \int d\varepsilon \rho_0(\varepsilon) \frac{1}{i\omega_n + \mu - \sum (i\omega_n) - \varepsilon}, \quad (3.5)$$

trong đó $\rho_0(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}})$ là hàm mật độ các trạng thái (DOS) không tương tác. Chúng tôi sử dụng hàm mật độ trạng thái không tương tác này có dạng nửa hình tròn:

$$\rho_0(\varepsilon) = \frac{2}{\pi D^2} \sqrt{D^2 - \varepsilon^2}, \quad (3.6)$$

trong đó D là một nửa độ rộng của dải năng lượng. Chúng tôi dùng D làm đơn vị năng lượng. Với hàm mật độ trạng thái như trên, từ công thức (3.4) và (3.5) chúng tôi thu được [27]

$$\mathcal{G}^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \frac{D^2}{4} G(i\omega_n). \quad (3.7)$$

Có thể nhận thấy rằng số lượng các hạt cục bộ trong hàm tác động hiệu dụng trong biểu thức (3.3) được bảo toàn. Nó chỉ có thể nhận hai giá trị: 0 và 1. Do đó, vết trong tổng thống kê có thể tính một cách độc lập trong các không gian con có $f^\dagger f = 0, 1$. Chúng ta thu được

$$\begin{aligned} Z_{imp} &= \text{Tr}_f \int \prod_{\sigma} Dc_{\sigma}^{\dagger} Dc_{\sigma} e^{-S_{imp}} \\ &= \int \prod_{\sigma} Dc_{\sigma}^{\dagger} Dc_{\sigma} e^{-S_0[c_{\sigma}^{\dagger}, c_{\sigma}]} \\ &\quad + e^{-\beta(E_f - \mu)} \int \prod_{\sigma} Dc_{\sigma}^{\dagger} Dc_{\sigma} e^{-S_l[c_{\sigma}^{\dagger}, c_{\sigma}]} \\ &= Z_0 + e^{-\beta(E_f - \mu)} Z_l, \end{aligned} \quad (3.8)$$

Trong đó

$$Z_m = \int \prod_{\sigma} Dc_{\sigma}^{\dagger} Dc_{\sigma} e^{-S_m[c_{\sigma}^{\dagger}, c_{\sigma}]}, \quad (3.9)$$

$$\begin{aligned} S_m[c_s^{\dagger}, c_s] &= - \int_0^b \int_s^b dt dt' \sum_s c_s^{\dagger}(t) [G^{-1}(t - t') \\ &\quad - m U_{cf} d(t - t')] c_s(t') + U_{cc} \int_0^b dt \left(c_{-}^{\dagger} c_{-} c^{\dagger} c^{-} \right)(t), \end{aligned} \quad (3.10)$$

với ký hiệu $m = 0, 1$. Ngược lại với trường hợp không spin (spinless) của mô hình Falicov-Kimball [32,50] tổng thống kê trong biểu thức (3.9) không thể tính được tường minh. Nó có cùng dạng tổng thống kê trong mô hình

Hubbard nhúng trong một môi trường trường trung bình hiệu dụng [27]. Giả sử chúng ta có thể tính được tổng thống kê trong biểu thức (3.10) và khi đó thu được hàm Green

$$G_m(iw_n) = -\frac{\delta \ln Z_m}{\delta \lambda(iw_n)} = \frac{1}{iw_n + \mu - \lambda(iw_n) - mU_{cf} - \Sigma_m(iw_n)}, \quad (3.11)$$

trong đó $\lambda(iw_n) = iw_n + \mu - \mathcal{G}^{-1}(iw_n)$, và $\Sigma_m(iw_n)$ là năng lượng riêng tương ứng do tương tác Coulomb cục bộ U_{cc} . Khi năng lượng riêng $\Sigma_m(iw_n)$ đã được biết, hàm Green trong biểu thức (3.3) cũng có thể xác định được. Chúng ta thu được:

$$\begin{aligned} G_{imp}(i\omega_n) &= -\frac{\delta \ln Z_{imp}}{\delta \lambda(i\omega_n)} \\ &= \frac{w_0}{i\omega_n + \mu - \lambda(i\omega_n) - \Sigma_0(i\omega_n)} \\ &\quad + \frac{w_1}{i\omega_n + \mu - \lambda(i\omega_n) - U_{cf} - \Sigma_1(i\omega_n)}, \end{aligned} \quad (3.12)$$

trong đó

$$w_m = \frac{e^{-m\beta(E_f - \mu)} Z_m}{Z_{imp}}. \quad (3.13)$$

Chúng ta nhận thấy rằng $w_0 + w_1 = 1$, và w_1 có ý nghĩa mật độ số hạt cục bộ. Về cơ bản, hàm Green trong biểu thức (3.12) có cùng cấu trúc với hàm Green cục bộ của trường hợp không spin [32,50], ngoại trừ năng lượng riêng bổ sung $\Sigma_m(i\omega_n)$ do tương tác Coulomb cục bộ giữa các hạt linh động. Điều kiện tự hợp của DMFT yêu cầu hàm Green thu được từ tác động trong biểu thức (3.3) phải trùng với hàm Green cục bộ trong biểu thức (3.5), có nghĩa là.

$$G_{imp}(i\omega_n) = G(i\omega_n). \quad (3.14)$$

Như vậy chúng ta có được một hệ phương trình tự hợp xác định hàm Green. Nó có thể được giải bằng tính số bằng phương pháp lặp lại [27]. Phần tính số tốn thời gian nhất là tính tổng thống kê và hàm tác động S_m trong biểu thức (3.9). Chúng tôi áp dụng ED để giải nó [27,33]. Biểu thức (3.10) mô tả động lực học của một tạp với tương tác đầy. Về cơ bản

nó tương đương với mô hình tạp Anderson:

$$H_m = (\mu - mU_{cf}) \sum_{\sigma} c_{\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + U_{cc} c_{\uparrow}^{\dagger} c_{\uparrow} c_{\downarrow}^{\dagger} c_{\downarrow} + \sum_{p,\sigma} V_p a_{p\sigma}^{\dagger} c_{\sigma} + H.c + \sum_{p,\sigma} E_p a_{p\sigma}^{\dagger} a_{p\sigma}, \quad (3.15)$$

trong đó $a_{p\sigma}^{\dagger}$ ($a_{p\sigma}$) là toán tử sinh (hủy), đại diện cho một bề dẫn với mức năng lượng E_p . V_p là lai hoá của tạp với bề dẫn. Mối liên hệ giữa mô hình tạp Anderson trong biểu thức (3.15) và hàm tác động trong biểu thức (3.10) là hệ thức sau đây của các thông số: [27,33]

$$\sum_p \frac{V_p^2}{i\omega_n - E_p} = \lambda(i\omega_n). \quad (3.16)$$

Để thực hiện ED, bề dẫn được giới hạn với số các quỹ đạo hữu hạn n_s ($p = 1, 2, \dots, n_s$). Khi đó, hàm Green của bề dẫn được xấp xỉ bằng

$$\mathcal{G}_{n_s}^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - mU_{cf} - \lambda_{n_s}(i\omega_n), \quad (3.17)$$

trong đó $\lambda_{n_s}(i\omega_n) = \sum_{p=1}^{n_s} V_p^2 / (i\omega_n - E_p)$. Các thông số của bề dẫn được xác định từ điều kiện cực tiểu của đại lượng sau.

$$d = \frac{1}{M+1} \sum_{n=0}^M \omega_n^{-k} |\mathcal{G}^{-1}(i\omega_n) - \mathcal{G}_{n_s}^{-1}(i\omega_n)|^2, \quad (3.18)$$

trong đó M là số tần số Matsubara được tính đến trong tính toán [27,33]. Tham số k được đưa vào để làm nổi bật vai trò của tần số Matsubara trong quá trình thực hiện phép lặp [27,33]. Ở đây d có thể hiểu như là tổng trung bình khoảng cách giữa giá trị $\mathcal{G}^{-1}(i\omega_n)$ và xấp xỉ của nó với $\mathcal{G}_{n_s}^{-1}(i\omega_n)$. Với $k > 0$ các tần số ω_n nhỏ đóng vai trò thành yếu trong quá trình xấp xỉ [27,33]. Cụ thể chúng tôi lấy $k = 1$ trong các phép tính số. Chúng tôi sử dụng gói chương trình LISA để tìm các thông số của bề dẫn cũng như để thực hiện ED [10]. Khi các thông số của bề dẫn được xác định, chúng tôi tính hàm Green của tạp Anderson trong biểu thức (3.15) bằng ED [27,33]. Cụ thể, các kết quả tính số được trình bày trong các phần sau thu được với $n_s = 4$. Đối với mô hình Hubbard một dải năng lượng, kích thước bề

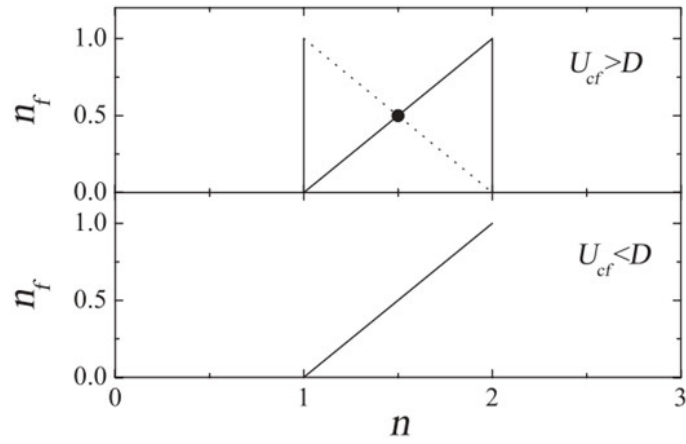
dẫn $n_s = 4$ đã cho kết quả định lượng tốt ở nhiệt độ thấp so với với mô phỏng Monte Carlo [27]. Chúng tôi cũng đã kiểm tra một số kết quả tính số bằng cách so sánh chúng với kết quả được tính toán với kích thước bể $n_s = 5$ [52]. Sau khi ED được thực hiện, chúng tôi tính hàm Green và năng lượng riêng ở nhiệt độ $T = 0,01$. Chúng tôi xét bể ở tập chính tắc lớn và lấy mật độ số hạt các hạt cục bộ n_f làm tham số đầu vào, thay vì mức năng lượng E_f . Như chúng ta đã nhận thấy $w_1 = n_f$ đã đơn giản hóa các phép tính số.

3.3. Chuyển pha kim loại-điện môi

3.3.1. Trường hợp cho mật độ số hạt tổng quát

Như chúng ta đã đề cập trong phần trước, mô hình Falicov-Kimball ba thành phần có hai trường hợp giới hạn đáng quan tâm. Khi $U_{cf} = 0$, Hamiltonian của các hạt linh động chỉ là mô hình Hubbard thông thường. Khi mật độ số hạt bằng 1 hay còn gọi là lấp đầy một nửa, chuyển pha kim loại-điện môi xảy ra ở nhiệt độ thấp và quá trình chuyển pha này thuộc loại một. Trong lý thuyết trường trung bình động có một khoảng hữu hạn của tương tác Coulomb $U_{c1} < U_{cc} < U_{c2}$, nơi mà cả hai pha kim loại và điện môi cùng tồn tại [27,47]. Khi $U_{cc} = 0$, mô hình Falicov-Kimball ba thành phần tương đương với mô hình Falicov-Kimball một thành phần không spin. Đối với pha đồng nhất, một chuyển pha kim loại-điện môi cũng xuất hiện khi số hạt lấp đầy một nửa. Ngược lại với mô hình Hubbard một dải năng lượng quá trình chuyển pha này diễn ra liên tục tại điểm pha $U_{cf}^c = D$. Chuyển pha kim loại-điện môi có thể xảy ra khi tương tác U_{cc} và U_{cf} thay đổi. Trước tiên, chúng tôi tổng kết các điều kiện về mật độ số hạt mà tại đó chuyển pha kim loại-điện môi có thể xảy ra. Trong Hình 3.1, chúng tôi vẽ giản đồ mật độ số hạt khi chuyển pha kim loại-điện môi xảy ra. Các đường trong hình này biểu thị các giá trị mật độ số hạt của n và n_f mà tại đó chuyển pha kim loại-điện môi có thể xảy ra. Ngoài các đường đó, không quan sát thấy có bất kỳ chuyển pha kim loại-điện môi nào khác.

Cũng có khả năng xảy ra sự chuyển pha từ chất điện môi sang kim loại khi tương tác tăng lên. Chúng tôi gọi quá trình chuyển pha là chuyển pha kim loại-điện môi nghịch đảo. Trong Hình 3.1, điều kiện mật độ số hạt cho chuyển pha kim loại-điện môi nghịch đảo được trình bày bằng đường chấm. Giả sử mật độ số hạt sẽ khác nhau khi $U_{cf} > D$ và $U_{cf} < D$ như trình bày trong Hình 3.1. Trong pha đồng nhất, $n = 2n_{c\sigma} + n_f$, chuyển pha kim loại-điện môi có thể xảy ra khi $1 < n < 2$. Trong trường hợp này với $n_{c\sigma} = 1/2$ luôn luôn độc lập cho dù $U_{cf} > D$ hay $U_{cf} < D$. Do đó, chuyển pha kim loại-điện môi chỉ được điều khiển bằng U_{cc} giống như trong mô hình Hubbard một dải năng lượng.



Hình 3.1: Giả đồ mật độ số hạt cho MIT. Nét liền biểu thị các giá trị mật độ số hạt của (n, n_f) tăng, mà tại đó MIT có thể xảy ra và nét chấm biểu thị các giá trị mật độ số hạt của (n, n_f) cho sự xuất hiện của MIT nghịch đảo. Điểm chấm đen cho biết giá trị lấp đầy ($n = 3/2, n_f = 1/2$) đối với MIT tái nhập.

Khi chuyển pha kim loại-điện môi chỉ có thể xảy ra ở $n_{c\sigma} = 1/2$ trong đó mọi vị trí nút mạng tinh thể đều có một hạt chiếm giữ và tương tác Coulomb cục bộ mạnh của chúng không cho phép các hạt khác chiếm trạng thái vào vị trí đó. Chuyển pha kim loại-điện môi như vậy có thể được hiểu là chuyển pha kim loại-điện môi chọn lọc loại hạt, trong đó các hạt hai thành phần định xứ do tương tác Coulomb của chúng. Số lượng các hạt nặng cũng như tương tác Coulomb của chúng với các hạt nhẹ không ảnh hưởng đến chuyển pha kim loại-điện môi này. Chúng ta cũng có thể kỳ

vọng chuyển pha kim loại-điện môi này là chuyển pha loại một. Trong Hình 3.1, ta thấy rằng chuyển pha kim loại-điện môi cũng có thể xảy ra khi $n = 1$ hoặc $n = 2$ đối với $U_{cf} > D$. Trong trường hợp này, mật độ các hạt hai thành phần và một thành phần có thể tùy ý, nhưng tổng mật độ số hạt của chúng luôn bằng 1 hay 2. Mật độ số hạt toàn phần như vậy thông ước với số thành phần các hạt. Tại $n = 1$, mọi vị trí mạng được một hạt của bất kỳ thành phần nào chiếm giữ. Tương tác Coulomb (cả U_{cc} và U_{cf}) ngăn chặn bất kỳ sự chiếm đóng đôi nào của các hạt. Tại $n = 2$, kích bản tương tự cũng xảy ra như trong trường hợp $n = 1$, nhưng đối với các nút mạng thì không có hạt nào chiếm giữ. Chúng tôi gọi MIT này là chuyển pha kim loại-điện môi thông ước. Chuyển pha kim loại-điện môi thông ước tương tự cũng xảy ra trong mô hình Hubbard ba thành phần [19,20].

Trong chuyển pha kim loại-điện môi thông ước, các hạt nhẹ và nặng đóng vai trò ngang nhau. Tương tác Coulomb ngăn chặn bất kỳ sự chiếm đóng đôi nào của các hạt. Ngoài chuyển pha kim loại-điện môi chọn lọc loại hạt và thông ước, chúng tôi cũng quan sát thấy chuyển pha kim loại-điện môi nghịch đảo. Chuyển pha kim loại-điện môi nghịch đảo có thể xảy ra khi $n_{c\sigma} + n_f = 1$ và $U_{cf} > D$. Các điều kiện này tương tự như các điều kiện chuyển pha kim loại-điện môi trong mô hình Falicov-Kimball không spin [32]. Trong trường hợp này, mọi vị trí của mạng đều có một hạt nhẹ hoặc một hạt nặng chiếm giữ. Tương tác Coulomb giữa các hạt nhẹ và hạt nặng không cho phép chúng chiếm đóng tại cùng một vị trí. Khi $U_{cc} = 0$ hệ đang ở pha điện môi, chúng ta có thể mong đợi rằng khi U_{cc} tăng lên thì hệ sẽ chuyển sang pha kim loại. Khi có cả chuyển pha kim loại-điện môi và chuyển pha kim loại-điện môi nghịch đảo xảy ra, hiệu ứng tái nhập của chuyển pha kim loại-điện môi có thể xảy ra. Nó xảy ra khi mật độ số hạt $n = 3/2$ và $n_f = 1/2$.

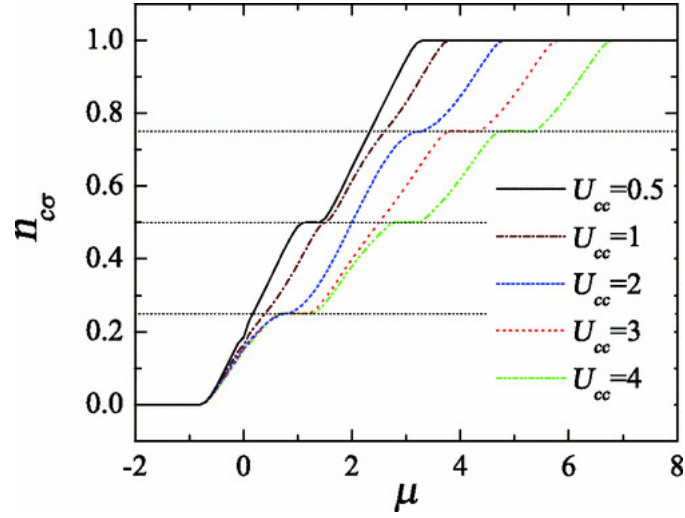
Tiếp theo, chúng tôi trình bày các kết quả tính số để xây dựng giản đồ pha được vẽ trong Hình 3.1. Với mục đích này, chúng tôi nghiên cứu sự phụ thuộc của mật độ số hạt $n_{c\sigma}$ vào thế hóa học μ ở một giá trị n_f cho trước. Trong pha điện môi khi thế hóa học nằm trong vùng cấm thì mật độ số hạt $n_{c\sigma}$ không thay đổi. Đồ thị mật độ số hạt $n_{c\sigma}$ như là một

hàm của thể hóa học sẽ biểu thị sự không đổi của hàm số khi thể hóa học nằm trong khoảng vùng cấm. Trong Hình 3.2, chúng tôi trình bày các kết quả tính số cho n_c thu được bằng cách giải các phương trình tự hợp của lý thuyết trường trung bình động kết hợp với phương pháp chéo hóa chính xác dưới dạng một hàm của thể hóa học tại $n_f = 1/2$ và $U_{cf} = 2$. Vì $U_{cf} > D$, rõ ràng đối với các giá trị nhỏ của U_{cc} , pha điện môi xuất hiện ở $n_{c\sigma} = 1/2$. Trong pha điện môi này, mỗi vị trí mạng tinh thể bị chiếm giữ bởi một hạt nhẹ hoặc một hạt nặng, và tương tác Coulomb giữa chúng ngăn cản sự chiếm đóng đôi của chúng. Trong hình 3.2, nó được thể hiện bằng đoạn nằm ngang của đường $n_{c\sigma}(\mu)$ với $U_{cc} = 0, 5$. Khi tăng U_{cc} , hệ chuyển sang pha kim loại, trong đó đồ thị của $n_{c\sigma}(\mu)$ không thể hiện bất kỳ đoạn thẳng nằm ngang nào. Đó là MIT nghịch đảo, xảy ra khi tổng số $n_{c\sigma} + n_f = 1$. Khi U_{cc} tăng thêm, đồ thị của $n_{c\sigma}(\mu)$ bắt đầu phát triển hai đoạn thẳng nằm ngang tại $n_{c\sigma} = 1/4$ và $3/4$, tương ứng với mật độ số hạt toàn phần $n = 1$ và 2 . Các đoạn nằm ngang này là chỉ dấu cho pha điện môi tại mật độ số hạt toàn phần bằng 1 hay 2, MIT tương ứng có tính thông ước.

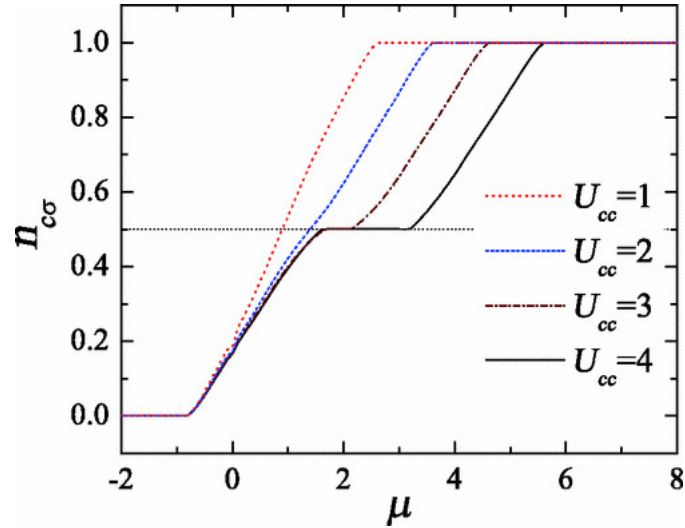
Đối với U_{cc} đủ lớn, một đoạn thẳng nằm ngang bổ sung xuất hiện ở $n_{c\sigma} = 1/2$ cho thấy có pha điện môi ở $n_{c\sigma} = 1/2$. Do đó, tại $n_{c\sigma} = 1/2$, có một pha điện môi trở lại. Tuy nhiên, trái ngược với pha điện môi ở các giá trị nhỏ U_{cc} , trong pha điện môi này, mỗi vị trí mạng được chiếm bởi một hạt nhẹ và tương tác Coulomb của chúng ngăn cản sự chiếm đóng đôi của các hạt, bởi vì một MIT cũng xảy ra ở U_{cf} nhỏ. MIT chọn lọc loại hạt này không phụ thuộc vào U_{cf} cũng như mật độ số hạt các hạt nặng.

Trong Hình 3.3, chúng tôi vẽ đồ thị mật độ số hạt linh động $n_{c\sigma}$ tại $U_{cf} = 0,8$ và $n_f = 1/2$. Trong trường hợp này $U_{cf} < D$, do đó hệ là kim loại khi $U_{cc} = 0$. Tương quan yếu của các hạt nhẹ không thể đẩy hệ ra khỏi trạng thái kim loại. Tuy nhiên, khi U_{cc} tăng thêm nữa, các tương quan giữa các hạt sẽ đẩy hệ sang trạng thái điện môi. Nó được thể hiện trong Hình 3.3, như đoạn thẳng nằm ngang trong đồ thị của $n_{c\sigma}(\mu)$ xuất hiện MIT xảy ra ở $n_{c\sigma} = 1/2$, và nó là MIT chọn lọc loại hạt. Đối với $U_{cf} < D$, chúng tôi không quan sát thấy bất kỳ MIT nào ở mật độ số hạt toàn phần

ở 1 hay 2. Tương quan giữa các hạt nhẹ và nặng không đủ mạnh để ngăn chúng chiếm cùng một vị trí. Do đó, không thể có MIT thông ước.



Hình 3.2: Mật độ số hạt linh động nco như là một hàm của thế hóa học μ tại $n_f = 1/2$ đối với các giá trị khác nhau của U_{cc} và $U_{cf} = 2$. Nét chấm biểu thị $n_{c\sigma} = 1/4$, $n_{c\sigma} = 1/2$, và $n_{c\sigma} = 3/4$ ($T = 0.01$, $D = 1$).



Hình 3.3: Mật độ số hạt linh động là một hàm của thế hóa μ tại $n_f = 1/2$ đối với các giá trị khác nhau của U_{cc} và $U_{cf} = 0.8$. Nét chấm biểu thị $n_{c\sigma} = 1/2$ ($T = 0.01$, $D = 1$).

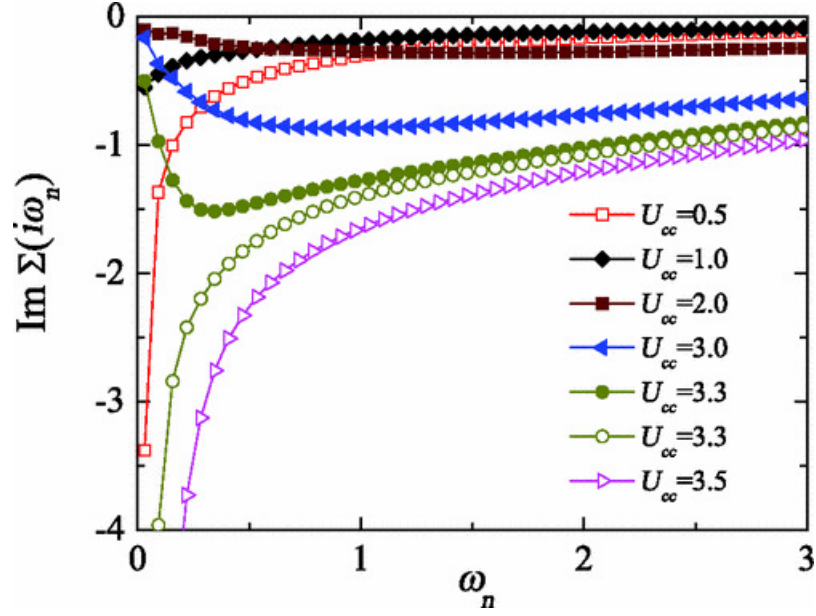
Chúng tôi đã kiểm tra những kết quả tìm thấy ở trên này bằng cách phân tích kết quả tính số cho cả hai trường hợp $U_{cf} > D$ và $U_{cf} < D$ khi mật độ số hạt toàn phần có dạng tổng quát $n_f = p/q$, trong đó p, q

là số nguyên ($p < q$). Tóm lại, FKM ba thành phần thể hiện MIT khác nhau tùy thuộc vào mật độ số hạt và tương tác Coulomb. MIT có thể là chuyển pha chọn lọc loại hạt, thông ước hoặc nghịch đảo. MIT chọn lọc loại hạt xảy ra ở $n_{c\sigma} = 1/2$, trong khi MIT thông ước chỉ xảy ra ở một phần ba hoặc hai phần ba tổng số lấp đầy. MIT nghịch đảo có thể xảy ra ở $n_{c\sigma} + n_f = 1$ và $U_{cf} > D$. Những MIT này có thể được quan sát bằng cách nạp hỗn hợp các nguyên tử fermion nhẹ và nặng vào một mạng quang học có độ sâu mạng tinh thể đủ lớn. Bằng cách đo các số cư trú đôi giữa các hạt nhẹ, giữa các hạt nhẹ và nặng, người ta có thể phát hiện ra các MIT này. Các mật độ số hạt toàn phần bằng $3/2$ và 1 là hai trường hợp đặc biệt của MIT. Trong hai phần tiếp theo, chúng tôi sẽ trình bày nghiên cứu chi tiết tất các trường hợp này.

3.3.2. Trường hợp mật độ số hạt toàn phần bằng $3/2$

Trong phần này, chúng ta sẽ nghiên cứu chi tiết về MIT ở mật độ số hạt toàn phần bằng $3/2$. Chúng ta đã thấy trong Hình 3.1 rằng tại mật độ số hạt toàn phần $n = 3/2$, MIT chỉ có thể xảy ra khi $n_{c\sigma} = n_f = 1/2$. Trong trường hợp này $\mu = (U_{cc} + U_{cf})/2$. Trong hình 3.4, chúng tôi trình bày các kết quả tính số cho phần ảo của năng lượng riêng $\text{Im } \Sigma(i\omega_n)$ của các hạt nhẹ đối với các giá trị khác nhau của U_{cc} và U_{cf} cố định.

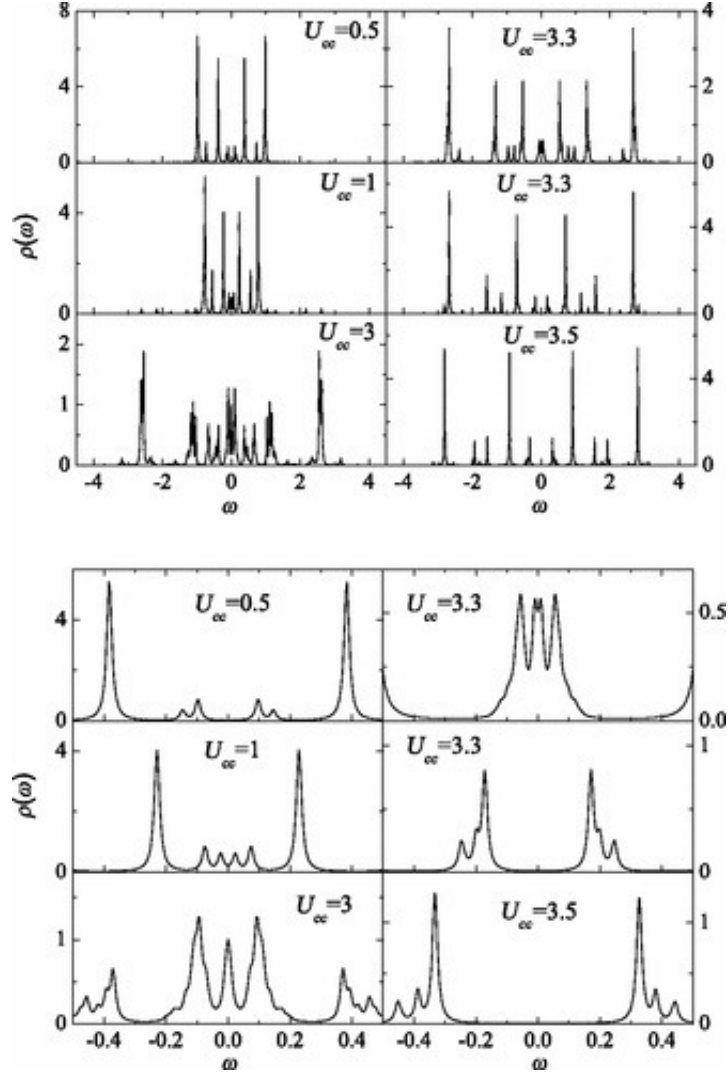
Tính chất của $\text{Im } \Sigma(i\omega_n)$ ở tần số thấp cho biết đặc tính dẫn của hệ. Khi $\text{Im } \Sigma(i\omega_n)$ phân kỳ khi $\omega_n \rightarrow 0$, hệ có tính điện môi, còn khi $\text{Im } \Sigma(i\omega_n) \rightarrow 0$ khi $\omega_n \rightarrow 0$, hệ là kim loại. Nếu $\lim_{\omega_n \rightarrow 0} \text{Im } \Sigma(i\omega_n)$ là hữu hạn, hệ vẫn là kim loại, nhưng nó không có các tính chất của chất lỏng Fermi. Vì trong Hình 3.4, $U_{cf} > D$, chúng ta có thể mong đợi rằng hệ là điện môi đối với các giá trị nhỏ của U_{cc} . Thật vậy, trong Hình 3.4, chúng ta có thể thấy rằng $\text{Im } \Sigma(i\omega_n)$ phân kỳ khi $\omega_n \rightarrow 0$ đối với $U_{cc} = 0, 5$, cho thấy trạng thái điện môi của hệ. Khi U_{cc} tăng dần, $\text{Im } \Sigma(i\omega_n)$ ngừng phân kỳ khi $\omega_n \rightarrow 0$, và hệ mang tính kim loại. Tuy nhiên, $\text{Im } \Sigma(i\omega_n)$ có thể hướng đến một giá trị hữu hạn khi $\omega_n \rightarrow 0$. Trong Hình 3.4, biểu hiện như vậy được thể hiện với $U_{cc} = 1$ và 2 . Tiếp theo giá trị hữu hạn $\text{Im } \Sigma(i\omega_n)$ khi $\omega_n \rightarrow 0$ trở nên nhỏ hơn khi U_{cc} tăng. Khi U_{cc} tăng thêm, $\text{Im } \Sigma(i\omega_n)$ có



Hình 3.4: Phần ảo của năng lượng riêng của các hạt nhẹ tại mật độ số hạt toàn phần $n = 3/2$ với các giá trị khác nhau U_{cc} và cố định $U_{cf} = 1.6$. ($T = 0.01$, $D = 1$).

xu hướng giảm giá trị khi $\omega_n \rightarrow 0$ về không. Kết quả này giống như đối với chất lỏng Fermi. Biểu hiện như vậy được thể hiện trên Hình 3.4 với $U_{cc} = 3$. Khi U_{cc} tiếp tục tăng lên, $\text{Im } \Sigma(i\omega_n)$ phân kỳ khi $\omega_n \rightarrow 0$ và hệ lại quay về pha điện môi. Tuy nhiên, giữa pha kim loại và pha điện môi, chúng tôi phát hiện một vùng hữu hạn, nơi cả trạng thái kim loại và trạng thái điện môi cùng tồn tại. Đặc điểm này tương tự như MIT trong mô hình Hubbard một dải năng lượng [27,47]. Trong Hình 3.4, chúng tôi trình bày cả năng lượng riêng ứng với trạng thái kim loại và năng lượng ứng với trạng thái điện môi, trong vùng này $U_{cc} = 3.3$, trong vùng các pha kim loại và pha điện môi riêng biệt không tồn tại đồng lập. Nó tương tự như điểm tới hạn của khí cổ điển, khi ở đó không tồn tại ranh giới pha giữa pha khí và pha lỏng. Xét về đặc tính năng lượng riêng của hệ, chúng ta quan sát thấy sự xuất hiện trở lại của pha điện môi trong vùng $U_{cf} > D$. Khi U_{cc} tăng từ giá trị 0, hệ trước tiên vẫn duy trì pha điện môi, sau đó tương tác Coulomb chuyển nó vào pha kim loại, và cuối cùng, hệ quay trở lại pha điện môi. MIT sau tương tự như chuyển pha loại 1, và nó vượt qua một vùng hữu hạn nơi cả pha kim loại và pha điện môi cùng tồn tại. Sự chuyển pha được phân tích ở trên cũng có thể quan sát thấy từ biểu hiện

của DOS của các hạt nhẹ. Trong Hình 3.5, chúng tôi vẽ đồ thị hàm mật độ trạng thái $\rho(\omega) = -\text{Im} G(\omega + i\eta)/\pi$ cho các giá trị khác nhau U_{cc} và giữ cố định U_{cf} . Trong ED, chúng ta có thể tính hàm Green cho cả tần số Matsubara và tần số thực. Trong các phép tính số, chúng tôi lấy $\eta = 0,01$ để mở rộng chiều rộng của các hàm delta. Khi DOS cho thấy một khoảng



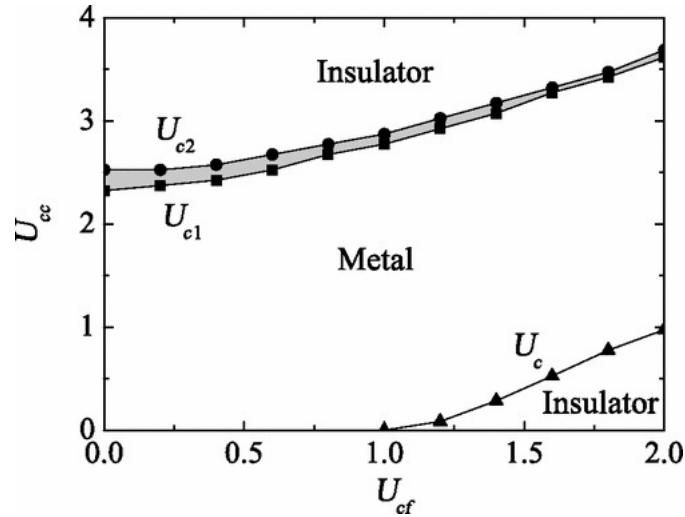
Hình 3.5: DOS tại mức độ lấp đầy một nửa cho các giá trị khác nhau của U_{cc} và $U_{cf} = 1.6$. (Hình bên trên) DOS ở mức năng lượng lấp đầy. (Hình bên dưới) DOS ở mức năng lượng thấp ($T = 0.01, D = 1$).

trống ở vị trí của thể hóa học ($\omega = 0$), hệ là điện môi. Nếu DOS hữu hạn tại $\omega = 0$ thì hệ là kim loại. Hình 3.5 cho thấy MIT giữa $0,5 < U_{cc} < 1$ tại $U_{cf} = 1,6$. Đối với các giá trị nhỏ của U_{cc} , DOS thể hiện một khe năng

lượng ở mức năng lượng Fermi. Với sự tăng lên của U_{cc} , khe năng lượng trở nên nhỏ hơn, và nó biến mất tại điểm pha U_c . Khi $U_{cc} > U_c$, DOS biểu thị một khe năng lượng giả tại $\omega = 0$. Khe năng lượng giả đó được phát triển từ khe năng lượng của pha điện môi. Trong Hình 3.5, kết quả này được thể hiện bằng DOS với $U_{cc} = 1$. Pha với khe năng lượng giả tương ứng với trường hợp giá trị hữu hạn của phần ảo của năng lượng riêng ở mức năng lượng zero. Khi U_{cc} tăng thêm nữa, DOS biểu thị một nhóm các đỉnh hẹp xung quanh $\omega = 0$. Trong Hình 3.5, nó được hiển thị bằng *DOS* với $U_{cc} = 3$. Trong mô hình Hubbard một dải năng lượng, nhóm các đỉnh hẹp ở $\omega = 0$ đại diện cho cộng hưởng Kondo [27,37]. Tuy nhiên, do hiệu ứng kích thước hữu hạn và sự rời rạc của phương pháp ED, cộng hưởng Kondo không xuất hiện ở toàn bộ quy mô. Sự xuất hiện của nhóm các đỉnh hẹp tại $\omega = 0$ có thể được hiểu là tín hiệu của cộng hưởng Kondo. Tuy nhiên, trái ngược với mô hình Hubbard hai thành phần, hàm Green cục bộ ở đây là sự chồng chập của hai hàm Green của hai dải năng lượng con $G_m(\omega)$ như người ta có thể thấy từ biểu thức (3.12). Mỗi hàm Green của một dải năng lượng con được biểu thị bởi một tạp Anderson với tương tác Coulomb U_{cc} được nhúng trong một bể dẫn. Mức năng lượng của tạp Anderson là $\mu - mU_{cf} = (U_{cc} \pm U_{cf})/2$. Tạp Anderson có tính đối xứng khi mức năng lượng của nó được đặt ở $U_{cc}/2$. Vì $U_{cf} > 0$, tạp Anderson không đối xứng. Do đó, cộng hưởng Kondo xuất hiện trong DOS với dải năng lượng con phải bị dịch chuyển từ mức Fermi. Chỉ đối với tạp Anderson đối xứng, cộng hưởng Kondo mới đạt đỉnh ở mức Fermi [21,53]. Do đó, nhóm các đỉnh hẹp tại $\omega = 0$ đại diện cho sự chồng chập của hai đỉnh Kondo đã bị dịch chuyển. Có thể coi đây là kiểu tách Kondo không đối xứng. Các quan sát thực nghiệm về sự tách không đối xứng Kondo trong quang phổ của các hạt nhẹ là một thách thức. Với giá trị điều chỉnh được của U_{cf} , các thí nghiệm quan sát thấy sự tách Kondo không đối xứng trong quang phổ của các hạt và chiều rộng tách tăng lên khi tăng U_{cf} . Tại U_{c2} , nhóm các đỉnh hẹp biến mất và hệ trở thành điện môi. Tuy nhiên, như trong mô hình Hubbard một thành phần, pha điện môi tồn tại cho đến khi $U < U_{c2}$. Trong vùng $U_{c1} < U_{cc} < U_{c2}$, cả pha kim loại và pha điện môi cùng tồn

tại. Do đó, MIT thứ hai thuộc chuyển pha loại 1. MIT này chỉ phù hợp với các hạt nhẹ, bởi vì nó tồn tại ngay cả khi U_{cf} nhỏ. Quá trình chuyển pha là MIT chọn lọc loại hạt.

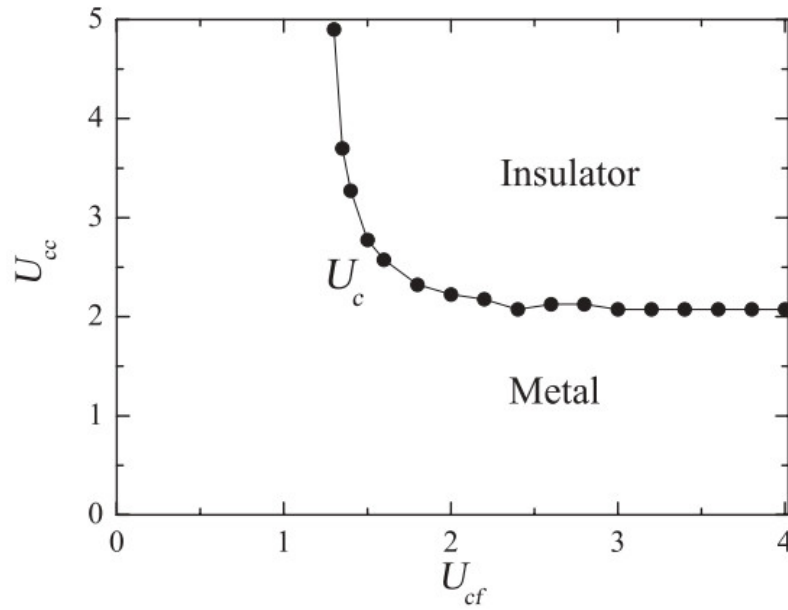
Trong pha điện môi, mỗi vị trí mạng được chiếm bởi một hạt, và tương tác Coulomb ngăn cản sự chiếm đóng đôi của các hạt. Các thí nghiệm có thể phát hiện, sự tồn tại của vùng cùng có hai pha, bằng cách đo số cư trú đôi của các hạt. Khi chuyển pha, số cư trú đôi thể hiện một bước nhảy gián đoạn về giá trị của nó. Cơ chế chuyển pha cho hai MIT là khác nhau. Trong MIT nghịch đảo khe năng lượng giả của pha kim loại được phát triển từ khe năng lượng của pha điện môi, trong khi ở MIT chọn lọc loại hạt, sự chuyển pha xảy ra do sự phá vỡ của sự tách Kondo không đối xứng.



Hình 3.6: Giản đồ pha tại mật độ số hạt $n_{\sigma\sigma} = n_f = 1/2$. Trong vùng màu xám, cả hai pha kim loại và điện môi cùng tồn tại.

Chúng ta cũng sẽ phân tích MIT thông qua năng lượng riêng của hệ và DOS cho trường hợp $U_{cf} < D$. Trong trường hợp này, MIT là chuyển pha chọn lọc loại hạt và có các tính chất tương tự như trong trường hợp $U_{cf} > D$, mà chúng ta đã thảo luận ở trên. Chúng tôi tóm tắt các quá trình chuyển pha trong giản đồ pha được vẽ trong Hình 3.6 như sau. Trong vùng $U_{cf} > D$, có hai chuyển pha, một là chuyển pha nghịch đảo, hai là chuyển pha chọn lọc loại hạt. Trong chuyển pha thứ nhất, sự tương quan giữa các hạt đưa hệ từ pha điện môi sang pha kim loại, trong khi ở chuyển

pha thứ hai, tương quan hạt đưa hệ từ kim loại sang pha điện môi. Một vùng đồng tồn tại hữu hạn của các pha kim loại và điện môi giữa các chuyển pha kim loại-điện môi chọn lọc. Giá trị tới hạn U_c của chuyển pha kim loại-điện môi nghịch đảo tăng lên với U_{cf} . Nó biến mất ở $U_{cf} = D$. Do đó, trong vùng $U_{cf} < D$, hiệu ứng tái nhập pha của pha điện môi không có. Giản đồ pha phù hợp với việc phân tích sự chuyển pha quan sát được từ sự phụ thuộc của $n_{c\sigma}$ vào thế hóa học, đã được trình bày trong phần trước.



Hình 3.7: Giản đồ pha ở tại mật độ số hạt $n_{c\sigma} = n_f = 1/3$. ($T = 0.01$, $D = 1$)

3.3.3. Trường hợp mật độ số hạt toàn phần bằng 1

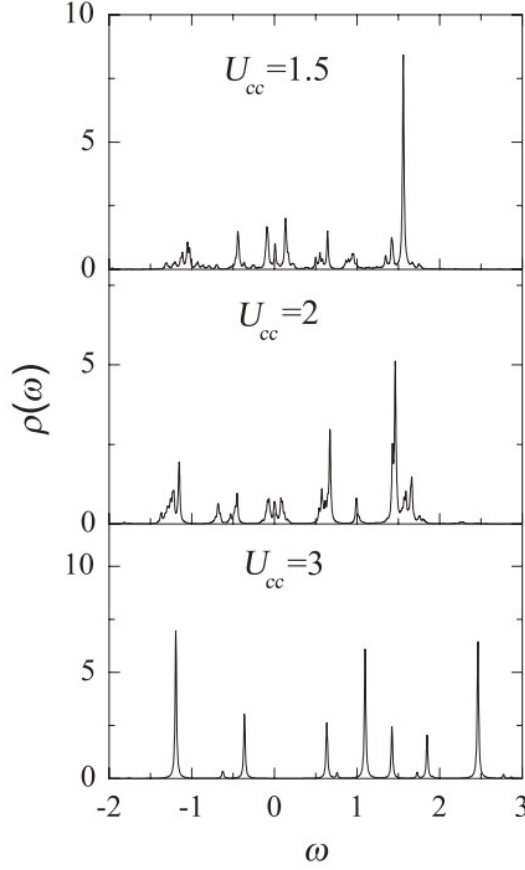
Trong phần này, chúng ta nghiên cứu MIT ở mức độ số hạt $n_{c\sigma} = n_f = 1/3$. MIT khá khác biệt so với trường hợp lấp đầy một nửa. Nó xảy ra với cả hạt nhẹ và hạt nặng. Trong các tính toán số, thế hóa học được điều chỉnh để duy trì $n_{c\sigma} = 1/3$. Trường hợp mật độ số hạt $n_{c\sigma} = n_f = 2/3$ là đối xứng hạt - lỗ trống của trường hợp mật độ số hạt $n_{c\sigma} = n_f = 1/3$.

Chúng tôi vẽ giản đồ pha cho trường hợp mật độ số hạt $n_{c\sigma} = n_f = 1/3$ trong Hình 3.7. Giá trị U_c tại điểm MIT nhanh chóng tăng lên khi U_{cf}

tiến đến giá trị D , trong khi nó giảm từ từ khi U_{cf} tăng. Pha điện môi chỉ xảy ra khi các tương tác Coulomb đủ lớn (cả U_{cc} và U_{cf}). Trong pha điện môi, mỗi vị trí mạng tinh thể được chiếm bởi một hạt trong số các thành phần hạt nhẹ hoặc hạt nặng, và tương tác Coulomb ngăn cản mọi cư trú đôi. MIT cũng có thể được phân tích thông qua năng lượng riêng của hệ và DOS của các hạt nhẹ, như trong trường hợp lấp đầy một nửa. Năng lượng riêng của hệ trong pha kim loại và pha điện môi thể hiện các đặc điểm tương tự như trong trường hợp lấp đầy một nửa. Tuy nhiên, các tính chất của DOS khác nhau.

Trong Hình 3.8, chúng tôi vẽ đồ thị DOS cho các giá trị khác nhau của U_{cc} và U_{cf} cố định. Chúng ta có thể thấy từ biểu thức (3.12) là hàm Green cục bộ, là sự chồng chập của hai hàm Green dải con với trọng số không bằng nhau. Đỉnh Kondo, xuất hiện trong DOS dải con cục bộ, cách xa năng lượng Fermi và bị suy giảm [21,53]. Do đó, đỉnh xuất hiện ở mức Fermi trong pha kim loại chỉ đơn thuần là sự chồng chập của DOS hai dải con cục bộ, và có thể nó không liên quan đến cộng hưởng Kondo. Do đó, MIT có thể xảy ra ở mật độ số hạt $n_{c\sigma} = n_f = 1/3$ trái ngược với mô hình Hubbard một thành phần, nơi không quan sát thấy MIT ở mật độ số hạt một phần ba. Ngược lại với trường hợp lấp đầy một nửa, chúng ta không quan sát thấy bất kỳ vùng nào đồng tồn tại của pha kim loại và pha điện môi. Tuy nhiên, gần điểm chuyển pha MIT, chúng tôi quan sát thấy sự phân tách pha xảy ra ở các mật độ số hạt gần với $1/3$.

Trong Hình 3.9 chúng tôi vẽ đồ thị mật độ số hạt linh động $n_{c\sigma}$ như một hàm của thế hóa học μ cho các giá trị khác nhau của U_{cc} gần với điểm chuyển pha U_c . Chúng ta có thể thấy trong Hình 3.9, khi $U_{cc} < U_c$, giản đồ của $n_{c\sigma}$ không hiển thị bất kỳ một đoạn thẳng nằm ngang nào tại $n_{c\sigma} = 1/3$, điều này thể hiện pha kim loại. Tuy nhiên, đối với U_{cc} gần với U_c ở phía điện môi, đồ thị của n_c không chỉ xuất hiện một đoạn thẳng nằm ngang thể hiện trạng thái điện môi, mà còn có một khoảng trống tại các mật độ số hạt gần với $n_{c\sigma} = 1/3$. Trong khoảng trống ấy, mật độ số hạt $n_{c\sigma}$ là bất định. Đặc điểm này cho thấy có sự phân tách pha tại các mật độ số hạt đó. MIT ở mật độ số hạt $1/3$ có tính thông ước. Nó không phân

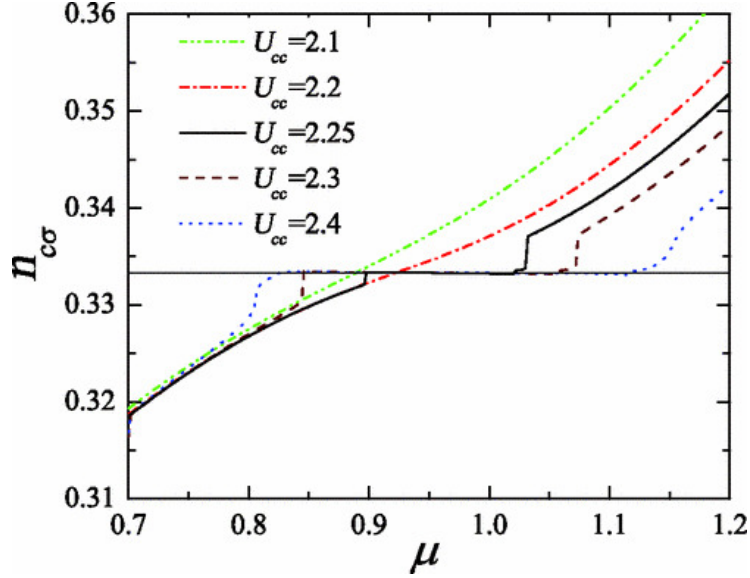


Hình 3.8: DOS của các hạt nhẹ ở mật độ số hạt $n_{c\sigma} = n_f = 1/3$ với các giá trị khác nhau của U_{cc} và cố định $U_{cf} = 2$. ($T = 0.01, D = 1$).

biệt hạt nhẹ và hạt nặng. Mọi cư trú đôi đều biến mất tại điểm chuyển pha. MIT cũng được quan sát ở mật độ số hạt lấp đầy một phần ba trong mô hình Hubbard ba thành phần [19, 20]. Người ta có thể nhận thấy rằng MIT thông ước luôn xuất hiện tại các mật độ số hạt thông ước, không phụ thuộc vào sự mất cân bằng khối lượng hoặc tương tác không bằng nhau hay không. Tại các mật độ số hạt thông ước, các thí nghiệm có thể phát hiện ra MIT này.

3.4. Kết luận

Trong chương này chúng tôi đã nghiên cứu MIT trong FKM ba thành phần bằng cách sử dụng lý thuyết DMFT với ED và tìm ra các điều kiện



Hình 3.9: Mật độ số hạt linh động $n_{c\sigma}$ là một hàm của thế hóa học μ đối với các giá trị khác nhau U_{cc} gần với giá trị chuyển pha U_c và cố định $U_{cf} = 2$. Nét chấm là $n_{c\sigma} = 1/3$. ($T = 0.01, D = 1$).

về mật độ số hạt mà tại đó MIT có thể xảy ra. Đặc biệt, MIT có thể xảy ra ở mật độ số hạt toàn phần $1 \leq n \leq 2$. Khi mật độ số hạt toàn phần $1 < n < 2$, MIT có chọn lọc loại hạt và nó chỉ có thể xảy ra khi mật độ số hạt linh động bằng $1/2$ ($n_{c\sigma} = 1/2$). Ở mật độ số hạt một phần ba hoặc hai phần ba, MIT chỉ có thể xảy ra khi các tương tác Coulomb đủ mạnh. MIT này xảy ra với cả hạt nhẹ và hạt nặng. Chúng tôi cũng quan sát MIT nghịch đảo, tức là sự chuyển pha từ điện môi sang kim loại khi tương tác Coulomb tăng lên. MIT nghịch đảo chỉ có thể xảy ra đối với các tương tác đủ mạnh giữa các hạt nhẹ và hạt nặng, và điều kiện mật độ số hạt $n_{c\sigma} + n_f = 1$.

Chúng tôi cũng đã nghiên cứu chi tiết các tính chất MIT ở mật độ số hạt một nửa và một phần ba. Tại mật độ số hạt một nửa chúng tôi quan sát thấy hiệu ứng lặp lại của pha điện môi, có nghĩa là khi tương tác Coulomb tăng lên, hệ trước tiên vẫn ở pha điện môi, sau đó trở thành kim loại, và cuối cùng, quay trở lại pha điện môi. MIT trước có tính liên tục, còn MIT thứ hai không liên tục. Như trong mô hình Hubbard một dải năng lượng, chúng tôi cũng quan sát thấy một vùng hữu hạn tại MIT thứ

hai, nơi cả hai pha kim loại và pha điện môi cùng tồn tại. Tuy nhiên, trái ngược với mô hình Hubbard một dải năng lượng, MIT xảy ra cùng với sự tách Kondo không đối xứng trong phổ của các hạt nhẹ. Ở mật độ số hạt một phần ba, MIT chỉ có thể xảy ra đối với các tương tác Coulomb đủ mạnh.

Chúng tôi tìm thấy sự phân tách pha gần với điểm chuyển pha MIT từ phía chất điện môi. Chúng tôi cũng đã xây dựng giản đồ pha ở các mật độ số hạt $1/2$ và $1/3$. Tuy nhiên, trong luận án này vẫn hạn chế chỉ xem xét các pha thuần nhất. Ở nhiệt độ thấp, ta có thể kỳ vọng sự ổn định của các trạng thái sóng mật độ điện tích. Các vấn đề này dành cho các nghiên cứu sau.

Chương 4

CHUYỂN PHA KIM LOẠI-ĐIỆN MÔI TRONG MÔ HÌNH HUBBARD BA THÀNH PHẦN KHI CÓ MẤT CÂN BẰNG KHỐI LƯỢNG CÁC THÀNH PHẦN

Trong chương này chúng tôi nghiên cứu ảnh hưởng của sự mất cân bằng khối lượng lên chuyển pha kim loại-điện môi trong mô hình Hubbard ba thành phần. Mô hình Hubbard ba thành phần mô tả hỗn hợp fermion gồm hai loại hạt khác nhau mất cân bằng về khối lượng. Một loại là các hạt fermion hai thành phần, và loại còn lại là các hạt đơn thành phần. Trong khuôn khổ nghiên cứu của luận án, tương tác cục bộ giữa các loại hạt được coi là bằng nhau.

Chúng tôi tìm thấy, sự mất cân bằng khối lượng, có thể chuyển hỗn hợp từ chất điện môi sang kim loại. Quá trình chuyển pha kim loại-điện môi này giống như một quá trình chuyển pha chọn lọc loại hạt có khối lượng nhẹ hơn và chỉ xảy ra ở mật độ hạt thông ước và tương tác cục bộ vừa phải. Đối với các tương tác cục bộ yếu và mạnh, sự mất cân bằng khối lượng không làm thay đổi trạng thái cơ bản của hỗn hợp. Các kết quả chính của nghiên cứu được công bố trên tạp chí Physical Review B.

4.1. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu

Một trong những vấn đề hấp dẫn trong vật lý các vật chất cô đặc là quá trình chuyển pha kim loại-điện môi. Đặc biệt, chuyển pha kim loại-điện môi do tương quan điện tử đã thu hút rất nhiều sự quan tâm. Tương quan điện tử cản trở sự cư trú đôi của các điện tử và gây ra tình trạng định xứ điện tử [34]. Với những thành tựu của kỹ thuật nguyên tử cực lạnh, mạng tinh thể quang học có thể mô phỏng thực nghiệm các mô hình lý thuyết

khác nhau về tương quan của các hạt fermion [15]. Điều đó đã mở ra một giai đoạn mới cho việc nghiên cứu các tác động tương quan trong vật liệu. Đặc biệt, điện môi Mott đã được quan sát thấy trong mạng quang học của các nguyên tử fermion ^{40}K với hai trạng thái siêu tinh tế và tương tác đẩy giữa chúng [17,18]. Những mạng quang học này mô phỏng rõ ràng mô hình Hubbard hai thành phần và cung cấp mối liên hệ giữa các quan sát thực nghiệm với các dự đoán lý thuyết [47]. Các mạng quang học cũng có thể được tạo ra với các loại hạt khác nhau và có thể mở rộng với số trạng thái siêu tinh tế lớn và sự mất cân bằng khối lượng lớn. Ví dụ, một hỗn hợp của trạng thái đơn tuyến ^{40}K nhúng trong các nguyên tử fermion hai thành phần ^6Li hoặc hỗn hợp của trạng thái hai thành phần ^{134}Yb và trạng thái sáu thành phần ^{173}Yb đã được thực nghiệm tạo nên [35,36]. Những thành tựu trên cho phép nghiên cứu chuyển pha kim loại-điện môi trong các hệ tương quan đa thành phần. Các nghiên cứu lý thuyết đã dự đoán quá trình chuyển pha kim loại-điện môi trong mô hình Hubbard ba thành phần [19,20]. Quá trình chuyển pha kim loại-điện môi xảy ra ở mật độ số hạt thông ước khi tương tác cục bộ đồng nhất [19]. Đối với tương tác cục bộ có độ lớn khác nhau, quá trình chuyển pha kim loại-điện môi cũng được phát hiện ở trạng thái lấp đầy một nửa [20]. Tuy nhiên, trong các nghiên cứu này, tất cả các thành phần của hạt đều có cùng một khối lượng. Các thí nghiệm cũng có thể điều chỉnh khối lượng hiệu dụng của từng loại hạt và thiết lập hỗn hợp có khối lượng không bằng nhau. Thật vậy, trong hỗn hợp các nguyên tử ^6Li và ^{40}K , sự mất cân bằng khối lượng có thể được điều chỉnh trong một phạm vi rộng [54]. Hỗn hợp của các hạt hai thành phần có khối lượng khác nhau trong mạng quang học thường dẫn đến sự khác biệt giữa các biên độ nhảy nút của mỗi thành phần. Với độ lệch so với giới hạn cân bằng khối lượng, một số quá trình chuyển pha có thể xảy ra và thay đổi trạng thái cơ bản. Do đó, các thuộc tính nhiệt độ thấp của mạng quang học chịu ảnh hưởng của sự mất cân bằng khối lượng là rất quan trọng và cần được nghiên cứu. Thật vậy, sự mất cân bằng khối lượng trong mô hình Hubbard hai thành phần đã được nghiên cứu chi tiết trong các trường hợp một chiều và ba chiều, đã làm rõ sự cạnh

tranh của một số trạng thái trật tự như trạng thái siêu lỏng, điện tích và trạng thái trật tự spin trong mạng quang học [37,55-57]. Việc tăng sự mất cân bằng của thông số nhảy nút hoặc tăng sự khác biệt giữa độ rộng dải năng lượng của mỗi loại hạt có thể dẫn đến tình trạng một loại hạt chuyển từ trạng thái kim loại sang trạng thái điện môi do sự tương quan giữa các hạt trong khi loại hạt còn lại vẫn ở trạng thái kim loại hoặc điện môi. Sự chuyển pha này tương tự như chuyển pha kim loại-điện môi chọn lọc quỹ đạo trong các hệ nhiều quỹ đạo tương quan [58-61]. Tuy nhiên, trong các hỗn hợp đa thành phần cực lạnh, chuyển pha kim loại-điện môi có thể có số lượng thành phần lẻ trong khi điều này không thể xảy ra trong các hệ nhiều quỹ đạo [19,20]. Do đó, nghiên cứu ảnh hưởng của sự mất cân bằng khối lượng lên chuyển pha kim loại-điện môi là một vấn đề đáng quan tâm nghiên cứu. Trên thực tế, sự ảnh hưởng của mất cân bằng khối lượng lên chuyển pha kim loại-điện môi trong hỗn hợp fermion của hai loại hạt đơn thành phần đã được nghiên cứu [37,55-57]. Hai thành phần có các đặc tính khác biệt, và khác với các tính chất của hỗn hợp khi khối lượng cân bằng [37]. Trong hỗn hợp fermion-fermion của các loại hạt đa thành phần có sự mất cân bằng khối lượng cực lớn, trong đó một loại hạt trong hỗn hợp cực kỳ nặng và không chuyển động, các chuyển pha kim loại-điện môi đặc trưng cũng đã được phát hiện. Chuyển pha kim loại-điện môi có thể xảy ra ở cả mật độ hạt thông ước và không thông ước. Mặc dù một loại hạt luôn được cố định, chuyển pha kim loại-điện môi có thể được phân loại là chuyển pha tập thể, chọn lọc loại hạt hoặc nghịch đảo, tùy thuộc vào tương tác cục bộ và mật độ hạt.

Trong chương này, chúng tôi nghiên cứu ảnh hưởng của sự mất cân bằng khối lượng đến MIT trong hỗn hợp fermion-fermion đa thành phần. Hỗn hợp bao gồm các hạt fermion hai thành phần và một thành phần. Trái ngược với nghiên cứu trước ở chương 3, cả hai loại hạt đều có cùng khối lượng và tính linh động hữu hạn. Những hỗn hợp fermion-fermion như vậy có thể được tạo ra bởi các nguyên tử ^{40}K hoặc ^6Li nhẹ hoặc ^{40}K với đồng vị fermion nặng của Sr hoặc Yb . Để mô hình hóa các hỗn hợp này với sự mất cân bằng khối lượng, chúng tôi đề xuất mô hình Hubbard ba thành

phần với các biên độ nhảy nút khác nhau. Trên thực tế, biên độ nhảy nút có thể được điều chỉnh theo thực nghiệm, bằng thể năng mạng tinh thể và năng lượng giạt [62]. Trong hỗn hợp khối lượng cân bằng, tương tác cục bộ có thể chuyển hỗn hợp từ trạng thái kim loại sang trạng thái điện môi ở mật độ số hạt thông ước. Trong trường hợp cực độ, khi một loại hạt hoàn toàn định xứ hoặc không nhảy nút, mô hình Hubbard ở trên rút gọn thành mô hình Falicov-Kimball ba thành phần và MIT được phát hiện tồn tại ở cả hai trường hợp mật độ hạt thông ước và không thông ước. Do đó, việc nghiên cứu MIT trong mối quan hệ với sự mất cân bằng biên độ nhảy nút trong các hệ là rất quan trọng để tách biệt các thuộc tính lượng tử ở nhiệt độ thấp dưới sự cạnh tranh giữa động năng điện tử và các mối tương quan một cách minh bạch.

Chúng tôi nghiên cứu mô hình Hubbard ba thành phần bằng cách áp dụng lý thuyết trường trung bình động (DMFT) cộng với phương pháp chéo hoá chính xác (ED). DMFT đã được sử dụng thành công để nghiên cứu các hệ điện tử có tương quan mạnh [27,49]. Các nghiên cứu trước đây về MIT trong mô hình Hubbard và Falicov-Kimball ba thành phần cũng dựa trên lý thuyết trường trung bình động (DMFT) [19,20]. DMFT chính xác khi số chiều không gian vô hạn và tính toán được đầy đủ các thăng giáng động lực học cục bộ [27,49]. Tuy nhiên, nó làm mất đi các tương quan không cục bộ trong không gian có số chiều hữu hạn. Trong lý thuyết trường trung bình động (DMFT), chúng tôi đã phát hiện MIT chỉ được tạo ra bởi sự mất cân bằng khối lượng. Sự chuyển pha này là sự chuyển pha giống như chọn lọc loại hạt có khối lượng nhẹ hơn và chỉ xảy ra ở tổng mật độ số hạt thông ước và tương tác cục bộ vừa phải. Đối với các tương quan yếu và mạnh, sự mất cân bằng khối lượng không làm hỗn hợp thay đổi trạng thái của nó.

4.2. Mô hình Hubbard ba thành phần và lý thuyết trường trung bình động

Chúng tôi nghiên cứu mô hình Hubbard ba thành phần, có Hamilton có dạng như sau

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle, \alpha} t_{\alpha} c_{i\alpha}^{\dagger} c_{j\alpha} + \frac{U}{2} \sum_{i, \alpha \neq \alpha'} n_{i\alpha} n_{i\alpha'} \quad (4.1)$$

trong đó $c_{i\alpha}^{\dagger}$ ($c_{i\alpha}$) là toán tử sinh (hủy) đối với hạt fermion với số lượng tử α tại vị trí i . α nhận ba giá trị khác nhau, ví dụ $\alpha = 1, 2, 3$. Với $n_{i\alpha} = c_{i\alpha}^{\dagger} c_{i\alpha}$ là toán tử số hạt của thành phần α các hạt fermion tại i , t_{α} là tham số nhảy nút của thành phần α . U là tương tác cục bộ giữa các trạng thái thành phần của các hạt. Thế hóa học μ cũng được đưa ra để kiểm soát tổng mật độ số hạt $n = \sum_{i\alpha} \langle n_{i\alpha} \rangle / N$, trong đó N là số nút mạng tinh thể. Mô hình Hubbard ba thành phần có thể được thực hiện hóa bằng cách nhúng các nguyên tử fermion cực lạnh với tam tuyến siêu tinh tế hoặc hỗn hợp fermion fermion của các loại nguyên tử khác nhau vào một mạng quang học. Tuy nhiên, trong khuôn khổ nghiên cứu của luận án thế năng bẫy trong mạng quang học được bỏ qua.

Sự mất cân bằng khối lượng chỉ phụ thuộc vào các tham số nhảy nút t_{α} . Trong mô hình Hubbard ba thành phần, sự mất cân bằng khối lượng thực sự chính là ở sự khác biệt của các tham số nhảy nút. Trong mạng tinh thể quang học, sự nhảy nút của hạt được thiết lập bằng hiệu ứng xuyên hầm của các hạt giữa các hố thế năng mạng tinh thể lân cận gần nhất. Nó có thể được điều chỉnh bằng biên độ thế năng mạng V_{α}^{lat} và năng lượng giạt $E_{r\alpha}$ của mỗi trạng thái thành phần của hạt [62].

$$t_{\alpha} \approx \frac{4}{\sqrt{\pi}} E_{r\alpha} v_{\alpha}^{3/4} \exp(-2\sqrt{v_{\alpha}}), \quad (4.2)$$

trong đó $V_{\alpha} = V_{\alpha}^{\text{lat}} / E_{r\alpha}$. Năng lượng giạt $E_{r\alpha} = k^2 / 2m_{\alpha}$, với k là vector sóng của laser tạo thành mạng tinh thể quang học, và m_{α} là khối lượng của thành phần α . Biên độ thế năng mạng V_{α}^{lat} có thể khác nhau đối với các trạng thái siêu tinh tế khác nhau của các hạt. Do đó, các tham số nhảy

nút cũng có thể khác nhau kể cả đối với các trạng thái siêu tinh tế của các hạt giống nhau có khối lượng giống nhau. Trong phần sau, chúng tôi sẽ xem xét về sự mất cân bằng nhảy nút $t_1 \neq t_2 = t_3$. Trường hợp này có thể được hiểu là hỗn hợp fermion-fermion của hai loại hạt khác nhau. Một loại là các hạt có một trạng thái siêu tinh tế ($\alpha = 1$), trong khi loại kia là các hạt có hai trạng thái siêu tinh tế ($\alpha = 2, 3$). Những hỗn hợp như vậy có thể được tạo ra bằng việc nhúng các nguyên tử ^{40}K và ^6Li , hoặc các nguyên tử nhẹ ^6Li hoặc ^{40}K với các đồng vị fermion nặng của Sr hoặc Yb vào mạng tinh thể quang học. Chúng tôi tham số hóa các biên độ nhảy nút bằng

$$t = \frac{t_1 + t_2}{2}, \quad (4.3)$$

$$\Delta t = \frac{t_2 - t_1}{t_1 + t_2}, \quad (4.4)$$

t là biên độ nhảy nút trung bình của hai loại hạt, và Δt mô tả sự mất cân bằng khối lượng giữa chúng. Với $-1 \leq \Delta t \leq 1$, khi $\Delta t = \pm 1$ là sự mất cân bằng khối lượng cực đại, trong đó có một loại hạt cực kỳ nặng và cố định. Trên thực tế, khối lượng hiệu dụng của các hạt tỷ lệ nghịch với tham số nhảy nút của chúng. Khi $\Delta t > 0$ cho biết hạt hai thành phần nhẹ hơn hạt một thành phần và ngược lại đối với $\Delta t < 0$. Khi $\Delta t = 0$ là hỗn hợp khối lượng cân bằng và là mô hình tương ứng với mô hình Hubbard ba thành phần mang tính đồng nhất [19]. Trong trường hợp khối lượng cân bằng, với tương tác cục bộ đủ mạnh, điện môi Mott tồn tại ở mật độ các hạt thông ước [19]. Tham số mất cân bằng của khối lượng Δt có thể được điều chỉnh theo thực nghiệm trong một phạm vi rộng. Ví dụ, trong hỗn hợp các nguyên tử ^6Li và ^{40}K , giá trị của Δt có thể biến thiên từ 0.3 đến 0.85 [54].

Chúng tôi nghiên cứu mô hình Hubbard ba thành phần bằng cách áp dụng lý thuyết trường trung bình động. Trong lý thuyết trường trung bình động này thì năng lượng riêng là một hàm cục bộ của tần số. Tuy nhiên, chỉ số không gian trong lý thuyết trường trung bình động bỏ qua các tương

quan không cục bộ. Hàm Green của thành phần α của hạt có dạng.

$$G_{\alpha}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n + \mu + t_{\alpha}\varepsilon_{\mathbf{k}} - \sum_{\alpha}(i\omega_n)}, \quad (4.5)$$

trong đó tần số ω_n là tần số Matsubara, $\varepsilon_{\mathbf{k}} = \sum_{(i,j)} \exp[ik(r_i - r_j)]$ là hệ số cấu trúc mạng tinh thể, và $\sum_{\alpha}(i\omega_n)$ là năng lượng riêng. Năng lượng riêng cục bộ được xác định từ động lực học của một hạt ba thành phần duy nhất được nhúng trong một trường trung bình động. Hàm tác động hiệu dụng của các hạt đơn.

$$\begin{aligned} S_{\text{imp}} = & - \int_0^{\beta} \int_0^{\beta} d\tau d\tau' \sum_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger}(\tau) \mathcal{G}_{\alpha}^{-1}(\tau - \tau') c_{\alpha}(\tau') \\ & + \frac{U}{2} \int_0^{\beta} d\tau \sum_{\alpha \neq \alpha'} n_{\alpha}(\tau) n_{\alpha'}(\tau), \end{aligned} \quad (4.6)$$

trong đó $\mathcal{G}_{\alpha}(\tau)$ là một hàm Green biểu diễn trường trung bình động. $\mathcal{G}_{\alpha}(\tau)$ đóng vai trò là hàm Green không tương tác so với hàm Green cục bộ. Nó liên quan đến năng lượng riêng và hàm Green cục bộ theo phương trình Dyson

$$\mathcal{G}_{\alpha}^{-1}(i\omega_n) = G_{\alpha}^{-1}(i\omega_n) + \sum_{\alpha}(i\omega_n). \quad (4.7)$$

Ở đây, hàm Green cục bộ bằng

$$G_{\alpha}(i\omega_n) = \int d\varepsilon \rho_0(\varepsilon) \frac{1}{i\omega_n + \mu - \sum_{\alpha}(i\omega_n) + t_{\alpha}\varepsilon}, \quad (4.8)$$

trong đó $\rho_0(\varepsilon) = \sum_{\mathbf{k}} \delta(\varepsilon - \varepsilon_{\mathbf{k}})$ là hàm mật độ trạng thái không tương tác. Không mất tính tổng quát, chúng tôi sử dụng DOS dạng bán nguyệt

$$\rho_0(\varepsilon) = \frac{2}{\pi} \sqrt{1 - \varepsilon^2}. \quad (4.9)$$

Với DOS bán nguyệt, từ phương trình. (4.7) và (4.8) chúng ta có hàm Green biểu diễn trường trung bình động $\mathcal{G}_{\alpha}(i\omega_n)$ từ hàm Green cục bộ [27]

$$\mathcal{G}_{\alpha}^{-1}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \frac{t_{\alpha}^2}{4} G_{\alpha}(i\omega_n). \quad (4.10)$$

Điều kiện tự hợp của lý thuyết trường trung bình động yêu cầu hàm Green có được từ tác động hiệu dụng trong biểu thức (4.6) đồng nhất với hàm Green cục bộ trong phương trình (4.8) có nghĩa là.

$$G_{\alpha}^{imp}(i\omega_n) = G_{\alpha}(i\omega_n). \quad (4.11)$$

Phương trình này hoàn tất hệ các phương trình tự hợp cho hàm Green, nó có thể được tính số bằng phương pháp lặp [27]. Phần tính toán cần rất nhiều thời gian nhất là giải số hàm tác dụng S_{imp} trong biểu thức (4.6). Có một số cách để tính toán hàm Green từ hàm tác động S_{imp} [27], ở đây chúng tôi sử dụng một phương pháp chéo hóa chính xác để tính toán [27,33]. Hàm tác động trong biểu thức (4.6) về cơ bản tương đương với mô hình Anderson [27,33].

$$\begin{aligned} H_{AIM} = & -\mu \sum_{\alpha} c_{\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} + \frac{U}{2} \sum_{\alpha \neq \alpha'} n_{\alpha} n_{\alpha'} + \sum_{p, \alpha} V_{p\alpha} a_{p\alpha}^{\dagger} c_{\alpha} \\ & + H.c + \sum_{p, \alpha} E_{p\alpha} a_{p\alpha}^{\dagger}, \end{aligned} \quad (4.12)$$

trong đó $a_{p\alpha}^{\dagger}$ ($a_{p\alpha}$) là toán tử sinh (huỷ) biểu diễn cho bề dẫn với mức năng lượng $E_{p\alpha}$, còn $V_{p\alpha}$ là thế lai hóa của bề dẫn với tạp chất. Mối liên hệ giữa mô hình Anderson trong phương trình (4.12) và hàm tác động trong phương trình (4.6) là mối quan hệ đồng nhất của các tham số của bề dẫn [27,33].

$$\sum_p \frac{|V_{p\alpha}|^2}{i\omega_n - E_{p\alpha}} = \lambda_{\alpha}(i\omega_n), \quad (4.13)$$

trong đó $\lambda_{\alpha}(i\omega_n) = i\omega_n + \mu - \mathcal{G}_{\alpha}^{-1}(i\omega_n)$. Phương pháp chéo hóa chính xác giới hạn bề dẫn với số hữu hạn n_s quỹ đạo ($p = 1, 2, \dots, n_s - 1$) Khi đó $\lambda(i\omega_n)$ được ước tính bằng

$$\lambda_{\alpha}^{(n_s)}(i\omega_n) = \sum_{p=1}^{n_s-1} \frac{|V_{p\alpha}|^2}{i\omega_n - E_{p\alpha}}. \quad (4.14)$$

Các tham số của bề dẫn được xác định từ việc cực tiểu khoảng cách d giữa $\lambda_{\alpha}(i\omega_n)$ và $\lambda_{\alpha}^{(n_s)}(i\omega_n)$ theo biểu thức

$$d = \frac{1}{M+1} \sum_{n=0}^M \omega_n^{-k} \left| \lambda_{\alpha}(i\omega_n) - \lambda_{\alpha}^{(n_s)}(i\omega_n) \right|^2, \quad (4.15)$$

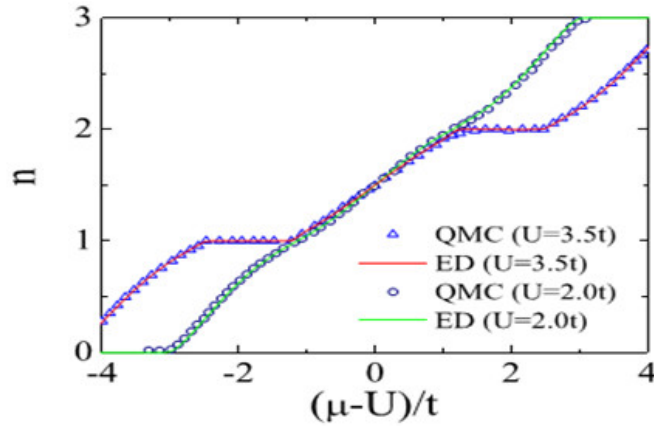
trong đó M là giá trị lớn nhất của tần số Matsubara [27,33], tham số k được đưa vào để cải thiện việc tối thiểu hoá ở tần số Matsubara thấp. Cụ thể, chúng tôi sử dụng giá trị $k = 1$ trong các phép tính số. Khi các tham số của bể dẫn được xác định, chúng tôi tính hàm Green của mô hình định xứ Anderson trong phương trình (4.12) bằng phương pháp chéo hóa chính xác [27,33]. Chúng tôi cũng tính toán số cư trú đôi khác loại $D_{\text{inter}} = \sum_i \langle n_{i1} (n_{i2} + n_{i3}) \rangle / N$ và số cư trú đôi cùng loại $D_{\text{intra}} = \sum_i \langle n_{i2} n_{i3} \rangle / N$. Các tỷ lệ số cư trú đôi này cho biết tỷ lệ các vị trí trong mạng quang học được cư trú bởi hai hạt và có thể quan sát được bằng thực nghiệm [18].

4.3. Chuyển pha kim loại-điện môi

Trong phần này, chúng tôi trình bày các kết quả tính số bằng việc phân tích chuyển pha kim loại-điện môi dưới tác động của sự mất cân bằng khối lượng được biểu thị bằng Δt [18]. Kết quả tính số thu được bằng lý thuyết trường trung bình động và phương pháp chéo hóa chính xác với 3 quỹ đạo cho bể dẫn, trên mỗi thành phần của tạp chất (có nghĩa là $n_s = 4$). Trên thực tế, thời gian tính toán tăng nhanh chóng với n_s vì tạp có 3 thành phần. Đối với mô hình Hubbard một dải năng lượng, lý thuyết trường trung bình động và phương pháp chéo hóa chính xác cho thấy rằng hai mức bể dẫn trên mỗi thành phần của tạp thường cho kết quả tương đối tốt [52]. Để kiểm tra độ chính xác của phương pháp chéo hóa chính xác, chúng tôi so sánh kết quả tính số của chúng tôi với kết quả thu được bằng lý thuyết trường trung bình động kết hợp với mô phỏng Monte Carlo theo kiểu Hirsch-Fye trong trường hợp cân bằng khối lượng ($\Delta t = 0$) [19]. Các mô phỏng lượng tử Monte Carlo là bộ giải bài toán một tạp chính xác và không giống như phương pháp chéo hóa chính xác, không chịu các tác động kích thước hữu hạn [27].

Đầu tiên, Hình 4.1 minh họa sự so sánh của tổng mật độ số hạt n dưới dạng một hàm của thế hóa μ thu được bằng lý thuyết trường trung bình động kết hợp với phương pháp chéo hóa chính xác và mô phỏng Monte Carlo đối với hai giá trị U khác nhau. Khi đường $n(\mu)$ có đoạn nằm ngang

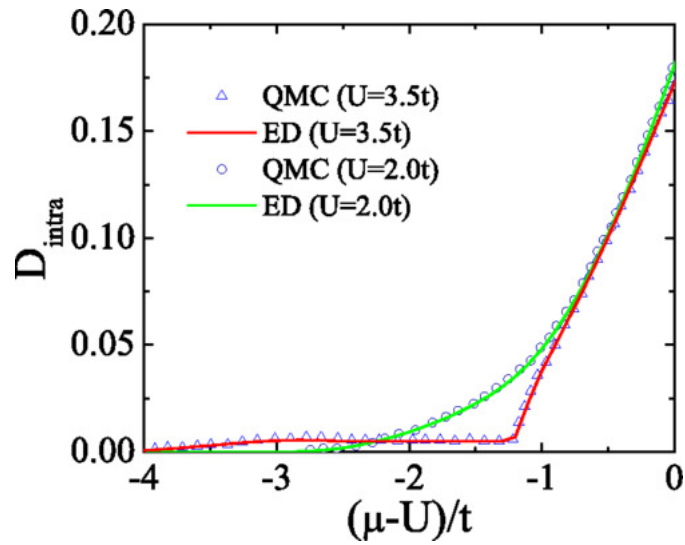
không thay đổi theo μ , nó biểu thị trạng thái điện môi. Bề rộng của đoạn nằm ngang tương đương với độ rộng vùng cấm. Hình 4.1 cho thấy sự nhất quán hoàn toàn giữa mô phỏng bằng phương pháp chéo hóa chính xác và phương pháp Monte Carlo, đối với cả pha kim loại và pha điện môi trong phạm vi toàn bộ tổng mật độ số hạt. Trong Hình 4.2 chúng tôi tiếp tục cho thấy hiệu quả của việc sử dụng lý thuyết trường trung bình động và phương pháp chéo hóa chính xác để xem xét chuyển pha kim loại-điện môi trong mô hình Hubbard, bằng cách so sánh các kết quả của việc dụng lý thuyết trường trung bình động và phương pháp chéo hóa chính xác trong việc xác định số cư trú đôi cùng loại D_{intra} dưới dạng một hàm thế hóa μ . Thông qua số cư trú đôi cùng loại đã khẳng định sự nhất quán hoàn toàn giữa mô phỏng bằng phương pháp chéo hóa chính xác và phương pháp Monte Carlo đối với cả pha kim loại và pha điện môi. Qua đó ta quan sát được số cư trú đôi triệt tiêu trong pha điện môi, tuy nhiên nó vẫn hữu hạn. Do đó, giá trị hữu hạn của cư trú đôi trong pha điện môi không phải là do kích thước hữu hạn của việc tính toán bằng phương pháp chéo hóa chính xác. Như đã chỉ ra trong các tài liệu, gần đúng Brinkman-Rice cho thấy rằng số cư trú đôi biến mất hoàn toàn trong pha điện môi Mott [63].



Hình 4.1: Tổng mật độ số hạt n , được tính bằng DMFT+ED (các đường liền nét) và bằng DMFT + QMC ($\Delta, 0$) dưới dạng hàm số thế hóa μ đối với các giá trị khác nhau của U trong trường hợp khối lượng cân bằng $\Delta t = 0$, ($T = 0.025t$).

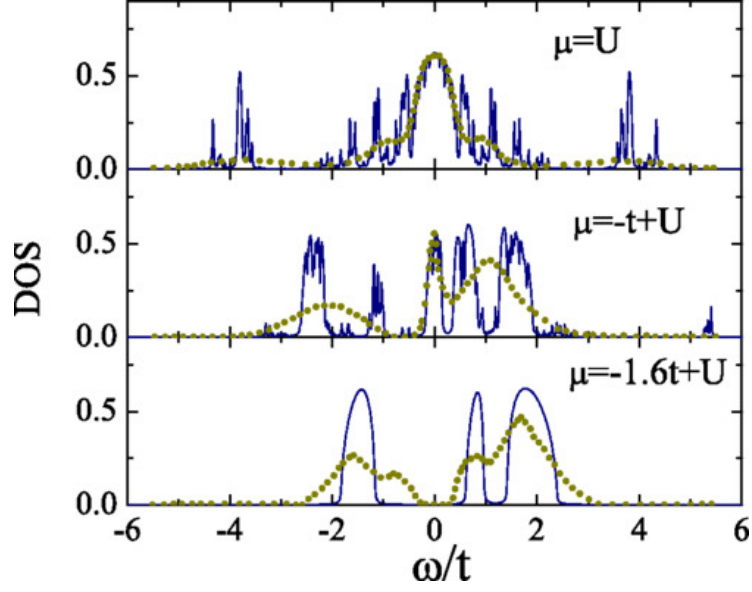
Trong thực tế, tương tác cục bộ luôn tạo ra các bước nhảy nút ảo, từ đó sinh ra hiện tượng cư trú đôi mặc dù rất nhỏ nhưng vẫn khác 0

ở pha điện môi. Đặc điểm này đã được giải thích bằng lý thuyết trường trung bình động [27,49,64,65]. Cư trú đôi chỉ biến mất ở giới hạn tương tác mạnh. Trên thực tế, gần đúng Brinkman-Rice dựa trên hàm sóng biến phân Gutzwiller và phép gần đúng Gutzwiller, để đánh giá năng lượng ở trạng thái cơ bản và nó cho biết số cư trú đôi ở pha điện môi triệt tiêu [9,63]. Tuy nhiên, ở khi số chiều không gian hữu hạn, không sử dụng các phép gần đúng Gutzwiller bổ sung, hàm sóng biến phân Gutzwiller luôn tạo ra độ cư trú đôi hữu hạn đối với bất kỳ tương tác cục bộ nào [66]. Hơn nữa, việc mở rộng lý thuyết trường trung bình động cho trường hợp số chiều hữu hạn có tính đến các tương quan không cục bộ, khi đó đã chỉ ra rằng số cư trú đôi ở pha điện môi Mott không triệt tiêu hoàn toàn [68,69]. Trong thực nghiệm, người ta đã quan sát thấy độ cư trú đôi ở MIT của các nguyên tử fermion hai thành phần cực lạnh triệt tiêu ở pha điện môi Mott, nhưng có một số lượng nhỏ các vị trí mạng quang học, cụ thể là một vài phần trăm, vẫn có cư trú đôi ở pha điện môi Mott [17].



Hình 4.2: Độ cư trú đôi dưới dạng hàm số của thế hóa μ , được tính bằng DMFT + ED (các đường liền nét) và bằng DMFT + QMC ($\Delta, 0$) đối với các giá trị tương tác khác nhau của U trong trường hợp khối lượng cân bằng $\Delta t = 0$, ($T = 0.025t$) [19].

Để hoàn thành việc so sánh, Hình 4.3 thể hiện hàm mật độ trạng thái của phần ảo $\text{Im } G_\alpha(\omega - i\eta)/\pi$, được tính bằng hai cách là lý thuyết trường trung bình động và mô phỏng Monteb Carlo [19]. Trong phép tính lý thuyết

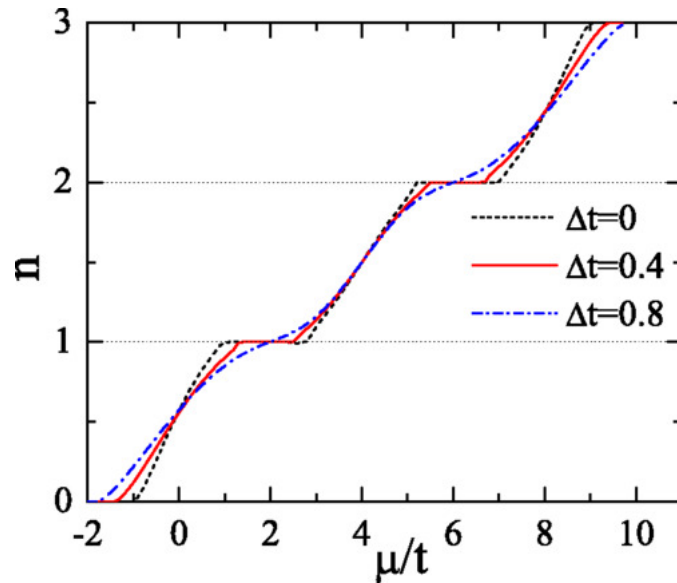


Hình 4.3: Hàm mật độ trạng thái (DOS), được tính bằng DMFT+ED (các đường liền nét) và bằng $DMFT + QMC$ (các dấu tròn) đối với các thể hóa μ khác nhau trong trường hợp khối lượng cân bằng $\Delta t = 0 (U = 3t, T = 0.05t)$.

trường trung bình động và phương pháp chéo hóa chính xác, chúng tôi đã sử dụng $\eta = 0.01t$. Mặc dù có cấu trúc các đỉnh nhọn của hàm delta trong phương pháp chéo hóa chính xác, các đặc điểm chính yếu của mật độ trạng thái thu được bằng lý thuyết trường trung bình động và phương pháp chéo hóa chính xác giống với các đặc điểm thu được bằng lý thuyết trường trung bình động và mô phỏng Monteb Carlo. Kiểm tra giá trị hàm mật độ trạng thái của thể hóa (giá trị của DOS tại $\omega = 0$) chúng tôi thấy rằng các đại lượng được xác định bởi cả hai phương pháp ED và QMC rất khớp nhau. Trong pha kim loại, DOS ở mức thể hóa luôn hữu hạn và triệt tiêu ở pha điện môi. Từ những so sánh ở trên về kết quả ED và QMC, chúng tôi kết luận rằng sử dụng phương pháp ED để giải bài toán tạp hiệu quả với $n_s = 4$ trong DMFT đã cho kết quả tương xứng. Sau đây, chúng tôi mở rộng tính toán cho trường hợp mất cân bằng khối lượng ($\Delta t \neq 0$) và sau đó thảo luận về ảnh hưởng của việc mất cân bằng khối lượng đối với MIT trong mô hình Hubbard ba thành phần.

Trong Hình 4.4 chúng tôi tính tổng mật độ số hạt dưới dạng một hàm của thể hóa khi sự mất cân bằng khối lượng biến thiên trong vùng $\Delta t > 0$

với tương tác cục bộ giống nhau U . Giá trị tương tác cục bộ được chọn sao cho MIT có thể xảy ra. Trong trường hợp $U = 4t$ chúng tôi quan sát thấy rằng sự mất cân bằng khối lượng có thể chuyển trạng thái hỗn hợp từ pha điện môi sang kim loại. Hình 4.4 cũng cho thấy rằng khi không có sự mất cân bằng khối lượng, $\Delta t = 0$, đường $n(\mu)$ thể hiện một đoạn nằm ngang tại $n = 1$ và $n = 2$ như vậy. Hỗn hợp chỉ ở pha điện môi với mật độ hạt thông ước [19]. Khi sự mất cân bằng khối lượng Δt tăng, các đoạn nằm ngang trên đồ thị giảm dần độ rộng và sau đó biến mất khi sự mất cân bằng khối lượng lớn. Những biểu hiện đó cho thấy sự chuyển pha từ pha điện môi sang kim loại xảy ra do sự mất cân bằng khối lượng ở các mật độ thông ước. Trên thực tế khi Δt tăng các hạt hai thành phần trở nên nhẹ hơn và các hạt một thành phần trở nên nặng hơn. Do tính chất này, tính di động của các hạt hai thành phần cũng có xu hướng tăng lên. Ở mức độ mất cân bằng khối lượng lớn, nó vượt qua tương tác cục bộ và hỗn hợp trở thành kim loại.

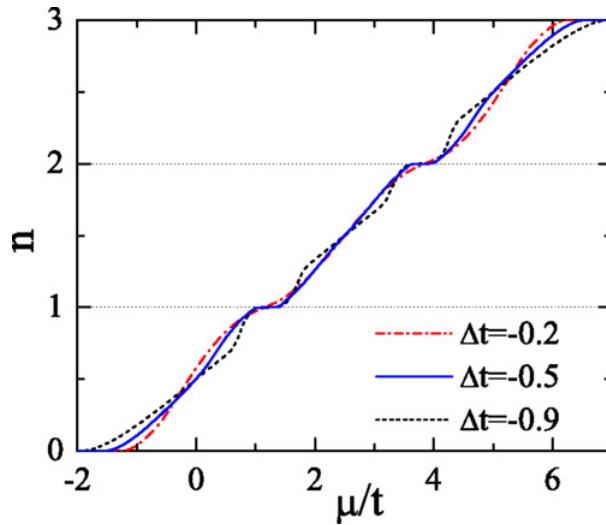


Hình 4.4: Tổng mật độ số hạt n dưới dạng một hàm của thế hóa μ đối với sự mất cân bằng khối lượng dương ($\Delta t > 0$) tại tương tác cố định $U = 4t$ ($T = 0.02t$).

Tại giới hạn $\Delta t = 1$, các hạt một thành phần trở nên định xứ, các hạt hai thành phần vẫn có thể di chuyển. Theo cách đó, sự mất cân bằng khối lượng chỉ có thể chuyển trạng thái hỗn hợp từ trạng thái điện môi sang

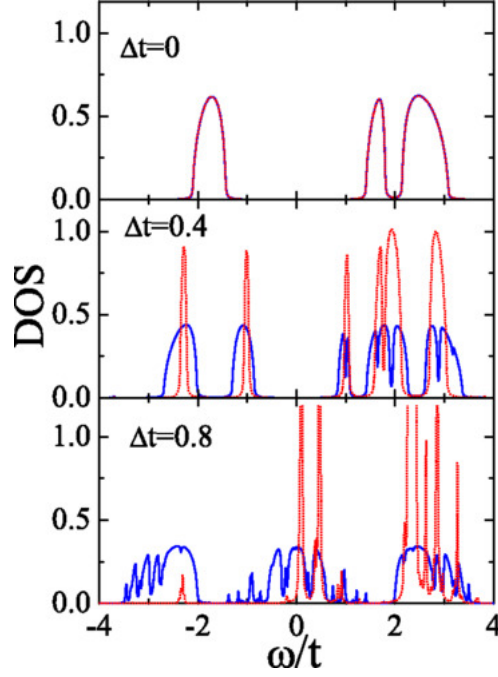
kim loại và không thể làm hỗn hợp mất trạng thái kim loại.

Tiếp theo, chúng tôi tiếp tục xem xét sự phụ thuộc của tổng mật độ số hạt vào thế hóa μ nhưng trong trường hợp ngược lại của sự mất cân bằng khối lượng khi ($\Delta t < 0$). Hình 4.5 cho thấy rằng đối với một tương tác cục bộ nhất định khi $U = 2,5t$ sự mất cân bằng khối lượng chỉ có thể chuyển hỗn hợp từ pha kim loại sang pha điện môi. Với sự gia tăng $|\Delta t|$, các hạt hai thành phần trở nên nặng hơn, và các hạt một thành phần trở nên nhẹ hơn. Khi $|\Delta t|$ vẫn còn nhỏ, $n(\mu)$ không có bất kỳ đoạn nằm ngang nào và hệ ở trạng thái kim loại. Các đoạn nằm ngang, biểu thị trạng thái điện môi chỉ xuất hiện nếu $|\Delta t|$ lớn hơn một giá trị tới hạn. Điều đó xảy ra ở mật độ thông ước $n = 1$ và $n = 2$, tương tự như trường hợp ngược lại với $\Delta t > 0$ (xem Hình 4.4). Tại giới hạn $\Delta t = -1$, các hạt hai thành phần trở nên định xứ. Tuy nhiên, nhảy nút của các hạt đơn thành phần vẫn còn tồn tại.



Hình 4.5: Tổng mật độ hạt số n dưới dạng hàm thế số của thế hóa μ đối với sự mất cân bằng khối lượng âm ($\Delta t < 0$) tại tương tác cố định $U = 2.5t$ ($T = 0.02t$).

Đối với tương tác khác loại yếu, các hạt đơn thành phần ở pha kim loại. Tuy nhiên, khi tương tác khác loại tăng lên, dải năng lượng của hạt đơn thành phần bị tách thành hai dải con, ngăn cách bởi một khe năng lượng. Điều này tạo nên MIT do tương quan khác loại hạt. Trên thực tế, mô hình với $\Delta t = -1$ tương đương với mô hình Falicov-Kimball không spin đối với

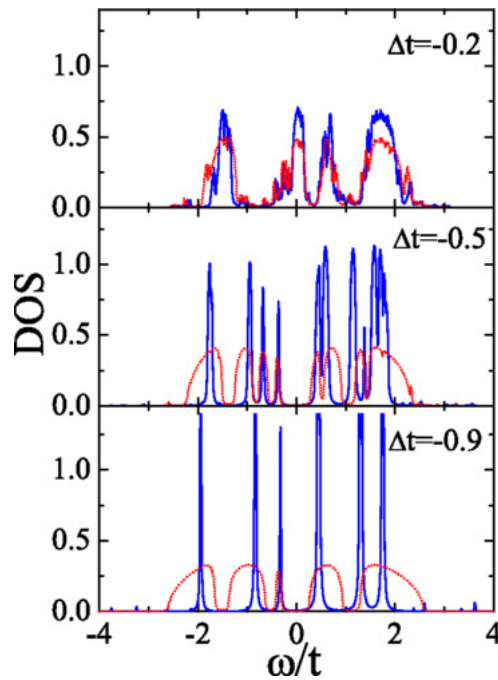


Hình 4.6: Hàm mật độ trạng thái (DOS) của các hạt hai thành phần (đường liền nét màu xanh lam) và của các hạt một thành phần (đường chấm màu đỏ) đối với sự mất cân bằng khối lượng dương ($\Delta t > 0$) tại tổng mật độ số hạt cố định $n = 1$ và tương tác $U = 4t(T = 0.02t)$.

tương tác mạnh [32]. Mô hình Falicov-Kimball không spin cũng phát hiện chuyển pha kim loại-điện môi Mott bằng cách tách dải năng lượng dẫn thành hai dải năng lượng con [32,69,70]. MIT có thể được hiểu chi tiết hơn thông qua khảo sát đặc điểm của DOS. Trong Hình 4.6 và 4.7 chúng tôi vẽ biểu đồ DOS của các hạt ở mật độ thông ước $n = 1$. Mật độ thông ước khác $n = 2$ tương đương với $n = 1$ thông qua phép đối xứng hạt-lỗ trống. Hình 4.6 và 4.7 một lần nữa khẳng định sự tồn tại MIT do mất cân bằng khối lượng ở cả hai vùng $\Delta t > 0$ và $\Delta t < 0$. Khi không có sự mất cân bằng khối lượng, $\Delta t = 0$, các hạt của hai loại tham gia như nhau vào MIT được tạo nên bởi tương tác cục bộ [19].

Tuy nhiên, như đã đề cập trước trong Hình 4.4 và Hình 4.5, trong vùng $\Delta t > 0$, sự mất cân bằng khối lượng chỉ có thể chuyển trạng thái hỗn hợp từ pha chất điện môi sang pha kim loại, trong khi tại vùng $\Delta t < 0$, nó chỉ chuyển trạng thái hỗn hợp từ pha kim loại sang pha điện môi tại

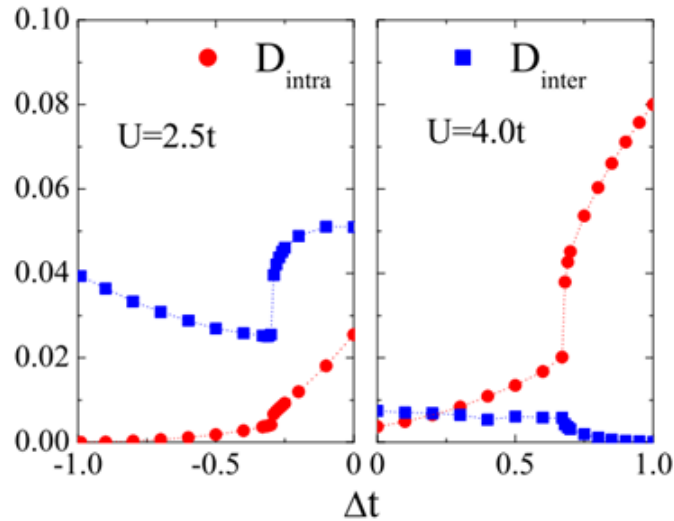
vùng $\Delta t > 0$, khi gia tăng Δt các hạt hai thành phần trở nên nhẹ hơn, và các dải năng lượng hầu hết bị các hạt chiếm giữ. Điều này cho thấy rằng sự mất cân bằng về khối lượng cũng gây ra sự mất cân bằng cư trú giữa hai loại hạt. Tại giới hạn cực đại, $\Delta t = 1$, các hạt một thành phần trở nên định xứ và chỉ các hạt hai thành phần tham gia vào MIT. Chúng ta có thể gọi MIT do mất cân bằng khối lượng là MIT chọn lọc loại hạt. Trong MIT này, các hạt nhẹ hơn tham gia chủ yếu vào việc chuyển trạng thái hỗn hợp về trạng thái kim loại. Tuy nhiên, MIT chọn lọc loại hạt này khác với MIT chọn lọc quỹ đạo [58-61].



Hình 4.7: Hàm mật độ các trạng thái (DOS) của các hạt hai thành phần (đường liền nét màu xanh lam) và của các hạt một thành phần (đường chấm màu đỏ) đối với sự mất cân bằng khối lượng âm ($\Delta t < 0$) ở tổng mật độ hạt cố định $n = 1$ và tương tác $U = 2.5t$ ($T = 0.02t$).

Trong MIT chọn lọc quỹ đạo, dải năng lượng rộng vẫn ở trạng thái kim loại trong khi dải năng lượng hẹp chuyển sang trạng thái điện môi. Ở MIT chọn lọc loại hạt này, các dải năng lượng của cả hai loại hạt đều là điện môi và khi MIT xảy ra, chúng cùng trở thành kim loại, nhưng các hạt nhẹ hơn chiếm ưu thế. Chỉ ở giới hạn $\Delta t = 1$, các hạt nặng trở nên định xứ.

Tương tự với vùng $\Delta t > 0$, khi $\Delta t < 0$, sự mất cân bằng khối lượng cũng gây ra sự mất cân bằng cư trú giữa hai loại hạt, nhưng sự mất cân bằng cư trú này không mạnh như ở vùng $\Delta t > 0$. Tại giới hạn $\Delta t = -1$, các hạt hai thành phần trở nên định xứ do biên độ nhảy nút của chúng triệt tiêu. Chúng tôi cũng đề cập đến MIT tạo ra bởi sự mất cân bằng khối lượng tại vùng $\Delta t < 0$ như MIT chọn lọc loại hạt bởi vì các hạt nhẹ hơn chiếm ưu thế hơn các hạt nặng hơn trong quá trình chuyển pha. Trái với MIT chọn lọc quỹ đạo, trong đó các hạt của cả hai spin luôn tham gia vào quá trình chuyển pha [58-61], tại vùng $\Delta t < 0$, các hạt một thành phần tham gia chủ yếu vào MIT. Điều này tương tự như MIT dạng điện môi Mott của các fermion không spin trong mô hình Falicov-Kimball [32,69,70]. MIT xảy ra khi dải năng lượng hạt đơn thành phần bị tách ra bởi một khe năng lượng do tương tác khác loại. Các thí nghiệm có thể quan sát MIT tạo ra bởi sự mất cân bằng khối lượng bằng cách đo các số cư trú đôi. Thật vậy, MIT của các nguyên tử ^{40}K cực lạnh đã được phát hiện bằng cách đo số cư trú đôi [17]. Trong hình 4.8 chúng tôi vẽ đồ thị số cư trú đôi cùng loại và khác loại ở tổng mật độ hạt $n = 1$ ở cả vùng $\Delta t > 0$ và $\Delta t < 0$. Có thể thấy sự gián đoạn của số cư trú đôi này tại điểm MIT. Điều này chứng tỏ rằng MIT là chuyển pha bậc một.

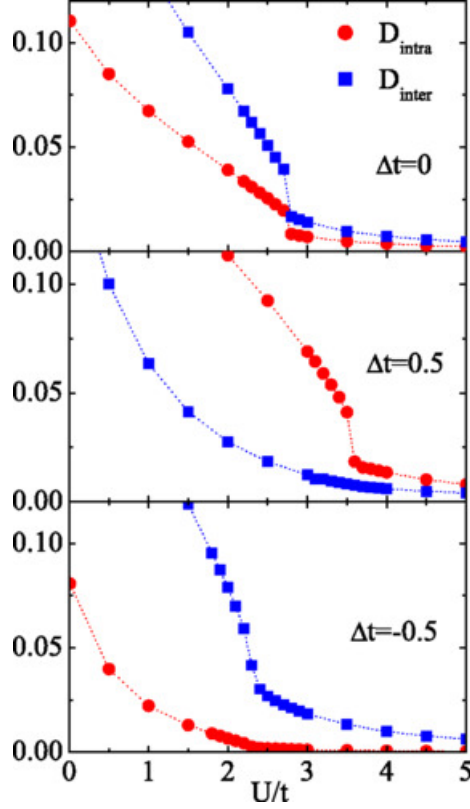


Hình 4.8: Số cư trú đôi cùng loại D_{intra} (hình tròn màu đỏ) và số cư trú đôi khác loại D_{inter} (ô vuông màu xanh lam) ở mật độ tổng số hạt cố định $n = 1 (T = 0.02t)$.

Hình bên trái thể hiện vùng $\Delta t < 0 (U = 2, 5t)$, trong khi hình bên phải thể hiện vùng $\Delta t > 0 (U = 4t)$. Khi $\Delta t > 0$, bảng bên phải của Hình 4.8 cho chúng ta thấy rằng số cư trú đôi trong pha điện môi nhỏ nhưng có giá trị khác 0 như đã thảo luận trước đây. Với sự gia tăng sự mất cân bằng khối lượng, tại MIT, số cư trú đôi cùng loại tăng đột ngột, trong khi số cư trú đôi khác loại giảm về 0. Trên thực tế, với sự mất cân bằng khối lượng lớn, trạng thái kim loại chiếm ưu thế bởi các hạt hai thành phần. Do đó, số cư trú đôi cùng loại tăng lên, trong khi số cư trú đôi khác loại có xu hướng biến mất khi $\Delta t \rightarrow 1$. Ngược lại với vùng $\Delta t > 0$, tại vùng $\Delta t < 0$ (bảng bên trái của Hình 4.8), cư trú đôi cùng loại giảm xuống 0 khi $|\Delta t|$ tăng. Rõ ràng là trong vùng này, các hạt hai thành phần trở nên nặng hơn, và trong giới hạn $\Delta t \rightarrow -1$ các hạt thực tế được định xứ. Do đó, số cư trú đôi cùng loại có xu hướng biến mất khi $\Delta t \rightarrow -1$. Tuy nhiên, số cư trú đôi khác loại vẫn hữu hạn trong pha điện môi. Trên thực tế, trong vùng $\Delta t < 0$, sự mất cân bằng khối lượng sẽ chuyển hỗn hợp từ trạng thái kim loại sang trạng thái điện môi. Do đó, MIT chỉ có thể xảy ra đối với tương tác cục bộ nhỏ hơn giá trị tối hạn của tương tác cục bộ đối với MIT trong trường hợp cân bằng khối lượng. Tương tác cục bộ trong phạm vi giá trị như trên không đủ mạnh để triệt tiêu cư trú đôi. Thay vào đó nó tạo ra nhảy nút ảo dẫn đến cư trú đôi của các hạt khác loại, mặc dù dải năng lượng của các hạt đơn thành phần đã mở ra khe năng lượng.

Để mô tả ảnh hưởng của MIT tạo ra do tương quan trong trường hợp mất cân bằng khối lượng, trong Hình 4.9 chúng tôi trình bày sự phụ thuộc của số cư trú đôi vào tương tác cục bộ đối với sự biến thiên Δt . Trong trường hợp khối lượng cân bằng ($\Delta t = 0$), $D_{\text{inter}} = 2D_{\text{intra}}$. Cả cư trú đôi cùng loại và khác loại đều thay đổi gián đoạn tại MIT, và chúng suy giảm ở trạng thái điện môi. Khi có sự mất cân bằng về khối lượng, chỉ có cư trú đôi cùng loại hoặc khác loại mới có biểu hiện bất thường tại MIT.

Trong vùng $\Delta t > 0$, cư trú đôi của các hạt hai thành phần cũng cho thấy sự triệt tiêu nhanh chóng tại MIT, trong khi cư trú đôi khác loại liên tục giảm khi tăng tương tác cục bộ. Các biểu hiện này trái ngược nhau tại vùng ngược lại với $\Delta t < 0$. Chúng chỉ ra vai trò tích cực của các hạt

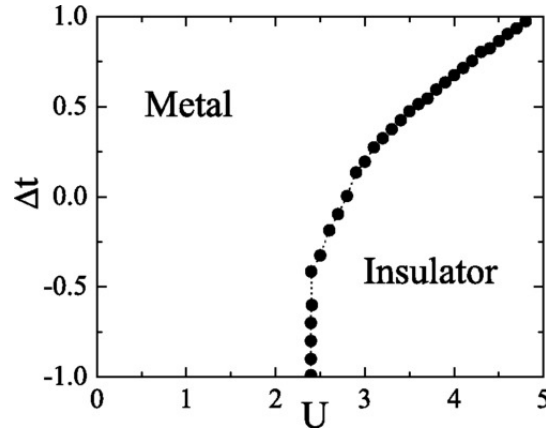


Hình 4.9: Số cơ trú đôi cùng loại D_{intra} (hình tròn màu đỏ) và số cơ trú đôi khác loại D_{inter} (ô vuông màu xanh lam) ở mật độ tổng số hạt cố định $n = 1$ và sự mất cân bằng khối lượng khác nhau ($T = 0.02t$).

hai thành phần trong vùng $\Delta t > 0$ và của các hạt đơn thành phần trong vùng $\Delta t < 0$ tại MIT. Điều này có nghĩa là các hạt nhẹ hơn mới tham gia tích cực vào MIT. Trong pha điện môi, cơ trú đôi suy giảm, nhưng chúng vẫn hữu hạn và chỉ biến mất ở giới hạn tương tác mạnh. Các cơ trú đôi có thể quan sát bằng thực nghiệm, nhưng đây là một thách thức đối với các quan sát thực nghiệm về sự gián đoạn số cơ trú đôi tại điểm chuyển pha.

Trong hình 4.10 chúng tôi tổng kết kết quả thu được bằng biểu đồ pha biểu thị MIT trong mặt phẳng thông số $(\Delta t, U)$ tại tổng mật độ số hạt thông ước. Biểu đồ pha được xây dựng từ sự phụ thuộc của tổng mật độ số hạt vào thế hóa như đã thảo luận trước đây. Pha điện môi được xác định khi có một đoạn thẳng bằng xuất hiện trong đường $n(\mu)$. Trái ngược với mô hình Hubbard hai thành phần, chúng tôi không quan sát thấy bất kỳ sự tồn tại đồng thời của pha kim loại và điện môi [47,48]. Bằng cách gia tăng

Δt , giá trị U tới hạn tăng một cách đơn điệu. Tuy nhiên, vì $-1 \leq \Delta t \leq 1$, MIT tạo ra bởi sự mất cân bằng khối lượng chỉ xảy ra ở một phạm vi tương tác cục bộ hữu hạn vừa phải. Đối với các tương tác cục bộ yếu và mạnh, sự mất cân bằng khối lượng không thể làm hỗn hợp thay đổi trạng thái cơ bản của nó. Trong hỗn hợp fermion của nguyên tử ^{40}K và ^6Li , Δt có thể biến thiên từ 0,3 đến 0,85 [54]. Có khả năng phát hiện MIT tạo ra bởi sự mất cân bằng khối lượng trong hỗn hợp nguyên tử cực lạnh ở mật độ hạt thông ước và tương tác cục bộ vừa phải.



Hình 4.10: Giản đồ pha tại tổng mật độ số hạt $n = 1$ ($T = 0.02$)

4.4. Kết luận

Trong chương này, chúng tôi đã nghiên cứu MIT tạo ra bởi sự mất cân bằng khối lượng trong mô hình Hubbard ba thành phần. Với DMFT và phương pháp chéo hoá chính xác, chúng tôi đã phát hiện MIT tạo ra bởi sự mất cân bằng khối lượng ở tổng số hạt thông ước, giống như trong mô hình Hubbard ba thành phần cân bằng [19]. MIT được tạo ra hoàn toàn bởi sự mất cân bằng khối lượng. Sự mất cân bằng khối lượng dương chỉ có thể chuyển hỗn hợp từ pha điện môi sang pha kim loại, trong khi sự mất cân bằng âm làm hỗn hợp chuyển từ pha kim loại sang pha điện môi.

Nghiên cứu MIT trong mô hình Hubbard ba thành phần khi có sự mất cân bằng khối lượng, chúng tôi cũng đã tính toán số cư trú đôi của cả hạt hai thành phần (D_{intra}) và các hạt khác loại (D_{inter}) dưới dạng hàm Δt và

tương tác cục bộ U . Tại giá trị U tới hạn, số cư trú đôi thể hiện gián đoạn, biểu thị MIT là chuyển pha bậc một. Sự mất cân bằng khối lượng càng lớn, MIT xảy ra ở giá trị U tới hạn lớn hơn. Biểu đồ pha biểu diễn MIT trong mặt phẳng $(\Delta t, U)$ cũng được xây dựng. Biểu đồ này cho thấy MIT chỉ xảy ra ở các tương tác cục bộ vừa phải. Đối với các tương tác cục bộ yếu và mạnh, sự mất cân bằng khối lượng không làm hệ thoát khỏi trạng thái ban đầu.

Trên thực tế, sự mất cân bằng khối lượng gây ra sự mất cân bằng độ cư trú giữa các loại hạt, và các hạt nhẹ hơn chiếm ưu thế trong chuyển pha kim loại-điện môi. Chuyển pha kim loại-điện môi có thể được hiểu là sự chuyển pha có chọn lọc các loại hạt nhẹ. Các đặc điểm này khác với các biểu hiện của hệ cân bằng khối lượng. Chúng tôi dự đoán chuyển pha kim loại-điện môi tạo ra bởi sự mất cân bằng khối lượng trong hỗn hợp fermion-fermion của các nguyên tử cực lạnh, chẳng hạn nạp vào mạng quang học hỗn hợp của nguyên tử ^{40}K và ^6Li . Bằng cách đo tỷ lệ của các vị trí cặp đôi trong mạng tinh thể quang học, chuyển pha kim loại-điện môi có thể được quan sát bằng cách điều chỉnh tỷ lệ mất cân bằng khối lượng.

Chương 5

HIỆU ỨNG KONDO TRONG HỆ ĐA THÀNH PHẦN CÓ DẢI NĂNG LƯỢNG PHẪNG

Trong chương này chúng tôi nghiên cứu hiệu ứng Kondo trong hệ đa thành phần có dải năng lượng phẳng [26,71]. Hệ đa thành phần ở đây được tạo nên do ô cơ sở của mạng tinh thể có nhiều nút mạng không tương đương nhau. Cụ thể hệ đa thành phần được xem xét bằng nghiên cứu động lực học của điện tử trong mạng tinh thể Lieb. Do cấu trúc đặc biệt của mạng tinh thể Lieb mà động lực học của điện tử tương đương như là hệ có 3 loại hạt fermion khác nhau, mỗi loại hạt fermion có hai thành phần spin. Chương này có hai phần. Phần 1 chúng tôi nghiên cứu hiệu ứng Kondo trong mạng tinh thể Lieb với một tạp từ [4,26,72,73]. Ở phần 2, chúng tôi nghiên cứu hiệu ứng liên kết Kondo trong mạng tinh thể Lieb với đầy đủ các tạp từ trên mỗi nút mạng. Các kết quả nghiên cứu chính đã được công bố trên tạp chí Communications in Physics và tạp chí Annals of Physics. Trong chương này có dùng một số cụm từ viết tắt như PAM, LM, SC, FSC, FLM....được chú thích trong bảng viết tắt ở đầu luận án trang số 7.

Phần I. Hiệu ứng Kondo trong mạng tinh thể Lieb có một tạp từ

5.1. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu

Sở hữu tính đặc biệt, tương quan điện tử trong mạng tinh thể có dải năng lượng phẳng đã thu hút rất nhiều sự chú ý của các nhà nghiên cứu. Trong mạng tinh thể có dải năng lượng phẳng, tương tác Coulomb của các điện tử chiếm ưu thế tuyệt đối so với động năng, hệ quả là xuất hiện các

hiện tượng hấp dẫn như tính chất sắt từ dải năng lượng phẳng [71] hoặc hiệu ứng Kondo phân tử [26]. Khi tạp từ liên kết với các điện tử dẫn từ dải năng lượng phẳng, sẽ tạo ra cặp đơn tuyến Kondo phân tử với một điện tử dẫn duy nhất và ngăn chặn sự tham gia của tất cả các điện tử dẫn khác, tham gia hình thành cặp đơn tuyến. Bên cạnh đó, trong mạng tinh thể Lieb, các điện tử dẫn cũng thể hiện tính chất giống với các điện tử ở gần các góc của vùng Brillouin thứ nhất [26,71]. Khi một tạp chất từ được liên kết với các điện tử dẫn như vậy, chúng sẽ tạo ra hiệu ứng Kondo khe mềm [25,74]. Bằng cách này, mạng tinh thể Lieb cho phép chúng ta nghiên cứu sự cạnh tranh giữa hiệu ứng Kondo khe mềm và hiệu ứng Kondo phân tử khi tạp chất từ tính được liên kết với cả điện tử dẫn ở vùng năng lượng phẳng và khe mềm. Về bản chất sự cạnh tranh đó thể hiện hiệu ứng tương quan đa thành phần. Với mục đích như vậy, chúng tôi tiến hành nghiên cứu hiệu ứng Kondo trong mạng tinh thể Lieb. Trái ngược với nghiên cứu trước đây, tạp chất từ chỉ được liên kết với các điện tử dẫn vùng năng lượng phẳng, trong nghiên cứu này, tạp chất từ được liên kết với cả điện tử dẫn của dải năng lượng phẳng và khe mềm. Để đạt được điều này, chúng tôi đã mở rộng sự lai hóa cục bộ giữa tạp chất từ và điện tử dẫn. Sự lai hóa cục bộ của tạp chất từ tại vị trí góc vuông của mạng tinh thể Lieb làm xuất hiện hiệu ứng Kondo khe mềm, trong khi sự lai hóa không cục bộ giữa tạp chất từ ở vị trí góc vuông và điện tử dẫn tại các vị trí lân cận gần nhất về cơ bản làm xuất hiện hiện tượng Kondo phân tử [26]. Qua đó, chúng tôi có thể nghiên cứu sự cạnh tranh giữa hiệu ứng Kondo khe mềm và Kondo phân tử trong mạng tinh thể Lieb.

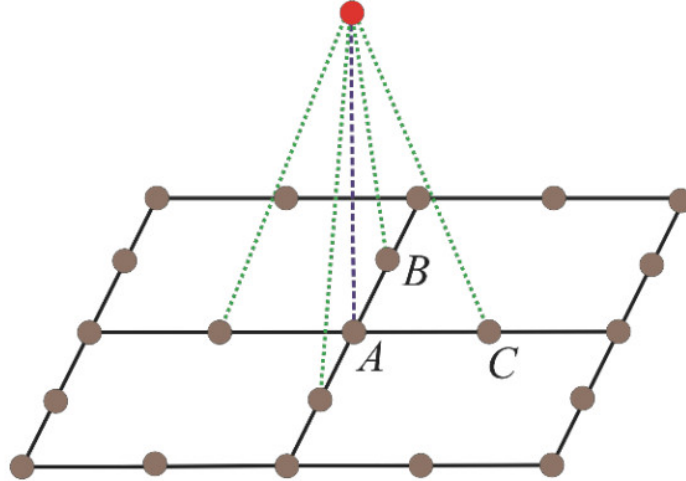
Chúng tôi sẽ sử dụng phương pháp tính số nhóm tái chuẩn hóa (NRG) để giải hiệu ứng Kondo được đề xuất [22-24,74]. Về cơ bản, NRG được đề xuất để giải quyết hiệu ứng Kondo trong kim loại. NRG mô tả chính xác tất cả các chế độ có thể xảy ra trong hiệu ứng Kondo. NRG cũng đã được mở rộng để giải quyết hiệu ứng Kondo trong các môi trường khác nhau, chẳng hạn như trong các hệ có khe mềm, chất siêu dẫn, v.v...[74]. Gần đây, NRG được áp dụng thành công cho hiệu ứng Kondo trong hệ có dải năng lượng phẳng [26].

5.2. Mô hình

Với mô hình là mạng tinh thể Lieb được mô phỏng bằng mạng quang học [75], như các nguyên tử siêu lạnh [76] và hình thành như một phân tử [77]. Chúng tôi xét một tạp chất từ, được đặt ở một vị trí góc vuông của mạng tinh thể Lieb [71] (vị trí A trong Hình 5.1) và lai hóa với các điện tử dẫn tại vị trí A cũng như tại các vị trí lân cận gần nhất. Hamilton của mô hình có dạng

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \varepsilon \sum_{\sigma} n_{A\sigma}^f + U n_{A\uparrow}^f n_{A\downarrow}^f + V_0 \sum_{\sigma} c_{A\sigma}^\dagger f_{A\sigma} + \text{H.c.} + V_1 \sum_{i(A), \sigma} c_{i\sigma}^\dagger f_{A\sigma} + \text{H.c.}, \quad (5.1)$$

trong đó $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) là toán tử sinh (hủy) hạt của điện tử dẫn tại nút i với spin σ , tham số t là tham số nhảy nút. Trong nghiên cứu này, chúng tôi chỉ tính đến nhảy nút lân cận gần nhất.



Hình 5.1: Cấu trúc mạng tinh thể Lieb.

Tạp chất từ tính (chấm bên trên) được lai hóa với điện tử dẫn ở vị trí góc (nút A) cũng như ở vị trí tâm cạnh, xung quanh vị trí góc (nút B và C) của các điện tử dẫn. $f_{A\sigma}^\dagger$ ($f_{A\sigma}$) là toán tử sinh (hủy) điều khiển tạp chất với spin σ tại điểm A. $n_{A\sigma}^f = f_{A\sigma}^\dagger f_{A\sigma}$ là toán tử số của tạp. ε là mức năng

lượng của tạp và U là tương tác Coulomb của các điện tử tại vị trí tạp. Tạp lai hóa với các điện tử dẫn tại nút A với biên độ V_0 và với các điện tử dẫn tại các vị trí lân cận gần nhất với biên độ V_1 . Khi $V_1 = 0$, Hamiltonian trong biểu thức (5.1) thể hiện hiệu ứng Kondo có khe mềm [25,74]. Khi $V_0 = 0$, Hamiltonian trong biểu thức (5.1) mô tả về cơ bản hiệu ứng Kondo phân tử [26]. Đối với các lai hóa hữu hạn V_0, V_1 , Hamiltonian trong biểu thức (5.1) sẽ mô tả sự cạnh tranh giữa hiệu ứng Kondo khe mềm và hiệu ứng Kondo phân tử, có thể xảy ra trong hệ.

Chúng tôi tham số hóa các biên độ lai hóa này bằng đưa tham số α và biên độ lai hóa V như sau.

$$V_0 = \frac{1}{2}(1 + \alpha)V, \quad (5.2)$$

$$V_1 = \frac{1}{2}(1 - \alpha)V. \quad (5.3)$$

Khi $\alpha = 1$, $V_0 = V$ và $V_1 = 0$. Khi $\alpha = -1$, $V_0 = 0$ và $V_1 = V$. Khi $-1 < \alpha < 1$, cả V_0 và V_1 đều hữu hạn. Tham số α mô tả mối quan hệ khác biệt giữa V_0 và V_1 , trong khi V là biên độ lai hóa tổng. Hiệu ứng Kondo hoàn toàn phụ thuộc vào hàm lai hóa [22-24,74]

$$\Delta(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k \Gamma_k^\dagger [\omega - h_0(k)]^{-1} \Gamma_k, \quad (5.4)$$

với $\Gamma_k^\dagger = (V_0, 2V_1 \cos(k_x/2), 2V_1 \cos(k_y/2))$ và $h_0(k)$ là Hamiltonian Bloch của các điện tử dẫn

$$h_0(k) = \begin{pmatrix} 0 & -2t \cos(k_x/2) & -2t \cos(k_y/2) \\ -2t \cos(k_x/2) & 0 & 0 \\ -2t \cos(k_y/2) & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.5)$$

5.3. Kết quả tính số

Chúng tôi sử dụng phương pháp tính số NRG để giải quyết hiệu ứng Kondo trong mạng tinh thể Lieb, được mô tả bởi Hamilton trong biểu thức (5.1). Về cơ bản phương pháp NRG là phương pháp tính số cho nhóm tái

chuẩn hóa [22-24, 74]. Tài liệu tổng quan [74] mô tả chi tiết phương pháp, ở đây chúng tôi chỉ điểm lại các đặc điểm chính của phương pháp. Phương pháp NRG giải mô hình Anderson một tạp có dạng

$$H = H_{\text{inp}} + H_{\text{bath}} + H_{\text{inp bath}}, \quad (5.6)$$

trong đó

$$\begin{aligned} H_{\text{inp}} &= \sum_{\sigma} \varepsilon_f f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + U f_{\uparrow}^{\dagger} f_{\uparrow} f_{\downarrow}^{\dagger} f_{\downarrow}, \\ H_{\text{bath}} &= \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma}, \\ H_{\text{inp-bath}} &= \sum_{k\sigma} V_k (f_{\sigma}^{\dagger} c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}). \end{aligned}$$

Với Hamiltonian trên, toán tử $c_{k\sigma}^{\dagger}$ ($c_{k\sigma}$) là toán tử sinh (hủy) điện tử dẫn ở trạng thái có động lượng k và spin σ , $f_{\sigma}^{\dagger}$ (f_{σ}) là toán tử sinh (hủy) tạp có spin σ , ε_f là mức năng lượng của tạp và U là tương tác Coulomb cục bộ của tạp, ε_k là hệ thức tán sắc của điện tử dẫn và V_k là hệ số lai hóa giữa điện tử dẫn và tạp. Hamiltonian (5.1) là một dạng của Hamiltonian trên ảnh hưởng của điện tử dẫn lên tạp được xác định thông qua hàm lai hóa

$$\Delta(\omega) = \pi \sum_k V_k^2 \delta(\omega - \varepsilon_k).$$

Hamiltonian (5.6) có thể viết lại như sau

$$H = H_{\text{inp}} + \sum_{\sigma} \int_{-1}^1 d\varepsilon g(\sigma) a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} + \sum_{\sigma} \int_{-1}^1 d\varepsilon h(\varepsilon) (f_{\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma} + a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} f_{\sigma}).$$

Trong đó $a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger} a_{\varepsilon\sigma}$ thỏa mãn hệ thức phản giao hoán

$$[a_{\varepsilon\sigma}^{\dagger}, a_{\varepsilon'\sigma'}]_{+} = \delta(\varepsilon - \varepsilon') \delta_{\sigma\sigma'}.$$

$g(\varepsilon)$ là hàm nghịch đảo của hàm $\varepsilon(\omega)$, có nghĩa là $g(\varepsilon(\omega)) = \omega$ và hàm lai hóa $h(\omega)$ được xác định như sau

$$\Delta(\omega) = \pi \frac{d\varepsilon(\omega)}{d\omega} h[\varepsilon(\omega)]^2,$$

Chúng ta xác định một thông số $\wedge > 1$ để gián đoạn theo thang logarithmic cho dải năng lượng dẫn.

$$x_n = \pm \wedge^{-n}, n = 0, 1, 2, \dots$$

$$d_n = \wedge^n (1 - \wedge^{-1}),$$

Trong một khoảng gián đoạn, chúng ta đưa ra một tập hợp hàm chuẩn trực

$$\psi_n p^\pm(\varepsilon) = \begin{cases} \frac{1}{\sqrt{d_n}} e^{\pm i \omega_n p \varepsilon} & \text{khi } x_{n+1} < \pm \varepsilon < x_n \text{ ngoài khoảng trên.} \\ 0 & \end{cases}$$

Trong cơ sở các hàm chuẩn xung lượng chúng ta thu được

$$a_{\varepsilon\sigma} = \sum_{rp} [a_{np\sigma} \psi_{np}^\dagger(\varepsilon) + b_{np\sigma} \psi_{rp}^-(\varepsilon)]$$

Trong đó

$$a_{np\varepsilon} = \int_{-1}^1 d\varepsilon [\psi_{np}^\dagger(\varepsilon)]^* a_{\varepsilon\sigma},$$

$$b_{np\sigma} = \int_{-1}^1 d\varepsilon [\psi_{np}^-(\varepsilon)]^* a_{\varepsilon\sigma}.$$

Cuối cùng chúng ta thu được Hamiltonian sau khi lược bỏ các số hạng có $p \neq 0$, và ký hiệu lại $a_{np\sigma} \equiv a_{n\sigma}$ [74]

$$H = H_{imp} + \sum_{n\sigma} (\varepsilon_n^\dagger a_{n\sigma}^+ a_{n\sigma} + \xi_n^- b_{n\sigma}^+ b_{n\sigma})$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger \sum_n (\gamma_n^\dagger a_{n\sigma} + \gamma_n^- b_{n\sigma})$$

$$+ \frac{1}{\sqrt{\pi}} \sum_{\sigma} \left(\sum_n (\gamma_n^\dagger a_{n\sigma}^\dagger + \gamma_n^- b_{n\sigma}^+) \right) f_{\sigma}. \quad (5.7)$$

Trong đó

$$\xi_n^\pm = \frac{\int_{\pm, n}^{\pm, n} d\varepsilon \Delta(\varepsilon) \varepsilon}{\int_{\pm, n} d\varepsilon \Delta(\varepsilon)},$$

ở đây chúng ta ký hiệu tích phân $\int^{+n} d\varepsilon = \int_{x_{n+1}}^{x_k} d\varepsilon$, $\int^{-n} d\varepsilon = \int_{-x_n}^{-x_{n+1}} d\varepsilon$. Sự lược bỏ các số hạng $p \neq 0$ được lý giải là các số hạng này liên kết với tập thông qua số hạng $p = 0$ và liên kết ngoài số hạng $p = 0$ và $p \neq 0$ của hệ số $((1 - \wedge^{-1}) \rightarrow 0$ khi $\wedge \rightarrow 1$. Từ Hamintonian (5.7) chúng ta có thể biến đổi nó thành các toán tử sau

$$c_{0\sigma} = \frac{1}{\sqrt{\xi_0}} \sum_n (\gamma_n^+ a_{n\sigma} + \gamma_n^- b_{n\sigma}),$$

Trong đó

$$\xi_0 = \sum_n [(\gamma_n^+)^2 + (\gamma_n^-)^2] = \int_{-1}^1 d\varepsilon \Delta(\varepsilon),$$

$$c_{n\sigma} = \sum_{m=0}^{\infty} (u_{nm} a_{m\sigma} + v_{nm} b_{m\sigma}).$$

Các hệ thức hồi quy [76]

$$u_{0m} = \frac{\gamma_m^+}{\sqrt{\xi_0}};$$

$$v_{0m} = \frac{\gamma_m^-}{\sqrt{\xi_0}};$$

$$u_{n+1,m} = \frac{1}{t_n} [(\xi_m^+ - \varepsilon_n) u_{nm} - t_{n-1} u_{n-1,m}],$$

$$v_{n+1,m} = \frac{1}{t_n} [(\xi_m^- - \varepsilon_n) v_{nm} - t_{n-1} v_{n-1,m}],$$

chúng ta thu được Hamiltonian như sau

$$H = H_{imp} + \sqrt{\frac{\xi_0}{\pi}} \sum_{\sigma} (f_{\sigma}^{\dagger} c_{0\sigma} + c_{0\sigma}^{\dagger} f_{\sigma})$$

$$+ \sum_{\sigma n=0}^{\infty} \left[\varepsilon_n c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma} + t_n (c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n+1\sigma} + c_{n+1\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma}) \right],$$

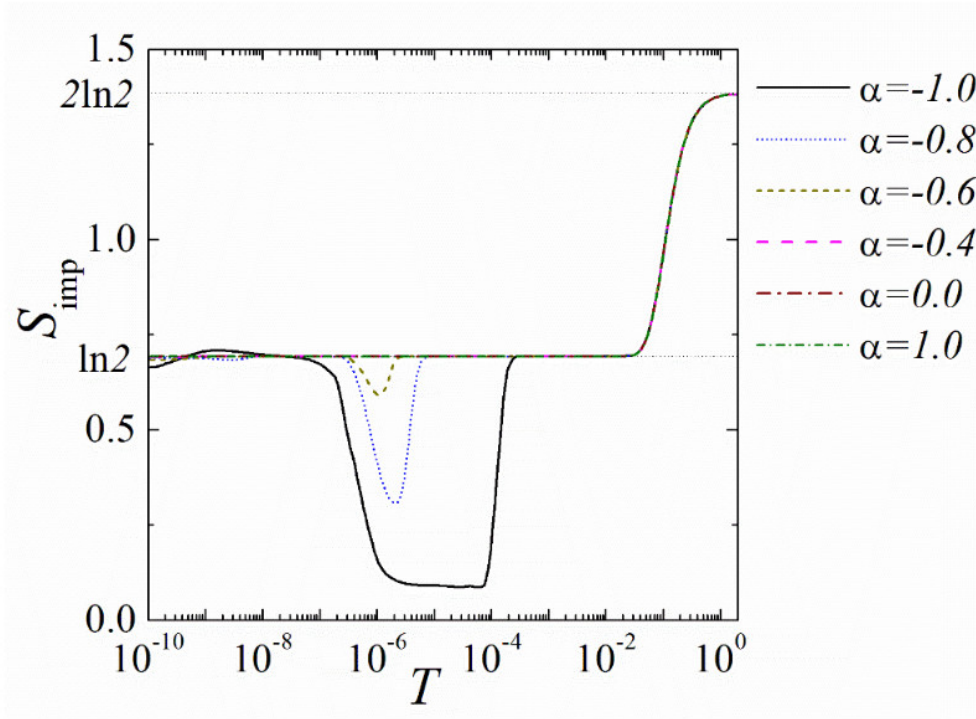
trong đó

$$t_n = \frac{(1 + \wedge^{-1}) (1 - \wedge^{-n-1})}{2\sqrt{1 - \wedge^{-2n-1}} \sqrt{1 - \wedge^{-2n-3}}} \wedge^{-n/2}.$$

Hamiltonian này có thể chéo hóa bằng phương pháp chéo hóa lặp liên tiếp và từ đó có thể tính được các đại lượng vật lý quan tâm [74]. Gói chương trình tính số hiệu ứng NRG Ljubjana được sử dụng [78,79]. Trong tính số, nửa chiều rộng của dải năng lượng $D = 2\sqrt{2}t = 1$ được dùng làm đơn vị năng lượng.

Chúng tôi đặt $\Gamma = \pi V^2$ và chỉ xét trường hợp đối xứng $\varepsilon = U/2$. Trong NRG, lưới logarit được rời rạc hóa theo lược đồ Z với mức cắt năng lượng $\Lambda = 2$ [78,79]. Tất cả các đại lượng tính toán được tính trung bình trên $N_z = 8$ mắt lưới logarit xen kẽ nhau cùng với các tham số tạo xen kẽ $z = 1/N_z$ [78,79]. Lưới logarit được rời rạc hóa một cách tự động trong chương trình tính số khi cho tham số z , N_z và Λ . Đại lượng nhiệt động học của tạp O được định nghĩa là $O_{imp} = O_{tot} - O_{tot}^{(0)}$ trong đó O_{tot} là đại lượng nhiệt động của toàn hệ và $O_{tot}^{(0)}$ là đại lượng đo khi không có tạp [74]. Đây là sự đóng góp của tạp từ vào đại lượng nhiệt động lực học. Giống với nghiên cứu trước, để xem xét đặc điểm của dải năng lượng phẳng, chúng tôi mở rộng dải năng lượng này bằng một đại lượng dương nhỏ η , tức là thay thế $\Delta(\omega) \rightarrow \Delta(\omega + i\eta)$ [26].

Trong Hình 5.2, chúng tôi trình bày đồ thị entropy của tạp với các thông số α khác nhau. Khi $\alpha = 1$, entropi tạp biểu hiện 2 chế độ. Ở nhiệt độ thấp, $S_{imp} = \ln 2$. Chế độ nhiệt độ thấp này là mômen cục bộ (LM). Tạp chất từ hoạt động như một mômen cục bộ, do đó $S_{imp} = \ln 2$, [22-24,74]. Khi nhiệt độ tăng, entropi tạp tăng về chế độ quỹ đạo tự do (FO) với giá trị entropy $2 \ln 2$. Khi nhiệt độ cao là chế độ FO [22-24,74]. Đúng với mong đợi, trường hợp $\alpha = 1$ sẽ xuất hiện hiện tượng Kondo trong dải năng lượng khe mềm, do $\alpha = 1$ được hiểu là $V_0 = V$ và $V_1 = 0$. Với trường hợp này, tạp chất từ chỉ liên kết với các điện tử dẫn tại nút A. Vì các điện tử dẫn tại nút A xuất hiện dải năng lượng khe mềm, do đó hiệu ứng Kondo là ở dải vùng năng lượng khe mềm [25,74]. Khi α giảm về phía giới hạn ngược lại $\alpha = -1$, chế độ mới với mức nhiệt độ thấp hơn chế độ LM xuất hiện. Trong chế độ này, entropy tạp nhỏ hơn trong chế độ LM và giảm dần theo giá trị của entropy tạp trong giới hạn $\alpha = -1$. Khi $\alpha = -1$, $V_0 = 0$ và $V_1 = V$ có nghĩa là tạp từ được kết nối với điện tử dẫn tại các vị trí

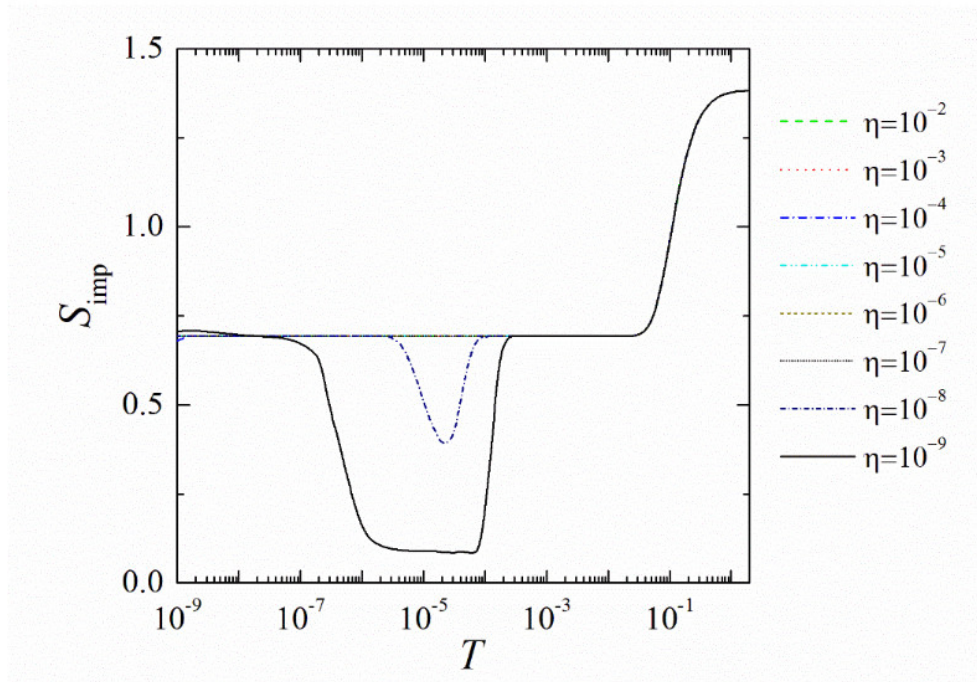


Hình 5.2: Đồ thị entropy của tạp đóng vai trò như một hàm số đo của nhiệt độ đối với các giá trị khác nhau của α . $U = 0.5, \Gamma = 0.001, \eta = 10^{-9}$.

trung điểm mỗi cạnh. Mật độ cục bộ của các trạng thái điện tử dẫn tại vị trí trung điểm mỗi cạnh cho thấy cả đặc điểm dải năng lượng khe mềm và dải phẳng. Điều này dẫn đến hiệu ứng Kondo phân tử, trong đó các điện tử dẫn của dải năng lượng phẳng đóng vai trò chi phối trong sự hình thành cặp Kondo đơn tuyến phân tử [26]. Các điện tử dẫn của dải năng lượng khe mềm không liên quan đến sự hình thành cặp Kondo đơn tuyến phân tử [26]. Tuy nhiên, trái ngược với nghiên cứu trước đây, lai hóa trong trường hợp $\alpha = -1$ là phụ thuộc động lượng. Với đặc điểm này, entropy tạp không tiếp cận với giá trị của entropy tạp trong hiệu ứng Kondo phân tử [26]. Ở nhiệt độ đủ thấp, ví dụ điển hình là nhỏ hơn η , sẽ xuất hiện chế độ liên kết mạnh. Tuy nhiên, chế độ này là giả, do giá trị hữu hạn của η . Trong giới hạn $\eta \rightarrow 0$, chế độ này biến mất. Ngoài ra, trong chế độ này, entropy tạp biến thiên xung quanh giá trị entropy của chế độ LM.

Giống như trong nghiên cứu trước đây [26], kết quả NRG phụ thuộc vào tham số mở rộng η như được trình bày trong Hình 5.3. Trong hình 5.3,

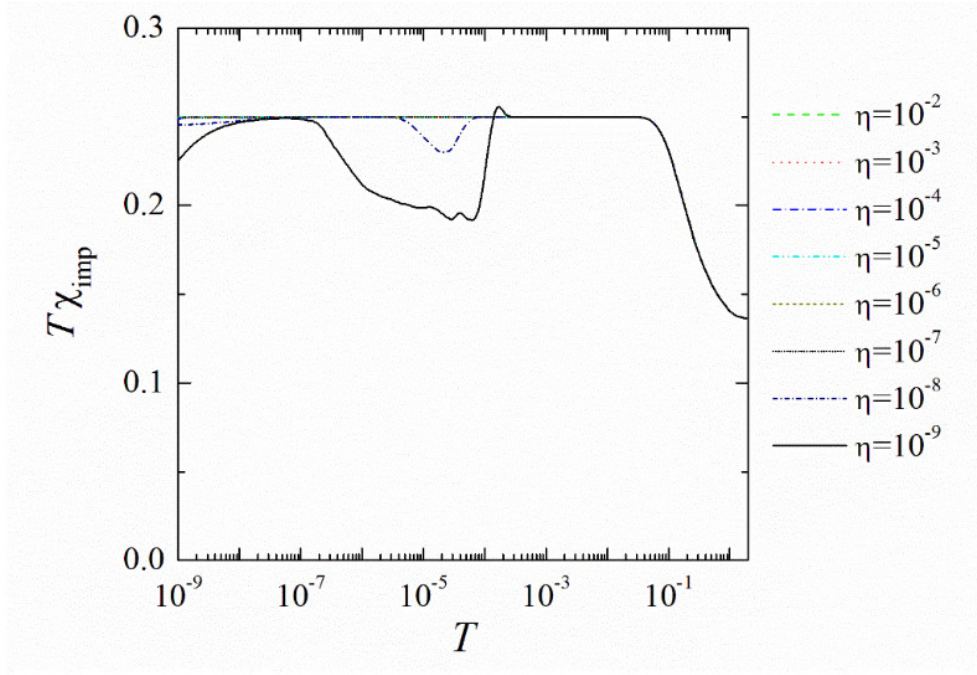
chúng tôi vẽ biểu thị sự phụ thuộc vào nhiệt độ của entropy tạp đối với các giá trị khác nhau của η . Chúng tôi xét trường hợp $\alpha = -1$, vì trong trường hợp này, mức độ ảnh hưởng của dải năng lượng phẳng là mạnh nhất, như đã được chỉ ra trong Hình 5.2. Có thể thấy, trong Hình 5.3 với chế độ LM và FO, tạp chất entropy độc lập với η . Tuy nhiên, trong chế độ hiệu ứng Kondo phân tử, entropy tạp phụ thuộc vào η theo đúng như dự đoán, do độ rộng của dải năng lượng phẳng ảnh hưởng đến sự hình thành đơn cặp Kondo đơn tuyến phân tử.



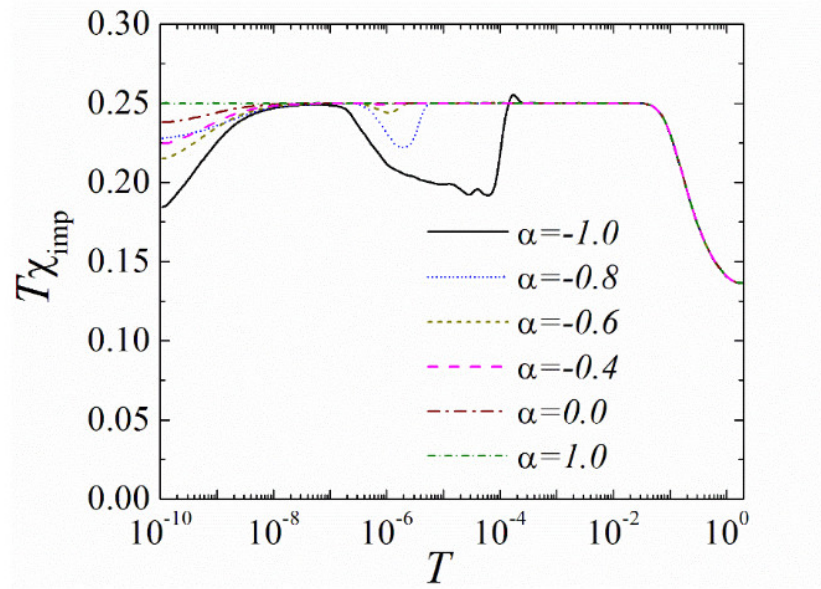
Hình 5.3: Đồ thị entropy của tạp như một hàm số của nhiệt độ đối với các giá trị khác nhau của η . Ở đây xét với $U = 0.5, \Gamma = 0.001, \alpha = -1$.

Tương tự, độ cảm ứng spin của tạp cũng phụ thuộc vào tham số mở rộng η , trình bày như trong hình 5.4. Trong Hình 5.4, chúng tôi vẽ đồ thị sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ cảm ứng spin tạp đối với các giá trị η khác nhau. Trong chế độ LM và FO, độ cảm ứng của spin tạp lại không phụ thuộc vào η , miễn η đủ nhỏ. Tuy nhiên, trong chế độ hiệu ứng Kondo phân tử, độ cảm ứng spin của tạp phụ thuộc rất nhiều vào η .

Trong Hình 5.5, chúng tôi trình bày sự phụ thuộc vào nhiệt độ của độ cảm ứng spin của tạp đối với các giá trị α khác nhau. Trong giới hạn $\alpha = 1$,



Hình 5.4: Độ cảm ứng của spin tạp như một hàm số của nhiệt độ đối với các giá trị khác nhau của η . Ở đây xét với $U = 0.5, \Gamma = 0.001, \alpha = -1$.



Hình 5.5: Độ cảm ứng của spin tạp như một hàm số của nhiệt độ đối với các giá trị khác nhau của α . Ở đây xét với $U = 0.5, \Gamma = 0.001, \eta = 10^{-9}$.

ta có thể thấy lại hiệu ứng Kondo dải năng lượng mềm. Ở đó chỉ có hai chế độ: LM và FO. Trong chế độ mô men từ cục bộ $T\chi_{imp} = 1/4$ và trong chế độ FO tiệm cận đến $1/8$ [22-24,74]. Hiệu ứng Kondo phân tử chỉ xuất hiện khi $\alpha < 0$. Điều kiện này có nghĩa là $V_1 > V_0$, chẳng hạn như, sự lai hóa tạp với các điện tử dẫn ở vị trí trung tâm mỗi cạnh (nút B và C) phải mạnh hơn so với sự lai hóa của tạp với các điện tử dẫn ở vị trí góc (nút A). Hiệu ứng Kondo phân tử mạnh nhất khi $\alpha = -1$, chẳng hạn, khi tạp từ bị tách khỏi các điện tử dẫn ở vị trí góc. Tuy nhiên, do sự phụ thuộc động lượng của quá trình lai hóa tạp từ với các điện tử dẫn tại vị trí trung tâm mỗi cạnh, độ cảm ứng spin của tạp không lên tới giá trị $-1/8$, như trong trường hợp không phụ thuộc vào sự lai hóa động lượng [26]. Ở nhiệt độ đủ thấp, điển hình là $T < \eta$, hệ đi đến khả năng ghép nối mạnh do giá trị hữu hạn của η . Tuy nhiên, như chúng tôi đã đề cập, chế độ này là giả do giá trị hữu hạn của η . Trong giới hạn $\eta \rightarrow 0$, chế độ này sẽ không còn.

5.4. Kết luận

Chúng tôi đã nghiên cứu hiệu ứng Kondo trong mạng tinh thể Lieb khi tạp từ lai hóa với các điện tử dẫn của cả dải năng lượng phẳng và khe mềm. Hiệu ứng Kondo phụ thuộc mạnh mẽ vào mối quan hệ của lai hóa tại vị trí góc và vị trí trung tâm các cạnh xung quanh. Khi sự lai hóa ở vị trí góc mạnh hơn, chỉ có thể tồn tại chế độ mô men từ cục bộ và quỹ đạo tự do. Chế độ Kondo phân tử chỉ xuất hiện khi sự lai hóa tại vị trí trung tâm các cạnh mạnh hơn và không tồn tại dưới nhiệt độ Kondo phân tử. Tình trạng này xảy ra do sự cạnh tranh giữa vùng năng lượng khe mềm và hiệu ứng Kondo phân tử trong mạng tinh thể Lieb.

Tuy vậy, ở đây chúng tôi mới nghiên cứu hiệu ứng tương quan điện tử trong hệ đa thành phần thể hiện qua số nguyên tử không tương đương trong một ô mạng cơ sở khi chỉ có một tạp từ. Do đó, hệ không thể hiện đầy đủ tính nhiều hạt của tạp từ. Để thấy rõ vai trò của tương quan trong hệ đa thành phần, ở phần sau chúng tôi xét hệ có cả một mạng tạp từ.

Phần II. Liên kết Kondo mạnh trong mạng tinh thể Lieb có nhiều tạp tử

5.5. Dẫn nhập vấn đề nghiên cứu

Trong phần này mô hình tạp Anderson tuần hoàn trên mạng tinh thể Lieb được nghiên cứu bằng gần đúng trường trung bình "boson cầm tù" trong giới hạn tương tác mạnh. Cấu trúc điện tử của các điện tử dẫn trên mạng tinh thể Lieb bao gồm cả dải năng lượng phẳng và dải năng lượng khe mềm ở vùng năng lượng thấp. Những đặc điểm này cho phép các điện tử dẫn hình thành cả hiệu ứng Kondo khe mềm và hiệu ứng Kondo phân tử, từ đó dẫn đến cạnh tranh giữa chúng trong mạng tinh thể. Chúng tôi tìm ra khả năng liên kết Kondo mạnh chọn lọc, các tạp tử chọn lọc liên kết tại các vị trí đã chọn với điện tử dẫn trong khi tại các vị trí còn lại, các tạp tử bị tách ra khỏi mạng tinh thể. Khả năng liên kết Kondo chọn lọc xảy ra giữa các chế độ mômen cực bộ toàn phần và chế độ liên kết toàn phần, dẫn đến mạng tinh thể suy biến hiệu dụng. Có nghĩa là một số nút mạng tinh thể tách ra khỏi toàn bộ mạng tinh thể ban đầu. Khác với phần trước, trong phần này chúng tôi không thể sử dụng phương pháp nhóm tái chuẩn hóa tính số cho mạng tạp tử. Do vậy, trong phần này chúng tôi sử dụng gần đúng trường trung bình và để giải quyết hiệu ứng tương quan điện tử mạnh, chúng tôi sử dụng phương pháp boson cầm tù.

5.6. Mô hình Anderson tuần hoàn (PAM) trên mạng tinh thể Lieb và gần đúng trường trung bình "boson cầm tù"

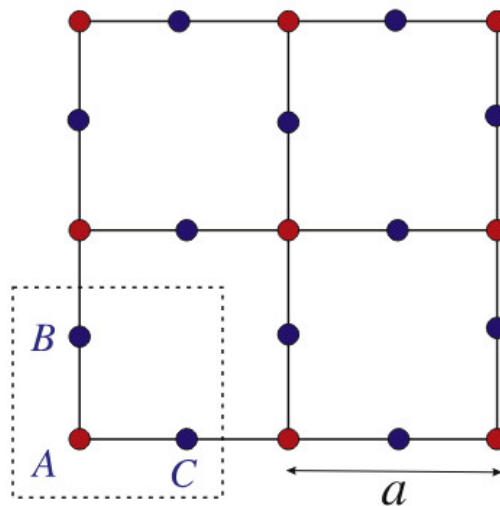
Mô hình Anderson tuần hoàn là mở rộng mô hình Anderson đơn tạp cho trường hợp toàn mạng tinh thể. Mô hình này mô tả mạng tinh thể của các điện tử cực bộ lai hóa với các điện tử dẫn. Mô hình Anderson

tuần hoàn là mô hình thích hợp để nghiên cứu các hợp chất fermion nặng. Hamilton của hệ có dạng

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_i f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + U \sum_i n_{fi\uparrow} n_{fi\downarrow} + \sum_{i\sigma} V_i c_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + H.c., \quad (5.8)$$

trong đó $c_{i\sigma}^\dagger$ ($c_{i\sigma}$) là toán tử sinh (hủy) điện tử dẫn với spin σ tại vị trí mạng tinh thể i , còn t là tham số nhảy nút lân cận gần nhất. $f_{i\sigma}^\dagger$ ($f_{i\sigma}$) là toán tử sinh (hủy) đối với tạp từ có spin σ tại vị trí i . ε_i là mức năng lượng của tạp từ tại vị trí i . U là tương tác Coulomb cục bộ của các điện tử tạp chất. $n_{fi\sigma} = f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma}$ là toán tử số tạp.

Để dễ hiểu, chúng tôi giả sử các tạp từ có độ suy biến spin là $N_f = 2$. V_i là cường độ lai hóa giữa các điện tử dẫn và tạp chất từ tính tại nút i . Trong mô hình liên kết chặt, cấu trúc điện tử của điện tử dẫn phụ thuộc vào cấu trúc mạng tinh thể. Chúng ta coi PAM được xác định trên mạng tinh thể Lieb. Mạng tinh thể Lieb là một mạng tinh thể hình vuông với các nút đơn trung điểm ở các cạnh (xem Hình 5.6). Vì ô cơ sở có 3 nút mạng, cho nên mô hình (5.6) có thể xem như tương đương với mô hình 3 thành phần, mỗi thành phần có bậc tự do spin bằng 2.



Hình 5.6: Cấu trúc mạng tinh thể Lieb

Mạng tinh thể Lieb có tính lưỡng phân, nhưng ô đơn vị chứa ba nút mạng. Hình vuông có ba nút A, B, C có thể xem như các ô đơn vị, như được hiển thị trong Hình 5.6. Chúng tôi lấy tham số mạng tinh thể là $a = 1$. Khi không có tạp từ mô hình liên kết chặt trên mạng tinh thể Lieb có dải năng lượng phẳng tiếp xúc với hai dải tán sắc tuyến tính tại điểm $M = (\pi, \pi)$ trong vùng Brillouin đầu tiên. Có thể thu được Hamilton hiệu dụng năng lượng thấp bằng cách khai triển Hamilton liên kết chặt xung quanh điểm M. Chúng ta thu được

$$H(\delta k) = \begin{pmatrix} 0 & -t\delta k_x & -t\delta k_y \\ -t\delta k_x & 0 & 0 \\ -t\delta k_y & 0 & 0 \end{pmatrix} = -t\delta k \cdot S, \quad (5.9)$$

$$S_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, S_y = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, S_z = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}. \quad (5.10)$$

Trong đó $\delta k = M - k$ và S là ma trận spin-1, theo đại số Lie $[S_\alpha, S_\beta] = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma}S_\gamma$. Biểu thức (5.8) cho thấy động lực học ở năng lượng thấp của mô hình liên kết chặt trên mạng tinh thể Lieb tương đương với mô hình spin-1. Hamilton hiệu dụng có ba giá trị riêng $E_\pm = \pm t|\delta \mathbf{k}|$, $E_0 = 0$, tương ứng với dải phân tán tuyến tính và dải năng lượng phẳng tiếp xúc với chúng tại điểm M. Mạng tinh thể Lieb có thể được thực hiện bằng nhiều cách khác nhau như tải các nguyên tử cực lạnh trong mạng tinh thể quang học, tạo ra một mảng dẫn sóng quang học [78], bằng cách đó ta có thể tạo ra một mạng tinh thể với hố thế là sóng ánh sáng [77,81,82], hoặc hệ các phân tử được giam giữ dưới hố thế do mạng quang học tạo ra [79]. Khi nhúng một tạp từ đơn lẻ vào mạng tinh thể Lieb, bài toán Kondo hoàn toàn phụ thuộc vào mật độ trạng thái cục bộ (LDOS) của các điện tử dẫn được liên kết với tạp chất từ tính [26,75]. LDOS của các điện tử dẫn tại nút B hoặc C thể hiện cả đặc tính dải năng lượng phẳng và dải năng lượng khe mềm [26,72], trong khi tại nút A chỉ có khe mềm [25]. Do đó tại nút B hoặc C, tạp từ tạo thành hiệu ứng Kondo phân tử với một điện tử dẫn duy nhất, trong khi tại nút A thì xảy ra hiệu ứng Kondo khe mềm [25]. Trong trường

hợp mạng tinh thể tạp, khi $V_B = V_C = 0$, các tạp từ chỉ có thể lai hóa với các điện tử dẫn tại các nút A , từ đó có thể dự kiến chỉ xảy ra hiệu ứng Kondo khe mềm. Ngược lại, khi $V_A = 0$, các tạp từ có thể thể hiện hiệu ứng Kondo phân tử mạng tinh thể. Đối với V_A, V_B , và V_C hữu hạn thì sẽ có sự cạnh tranh giữa hiệu ứng Kondo khe mềm với hiệu ứng Kondo phân tử trong mạng tinh thể.

Chúng tôi sử dụng phương pháp "boson cầm tù" để xử lý tương quan điện tử trong PAM [83,84]. Vì sự liên kết Kondo mạnh mẽ có tính phi nhiễu loạn, chúng tôi sẽ tập trung vào vùng tương quan mạnh. Trong khoảng giới hạn $U \rightarrow \infty$, ta có thể sử dụng thay thế $f_{i\sigma} \rightarrow \tilde{f}_{i\sigma} b_i^\dagger$, trong đó $b_i^\dagger$ là một toán tử boson, còn được gọi là "boson cầm tù", đại diện cho trạng thái trống của tạp từ tại vị trí i . $\tilde{f}_{i\sigma}$ là toán tử fermion cho tạp khi độ cư trú đôi của chúng được loại trừ hoàn toàn. Phương pháp "boson cầm tù" mở rộng không gian trạng thái ở các vị trí. Nhằm loại bỏ các trạng thái phi vật lý, với điều kiện ràng buộc

$$b_i^\dagger b_i + \sum_{\sigma} \tilde{f}_{i\sigma}^\dagger \tilde{f}_{i\sigma} = 1, \quad (5.11)$$

được đề ra. Trong phương pháp "boson cầm tù", Hamiltonian trong biểu thức (5.6) trở thành

$$\begin{aligned} H = & -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_i \tilde{f}_{i\sigma}^\dagger \tilde{f}_{i\sigma} \\ & - \sum_i \lambda_i \left(b_i^\dagger b_i + \sum_{\sigma} \tilde{f}_{i\sigma}^\dagger \tilde{f}_{i\sigma} \right) + \sum_{i\sigma} V_i c_{i\sigma}^\dagger \tilde{f}_{i\sigma} b_i^\dagger + H.c. \end{aligned} \quad (5.12)$$

trong đó thừa số Lagrange λ_i được đưa vào để đặt điều kiện ràng buộc trong Phương trình (5.11). Trong phép xấp xỉ trường trung bình b_i trở thành số phức và điều kiện giới hạn được thay bằng kết quả trung bình

$$|\langle b_i \rangle|^2 + \sum_{\sigma} \langle \tilde{f}_{i\sigma}^\dagger \tilde{f}_{i\sigma} \rangle = 1. \quad (5.13)$$

Hamiltonian trong gần đúng trường trung bình trở thành khả tích và có thể giải được. Cực tiểu hóa năng lượng tự do liên quan đến $\langle b_i \rangle$, chúng

ta thu được phương trình sau

$$\lambda_\alpha = \sum_\sigma |V_\alpha|^2 \int d\omega f(\omega) \frac{\rho_\alpha^c(\omega)}{\omega - \varepsilon_\alpha + \lambda_\alpha}, \quad (5.14)$$

trong đó $\alpha = A, B, C$, và $f(\omega) = \frac{1}{\exp(\frac{\omega}{T})+1}$ là hàm phân bố Fermi-Dirac ở nhiệt độ T . $\rho_\alpha^c(\omega)$ là LDOS của các điện tử dẫn điện tại vị trí α . Các phương trình trong gần đúng trường trung bình (5.11)-(5.12) có thể giải số. Khi nghiệm $\langle b_\alpha \rangle \neq 0$ tồn tại, các mô men từ của tạp tại vị trí đó được liên kết chặt với các điện tử dẫn. Đây là trạng thái SC, trong đó các cặp đơn tuyến Kondo giữa các tạp từ và điện tử dẫn được hình thành. Nghiệm $\langle b_\alpha \rangle = 0$ biểu thị trạng thái LM, trong đó các tạp từ ở vị trí đó được tách ra khỏi mạng tinh thể. Tùy thuộc vào các tham số của mô hình, các phương trình trong gần đúng trường trung bình (5.11)-(5.12) có thể có các nghiệm như sau:

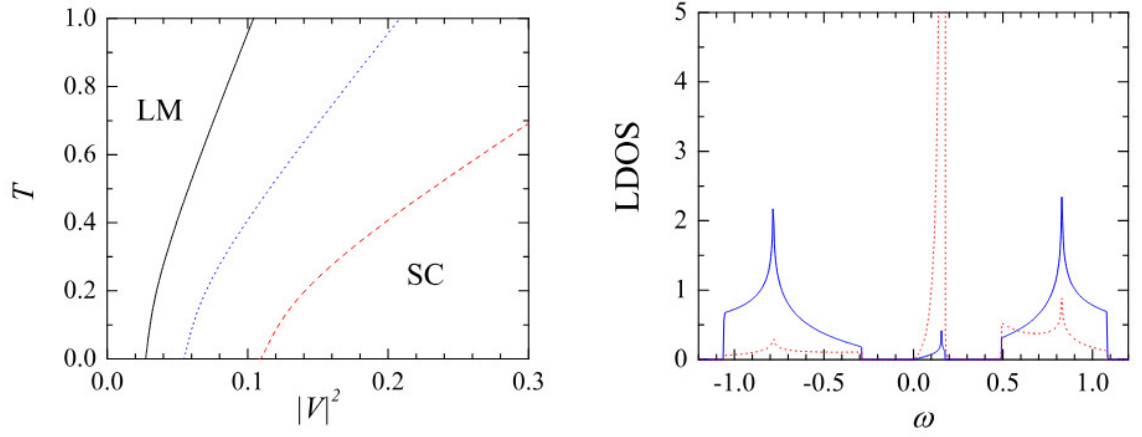
1. $\langle b_A \rangle = \langle b_B \rangle = \langle b_C \rangle = 0$. Tất cả các tạp từ được tách hiệu dụng ra khỏi điện tử dẫn. Đây là trạng thái FLM.
2. $\langle b_\alpha \rangle = \langle b_\beta \rangle = 0$ và $\langle b_\gamma \rangle \neq 0$. Tại các vị trí γ các mômen từ của tạp được liên kết chặt với các điện tử dẫn, trong khi tại các vị trí khác, các mô men ở trạng thái LM. Trạng thái này được gọi là liên kết mạnh chọn lọc γ (γ -SSC). Ở trạng thái này, các vị trí tạp α và β bị loại khỏi mạng tinh thể. Sự suy giảm của mạng tinh thể này hoàn toàn là một hiệu ứng tương quan điện tử. Đối với $\gamma = B$ hay $\gamma = C$ đặc tính của SC là sự hình thành đơn tuyến Kondo phân tử, bởi vì LDOS của các điện tử dẫn tại vị trí B và C có đặc trưng của độ phẳng của dải. Khi $\gamma = A$, SC là loại Kondo khe mềm, vì LDOS của các điện tử dẫn tại các vị trí A cho thấy có khe mềm [25,75].
3. $\langle b_\alpha \rangle = 0$ và $\langle b_\beta \rangle \neq 0, \langle b_\gamma \rangle \neq 0$. Tại các nút α , tạp từ được tách ra khỏi điện tử dẫn, tại các nút còn lại, các tạp từ trong trạng thái SC. Đây được gọi là trạng thái liên kết mạnh chọn lọc $\beta\gamma$ ($\beta\gamma$ -SSC). Trong trạng thái này, các vị trí tạp chất α bị loại khỏi mạng tinh thể.

4. $\langle b_A \rangle \neq 0$, $\langle b_B \rangle \neq 0$, và $\langle b_C \rangle \neq 0$. Tất cả các tạp từ đều ở chế độ SC. Đây là trạng thái FSC. Trạng thái này hình thành cả hiệu ứng Kondo phân tử lẫn khe mềm. Có thể xác định đường tới hạn là ranh giới chuyển pha của trạng thái ngưng tụ boson qua phương trình (5.14) bằng cách lấy giới hạn $\langle b_\alpha \rangle \rightarrow 0$. Trong giới hạn này, tạp từ bị tách khỏi các điện tử dẫn và $\langle \tilde{f}_{\alpha\sigma}^\dagger \tilde{f}_{\alpha\sigma} \rangle = f(\varepsilon_\alpha - \lambda_\alpha)$. Từ đây chúng ta có phương trình (5.13) cho nghiệm $\lambda_\alpha = \varepsilon_\alpha$. Kết hợp với phương trình (5.14) chúng ta có

$$\frac{\varepsilon_\alpha}{|V_\alpha|^2} = \sum_\sigma \int d\omega f(\omega) \frac{\rho_{0\alpha}^c(\omega)}{\omega}, \quad (5.15)$$

trong đó $\rho_{0\alpha}^c(\omega)$ là LDOS của các điện tử dẫn trong mạng tinh thể ở nút tạp α bị loại trừ. Phương trình (5.13) xác định đường tới hạn của ngưng tụ boson tại nút α . Ở nhiệt độ 0, $f(\omega)$ triệt tiêu với $\omega > 0$. Do đó, phương trình (5.13) có một nghiệm khi và chỉ khi $\varepsilon_\alpha < 0$. Kết quả này cho thấy hiệu ứng Kondo chỉ xảy ra khi mức năng lượng của các tạp từ thấp hơn mức Fermi của các điện tử dẫn. Khi $\varepsilon_\alpha \geq 0$, ngưng tụ boson không thể xảy ra mà thay vào đó, trật tự từ tính có thể trở nên ổn định [85]. Trong mạng tinh thể Lieb, LDOS ở các nút góc và trung điểm có mức năng lượng khác nhau năng lượng thấp dẫn tới đường tới hạn có các giá trị khác nhau. Nếu mức năng lượng của tạp ε_α và lai hoá V_α không đồng đều, chúng ta sẽ quan sát thấy được các đường tới hạn khác nhau. Những đặc điểm này tạo ra một giản đồ pha rất đa dạng.

Trong tính số, chúng tôi sử dụng nửa độ rộng của vùng chứa điện tử dẫn không tương tác $D = 2\sqrt{2}t = 1$ làm đơn vị năng lượng. Sử dụng phương pháp Powell [86] để tìm nghiệm của phương trình trong gần đúng trường trung bình. Chúng tôi chủ yếu tập trung vào hai trường hợp: (i) Mạng tinh thể suy giảm, trong đó các tạp từ đều đặn bị tách ra khỏi các điện tử dẫn. (ii) Lai hoá đồng đều, trong đó tất cả các tạp từ đều liên kết với các điện tử dẫn như nhau. Tất cả tạp từ có mức năng lượng nằm dưới mức năng lượng Fermi của các điện tử dẫn, tức là $\varepsilon_\alpha < 0$.



Hình 5.7: Mạng tinh thể suy giảm có $V_A \equiv V$ và $V_B = V_C = 0$. Hình bên trái: Giảm đồ pha cho các giá trị khác nhau của ε_A (các đường liền nét, đường chấm và nét đứt lần lượt biểu thị cho $\varepsilon_A = -0.05, -0.1$ và -0.2). Hình bên phải: LDOS của các điện tử dẫn (đường liền nét) và tạp từ (đường chấm) tại nút A trong pha SC cho $V^2 = 0.25$ và $\varepsilon_A = -0.1$ ($T = 0.1$). Tham số mở rộng $\eta = 10^{-4}$.

5.7. Mạng tinh thể suy giảm

Trong mục này, chúng ta xem xét mạng tinh thể suy giảm, hay còn được hiểu là một tập hợp tạp từ đều đặn bị tách ra khỏi các điện tử dẫn. Trạng thái suy giảm đều đặn trong các mạng tinh thể có điện tử tương quan mạnh có thể dẫn nhiều hiện tượng thú vị, ví dụ như hiện tượng sắt từ có thể xảy ra trong mô hình Hubbard trên mạng tinh thể vuông suy giảm 1/4 [87], hoặc trong mô hình Anderson có một nửa số tạp từ đều đặn bị suy giảm [90], tính chất chất lỏng spin xảy ra trong mô hình Hubbard hoặc Heisenberg trên mạng tinh thể vuông suy giảm 1/5 [88,89]. Ở đây, chúng tôi chủ yếu quan tâm đến hai trường hợp suy giảm: (i) $V_A \equiv V \neq 0, V_B = V_C = 0$; (ii) $V_A = 0, V_B = V_C \equiv V \neq 0$. Trong trường hợp đầu tiên, mạng con của các tạp từ tại các nút trung điểm trong toàn bộ mạng tinh thể bị suy giảm. Chỉ ở các nút góc còn lại là có lai hoá giữa các tạp chất từ tính và điện tử dẫn. Mật độ trạng thái cục bộ của điện tử dẫn không tương tác ở các nút góc thể hiện khe năng lượng triệt tiêu $\rho_A^{0c}(\omega) \sim |\omega|$,

tương tự như trong các điện tử Dirac [25]. Trường hợp này là bài toán Kondo khe mềm [25]. Trong Hình 5.7, chúng tôi trình bày các đường tới hạn tách pha SC khỏi pha LM cho các giá trị khác nhau ε_A . Pha SC chỉ tồn tại khi lai hoá $|V_A|$ lớn hơn giá trị tới hạn V_{cr} . Giá trị tới hạn V_{cr} tăng đều với $|\varepsilon_A|$. Trong Hình 5.8 chúng tôi cũng vẽ đồ thị về mật độ trạng thái cục bộ của các điện tử dẫn $\rho_A^c(\omega)$ và tạp từ $\rho_A^f(\omega)$ tại nút A trong trạng thái SC. Do giới hạn $U \rightarrow \infty$ là trường hợp bất đối xứng cực đại, các mật độ trạng thái cục bộ này không tuân theo đối xứng hạt-lỗ trống mà cho thấy một dải lai hóa trong khoảng trống giữa hai vùng phụ của các điện tử dẫn. Sự xuất hiện của vùng lai hoá là do trạng thái ngưng tụ "boson cầm tù". Tính chất năng lượng thấp của mật độ trạng thái cục bộ có thể bắt nguồn từ Hamilton hiệu dụng năng lượng thấp. Mở rộng trường trung bình Hamiltonian xung quanh điểm M, chúng ta thu được Hamilton hiệu dụng năng lượng thấp

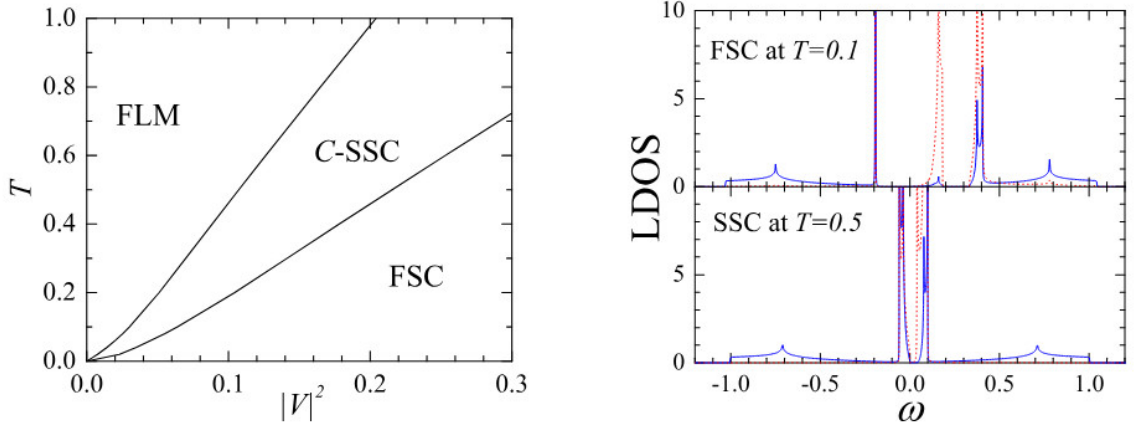
$$H(\delta k) = \begin{pmatrix} 0 & -t\delta k_x & -t\delta k_y & V_A \langle b_A \rangle^* \\ -t\delta k_x & 0 & 0 & 0 \\ -t\delta k_y & 0 & 0 & 0 \\ V_A^* \langle b_A \rangle & 0 & 0 & \varepsilon_A - \lambda_A \end{pmatrix},$$

trong đó $\delta k = M - k$. Ở năng lượng thấp $0 < \omega/D \ll 1$, chúng ta có

$$\rho_A^c(\omega) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\delta k} \text{Im}[\omega - H(\delta k) + i\eta]_{11}^{-1} \sim \omega,$$

$$\rho_A^f(\omega) = -\frac{1}{\pi} \sum_{\delta k} \text{Im}[\omega - H(\delta k) + i\eta]_{44}^{-1} \sim \omega.$$

Tham số mở rộng $\eta = 10^{-4}$, trong đó $\eta = 0^+$ là đại lượng nhỏ mở rộng cho hàm Green. Tính chất năng lượng thấp này của LDOS là đặc điểm của bài toán Kondo khe mềm trong pha SC không đối xứng. Trong trường hợp suy giảm thứ hai, $V_A = 0$ và $V_B = V_C \equiv V \neq 0$, mạng con chứa tạp từ ở các nút góc bị suy giảm. LDOS của các điện tử dẫn tại các nút trung điểm có khe mềm và dải năng lượng phẳng. Trường hợp này đặt ra bài toán Kondo phân tử [4,26]. Hình 5.8 thể hiện giản đồ pha. Khi $\varepsilon_B \neq \varepsilon_C$ thì xuất hiện ba pha khác nhau. Không giống các trường hợp suy giảm



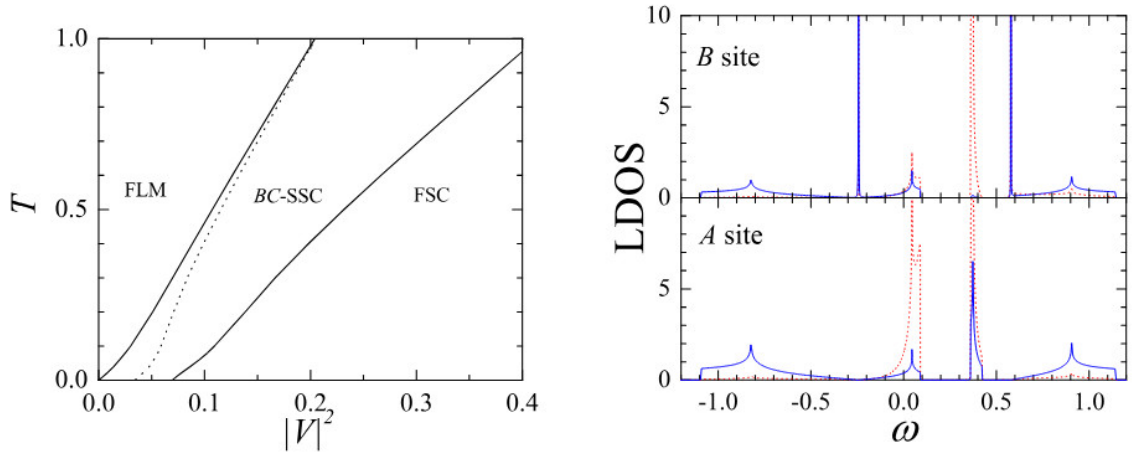
Hình 5.8: Mạng tinh thể suy giảm với $V_A = 0$ và $V_B = V_C \equiv V$. Hình bên trái: Giảm đồ pha cho $\varepsilon_B = -0.2, \varepsilon_C = -0.1$. Hình bên phải: LDOS của các điện tử dẫn (đường liền nét) và của tạp chất từ tính (đường chấm) ở nút C trong pha FSC và các pha SSC cho $V^2 = 0.15, \varepsilon_B = -0.2, \varepsilon_C = -0.1$.

trước, điểm tới hạn và pha SC không tồn tại với tất cả trường hợp lai hoá khác không V . Pha FSC, trong đó $\langle b_B \rangle \neq 0, \langle b_C \rangle \neq 0$, xảy ra ở vùng nhiệt độ thấp trong khi pha FLM có $\langle b_B \rangle = \langle b_C \rangle = 0$ ở vùng nhiệt độ cao. Giữa pha FSC và FLM là pha SSC, tại đây tạp từ và điện tử dẫn chỉ liên kết mạnh ở một trong hai nút B hoặc C, đồng thời tất cả các nút tạp từ khác dễ bị loại bỏ khỏi mạng tinh thể. Sự suy giảm này là hiệu ứng tương quan mạnh do trạng thái ngưng tụ chọn lọc nút của các boson cầm tù, xuất phát từ trạng thái bất đối xứng giữa các nút B và C. Khi $\langle b_B \rangle = \langle b_C \rangle = 0$ thì SSC biến mất. Trong trường hợp nút B và C tương đương nhau thì không thể phá vỡ trạng thái đối xứng của chúng. Trong Hình 5.8, chúng tôi cũng vẽ đồ thị mật độ trạng thái cục bộ trong pha FSC và SSC. Trong pha FSC, dải lai hóa khe mềm vẫn tồn tại gần mức Fermi trong khe giữa hai dải phụ của các điện tử dẫn, tương tự như trong trường hợp suy giảm trước đó. Ngoài vùng lai hóa khe mềm, hai dải phụ hẹp xuất hiện ở rìa độ rộng của các vùng phụ chứa điện tử dẫn. Đây chính là các dải lai hoá giữa dải phẳng của điện tử dẫn và tạp từ. Có thể thấy, sự xuất hiện của các dải lai hoá dải phẳng là hệ quả của hiệu ứng Kondo phân tử với tạp từ trong dải năng lượng phẳng [26].

Tuy nhiên, trái với trường hợp một tạp mà tại đó điện tử dẫn khe mềm không thể hình thành cặp đơn tuyến Kondo [26], điện tử dẫn khe mềm tại các nút B và C vẫn hình thành dải lai hóa với các tạp từ. Trong pha SSC mà tại đó chỉ xuất hiện trạng thái ngưng tụ boson tại nút B hoặc C, dải lai hoá khe mềm suy giảm trong khi hai dải lai hóa dải phẳng vẫn duy trì. Các đặc điểm này của mật độ trạng thái cục bộ phân biệt SSC với pha FSC.

5.8. Lai hoá đồng đều

Trong phần này, chúng tôi xét đến trường hợp $V_A = V_B = V_C \equiv V$, tức là trạng thái lai hóa giống nhau ở tất cả nút trong mạng tinh thể. Tuy nhiên, các tạp từ vẫn bất đối xứng khi thay đổi ε_α . Sự bất đối xứng của tạp giữa nút B và C hình thành hai đường tới hạn khác nhau. Các đường này kết hợp cùng đường tới hạn của trạng thái ngưng tụ boson tại các nút A có thể tạo thành giản đồ pha đa dạng.



Hình 5.9: Lai hoá đồng đều $V_A = V_B = V_C = V$. Hình bên trái: Giản đồ pha cho $\varepsilon_A = -0.2, \varepsilon_B = \varepsilon_C = -0.1$ (đường liền nét). Đường chấm là ranh giới pha giữa FSC và BC-SSC khi $\varepsilon_A = \varepsilon_B = \varepsilon_C = -0.1$. Hình bên phải: LDOS của điện tử dẫn (đường liền nét) và của tạp từ (đường chấm) tại các nút A và B trong pha FSC cho $V^2 = 0.25$, $\varepsilon_A = -0.2, \varepsilon_B = \varepsilon_C = -0.1 (T = 0.1)$. Thông số mở rộng $\eta = 10^{-4}$.

5.8.1. Trường hợp $|\varepsilon_A| \geq |\varepsilon_B| = |\varepsilon_C|$

Trong trường hợp này, tất cả các nút ở trung điểm đều tương đương nhau. Có thể lập giản đồ pha từ các đường tới hạn tính theo phương trình (7). Đường tới hạn phân tách không gian pha (V, T) thành ba vùng như trong Hình 5.9. Ở mức nhiệt độ thấp và lai hoá mạnh, $\langle b_B \rangle = \langle b_C \rangle \neq 0$ và $\langle b_A \rangle \neq 0$. Từ đây sinh ra pha FSC. Ở mức nhiệt độ cao và khả năng lai hoá yếu, $\langle b_A \rangle = \langle b_B \rangle = \langle b_C \rangle = 0$. Đây là pha FLM.

Trong vùng trung gian, $\langle b_B \rangle = \langle b_C \rangle \neq 0$ và $\langle b_A \rangle = 0$. Đây là pha BC-SSC. Tương đương với FSC của mạng tinh thể suy giảm có $V_A = 0$. Tuy nhiên, sự suy giảm tập từ tại các nút A là một hiệu ứng tương quan điện tử, không xuất hiện hiệu ứng Kondo khe mềm tại các nút A. Sự suy giảm này vẫn xảy ra khi $\varepsilon_A = \varepsilon_B = \varepsilon_C$, tức là dù tất cả các thông số tập từ đồng nhất. SC Kondo chọn lọc này tại các nút B và C là do điểm kỳ dị dải phẳng của LDOS tại các nút B và C. BC-SSC luôn tồn tại ở trạng thái lai hoá yếu không phụ thuộc vào các thông số của tập từ. Trên thực tế, hiệu ứng Kondo phân tử chiếm ưu thế trong pha BC-SSC. Đối với $\varepsilon_A = \varepsilon_B = \varepsilon_C$, hai ranh giới pha mà ở đó phân tách pha BC-SSC khỏi pha FSC và FLM tiệm cận nhau ở nhiệt độ cao như thể hiện trong Hình 5.9. Trong Hình 5.9 chúng tôi cũng vẽ đồ thị LDOS của các điện tử dẫn và các tập từ tại các nút A và B trong pha FSC. Pha BC-SSC tương đương với pha FSC trong mạng tinh thể suy giảm nút A đã được thảo luận trong mục 5.7. Trong pha FSC, LDOS tại các nút A và B cho thấy nhiều đặc điểm khác nhau. Tại các nút A, LDOS cho thấy hai dải lai hoá khe mềm, tại đây các dải nằm trong khe năng lượng giữa hai dải dẫn. Sự xuất hiện của hai dải trên là do trạng thái ngưng tụ boson tại các nút A. Do hiệu ứng Kondo tại nút A thuộc loại khe mềm nên LDOS tại nút A không hình thành dải lai hoá giữa dải phẳng và tập.

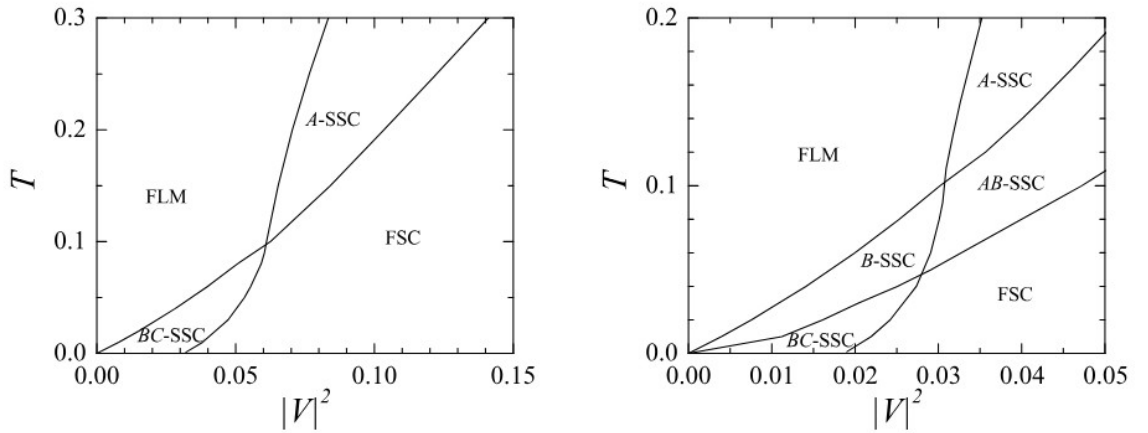
Ngược lại, tại các nút B hoặc C, hai dải lai hoá cũng hình thành tại rìa khe năng lượng do sự ngưng tụ boson tại các nút B và C. Các dải lai hóa này có đặc điểm giống với các dải lai hóa vùng phẳng hình thành trong mạng tinh thể suy giảm nút A. Đây là đặc tính điển hình của LDOS trong

pha FSC.

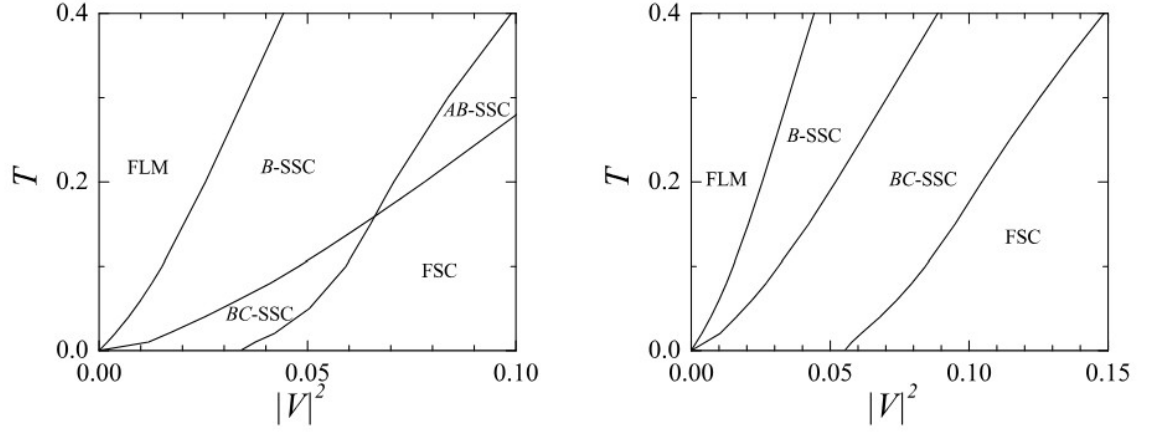
5.8.2. Trường hợp $|\varepsilon_A| < |\varepsilon_B| = |\varepsilon_C|$

Tương tự như phần trước, trong trường hợp này, mức năng lượng của tạp tại các nút B và C tương đương nhau nhưng nằm ở mức thấp hơn các tạp tại nút A. Hình bên trái Hình 5.10 thể hiện giản đồ pha. Ngoài pha BC-SSC như mục trước, pha A-SSC xuất hiện ở vùng nhiệt độ cao và lai hóa mạnh. Pha A-SSC này tương đương với một trong các mạng tinh thể cho thấy mức độ suy giảm tạp từ tại các nút B và C, do $\langle b_B \rangle = \langle b_C \rangle = 0$. Pha BC-SSC chỉ có khả năng tồn tại trong nhiệt độ thấp và lai hóa yếu. Giản đồ pha cũng cho thấy điểm tới hạn điểm bốn khi ở có sự xuất hiện của các pha FSC, FLM, BC-SSC và A-SSC.

Tuy nhiên, khi $\varepsilon_A = \varepsilon_B = \varepsilon_C$ thì sẽ không còn điểm đặc trưng này. Trường hợp này (mục 5.8.2) không được liên kết đoạn nhiệt với trường hợp trước đó (mục 5.8.1).



Hình 5.10: Giản đồ pha cho lai hóa đồng đều $V_A = V_B = V_C = V$. Hình bên trái: trường hợp $\varepsilon_A = -0.1, \varepsilon_B = \varepsilon_C = -0.2$. Hình bên phải: trường hợp $\varepsilon_A = -0.05, \varepsilon_B = -0.1, \varepsilon_C = -0.15$.



Hình 5.11: Giản đồ pha cho lai hóa đồng đều $V_A = V_B = V_C = V$. Hình bên trái: trường hợp $\varepsilon_A = -0.1, \varepsilon_B = -0.05, \varepsilon_C = -0.15$. Hình bên phải: trường hợp $\varepsilon_A = -0.15, \varepsilon_B = -0.05, \varepsilon_C = -0.1$.

5.8.3. Trường hợp $|\varepsilon_A| < |\varepsilon_B| < |\varepsilon_C|$

Trường hợp này cũng tương đương với trường hợp $|\varepsilon_A| < |\varepsilon_C| < |\varepsilon_B|$. Giản đồ pha được biểu thị đa dạng trong hình bên phải Hình 5.10. Ngoài các pha FSC và FLM còn có cả pha SSC hai nút và nút đơn. Có hai điểm tới hạn điểm bốn. Không giống với các trường hợp trước (mục 5.8.1-5.8.2), pha BC-SSC không có sự đối xứng $\langle b_B \rangle \neq \langle b_C \rangle$ do $\varepsilon_B \neq \varepsilon_C$. Pha A-SSC tương đương với pha trong mạng tinh thể với các tạp nút B và C suy giảm, trong khi pha B-SSC phá vỡ sự đối xứng giữa các nút B và C. Đối với pha B-SSC, sự ngưng tụ boson tại các nút B chọn lọc do $|\varepsilon_B| < |\varepsilon_C|$. Ngược lại, với trường hợp $|\varepsilon_C| < |\varepsilon_B|$, đã có chọn lọc thay thế cho sự ngưng tụ boson tại các nút C. Điều này cũng xảy ra đối với pha AB-SSC. Tuy nhiên, khi $\varepsilon_B = \varepsilon_C$, thì sẽ không còn sự đối xứng giữa B và AB-SSC.

5.8.4. Trường hợp $|\varepsilon_B| < |\varepsilon_A| < |\varepsilon_C|$

Trường hợp này cũng tương đương với trường hợp $|\varepsilon_B| < |\varepsilon_A| < |\varepsilon_C|$. Hình bên trái Hình 5.11 thể hiện giản đồ pha. Có một điểm tới hạn điểm bốn. Tương tự như trường hợp trước (mục 5.8.3), do $|\varepsilon_B| \neq |\varepsilon_C|$, nên các pha B hoặc AB-SSC không đối xứng. Khi $|\varepsilon_B| < |\varepsilon_A| < |\varepsilon_C|$, khả năng

ngưng tụ boson tại nút B thuận lợi hơn tại nút A và C. Do vậy, Kondo SC tại nút B luôn được ưu tiên ngoại trừ trong chế độ FLM. Với trường hợp trước đó thì không có đặc điểm này, trong đó $|\varepsilon_A| < |\varepsilon_B|$ và có sự thay thế pha A-SSC. Trường hợp $|\varepsilon_C| < |\varepsilon_A| < |\varepsilon_B|$ thì sẽ có Kondo SC chọn lọc tại nút C.

5.8.5. Trường hợp $|\varepsilon_B| < |\varepsilon_C| \leq |\varepsilon_A|$

Trường hợp này cũng tương đương với trường hợp $|\varepsilon_C| < |\varepsilon_B| \leq |\varepsilon_A|$. Hình bên phải Hình 5.11 thể hiện giản đồ pha. Không giống với các trường hợp trước đó, trường hợp này không có điểm tới hạn điểm bốn. Do $|\varepsilon_B|$ và $|\varepsilon_C|$ là nhỏ nhất trong số mức năng lượng của tạp, nên sẽ ưu tiên Kondo SC chọn lọc tại các nút B hoặc C hơn, ngoại trừ pha FLM. Trong Hình 5.11, pha B-SSC tồn tại ở nhiệt độ cao và lai hóa yếu, được chọn lọc do $|\varepsilon_B| < |\varepsilon_C|$. Có một điểm tới hạn phân tách pha BC-SSC và FSC.

5.9. Kết luận

Mô hình Anderson tuần hoàn trong mạng tinh thể Lieb thể hiện đa dạng các giản đồ pha. Tùy thuộc vào thông số của tạp từ, sẽ dẫn đến các pha SSC khác nhau. Tuy nhiên, ở nhiệt độ thấp chỉ tồn tại các pha BC-SSC và FSC mà không phụ thuộc vào các thông số của tạp. Có một điểm tới hạn phân tách pha BC-SSC và FSC. Qua ranh giới pha, các tạp từ tại nút A được thay đổi từ chế độ LM sang chế độ SC, trong khi các tạp chất tại nút B và C luôn liên kết mạnh với các điện tử dẫn. Chế độ Kondo SC chọn lọc này tại các nút B và C cho thấy sự chi phối của hiệu ứng Kondo dải năng lượng phẳng ở nhiệt độ thấp. Thực tế cho thấy, đối với một tạp đơn, các dải năng lượng phẳng hoặc dải hẹp sẽ ngăn cản các điện tử tán sắc khác tham gia vào sự hình thành cặp đơn tuyến Kondo, kết quả là chỉ xảy ra hiệu ứng Kondo phân tử [26]. Chỉ khi lai hóa đủ mạnh, tất cả các tạp từ mới có thể liên kết mạnh với các điện tử dẫn. Kondo SC chọn lọc tương tự như chất lỏng Fermi được phân số hóa [90,91]. Có thể thấy, mức năng lượng của các tạp từ cũng đóng một vai trò quan trọng

trong SSC. Các tạp từ sở hữu mức năng lượng sâu hơn (nghĩa là giá trị tuyệt đối của mức năng lượng lớn hơn) nên sẽ ít được ưu tiên chọn lọc cho chế độ Kondo SC. Đặc biệt, các tạp từ với mức năng lượng sâu nhất suy giảm [92] khỏi mạng tinh thể ngoại trừ pha FSC ở quá trình lai hóa mạnh mẽ diễn ra. Với mức năng lượng sâu hơn, các tạp từ khó có thể kết hợp với điện tử dẫn, chúng gần mức năng lượng Fermi hơn để tạo thành cặp đơn Kondo.

Tuy nhiên, trong SSC, độ phẳng của dải năng lượng đóng vai trò chủ đạo. Do ở mức nhiệt độ thấp, Kondo SC được chọn lọc tại các vị trí mạng tinh thể đó, tại đây, LDOS mang đặc điểm dải năng lượng phẳng và không bị ảnh hưởng bởi mức năng lượng của tạp từ. Tuy vậy, trong chương này chúng tôi mới chỉ nghiên cứu hiệu ứng liên kết Kondo mạnh, chọn lọc trong hệ đa thành phần thông qua số nút mạng không tương đương trong một ô cơ sở trong gần đúng trường trung bình. Mặc dù hiệu ứng tương quan điện tử đã được tính đến thông qua phương pháp boson cầm tù, gần đúng trường trung bình tĩnh có thể còn có những hạn chế nhất định, chẳng hạn như tương quan điện tử cục bộ không được xét đến một cách đầy đủ.

Do vậy, vẫn cần thiết nghiên cứu vấn đề đề cập trong chương này ở ngoài phạm vi gần đúng trường trung bình. Chúng tôi để lại vấn đề này cho nghiên cứu tiếp theo trong tương lai.

KẾT LUẬN VÀ KIẾN NGHỊ

1. Mạng quang học là một cấu trúc ánh sáng được sử dụng để giữ và điều khiển các nguyên tử trung hòa đã được làm lạnh trước tiên trong một bẫy quang tử và sau đó sử dụng các kỹ thuật laser khác tiếp tục làm lạnh xuống nhiệt độ cực thấp khoảng μK hay thấp hơn để tạo ra cấu trúc tuần hoàn giống như mạng tinh thể [15]
2. Trên cơ sở mạng quang học chúng tôi xét bài toán tương quan đa thành phần như thành phần Spin, quỹ đạo, mô men góc toàn phần... (gọi chung là bậc tự do). Chúng tôi tìm thấy sự phân tách pha gần với điểm chuyển pha kim loại-điện môi từ phía chất điện môi. Chúng tôi cũng đã xây dựng giản đồ pha ở các mật độ số hạt khác nhau. Tuy nhiên, trong luận án này vẫn hạn chế chỉ xem xét các pha thuần nhất. Ở nhiệt độ thấp, ta có thể kỳ vọng sự ổn định của các trạng thái sóng mật độ điện tích. Các vấn đề này dành cho các nghiên cứu sau.
3. Cụ thể trong luận án chúng tôi đã nghiên cứu chuyển pha kim loại-điện môi trong mô hình Falicov-Kimball ba thành phần bằng cách sử dụng lý thuyết trường trung bình động với phương pháp chéo hóa chính xác, chúng tôi đã tìm ra các điều kiện về mật độ số hạt mà tại đó pha kim loại-điện môi có thể xảy ra. Đặc biệt, chuyển pha kim loại-điện môi có thể xảy ra ở mật độ số hạt toàn phần $1 \leq n \leq 2$. Khi mật độ số hạt toàn phần $1 < n < 2$, chuyển pha kim loại-điện môi có chọn lọc loại hạt và nó chỉ có thể xảy ra khi mật độ số hạt linh động bằng $1/2$ ($n_{c\sigma} = 1/2$). Ở mật độ số hạt một phần ba hoặc hai phần ba, chuyển pha kim loại-điện môi chỉ có thể xảy ra khi các tương tác Coulomb đủ mạnh. Chuyển pha kim loại-điện môi này xảy ra với cả hạt nhẹ và hạt nặng. Chúng tôi cũng quan sát chuyển pha kim loại-điện môi nghịch đảo, tức là, sự chuyển pha từ điện môi sang kim loại khi tương tác Coulomb tăng lên. Chuyển pha kim loại-điện môi nghịch đảo chỉ có thể xảy ra đối với các tương tác đủ mạnh giữa

các hạt nhẹ và hạt nặng, và điều kiện mật độ số hạt $n_c + n_f = 1$. Chúng tôi cũng đã nghiên cứu chi tiết các tính chất MIT ở mật độ số hạt một nửa và một phần ba. Tại mật độ số hạt một nửa chúng tôi quan sát thấy hiệu ứng lặp lại của pha điện môi, có nghĩa là khi tương tác Coulomb tăng lên, hệ trước tiên vẫn ở pha điện môi, sau đó trở thành kim loại, và cuối cùng, quay trở lại pha điện môi. MIT trước có tính liên tục, còn MIT thứ hai không liên tục. Như trong mô hình Hubbard một dải năng lượng, chúng tôi cũng quan sát thấy một vùng hữu hạn tại MIT thứ hai, nơi cả hai pha kim loại và pha điện môi cùng tồn tại. Tuy nhiên, trái ngược với mô hình Hubbard một dải năng lượng, MIT xảy ra cùng với sự tách Kondo không đối xứng trong phổ của các hạt nhẹ. Ở mật độ số hạt một phần ba, MIT chỉ có thể xảy ra đối với các tương tác Coulomb đủ mạnh. Chúng tôi tìm thấy sự phân tách pha gần với điểm chuyển pha MIT từ phía chất điện môi. Chúng tôi cũng đã xây dựng giản đồ pha ở các mật độ số hạt $1/2$ và $1/3$. Tuy nhiên, trong luận án này vẫn hạn chế chỉ xem xét các pha thuần nhất. Ở nhiệt độ thấp, ta có thể kỳ vọng sự ổn định của các trạng thái sóng mật độ điện tích hoặc spin. Các pha này dành cho các nghiên cứu sau này.

4. Chúng tôi đã nghiên cứu chi tiết hơn về MIT tạo ra bởi sự mất cân bằng khối lượng trong mô hình Hubbard ba thành phần. Với DMFT và phương pháp chéo hoá chính xác, chúng tôi đã phát hiện MIT tạo ra bởi sự mất cân bằng khối lượng ở tổng số hạt thông ước, giống như trong mô hình Hubbard ba thành phần cân bằng [19]. MIT được tạo ra hoàn toàn bởi sự mất cân bằng khối lượng. Sự mất cân bằng khối lượng dương chỉ có thể chuyển hỗn hợp từ pha điện môi sang pha kim loại, trong khi sự mất cân bằng âm làm hỗn hợp chuyển từ pha kim loại sang pha điện môi. Nghiên cứu MIT trong mô hình Hubbard ba thành phần khi có sự mất cân bằng khối lượng, chúng tôi cũng đã tính toán số cư trú đôi của cả hạt hai thành phần cùng loại và khác loại dưới dạng hàm Δt và tương tác cục bộ U . Tại giá trị U tới hạn, số cư trú đôi thể hiện gián đoạn, biểu thị MIT là chuyển pha bậc một.

Sự mất cân bằng khối lượng càng lớn, MIT xảy ra ở giá trị U tối hạn lớn hơn. Giản đồ pha biểu diễn MIT trong mặt phẳng $(\Delta t, U)$ cũng được xây dựng. Giản đồ này cho thấy MIT chỉ xảy ra ở các tương tác cục bộ vừa phải. Đối với các tương tác cục bộ yếu và mạnh, sự mất cân bằng khối lượng không làm hệ thoát khỏi trạng thái ban đầu. Trên thực tế, sự mất cân bằng khối lượng gây ra sự mất cân bằng độ cư trú giữa các loại hạt, và các hạt nhẹ hơn chiếm ưu thế trong MIT. MIT có thể được hiểu là sự chuyển pha có chọn lọc các loại hạt nhẹ. Các đặc điểm này khác với các biểu hiện của hệ cân bằng khối lượng. Chúng tôi dự đoán MIT tạo ra bởi sự mất cân bằng khối lượng trong hỗn hợp fermion-fermion của các nguyên tử cực lạnh, chẳng hạn nạp vào mạng quang học hỗn hợp của nguyên tử ^{40}K và ^6Li . Bằng cách đo tỷ lệ của các vị trí cặp đôi trong mạng tinh thể quang học, MIT có thể được quan sát bằng cách điều chỉnh tỷ lệ mất cân bằng khối lượng

5. Cũng dựa trên mạng quang học, chúng tôi cũng đã nghiên cứu hiệu ứng Kondo trong mạng tinh thể Lieb khi tạp từ lai hóa với các điện tử dẫn của cả dải năng lượng phẳng và khe mềm. Hiệu ứng Kondo phụ thuộc mạnh mẽ vào mối quan hệ của lai hóa tại vị trí góc và vị trí rìa trung tâm các cạnh xung quanh. Khi sự lai hóa ở vị trí góc mạnh hơn, chỉ có thể tồn tại chế độ LM và FO. Chế độ Kondo phân tử chỉ xuất hiện khi sự lai hóa tại vị trí trung tâm các cạnh mạnh hơn và không tồn tại dưới nhiệt độ Kondo phân tử. Tình trạng này xảy ra do sự cạnh tranh giữa vùng năng lượng khe mềm và hiệu ứng Kondo phân tử trong mạng tinh thể Lieb.
6. Đặc biệt với mô hình Anderson tạp chất trong mạng tinh thể Lieb thể hiện đa dạng các giản đồ pha. Tùy thuộc vào thông số của tạp từ, sẽ dẫn đến các pha SSC khác nhau. Tuy nhiên, ở nhiệt độ thấp chỉ tồn tại các pha BC-SSC và FSC mà không phụ thuộc vào các thông số của tạp. Có một điểm tới hạn phân tách pha BC-SSC và FSC. Qua ranh giới pha, các tạp từ tại nút A được thay đổi từ chế độ LM sang

chế độ SC, trong khi các tạp chất tại nút B và C luôn liên kết mạnh với các điện tử dẫn. Chế độ Kondo SC chọn lọc này tại các nút B và C cho thấy sự chi phối của hiệu ứng Kondo dải năng lượng phẳng ở nhiệt độ thấp. Thực tế cho thấy, đối với một tạp đơn, các dải năng lượng phẳng hoặc dải hẹp sẽ ngăn cản các điện tử tán sắc khác tham gia vào sự hình thành cặp đơn tuyến Kondo, kết quả là chỉ xảy ra hiệu ứng Kondo phân tử. Chỉ khi lai hóa đủ mạnh, tất cả các tạp từ mới có thể liên kết mạnh với các điện tử dẫn. Kondo SC chọn lọc tương tự như chất lỏng Fermi được phân số hóa. Có thể thấy, mức năng lượng của các tạp từ cũng đóng một vai trò quan trọng trong SSC. Các tạp từ sở hữu mức năng lượng sâu hơn (nghĩa là giá trị tuyệt đối của mức năng lượng lớn hơn) nên sẽ ít được ưu tiên chọn lọc cho chế độ Kondo SC. Đặc biệt, các tạp từ với mức năng lượng sâu nhất suy giảm khỏi mạng tinh thể ngoại trừ pha FSC ở quá trình lai hóa mạnh mẽ diễn ra. Với mức năng lượng sâu hơn, các tạp từ khó có thể kết hợp với điện tử dẫn, chúng gần mức năng lượng Fermi hơn để tạo thành cặp đơn Kondo. Tuy nhiên, trong SSC, độ phẳng của dải năng lượng đóng vai trò chủ đạo. Do ở mức nhiệt độ thấp, Kondo SC được chọn lọc tại các vị trí mạng tinh thể đó, tại đây, LDOS mang đặc điểm dải năng lượng phẳng và không bị ảnh hưởng bởi mức năng lượng của tạp từ.

Tuy vậy, chúng tôi mới chỉ nghiên cứu hiệu ứng liên kết Kondo mạnh chọn lọc trong hệ đa thành phần thông qua số nút mạng không tương đương trong một ô cơ sở trong gần đúng trường trung bình. Mặc dù hiệu ứng tương quan điện tử đã được tính đến thông qua phương pháp boson cầm tù, gần đúng trường trung bình tĩnh có thể còn có những hạn chế nhất định, chẳng hạn như tương quan điện tử cục bộ không được xét đến một cách đầy đủ. Do vậy, vẫn cần thiết nghiên cứu vấn đề đề cập trong luận án này ở ngoài phạm vi gần đúng trường trung bình. Chẳng hạn trong gần đúng trường trung bình động hay mở rộng của chúng [93]. Gần đây, một nghiên cứu mới về phân loại các pha Mott trong hệ tương quan đa thành phần được đề xuất [94] và khả năng các pha nghiên cứu trong luận án này có thể được nghiên cứu tiếp theo sự phân loại mới. Bên cạnh dải năng

lượng phẳng, các mạng tinh thể frustrated có thể cho những pha kỳ lạ [95-97]. Chúng tôi để lại vấn đề này cho nghiên cứu tiếp theo trong tương lai.

DANH MỤC CÔNG TRÌNH CỦA TÁC GIẢ

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

Tạp chí quốc tế:

1. Duong-Bo Nguyen and Minh-Tien Tran, *Mott transitions in three-component Falicov-Kimball model*, Physical Review B, 2013, 87, 045125.
2. Duong-Bo Nguyen, Duy-Khuong Phung, Van-Nham Phan, and Minh-Tien Tran, *Metal-insulator transition induced by mass imbalance in a three-component Hubbard model*, Physical Review B, 2015, 91, 115140.
3. Duong-Bo Nguyen, Thanh-Mai Thi Tran, Thuy Thi Nguyen, Minh-Tien Tran, *Selective Kondo strong coupling in magnetic impurity flat-band lattices*, Annals of Physics, 2019, 400, 9.

Tạp chí quốc gia

1. Duong-Bo Nguyen, Hong-Son Nguyen and Minh-Tien Tran, *Competition between the soft gap the molecular Kondo singlets in flat-band lattices*, Communications in Physics, 2018, 28, 361.

Các kết quả công bố ở trên cũng được báo cáo tại hội nghị Vật lý lý thuyết toàn quốc

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

1. Minh-Tien Tran, Duong-Bo Nguyen, Hong-Son Nguyen, and Thanh-Mai Thi Tran, *Topological Green function of interacting systems*, Phys-

- ical Review B, 2022, 105, 155112.
2. Thanh-Mai Thi Tran, Duong-Bo Nguyen, Hong-Son Nguyen, Minh-Tien Tran, *Magnetic competition in topological kagome magnets*, Materials Research Express, 2021, 8, 126101.
 3. Nguyen Duong Bo, Nguyen Hong Son, Tran Minh Tien, *Exotic states emerged by spin-orbit coupling, lattice modulation and magnetic field in Lieb nano-ribbons*, Communications in Physics, 2019, 29, 293.
 4. Ta Van Binh, Nguyen Duong Bo, Nguyen Hong Son and Tran Minh Tien, *Interplay between the spin-orbit coupling and lattice modulation on the Lieb lattice*, Journal of Physics: Conference Series, 2019, 1274, 12001.
 5. Thanh-Mai Thi Tran, Duong-Bo Nguyen, Hong-Son Nguyen, Minh-Tien Tran, *Magnetic competition in topological kagome magnets*, Materials Research Express, 2021, 8, 126101.
 6. Minh-Tien Tran, Duong-Bo Nguyen, Hong-Son Nguyen, and Thanh-Mai Thi Tran, *Topological Green function of interacting systems*, Physical Review B, 2022, 105, 155112.

TÀI LIỆU THAM KHẢO

- [1] D. P. Arovas, E. Berg, S. A. Kivelson, S. Raghu. *The Hubbard model*, Annu. Rev. Condens. Matter Phys., 2022, 13, 239.
- [2] S. Paschen, Q. Si. *The many faces (phases) of strong correlations*, Europhys. News, 2021, 52, 30.
- [3] Phan Văn Nhâm, Nguyễn Toàn Thắng. *Vật lý các hệ điện tử tương quan mạnh*, 2020, NXB Giáo dục.
- [4] P. Fulde. *Electron correlations in molecules and solids*, 1995, Springer Series in Solid-State Sciences.
- [5] F. Gebhard. *The Mott metal-insulator transition*, 2010, Springer Tracts in Modern Physics.
- [6] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin. *Solid State Physics*, 1976, Harcourt College Publishers.
- [7] J. Hubbard. *Electron correlations in narrow energy bands*, Proc. R. Soc. Lond. A, 1963, 276, 238-257.
- [8] J. Hubbard. *Electron correlations in narrow energy bands. iii. an improved solution*, Proc. R. Soc. Lond. A, 1964, 281, 401.
- [9] M. C. Gutzwiller. *Effect of correlation on the ferromagnetism of transition metals*, Phys. Rev. Lett., 1963, 10, 159.
- [10] J. Kanamori. *Electron correlation and ferromagnetism of transition metals*, Prog. Theor. Phys., 1963, 30, 275.
- [11] A. V. Rozhov, A. O. Sboychakov, A. L. Rakhmanov, F. Nori. *Electronic properties of graphene-based bilayer systems*, Phys. Rep., 2016, 648, 1.
- [12] Y. D. Liao, X. Y. Xu, Z. Y. Meng, J. Kang. *Correlated insulating phases in the twisted bilayer graphene*, Chin. Phys. B, 2021, 30, 017305.

- [13] P. Fulde, J. Keller, G. Zwicklenagl. *Theory of heavy fermion systems*, J. Phys. C, 1988, 41, 1.
- [14] A. H. Castro Neto, F. Guinea, N. M. R. Peres, K. S. Novoselov, A. K. Geim. *The electronic properties of graphene*, Rev. Mod. Phys., 2009, 81, 109.
- [15] M. Lewenstein, A. Sanpera, V. Ahufinger. *Ultracold atoms in optical lattices: simulating quantum many-body systems*, 2012, Oxford.
- [16] I. Bloch, J. Dalibard, W. Zwerger. *Many-body physics with ultracold gases*, Rev. Mod. Phys., 2008, 80, 885.
- [17] R. Jordens, N. Strohmaier, K. Gunter, H. Moritz, T. Esslinger. *A Mott insulator of fermionic atoms in an optical lattice*, Nature, 2008, 455, 204.
- [18] U. Schneider, L. Hackermuller, S. Will, Th. Best, I. Bloch, T. A. Costi, R. W. Helmes, D. Rasch, A. Rosch. *Metallic and insulating phases of repulsively interacting fermions in a 3D optical lattice*, Science, 2008, 322, 1520.
- [19] E. V. Gorelik, N. Blumer. *Mott transitions in ternary flavor mixtures of ultracold fermions on optical lattices*, Phys. Rev. A, 2009, 80, 051602(R).
- [20] K. Inaba, S. Y. Miyatake, S. I. Suga. *Mott transitions of three component fermionic atoms with repulsive interaction in optical lattices*, Phys. Rev. A, 2010, 82, 051602(R).
- [21] A. C. Hewson. *The Kondo problem to heavy fermions*, 1997, Cambridge University Press, Cambridge.
- [22] K. G. Wilson. The renormalization group: *Critical phenomena and the Kondo problem*, Rev. Mod. Phys., 1975, 47, 773.

- [23] H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins, K.G. Wilson. *Renormalization-group approach to the Anderson model of dilute magnetic alloys. I. Static properties for the symmetric case*, Phys. Rev. B, 1980, 21, 1003.
- [24] H. R. Krishna-murthy, J. W. Wilkins, K. G. Wilson. *renormalization-group approach to the erson model of dilute magnetic alloys. II. Static properties for the asymmetric case*, Phys. Rev. B, 1980, 21, 1044.
- [25] L. Fritz, M. Vojta. *The physics of Kondo impurities in graphene*, Rep. Prog. Phys., 2013, 76, 032501.
- [26] Minh Tien Tran, Thuy Thi Nguyen. *Molecular Kondo effect in flat band lattices*, Phys. Rev. B, 2018, 97, 155125.
- [27] Georges, G. Kotliar, W. Krauth, M. J. Rozenberg. *Dynamical mean-field theory of strongly correlated fermion systems the limit of infinite dimensions*, Rev. Mod. Phys., 1996, 68, 13.
- [28] G. Kotliar, S. Y. Savrasov, K. Haule, V. S. Oudovenko, O. Parcollet, C. A. Marianetti. *Electronic structure calculations with dynamical mean-field theory*, Rev. Mod. Phys., 2006, 78, 865.
- [29] K. Held. *Electronic structure calculations using dynamical mean field theory*, Adv. Phys., 2007, 56, 829-926.
- [30] Trần Minh Tiến. *Cơ sở Vật lý của các hệ nhiều hạt*, 2017, Nhà xuất bản Khoa học và Công nghệ.
- [31] Trần Minh Tiến. *Phương pháp hàm Green cho các hệ nhiều hạt*, 2020, Nhà xuất bản Khoa học và Công nghệ.
- [32] J. K. Freericks, V. Zlatic. *Exact dynamical mean-field theory of the Falicov Kimball model*, Rev. Mod. Phys., 2003, 75, 1333.
- [33] M. Caffarel, W. Krauth. *Exact diagonal lization appranh to correlated fermions in infinite dimensions: Mott transition superconductivity*, Phys. Rev. Lett., 1994, 72, 1545.

- [34] N. F. Mott. *Metal insulator transitions*, 1990, Taylor Francis, London.
- [35] F. M. Spiegelhalder, A. Trenkwalder, D. Naik, G. Hendl, F. Schreck, R. Grimm. *Collisional Stability of Immersed in a Strongly Interacting Fermi Gas of* , Phys. Rev. Lett., 2009, 103, 223203.
- [36] S. Taie, Y. Takasu, S. Sugawa, R. Yamazaki, T. Tsujimoto, R. Murakami, Y. Takahashi. *Realization of a $SU(2) \times SU(6)$ System of Fermions in a Cold Atomic Gas*, Phys. Rev. Lett., 2010, 105, 190401.
- [37] T. L. Dao, M. Ferrero, P. S. Cornaglia, M. Capone. *Mott transition of fermionic mixtures with mass imbalance in optical lattices*, Phys. Rev. A, 2012, 85, 013606.
- [38] J. K. Freericks, M. M. Maskara, A. Hu, T. M. Hanna, C. J. Williams, P. S. Julienne, R. Lemanski. *Improving the efficiency of ultracold dipolar molecule formation by first loading onto an optical lattice*, Phys. Rev. A, 2010, 82, 039901.
- [39] C. Ates, K. Ziegler. *Quantum phases in mixtures of Fermionic atoms*, Phys. Rev. A, 2005, 71, 063610.
- [40] L. M. Falicov, J. C. Kimball. *Simple Model for Semiconductor-Metal Transitions: SmB_6 Transition-Metal Oxides*, Phys. Rev. Lett., 1969, 22, 997.
- [41] T. Kennedy. *Some rigorous results on the ground states of The Falicov-Kimball model*, Rev. Math. Phys., 1994, 6, 901.
- [42] T. Portengen, Th. Ostreich, L. J. Sham. *Quantum phases in mixtures theory of electronic ferroelectricity*, Phys. Rev. B, 1996, 54, 17452.
- [43] Tran Minh-Tien. *Charge ordered ferromagnetic phase in manganites*, Phys. Rev. B, 2003, 67, 144404.
- [44] Van-Nham Phan, Minh-Tien Tran. *Doping change and distortion effect on double-exchange ferromagnetism*, Phys. Rev. B, 2005, 72, 214418.

- [45] U. Brandt, A. Fledderjohann. G. Hulsénbeck, *New phases in a spin-1/2 Falicov-Kimball model*, Z. Phys. B, 1990, 81, 409.
- [46] J. Jedrzejewski, V. Derzhko. *Ground-state properties of multicomponent Falicov-Kimball-like models I*, Phys. A, 2003, 317, 227.
- [47] A. Georges, G. Kotliar. *Hubbard model in infinite dimensions*, Phys. Rev. B, 1992, 45, 6479.
- [48] M. J. Rozenberg, G. Kotliar. X. Y. Zhang, *Mott-Hubbard transition in infinite dimensions. II*, Phys. Rev. B, 1994, 49, 10181.
- [49] W. Metzner, D. Vollhardt. *Correlated Lattice Fermions in $d = \infty$ Dimensions*, Phys. Rev. Lett., 1989, 62, 324.
- [50] U. Brandt, C. Mielsch. *Thermodynamics and correlation functions of the Falicov-Kimball model in large dimensions*, Z. Phys. B, 1989, 75, 365.
- [51] Q. Si, G. Kotliar, A. Georges. *Falicov-Kimball model the breaking of Fermi liquid theory in infinite dimensions*, Phys. Rev. B, 1992, 46, 1261(R).
- [52] A. Liebsch, H. Ishida. *Temperature and bath size in exact diagonalization dynamical mean field theory*, J. Phys.: Cond. Matter, 2012, 24, 053201.
- [53] B. Horvatic, D. Sokcevic, V. Zlatic. *Finite-temperature spectral density for the Anderson model*, Phys. Rev. B, 1987, 36, 675.
- [54] M. Dalmonte, K. Dieckmann, T. Roscilde, C. Hartl, A. E. Feiguin, U. Schollwock, F. Heidrich-Meisner. *Dimer, trimer, Fulde-Ferrell-Larkin-Ovchinnikov liquids in mass- and spin-imbalanced trapped binary mixtures in one dimension*, Phys. Rev. A, 2012, 85, 063608.
- [55] M. A. Cazalilla, A. F. Ho, T. Giamarchi. *Two-component Fermi gas on internalstate-dependent optical lattices*, Phys. Rev. Lett., 2005, 95, 226402.

- [56] T. L. Dao, A. Georges, M. Capone. *Competing superfluid density-wave groundstates of fermionic mixtures with mass imbalance in optical lattices*, Phys. Rev. B, 2007, 76, 104517.
- [57] N. Takemori, A. Koga. *Low-temperature properties of the Fermionic mixtures with mass imbalance in optical lattice*, J. Phys. Soc. Jpn., 2012, 81, 063002.
- [58] V. I. Anisimov, I. A. Nekrasov, D. E. Kondakov, T. M. Rice, M. Sigrist. *Orbitalselective Mott-insulator transition in Eur. Phys. J. B*, 2002, 25, 191.
- [59] A. Koga, N. Kawakami, T. M. Rice, M. Sigrist. *Orbital-selective Mott transitions in the degenerate Hubbard model*, Phys. Rev. Lett., 2004, 92, 216402.
- [60] A. Liebsch. *Single Mott transition in the multiorbital Hubbard model*, Phys. Rev. B, 2004, 70, 165103.
- [61] L. de'Medici, A. Georges, S. Biermann. *Orbital-selective Mott transition in multib systems: Slave-spin representation dynamical mean-field theory*, Phys. Rev. B, 2005, 72, 205124.
- [62] W. Zwerger. *Mott-Hubbard transition of cold atoms in optical lattices*, J. Opt. B, 2003, 5, 9.
- [63] W. F. Brinkman T. M. Rice. *Application of Gutzwiller's Variational Method to the Metal-Insulator Transition*, Phys. Rev. B, 1970, 2, 4302.
- [64] X. Y. Zhang, M. J. Rozenberg, G. Kotliar. *Mott transition in the $d = \infty$ Hubbard model at zero temperature*, Phys. Rev. Lett., 1993, 70, 1666.
- [65] A. Georges, W. Krauth. *Physical properties of the half-filled Hubbard model in infinite dimensions*, Phys. Rev. B, 1993, 48, 7167.
- [66] F. Gebhard. *Gutzwiller correlated wave functions in finite dimensions d : A systematic expansion in $1/d$* , Phys. Rev. B, 1990, 41, 9452.

- [67] S. Moukouri, M. Jarrell. *Absence of a Slater Transition in the Two-Dimensional Hubbard Model*, Phys. Rev. Lett., 2001, 87, 167010.
- [68] O. Parcollet, G. Biroli, G. Kotliar. *Cluster dynamical mean field analysis of the Mott transition*, Phys. Rev. Lett., 2004, 92, 226402.
- [69] P. G. J. van Dongen. *Exact mean-field theory of the extended simplified Hubbard model*, Phys. Rev. B, 1992, 45, 2267.
- [70] P. G. J. van Dongen, C. Leinung. *Mott-Hubbard transition in a magnetic field*, Annu. Phys., 1997, 6, 45.
- [71] H. Tasaki. *From Nagaoka's ferromagnetism to flat-band ferromagnetism beyond: An introduction to ferromagnetism in the Hubbard model*, Prog. Theor. Phys., 1998, 99, 489.
- [72] C. S. Neumann & P. Fulde. *Is there a molecular analogue of a Kondo singlet state*, Z. Phys. B, 1989, 74, 277.
- [73] E. Runge and G. Zwicknagl. *Electronic structure calculations and strong correlations: A model study*, Ann. Phys., 1996, 80, 333.
- [74] R. Bulla, T. A. Costi, T. Pruschke. *Numerical renormalization group method for quantum impurity systems*, Rev. Mod. Phys., 2008, 80, 395.
- [75] S. Mukherjee, A. Spracklen, D. Choudhury, N. Goldman, P. Ohberg, E. ersson, and R. R. Thomson. *Observation of a localized flat-band state in a photonic Lieb lattice*, Phys. Rev. Lett., 2015, 114, 245504.
- [76] S. Taie, H. Ozawa, T. Ichinose, T. Nishio, S. Nakajima và Y. Takahashi. *Coherent driving freezing of bosonic matter wave in an optical Lieb lattice*, Sci. Adv., 2015, 1, 1500854.
- [77] M. R. Slot, T. S. Gardenier, P. H. Jacobse, G. C. P. van Miert, S. N. Kempkes, S. J. M. Zevenhuizen, C. M. Smith, D. Vanmaekelbergh, and I. Swart. *Experimental realization characterization of an electronic Lieb lattice*,. Nat, Phys., 2017, 13, 672.

- [78] R. Zitko, Th. Pruschke. *Energy resolution discretization artifacts in the numerical renormalization group*, Phys. Rev. B, 2009, 79, 085106.
- [79] R. Zitko. *Adaptive logarithmic discretization for numerical renormalization group methods*, Comp. Phys. Comm., 2009, 180, 1271.
- [80] P.W. Anderson. *Localized Magnetic States in Metals*, Phys. Rev., 1961, 124, 41.
- [81] D. Guzman-Silva, C. Mejia-Cortes, M. A. Bres, M. C. Rechtsman, S. Weimann, S. Nolte, M. Segev, A. Szameit, R. A. Vicencio. *Experimental observation of bulk edge transport in photonic Lieb lattices*, New J. Phys., 2014, 16, 063061.
- [82] R. A. Vicencio, C. Cantillano, L. Morales-Inostroza, B. Real, C. Mejia-Cortes, S. Weimann, A. Szameit, M.I. Molina. *Observation of Localized States in Lieb Photonic Lattices*, Phys. Rev. Lett., 2015, 114, 245503.
- [83] D. M. Newns, N. Read. *Mean-field theory of intermediate valence/heavy fermion systems*, Adv. Phys., 1987, 36, 799.
- [84] P. Coleman. *1/N expansion for the Kondo lattice*, Phys. Rev. B, 1983, 28, 5255.
- [85] N. Hartman, W. T. Chiu, R.T. Scalettar. *Magnetic correlations in a periodic Anderson model with nonuniform conduction electron coordination*, Phys. Rev. B, 2016, 93, 235143.
- [86] M. J. D. Powell, in: P. Rabinowitz (Ed.) *M. J. D. Powell, in: P. Rabinowitz (Ed.). Numerical Methods for Nonlinear Algebraic Equations*. Gordon and Breach, Newark, NJ, 1970, 87-114.
- [87] E. H. Lieb. *Two theorems on the Hubbard Model*, Phys. Rev. Lett, 1989, 62, 1201.
- [88] E. Khatami, R. R. P. Singh, W.E. Pickett, R.T. Scalettar. *Magnetic Correlations Pairing in the 1/5-Depleted Square Lattice Hubbard Model*, Phys. Rev. Lett., 2014, 113, 106402.

- [89] M. Troyer, H. Kontani, K. Ueda. *Phase Diagram of Depleted Heisenberg Model for*, Phys. Rev. Lett., 1996, 76, 3822.
- [90] T. Senthil, S. Sachdev, M. Vojta. *Fractionalized Fermi Liquids*, Phys. Rev. Lett., 2003, 90, 216403
- [91] T. Senthil, M. Vojta, S. Sachdev. *Weak magnetism non-Fermi liquids near heavy-fermion critical points*, Phys. Rev. B, 2004, 69, 035111.
- [92] N. C. Costa, M.V. Araujo, J.P. Lima, T. Paiva, R.R. dos Santos, R.T. Scalettar. *Compressible ferrimagnetism in the depleted periodic Anderson model*, Phys. Rev. B, 2018, 97, 085123.
- [93] Tran Minh Tien. *Nonlocal dynamical correlations in the Falicov-Kimball model*, Phys. Rev. B, 1998, 58, R15965.
- [94] Duc-Anh Le, Thanh Mai Thi Tran, Minh-Tien Tran. *Swap Mott transition in multicomponent fermion systems*, Phys. Rev. B, 2024, 109, 115105.
- [95] Y. Z. Zhang, Minh-Tien Tran, V. Yushankhai and P. Thalmeier. *Metal-insulator transition in the quarter-filled frustrated checkerboard lattice*, Eur. Phys. J. B, 2005, 44, 265-276.
- [96] Thanh-Mai Thi Tran, Duong-Bo Nguyen, Hong-Son Nguyen, Minh-Tien Tran. *Magnetic competition in topological kagome magnets*, *Materials Research Express*, Materials Research Express, 2021, 8, 126101.
- [97] Tran Thi Thanh Mai, Tran Minh Tien. *Impact of magnetic field on magnetic states in kagome magnets*, *Communications in Physics*, 2022, 32, 29-37.