

# 北京理工大学

## 本科生毕业设计（论文）

### 近藤模型中的自旋表示

Spin Representations for the Kondo Model

学    院：    物理学院

---

专    业：    应用物理学（物理菁英班）

---

学 生 姓 名：    张迎姬

---

学    号：    1120171041

---

指 导 教 师：    陈天

---

校外指导教师：    杨义峰

---

2021年6月8日

## 原创性声明

本人郑重声明：所提交的毕业设计（论文），是本人在指导老师的指导下独立进行研究所取得的成果。除文中已经注明引用的内容外，本文不包含任何其他个人或集体已经发表或撰写过的研究成果。对本文的研究做出重要贡献的个人和集体，均已在文中以明确方式标明。

特此申明。

本人签名： 日期： 年 月 日

## 关于使用授权的声明

本人完全了解北京理工大学有关保管、使用毕业设计（论文）的规定，其中包括：①学校有权保管、并向有关部门送交本毕业设计（论文）的原件与复印件；②学校可以采用影印、缩印或其它复制手段复制并保存本毕业设计（论文）；③学校可允许本毕业设计（论文）被查阅或借阅；④学校可以学术交流为目的，复制赠送和交换本毕业设计（论文）；⑤学校可以公布本毕业设计（论文）的全部或部分内容。

本人签名： 日期： 年 月 日

指导老师签名： 日期： 年 月 日

## 近藤模型中的自旋表示

### 摘 要

重费米子体系是一类重要的强关联电子体系。近藤模型是重费米子体系中最重要理论模型之一，它描述了导带电子与局域磁矩之间的耦合，其中局域磁矩由自旋算符描述。由于自旋算符不满足玻色子或费米子的正则对易关系，基于 Wick 定理的量子多体理论不能直接应用在该模型中。为了处理含有自旋算符的近藤模型，人们提出了自旋算符的许多赝粒子表示方法，这些工作为研究重费米子体系提供了不同的出发点。本文首先介绍了自旋算符的几种常见的赝粒子表示，这些不同的表示适用于不同的物理问题。之后，我们具体讨论了 Schwinger boson 表示方法在单杂质近藤模型中的应用，并利用数值方法计算了系统的热力学量。最后，我们分析了这一模型在低温下展示出的费米液体行为。

**关键词：强关联电子体系；重费米子体系；近藤模型；自旋表示**

## **Spin Representations for the Kondo Model**

### **Abstract**

Heavy fermion systems play an important role in strongly correlated electron systems. The Kondo model is one of the most intensively studied theoretical models of heavy fermion systems, for it can describe the interaction between conducting electrons and local impurities represented by spin operators. Given that the commutation relation between spin operators differs from that between bosonic or fermionic operators, we found that the field-theoretical methods based on the Wick's theorem are not suitable for this model. To solve this problem, people have developed many pseudo-particle representations for spin operators, which serve as different starting points for the studies of heavy fermion systems. In this thesis, we describe some of the commonly used pseudo-particle representations for spin operators, which are applicable to different problems. Then we apply the Schwinger boson representation to the fully-screened single impurity Kondo model, and calculate thermodynamic quantities with numerical methods. We then discuss the Fermi liquid behaviour at low temperatures.

**Key Words: Strongly Correlated Systems; Heavy Fermion Systems; Kondo Model; Spin Representations**

## 目 录

摘 要 .....	I
Abstract .....	II
第 1 章 绪论 .....	1
1.1 重费米子体系 .....	1
1.2 重要模型 .....	2
1.3 研究目的及行文结构 .....	4
第 2 章 常用的自旋表示 .....	5
2.1 费米子表示 .....	6
2.1.1 Pseudo fermion 或 slave boson 表示 .....	6
2.2 玻色子表示 .....	8
2.2.1 Hosten-Primakoff boson 表示 .....	8
2.2.2 Schwinger boson 表示 .....	9
2.3 小结 .....	9
第 3 章 自洽方程推导 .....	11
3.1 单杂质近藤模型的哈密顿量 .....	11
3.2 自洽方程 .....	13
3.3 小结 .....	17
第 4 章 数值计算结果 .....	18
4.1 对格林函数的讨论 .....	18
4.2 熵 .....	19
4.3 磁化率 .....	22
结 论 .....	23
参考文献 .....	24
致 谢 .....	26

## 第 1 章 绪论

### 1.1 重费米子体系

研究材料的微观物理机制与宏观性质间的关系是凝聚态物理中的重要问题之一。对于一般的固体材料而言，当电子间的相互作用较弱时，我们可以用单电子近似的方法来处理相应的物理问题。常规的导体、半导体和绝缘体等材料在这一框架下都得到了很好的描述。然而，一些材料往往含有  $f$  或  $d$  壳层未被填满的原子。在这些材料中，电子间具有很强的相互作用，此时强关联效应带来的影响不能够被忽略。在这一情况下，单电子近似将不再适用<sup>[1,2]</sup>。人们在研究强关联电子体系时发现了许多新奇的物理现象，例如非常规超导、庞磁阻效应、金属-绝缘体转变、自旋-电荷分离以及重费米子行为等等。这些新发现丰富了凝聚态物理学的研究内容，也推动了工业技术的发展。

重费米子体系是一种重要的强关联电子体系。1975 年，K. Andres 等人在低温下测得了  $\text{CeAl}_3$  有很大的线性比热系数，从而在实验上发现了第一个重费米子金属化合物<sup>[3]</sup>。在低温下，重费米子材料的比热系数大约比常规金属高出二到三个数量级。由于电子的比热系数与有效质量成正比，这意味着材料中的准粒子具有非常大的有效质量，因此这一类材料得名重费米子材料。

常见的重费米子化合物是包含稀土元素或铜系元素的金属化合物。在重费米子化合物中，局域在晶格上的  $f$  或  $d$  电子形成局域磁矩，并与导带电子杂化。这类化合物展现出许多不同于一般金属化合物的特殊性质。重费米子材料中纷繁的现象使其成为人们研究强关联体系机制的一个重要方向。1979 年，F. Steglich 等人通过在实验上对比  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  和  $\text{LaCu}_2\text{Si}_2$  的低温性质，发现  $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  表现出非常规超导行为<sup>[4]</sup>。1994 年，H. Löhneysen 等人在实验上发现了重费米子材料中的量子临界及非费米液体特征<sup>[5]</sup>。1998 年，N. Mathur 等人通过实验现象讨论了重费米子超导材料中载流子的配对机制，指出量子临界点附近的磁性涨落会是非常规超导行为出现的原因<sup>[6]</sup>。这些发现扩展了人们研究高温超导及其他材料中出现的非常规行为的思路。

Kondo 模型是研究重费米子问题的出发点。Kondo 问题起源于二十世纪上叶，德国物理学家 Meissner 等人在实验上观察到了金 (Au) 在  $T = 10 \text{ K}$  附近出现的电阻反常极小值现象<sup>[7]</sup>。1964 年，Sarachik 等人在实验上给出明确证据，将电阻极小与金属

中的磁性掺杂联系起来<sup>[8]</sup>。同年，日本物理学家 Kondo 通过分析金属中导带电子和磁性杂质之间的自旋翻转散射机制，解释了金属中的电阻极小值现象<sup>[9]</sup>。因此这一现象被称为 Kondo 效应。后来 Kondo 效应在多体问题中得到推广，成为理解强关联物理的一个重要概念。

在重费米子体系中还存在一种长程自旋相互作用，称为 RKKY 相互作用。1940 年，Frölich 等人讨论了在核自旋与电子云之间出现铁磁相互作用的可能性<sup>[10]</sup>。后来 Ruderman 和 Kittel 利用微扰展开方法计算了核自旋之间的耦合<sup>[11]</sup>，而 Kasuya 和 Yosida 将这一机制推广到局域自旋之间的间接交换相互作用<sup>[12, 13]</sup>，因此这一间接相互作用被称为 Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida 相互作用，简称为 RKKY 相互作用。

各种相互作用间的竞争会导致体系在不同的物理行为之间发生转变。1977 年，Doniach 计算了 Kondo 晶格模型的平均场解，指出屏蔽局域磁矩的 Kondo 效应与引起磁性关联的 RKKY 相互作用的竞争导致了系统的基态性质会随着交换耦合常数  $J$  的改变而变化<sup>[14]</sup>。当  $J$  低于临界值  $J_c$  时，RKKY 相互作用占主导，系统的基态有反铁磁序；在  $J$  增大的过程中，局域磁矩与导带电子之间的关联逐渐增强，Kondo 屏蔽逐渐抑制 RKKY 相互作用；当  $J$  高于临界值时，Kondo 效应占主导，系统展现出费米液体行为。多种相互作用的竞争与相互影响，使得重费米子体系具有丰富的物理行为。

在研究重费米子问题的过程中，人们发展出许多微观模型用以研究不同的问题。下面我们简单介绍几个重要的模型，包括单杂质 Kondo 模型、单杂质 Anderson 模型和 Kondo 晶格模型。

## 1.2 重要模型

Kondo 在解释电阻极小问题时，采用了单杂质 Kondo 模型（Single Impurity Kondo Model, SIKM），其哈密顿量为：

$$H_{\text{SIKM}} = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma} + J_{\text{K}} \mathbf{S} \cdot \mathbf{s}, \quad (1-1)$$

式中第一项为导带电子的总动能，其中  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  是动量为  $\mathbf{k}$  的导带电子的动能， $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  及  $c_{\mathbf{k}\sigma}$  是动量为  $\mathbf{k}$ ，自旋为  $\sigma$  的导带电子的产生、湮灭算符；第二项是局域杂质自旋与导带电子之间的 Kondo 耦合，其中  $J_{\text{K}}$  是 Kondo 耦合系数， $\mathbf{S}$  是杂质电子的自旋算符， $\mathbf{s}$  是

导带电子的自旋密度算符，其形式为：

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2N_s} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\alpha\beta} c_{\mathbf{k}\alpha}^\dagger \boldsymbol{\sigma} c_{\mathbf{k}'\beta}. \quad (1-2)$$

在研究导带电子与局域杂质之间的相互作用时，Anderson 考虑到局域电子间的库仑相互作用对局域磁矩形成的影响，以及  $d$  轨道态  $\phi_L$  和 Bloch 轨道态  $\phi_{\mathbf{k}}$  之间的转移，于 1961 年提出了  $s$ - $d$  混合模型，即单杂质 Anderson 模型（Single Impurity Anderson Model, SIAM)<sup>[15]</sup>。单杂质 Anderson 模型可以写成四项：

$$H_{\text{SIAM}} = \underbrace{\sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}\sigma}}_{H_{0c}} + \underbrace{E \sum_{\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma}}_{H_{0d}} + \underbrace{U n_{d\uparrow} n_{d\downarrow}}_{H_{\text{corr}}} + \underbrace{V \sum_{\mathbf{k}\sigma} (c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \text{h.c.})}_{H_{\text{hyb}}}, \quad (1-3)$$

其中第一项  $H_{0c}$  是自由电子项， $\epsilon_{\mathbf{k}}$  是动量为  $\mathbf{k}$  的自由电子能量， $c_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger$  和  $c_{\mathbf{k}\sigma}$  是动量为  $\mathbf{k}$  自旋为  $\sigma$  的导带电子产生、湮灭算符；第二项刻画了杂质  $d$  电子的能级，其中  $E$  是该能级的能量， $d_{\sigma}^\dagger$  和  $d_{\sigma}$  分别是自旋为  $\sigma$  的  $d$  电子产生、湮灭算符；第三项  $H_{\text{corr}}$  是  $d$  电子的排斥相互作用项， $U$  是库仑排斥势。考虑到  $d$  电子间排斥作用远大于  $s$  电子间和  $s$ - $d$  电子间的排斥作用，在此只保留  $d$  电子间排斥作用；式中第四项  $H_{\text{hyb}}$  是杂化相互作用项，用于描述导带电子和局域  $d$  电子间的耦合。

单杂质 Anderson 模型与 Kondo 模型都能够用于描述导带电子与局域单杂质电子间的相互作用，虽然两者被用于讨论不同的物理情形，但是又存在关联<sup>[16]</sup>。1966 年，Schrieffer 和 Wolff 从单杂质 Anderson 模型出发，利用正则变换导出了 Kondo 模型<sup>[17]</sup>，这一方法在后来就被人们称为 Schrieffer-Wolff 变换。

另外，在 Kondo 问题中，一个重要的参量是体系的特征温度，称为 Kondo 温度  $T_K$ 。通常有  $T_K = D \exp[-1/(2\rho_0 J_K)]$ ，其中  $D$  是导带电子的带宽， $\rho_0$  是费米面处的态密度。在高温下，即温度  $T \gg T_K$  时，杂质自旋与导带电子之间的有效耦合强度很弱。因此，我们可以将  $J_K$  视为小参数进行微扰计算。在此区间的理论计算表明，电阻会出现对温度的对数依赖。正是这一对数依赖与声子的  $T^5$  的贡献一起导致了实验上发现的反常的电阻极小现象。在低温下，即  $T \ll T_K$  时，局域磁矩和导带电子之间的有效耦合将发散，导致微扰理论失效。此时，导带电子将屏蔽局域磁矩，二者形成一个自旋单态，称为近藤单态。在  $T_K$  以下，由于局域磁矩被屏蔽了，电阻率和磁



化率将趋于一个饱和值，这与实验上测得的结果一致。

由于重费米子化合物中包含排成晶格的  $f$  电子或  $d$  电子，我们可以认为这类化合物是在稀磁合金中逐渐增加磁性杂质掺杂浓度得到的。因此，对于这类含有周期性排列的  $f$  或  $d$  电子的体系，人们可以用近藤晶格模型（Kondo Lattice Model, KLM）来描述。近藤晶格模型是单杂质近藤模型的晶格推广，其哈密顿量为<sup>[2]</sup>：

$$H_{\text{KLM}} = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + J_K \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i, \quad (1-4)$$

其中第一项与单杂质 Kondo 模型相同，为导带电子动能项；第二项是第  $i$  个格点上局域自旋  $\mathbf{S}_i$  与导带电子自旋  $\mathbf{s}_i$  之间的 Kondo 耦合作用。

### 1.3 研究目的及行文结构

在单杂质 Kondo 模型和 Kondo 晶格模型中，由于自旋算符不满足玻色（费米）子的对易（反对易）代数关系，我们不能直接对其应用基于 Wick 定理的量子场论方法。为了将量子场论方法应用到以上模型中，就需要将自旋算符用费米子或玻色子算符表示出来。因此，找到描述量子自旋的适当方法，是研究近藤问题和重费米子问题的出发点。

本文第二章将介绍自旋哈密顿量的特点以及几种常用的自旋算符表示方法，包括玻色子表示与费米子表示。第二章还将重点介绍这些表示方法在处理近藤问题时需要考虑的问题，包括对约束条件的处理以及一些近似方法，并介绍自旋表示方法在具体问题中的应用。在第三章，我们将应用 Schwinger boson 表示来处理单杂质近藤模型，并利用基于 Wick 定理的量子场论方法推导自洽方程；第四章将给出自洽方程的数值计算结果，并讨论在 Schwinger boson 表示下，系统在不同温度下展现出的不同物理行为。

## 第 2 章 常用的自旋表示

在凝聚态物理中，对自旋的研究是一项重要的内容。在考虑固体的磁性以及掺杂问题时，电子间的关联常常以自旋相互作用的形式表现出来<sup>[16]</sup>。为此，人们发展出了许多与自旋有关的模型，例如 Heisenberg 模型、 $t$ - $J$  模型，以及上文提到的 Kondo 模型等等，用以讨论不同的物理问题。

对于不包含自旋的系统，如果哈密顿量是玻色子或费米子算符的双线性形式，那么体系可以被严格求解；如果哈密顿量还包含玻色子或费米子算符的高次项，那么可以对相互作用项逐阶展开，然后利用 Wick 定理等多体物理或量子场论方法进行求解。然而，对于包含量子自旋的系统，哈密顿量中的自旋算符并不满足玻色子或费米子之间的正则（反）对易关系，这导致了对系统的求解变得困难。为了更好地理解含有自旋的系统，人们发展出了许多处理自旋算符的方法。本章将主要介绍自旋的玻色子表示与费米子表示及其在 Kondo 模型中的应用。

一般来讲，在利用玻色子或费米子算符来表示自旋时，我们需要考虑两个基本问题。其一是对约束条件的处理，其二是对系统的各种性质给出合适的近似描述。在引入辅助的费米子或玻色子算符时，引入的新算符所张成的 Hilbert 空间通常大于原始自旋算符所在的空间。因此，针对不同的表示方法，我们需要对系统添加相应的约束条件，从而把算符限制在具有物理意义的子空间下，以便描述实际的物理问题。以 SU(2) Heisenberg 模型的 Schwinger boson 表示为例，用  $a$  和  $b$  两个 Schwinger bosons 将自旋的三个分量  $S^z$ ， $S^+$  和  $S^-$  表示出来<sup>[18]</sup>，有：

$$\begin{aligned} S^+ &= S^x + iS^y = a^\dagger b, \\ S^- &= S^x - iS^y = b^\dagger a, \\ S^z &= \frac{1}{2} (a^\dagger a - b^\dagger b). \end{aligned} \tag{2-1}$$

可以证明，这样表示出的自旋算符满足自旋对易关系。如果不对引进的两个玻色子  $a$  和  $b$  的取值加以约束，那么粒子数  $n_a$  和  $n_b$  可以任意取值，产生湮灭算符会处于一个巨大的 Fock 空间中，而自旋算符所描述的 Hilbert 空间只是这个空间的一个子集。如图 2-1 所示，每一个位点表示一个  $n_a$  和  $n_b$  取值的组合，在没有约束限制时，取值可以取遍空间中所有的位点；当添加上约束条件之后，粒子数的取值就被

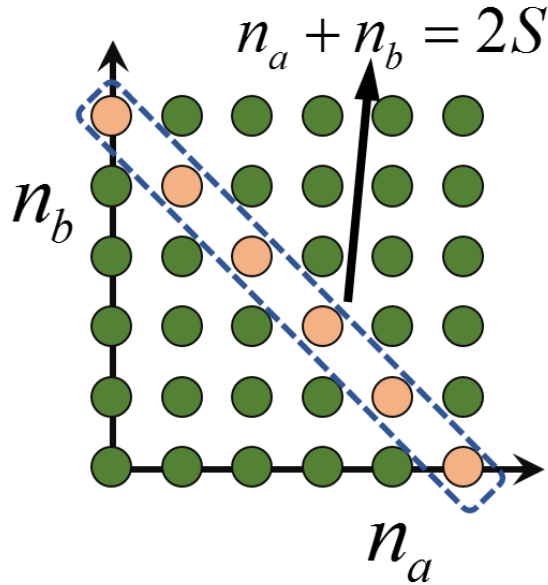


图 2-1 Schwinger boson 表示的约束条件的示意图。

限制在了黄色的位点上。这样处理之后的玻色子算符才具有实际的物理意义。因此，对于各种自旋算符的表示方法，我们都要仔细考虑其相应的约束条件。

但是仅仅给出准确的约束条件，不足以使得一个自旋表示方法成为一套好用的方法。对于难以严格求解的模型，我们还需要从自旋的表示方法出发，给出处理问题的恰当近似。适当的表示方法的恰当近似能够为微扰展开或鞍点展开提供合适的出发点，这为自旋问题的进一步研究提供了新的方法和思路。下面介绍一些常用的自旋表示方法。

## 2.1 费米子表示

### 2.1.1 Pseudo fermion 或 slave boson 表示

自旋算符的一种费米子表示为 pseudo fermion 表示。Pseudo fermion 表示将自旋的分量表示为：

$$S_{\alpha\beta} = f_{\alpha}^{\dagger} f_{\beta} - \frac{n_f}{N} \delta_{\alpha\beta}, \quad (2-2)$$

其中  $\alpha, \beta$  的取值范围为  $1 \sim 2$ 。这些分量与自旋算符的对应关系是：

$$\begin{aligned} S_{12} &= S^+, \\ S_{21} &= S^-, \\ S_{11} &= -S_{22} = S^z. \end{aligned} \tag{2-3}$$

这种 pseudo fermion 表示只能用来描述自旋  $1/2$  的系统，相应的约束条件是  $n_f = \sum_{\alpha} f_{\alpha}^{\dagger} f_{\alpha} = 1$ 。在强关联系统中，对相互作用的强度做微扰展开往往不是一个明智的选择。为了能将微扰论的框架应用于强关联问题中，人们往往需要寻找其他可用于微扰展开的参数，进而发展出不同的方法。大  $N$  展开是其中的一种常用方法，以自旋模型为例，它将自旋的对称性群从  $SU(2)$  扩展为  $SU(N)$ ，然后对  $1/N$  做微扰展开。大  $N$  展开需要将指标  $\alpha, \beta$  的取值范围从  $1 \sim 2$  扩展到  $1 \sim N$ ，约束条件也需要扩展为  $n_f = Q$ ，其中  $q = Q/N$  是有限值。1982 年，Read 等人利用这种表示，用泛函积分方法处理了 Kondo 模型<sup>[19]</sup>。

在处理 Anderson 模型时，一个与 pseudo fermion 表示等价的表示是 slave boson 表示。1975 年，Barnes 引入辅助费米子  $\{f_{\sigma}\}$  和玻色子  $\{e, a\}$  算符，来表示形如式 (1-3) 的 Anderson 模型中的  $d$  电子算符  $d_{\sigma}$ <sup>[20]</sup>，即：

$$d_{\sigma} = e^{\dagger} f_{\sigma} + \sigma f_{-\sigma}^{\dagger} a, \tag{2-4}$$

其中  $e$  对应空占据态， $f_{\sigma}$  对应单占据态， $a$  对应双占据态。可以证明，在引入约束条件

$$e^{\dagger} e + \sum_{\sigma} f_{\sigma}^{\dagger} f_{\sigma} + a^{\dagger} a = 1 \tag{2-5}$$

后，算符  $d_{\sigma}$  将满足标准的费米子反对易关系。在这一表示中，电子的自旋算符的形式与自旋算符的 pseudo fermion 表示中的形式一样，因此可以认为  $f_{\sigma}$  就是 pseudo fermion 表示中出现的赝费米子算符，于是这两种方法之间就有了密切的关联。对于 Anderson 模型， $d$  电子间的库仑相互作用通常很大，因此人们一般取  $U \rightarrow \infty$  极限，取这一极限就相当于将  $a$  算符直接舍弃，只保留  $e$  和  $f$ 。

1983 年，Coleman 在研究大  $U$  极限下的 Anderson 模型时，利用了 slave boson 方法<sup>[21]</sup>。他引入玻色子算符来描述局域电子的空占据态，以及费米子算符来描述单占

据态。这种方法避免了由于哈密顿量中的 Hubbard 算子不满足费米子（玻色子）对易关系从而导致无法应用传统量子场论方法的问题。

1993 年, Cox 等人利用这一表示研究了多通道单杂质 Kondo 模型的性质。他们的出发点是多通道、大  $U$  极限下的单杂质 Anderson 模型, 其哈密顿量为:

$$H_{\text{SIAM}} = \sum_{k\sigma\alpha} \epsilon_k c_{k\sigma\alpha}^\dagger c_{k\sigma\alpha} + \epsilon_f \sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \frac{V}{\sqrt{N_s}} \sum_{k\sigma\alpha} (f_{\sigma}^\dagger b_{\alpha} c_{k\sigma\alpha} + \text{H.c.}), \quad (2-6)$$

其中,  $b_{\alpha}$  表示空占态,  $\alpha$  是通道指标, 它的取值范围是  $1 \sim K$ ; 算符  $f_{\sigma}^\dagger$  表示单占态,  $\sigma$  的取值范围是  $1 \sim N$ ;  $N_s$  是格点数。在取大  $N$  极限的时候, 需要固定  $K/N$  的取值。在这一方法中, 约束条件是:

$$\sum_{\sigma} f_{\sigma}^\dagger f_{\sigma} + \sum_{\alpha} b_{\alpha}^\dagger b_{\alpha} = 1. \quad (2-7)$$

## 2.2 玻色子表示

### 2.2.1 Holstein-Primakoff boson 表示

下面介绍一种自旋的玻色子表示方法。1940 年, Holstein 和 Primakoff 引入一个玻色子算符  $b$  来表示自旋算符的三个分量<sup>[22]</sup>:

$$\begin{aligned} S^+ &= \left( \sqrt{2S - n_b} \right) b, \\ S^- &= b^\dagger \sqrt{2S - n_b}, \\ S^z &= -n_b + S, \end{aligned} \quad (2-8)$$

其中  $n_b = b^\dagger b$ 。利用  $[b, b^\dagger] = 1$  可以看出, 式 (2-8) 中的算符满足自旋算符的对易关系:

$$[S^\alpha, S^\beta] = i\epsilon^{\alpha\beta\gamma} S^\gamma, \quad (2-9)$$

其中拉丁字母上标遍历  $x, y, z$ ;  $\epsilon^{\alpha\beta\gamma}$  是全反对称张量。在描述量子 Heisenberg 模型的磁有序相时, Holstein-Primakoff 表示十分有效<sup>[18]</sup>。

### 2.2.2 Schwinger boson 表示

还有一种自旋的表示方式是 Schwinger boson 表示。人们对海森堡模型的研究表明, Schwinger boson 表示能够对量子磁性问题的描述<sup>[23]</sup>。这一方法用  $N$  个 Schwinger boson  $\{b_\alpha\}$  来写出推广之后的自旋算符, 也就是  $SU(N)$  群的  $(N^2 - 1)$  个生成元  $(S_{\alpha\beta})_{1 \leq \alpha, \beta \leq N}$ , 即:

$$S_{\alpha\beta} = b_\alpha^\dagger b_\beta - \frac{P}{N} \delta_{\alpha\beta}, \quad \sum_{\alpha=1}^N b_\alpha^\dagger b_\alpha = P = 2S, \quad (2-10)$$

后一项是 Schwinger boson 表示的约束, 它将算符的表示限制在具有物理意义的子空间下。在  $N = 2$  时, 这一子空间就是由角动量算符  $S^z$  的本征态  $|S, m\rangle (m = -S, -S + 1, \dots, S)$  张成的子空间。 $P$  取值较小时, 系统具有强烈的量子涨落;  $P$  取值较大时, 系统趋近于半经典极限。

相比于 Hosten-Primakoff 表示, Schwinger boson 表示的自旋算符由于不包含平方根项, 在计算自旋算符的矩阵元时将显得十分有效。1997 年, Parcollet 等人在大  $N$  极限下的多通道 Kondo 模型中引入 Schwinger boson 来表示杂质自旋<sup>[24]</sup>。在这种表示下, 多通道 Kondo 模型写为:

$$H_{\text{MCK}} = \sum_{\mathbf{p}} \sum_{1 \leq \nu \leq K} \sum_{1 \leq \alpha \leq N} \epsilon_{\mathbf{p}} c_{\mathbf{p}\nu\alpha}^\dagger c_{\mathbf{p}\nu\alpha} + J_K \sum_{\mathbf{p}\mathbf{p}'\nu\alpha\beta} S_{\alpha\beta} c_{\mathbf{p}\nu\beta}^\dagger c_{\mathbf{p}'\nu\alpha}. \quad (2-11)$$

其中,  $\mathbf{p}$  是导带电子的动量,  $\nu$  是通道指标,  $\alpha$  是自旋指标。他们计算了居里常数及剩余熵在三个区域下的不同性质, 以及比热和杂质磁化率等低温行为。

上面介绍的两种玻色子表示方法中, Holstein-Primakoff boson 表示将  $S^z$  方向挑选出来, 由此将  $|S, S\rangle$  定义真空态, 而 Schwinger boson 提供了一种自旋空间的对称表示, 所以两种表示分别适用于不同的物理情形, Holstein-Primakoff boson 表示适用于对称破缺相, 而 Schwinger boson 表示适用于对称相<sup>[18]</sup>。

## 2.3 小结

本章我们介绍了几种常见的自旋表示方法, 包括 pseudo fermion (slave boson) 表示、Holstein-Primakoff boson 表示, 以及 Schwinger boson 表示。除此之外, 自旋还有 Majorana fermion 表示、超对称表示等等。

以费米子表示或玻色子表示作为出发点的各种近似方法适用于描述不同的物理情形。在早期的工作中,人们认为自旋的费米子表示更适用于描述 Kondo 模型在低温下的费米液体行为,而玻色子表示更适合描述体系的磁性行为。但是在处理导带电子与局域磁矩之间有杂化的 Kondo 模型时,人们曾经认为玻色子方法并不能很好地描述局域磁矩被完全屏蔽时的费米液体行为。但在 2006 年,Rech 等人发展了 Schwinger boson 方法,成功地用它描述了多通道完全屏蔽的 Kondo 模型中的费米液体行为,并研究了两杂质 Kondo 模型中 Kondo 效应与反铁磁相互作用之间的竞争<sup>[25]</sup>,从而扩展了玻色子表示的应用范围。

下面我们根据 Rech 等人给出的方法,采取 Schwinger boson 表示,利用泛函积分方法推导单杂质 Kondo 模型的自洽方程并做数值计算,讨论自旋的表示方法在具体模型中的应用。

## 第 3 章 自治方程推导

### 3.1 单杂质近藤模型的哈密顿量

下面我们将利用 Schwinger boson 表示推导单杂质 Kondo 模型的自治方程。我们考虑的大  $N$  极限下的多通道单杂质 Kondo 模型的哈密顿量为<sup>[25]</sup>：

$$H_{\text{MCK}} = H_c + H_{\text{int}} - \lambda(n_b - 2S), \quad (3-1)$$

其中第一项  $H_c$  为导带电子动能项：

$$H_c = \sum_{\mathbf{k}\nu\alpha} \epsilon_{\mathbf{k}} c_{\mathbf{k}\nu\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}\nu\alpha}, \quad (3-2)$$

这里的  $\epsilon_{\mathbf{k}}$  是波矢为  $\mathbf{k}$  的导带电子动能； $\nu$  是通道指标， $\alpha$  和  $\beta$  的取值范围是  $1 \sim N$ ； $c_{\mathbf{k}\nu\alpha}^\dagger$  和  $c_{\mathbf{k}\nu\beta}$  分别是导带电子的产生、湮灭算符。

第二项  $H_{\text{int}}$  是导带电子自旋与局域自旋的相互作用项：

$$H_{\text{int}} = J_{\text{K}} \mathbf{s} \cdot \mathbf{S} = J_{\text{K}} \sum_a s^a S^a, \quad (3-3)$$

其中  $\mathbf{s}$  是导带电子的自旋密度算符； $\mathbf{S}$  是局域杂质的自旋算符，它可以用 Schwinger boson 算符表示出来。在大  $N$  极限下，它们分别为：

$$\begin{aligned} s^a &= \frac{1}{\mathcal{N}_S} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\nu\alpha\beta} c_{\mathbf{k}\nu\alpha}^\dagger t_{\alpha\beta}^a c_{\mathbf{k}'\nu\beta}, \\ S^a &= \sum_{\alpha\beta} b_\alpha^\dagger t_{\alpha\beta}^a b_\beta, \end{aligned} \quad (3-4)$$

其中  $\mathcal{N}_S$  是晶格中的格点数； $b_\alpha^\dagger$  和  $b_\beta$  分别是 Schwinger boson 或 spinon 的产生湮灭算符； $t_{\alpha\beta}^a$  是  $\text{SU}(N)$  群的生成元，具有完备性关系<sup>[26]</sup>：

$$\sum_a t_{\alpha\beta}^a t_{\delta\gamma}^a = \frac{1}{2} \delta_{\alpha\gamma} \delta_{\beta\delta} - \frac{1}{2N} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\delta\gamma}, \quad (3-5)$$



于是式 (3-3) 可以表示为:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{int}} &= \frac{2J_K}{N\mathcal{N}_S} \sum_{\nu\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} t_{\alpha\beta}^a t_{\delta\gamma}^a c_{\nu\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}'\nu\beta} b_\gamma^\dagger b_\delta \\
 &= \frac{2J_K}{N\mathcal{N}_S} \sum_{\nu\mathbf{k}\mathbf{k}'} \sum_{\alpha\beta\gamma\delta} \left( \frac{1}{2} \delta_{\alpha\delta} \delta_{\beta\gamma} - \frac{1}{2N} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\gamma\delta} \right) c_{\nu\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\mathbf{k}'\nu\beta} b_\gamma^\dagger b_\delta,
 \end{aligned} \tag{3-6}$$

其中  $J_K$  是 Kondo 耦合常数; 括号里的第二项在大  $N$  极限下是高阶小量, 可以被忽略。这样, 相互作用项  $H_{\text{int}}$  就能够写成:

$$H_{\text{int}} = \frac{1}{N\mathcal{N}_S} \sum_{\nu\mathbf{k}\mathbf{k}'\alpha\beta} c_{\nu\mathbf{k}\alpha}^\dagger c_{\nu\mathbf{k}'\beta} b_\beta^\dagger b_\alpha. \tag{3-7}$$

第三项是对玻色子算符约束条件的处理。Schwinger boson 算符所张成的 Hilbert 空间不总是具有物理意义的。为了表示自旋算符, 需要将玻色子算符限制在具有物理意义的子空间下, 即算符需要满足约束条件:

$$n_b = 2S. \tag{3-8}$$

严格处理这一约束条件是困难的, 通常的做法是将约束条件放松为  $\langle n_b \rangle = 2S$ , 其中  $\langle n_b \rangle$  是 spinon 粒子数的期望值。然后我们在哈密顿量中引入拉格朗日乘子项, 这也就是式 (3-1) 中的最后一项。拉格朗日乘子  $\lambda$  可以起到 spinon 的化学势的作用, 在计算时, 我们需要调节  $\lambda$  的取值, 使放松后的约束条件得到满足。

在上面的讨论中, 我们在一般的哈密顿量里添加了一个通道指标  $\nu$ , 可以认为这一指标为导带电子引入了一个“味”量子数, 这样的体系称为多通道的 Kondo 模型。在多通道的哈密顿量中, 我们可以独立调控通道数  $K$  和 Schwinger boson 粒子数  $P$ , 根据二者的大小不同, 能够将体系分为欠屏蔽、完全屏蔽和过屏蔽情形。如图 3-1 所示, 红色箭头表示局域杂质自旋的大小, 蓝色箭头表示参与屏蔽的导带电子, 蓝色箭头的个数即通道数  $K$ 。

图 3-1 的最左图表示在参数  $K < P$  情况下, 局域磁矩没有完全被导带电子屏蔽的情形。中间的示意图表示  $K = P$ , 局域自旋被完全屏蔽时的情形。在这种情况下, 体系在低温下会展现出费米液体行为。最右图描述当  $K > P$  时的过屏蔽情形, 这一情形在低温下会表现出非费米液体行为。我们最感兴趣的近藤模型是式 (3-1) 对应

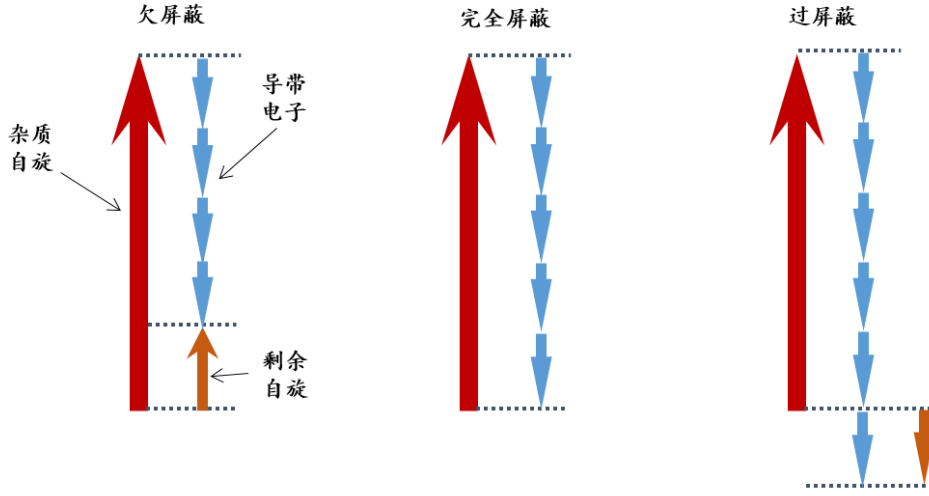


图 3-1 自旋的欠屏蔽、完全屏蔽和过屏蔽示意图。

的  $K = 1$ ,  $N = 2$ ,  $S = 1/2$  的完全屏蔽情形，所以在计算过程中均取  $K = P$ 。

### 3.2 自洽方程

下面推导体系的自洽方程。系统的拉格朗日量为：

$$\begin{aligned} \mathcal{L} = & \sum_{k\nu\alpha} \bar{c}_{k\nu\alpha} (\partial_\tau + \xi_k) c_{k\nu\alpha} + \sum_{\alpha} \bar{b}_{\alpha} (\partial_\tau - \lambda) b_{\alpha} \\ & + 2\lambda S - \sum_{\nu\alpha\beta k_1 k_2} c_{\nu\beta k_2} \bar{b}_{\beta} \left( \frac{J_K}{N\mathcal{N}_S} \right) \bar{c}_{\nu\alpha k_1} b_{\alpha}, \end{aligned} \quad (3-9)$$

式中最后一项为导带电子与局域自旋的相互作用项  $\mathcal{L}_{\text{int}}$ ，是单粒子算符的四次型，难以直接求解。为了将这一项解耦合以便后续计算，我们需要利用 Hubbard-Stratonovich 变换<sup>[27]</sup> 引入辅助场  $\chi_\nu$ ，将相互作用项的作用量改写为：

$$\begin{aligned} \exp \left[ - \int d\tau \mathcal{L}_{\text{int}} \right] = & \int \mathcal{D}[\bar{\chi}, \chi] \exp \left[ - \int d\tau \left( \sum_{\mu\nu} \bar{\chi}_\nu \frac{\delta_{\nu\mu}}{J_K} \chi_\mu \right. \right. \\ & \left. \left. + \sum_{\nu} \sum_{k_2\beta} \frac{c_{\nu\beta k_2} \bar{b}_{\beta}}{\sqrt{N\mathcal{N}_S}} \chi_\nu + \sum_{\nu} \sum_{k_1\alpha} \bar{\chi}_\nu \frac{\bar{c}_{\nu\alpha k_1} b_{\alpha}}{\sqrt{N\mathcal{N}_S}} \right) \right], \end{aligned} \quad (3-10)$$

其中引入的辅助场  $\chi$  是无自旋的费米子场，称为 holon 场； $\mathcal{D}[\bar{\chi}, \chi]$  是  $\chi$  场的积分测度。引入 holon 场之后，体系的总作用量在频率表象下为：

$$S = \sum_{k\nu\alpha n} \bar{c}_{k\nu\alpha n} (-i\omega_n + \xi_k) c_{k\nu\alpha n} + \sum_{\alpha m} \bar{b}_{\alpha m} (-i\omega_m - \lambda) b_{\alpha m} + \sum_{\nu n} \frac{\bar{\chi}_{\nu n} \chi_{\nu n}}{J_K} + 2S\lambda + S_{\text{int}}, \quad (3-11)$$

其中相互作用项  $S_{\text{int}}$  为：

$$S_{\text{int}} = \frac{1}{\sqrt{N\mathcal{N}_S\beta}} \sum_{k\alpha\nu} \sum_{mn_1n_2} \delta_{\omega_m, \omega_{n_1} + \omega_{n_2}} (c_{k\nu\alpha n_1} \bar{b}_{\alpha m} \chi_{\nu n_2} + \bar{\chi}_{\nu n_2} b_{\alpha m} \bar{c}_{k\nu\alpha n_1}). \quad (3-12)$$

从无相互作用项的作用量中可以看出零阶格林函数为：

$$\begin{aligned} (G_{c,0})_{1,2} &= -\langle c_1 \bar{c}_2 \rangle_0 = \frac{\delta_{\mathbf{k}_1 \mathbf{k}_2} \delta_{\nu_1 \nu_2} \delta_{\alpha_1 \alpha_2} \delta_{n_1 n_2}}{i\omega_n - \xi_k}, \\ (G_{b,0})_{1,2} &= -\langle b_1 \bar{b}_2 \rangle_0 = \frac{\delta_{\alpha_1 \alpha_2} \delta_{m_1 m_2}}{i\omega_m + \lambda}, \\ (G_{\chi,0})_{1,2} &= -\langle \chi_1 \bar{\chi}_2 \rangle_0 = -J_K \delta_{\nu_1 \nu_2} \delta_{n_1 n_2}, \end{aligned} \quad (3-13)$$

其中下标 1 和 2 表示  $c_1 \equiv c_{\mathbf{k}_1 \nu_1 \alpha_1 n_1}$  以及  $\bar{c}_2 \equiv \bar{c}_{\mathbf{k}_2 \nu_2 \alpha_2 n_2}$  等等。由式 (3-13)，我们定义：

$$\begin{aligned} (G_{c,0})_{\mathbf{k},n} &\equiv \frac{1}{i\omega_n - \xi_k}, \\ (G_{b,0})_m &\equiv \frac{1}{i\omega_m + \lambda}, \\ (G_{\chi,0})_n &\equiv -J_K. \end{aligned} \quad (3-14)$$

由于相互作用项 (3-12) 包含 holon 场的一次型，因此利用 Wick 定理可以算出，格林函数的一阶修正是零。考虑二阶修正的  $c$  电子格林函数为：

$$\begin{aligned} (G_{c,2})_{1,2} &= -\frac{1}{2!} \langle \bar{c}_1 c_2 (-S_{\text{int}})^2 \rangle \\ &= -\frac{1}{N\mathcal{N}_S\beta} \sum_{\mathbf{k}_1 \alpha_1 \nu_1} \sum_{\mathbf{k}_2 \alpha_2 \nu_2} \sum_{m_1 n_{11} n_{21}} \sum_{m_2 n_{12} n_{22}} \delta_{\omega_{m_1}, \omega_{n_{11}} + \omega_{n_{21}}} \delta_{\omega_{m_2}, \omega_{n_{12}} + \omega_{n_{22}}} \\ &\quad \times \langle c_1 \bar{c}_{\mathbf{k}_2 \nu_2 \alpha_2 n_{12}} \rangle (-1) \langle c_{\mathbf{k}_1 \nu_1 \alpha_1 n_{11}} \bar{c}_2 \rangle \langle b_{\alpha_2 m_2} \bar{b}_{\alpha_1 m_1} \rangle \langle \chi_{\nu_{21}} \bar{\chi}_{\nu_{22}} \rangle \\ &= \frac{1}{N\mathcal{N}_S\beta} \sum_m \delta_{\omega_m, \omega_{n_1} + \omega_{n_2}} [(G_{c,0})_{\mathbf{k},n_1}]^2 (G_{b,0})_m (G_{\chi,0})_{n_2}, \end{aligned} \quad (3-15)$$

于是可以算出  $c$  电子的自能为：

$$\Sigma_c(i\omega_{n_1}) = \frac{1}{N\mathcal{N}_S\beta} \sum_{mn_2} (G_{b,0})_m (G_{\chi,0})_{n_2} \delta_{\omega_m, \omega_{n_1} + \omega_{n_2}}, \quad (3-16)$$

可以看出，这一项正比于  $1/N$ ，所以在大  $N$  极限下可以被忽略。因此，在后面的推导与计算中，我们不再区分  $G_{c,0}$  与  $G_c$ 。用相同的方法可以算出 **spinon** 和 **holon** 的自能为：

$$\begin{aligned} \Sigma_b(i\omega_m) &= -\frac{k}{\mathcal{N}_S\beta} \sum_{kn_1n_2} \delta_{\omega_m, \omega_{n_1} + \omega_{n_2}} (G_{c,0})_{k,n_1} (G_{\chi,0})_{n_2}, \\ \Sigma_\chi(i\omega_{n_2}) &= \frac{1}{\mathcal{N}_S\beta} \sum_{kn_1m} \delta_{\omega_m, \omega_{n_1} + \omega_{n_2}} (G_{c,0})_{k,n_1} (G_{b,0})_m. \end{aligned} \quad (3-17)$$

我们可以看出，在大  $N$  极限下只有二阶的费曼图对正规自能有贡献。算出正规自能后，我们就可以用 Dyson 方程表示出格林函数：

$$\begin{aligned} G_b(i\omega_m) &= \frac{1}{i\omega_m + \lambda - \Sigma_b(i\omega_m)}, \\ G_\chi(i\omega_n) &= \frac{1}{-J_K^{-1} - \Sigma_\chi(i\omega_n)}. \end{aligned} \quad (3-18)$$

在式 (3-17) 中将零阶格林函数  $G_{\chi,0}$  与  $G_{b,0}$  替换为全格林函数  $G_\chi$  和  $G_b$  后，再与式 (3-18) 联立，我们就得到了自洽方程。为了便于后续数值求解，我们需要对方程进行进一步处理。下面以 **holon** 场的处理为例。

我们首先将  $G_b$  和  $G_c$  用谱函数表示出来，得到：

$$\begin{aligned} G_c(i\omega_{n_1}) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_c^{\text{ret}}(z_1) dz_1}{i\omega_{n_1} - z_1}, \\ G_b(i\omega_m) &= \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-\frac{1}{\pi} \text{Im} G_b^{\text{ret}}(z_1) dz_1}{i\omega_m - z_1}. \end{aligned} \quad (3-19)$$

然后把这些谱表示代入式 (3-17) 的  $\Sigma_\chi$  中，并作解析延拓  $i\omega_n \rightarrow \omega + i\delta$  整理得到：

$$\Sigma_\chi(\xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \frac{-dz}{\pi} \{n_F(z) \text{Im} G_c(z) G_b(z + \xi) - n_B(z) \text{Im} G_b(z) [G_c(z - \xi)]^*\}, \quad (3-20)$$

其中出现的格林函数都是推迟格林函数，并且略去了推迟格林函数的上标 **ret**。通常

为了简化计算，我们近似地认为导带电子的态密度是常数，于是有：

$$\begin{aligned}
 G_c(\omega + i\delta) &= \int_{-D}^D \frac{\rho_0 dz}{\omega - z + i\delta} \\
 &= \int_{-D}^D \frac{\rho_0 dz}{w - z} - i\pi\rho_0 \int_{-D}^D \delta(w - z) dz \\
 &= -\rho_0 \ln \left| \frac{\omega - D}{\omega + D} \right| - i\pi\Theta(D - |\omega|),
 \end{aligned} \tag{3-21}$$

将这里的导带电子格林函数代入式（3-20），算出自能  $\Sigma_\chi(\xi)$  的实部与虚部分别为：

$$\begin{aligned}
 \text{Re}\Sigma_\chi(\xi) &= \rho_0 \int_{-D}^D dz n_F(z) \text{Re}G_b(z + \xi) + \frac{\rho_0}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz n_B(z) \ln \left| \frac{z - \xi + D}{z - \xi - D} \right| \text{Im}G_b(z), \\
 \text{Im}\Sigma_\chi(\xi) &= \rho_0 \int_{-D}^D dz \text{Im}G_b(z + \xi) [n_F(z) + n_B(z + \xi)].
 \end{aligned} \tag{3-22}$$

推迟格林函数的实部和虚部与自能之间的关系分别为：

$$\begin{aligned}
 \text{Re}G_\chi(\xi) &= \frac{-J_K^{-1} - \text{Re}\Sigma_\chi(\xi)}{(-J_K^{-1} - \text{Re}\Sigma_\chi(\xi))^2 + (-\text{Im}\Sigma_\chi(\xi))^2}, \\
 \text{Im}G_\chi(\xi) &= \frac{\text{Im}\Sigma_\chi(\xi)}{(-J_K^{-1} - \text{Re}\Sigma_\chi(\xi))^2 + (-\text{Im}\Sigma_\chi(\xi))^2}.
 \end{aligned} \tag{3-23}$$

式（3-22）和（3-23）将  $\Sigma_\chi$  和  $G_\chi$  处理成了便于数值计算的具体形式。对于 spinon 场，可以用同样的方法进行处理，在此不加赘述，得到的结果为：

$$\begin{aligned}
 \text{Re}G_b(\xi) &= \frac{\xi + \lambda - \text{Re}\Sigma_b(\xi)}{(\xi + \lambda - \text{Re}\Sigma_b(\xi))^2 + (-\text{Im}\Sigma_b(\xi))^2}, \\
 \text{Im}G_b(\xi) &= \frac{\text{Im}\Sigma_b(\xi)}{(\xi + \lambda - \text{Re}\Sigma_b(\xi))^2 + (-\text{Im}\Sigma_b(\xi))^2}, \\
 \text{Re}\Sigma_b(\xi) &= -\frac{1}{2} \frac{k}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dz \text{Im}G_\chi(z) n_F(-z) \ln \left| \frac{\xi - z + D}{\xi - z - D} \right| \\
 &\quad - \frac{1}{2} k \int_{-D}^D dz n_F(z) \text{Re}G_\chi(\xi - z), \\
 \text{Im}\Sigma_b(\xi) &= \frac{1}{2} k \int_{-D}^D dz \text{Im}G_\chi(\xi - z) [n_F(z - \xi) - n_F(z)].
 \end{aligned} \tag{3-24}$$

此外，spinon 粒子数的期望  $\langle n_b \rangle$  也可以表示为：

$$\langle n_b \rangle = -N \int \frac{d\xi}{\pi} n_B(\xi) \text{Im}G_b(\xi), \quad (3-25)$$

其中，将式（3-24）中  $\text{Im}G_b$  的表达式代入，我们就得到用自能表示出的约束条件：

$$- \int \frac{d\xi}{\pi} \frac{n_B(\xi) \text{Im}\Sigma_b(\xi)}{(\xi + \lambda - \text{Re}\Sigma_b(\xi))^2 + (\text{Im}\Sigma_b(\xi))^2} = k. \quad (3-26)$$

### 3.3 小结

本章我们利用 Schwinger boson 表示推导出了单杂质 Kondo 模型的自洽方程。在处理哈密顿量中的相互作用项的时候，我们利用自旋的玻色子表示引入了 spinon 场  $b$ ，利用 Hubbard-Stratonovich 变换引入了费米子型辅助 holon 场  $\chi$ 。下一章我们给出自洽方程组的数值结果，并结合磁化率和熵等物理量讨论 Kondo 模型在低温下的性质。

## 第 4 章 数值计算结果

上一章我们已经给出了 Kondo 模型在 Schwinger boson 表示下的自洽方程。在本章，我们将使用迭代方法对这些自洽方程进行计算，并对计算结果加以讨论。在计算过程中，我们以  $D$  为能量单位，选取  $J_K = 1, \hbar = k_B = 1, T_K = \exp(-2D/J_K) \approx 0.135$ 。我们考虑的温度范围是  $0 < (T/T_K) \leq 1$ 。

根据第一章的介绍，当  $T \gg T_K$  时，系统在高温下展现出局域磁矩行为；在  $T_K$  附近，Kondo 模型的热力学量会出现由高温行为向低温行为转变的 crossover；随着温度的继续下降，在  $T \ll T_K$  时，局域自旋被导带电子完全屏蔽，宏观上系统表现出无局域磁矩的费米液体行为。下面我们给出热力学量的计算结果，并分析它们随温度的变化关系及其中的物理行为。

### 4.1 对格林函数的讨论

下面我们给出 spinon 场与 holon 场的格林函数虚部的数值计算结果。图 4-1(a)

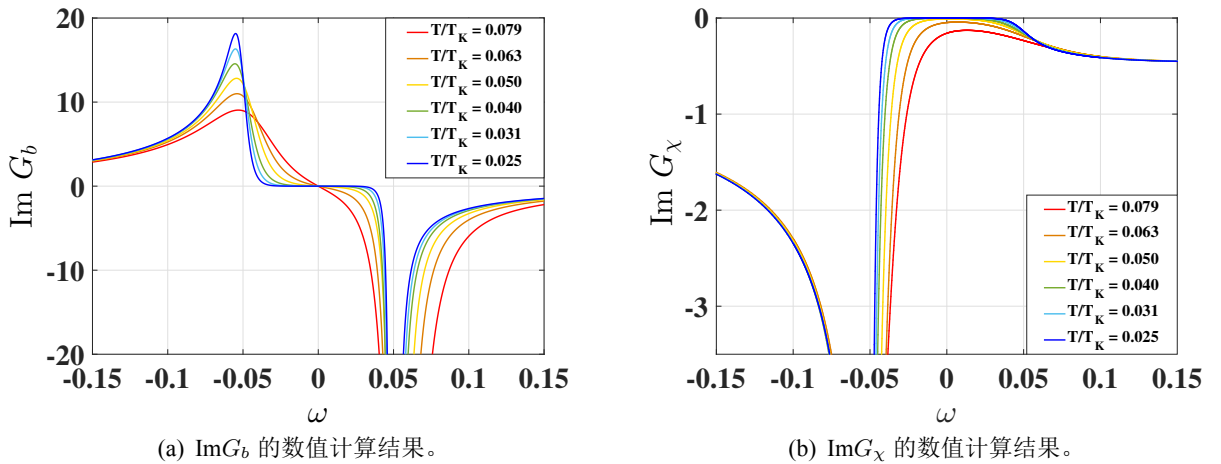


图 4-1 spinon 和 holon 的格林函数虚部数值计算结果。

和 4-1(b) 是温度处于  $0.025 < (T/T_K) < 0.079$  之间的  $\text{Im } G_b$  和  $\text{Im } G_\chi$  的数值计算结果。从图中可以看出，随温度降低，在  $\omega = 0$  附近谱函数的取值逐渐接近于 0。大概在  $T < 0.04T_K$  时， $\text{Im } G_b$  和  $\text{Im } G_\chi$  的取值在 origin 附近逐渐形成一个能隙，并且随着温度的降低，能隙逐渐变宽。在温度低至  $0.025T_K$  左右时，能隙已经扩展到了  $\omega = \pm 0.04$  左右的位置。随着能隙逐渐展宽，它的边缘和两侧的尖峰都逐渐变得

尖锐。另外，从  $\text{Im}G_b$  和  $\text{Im}G_\chi$  的表达式中可以看出，在  $T$  趋于 0 时，如果 spinon 和 holon 的谱函数中有能隙，那它们会同时出现。理由如下：

在低温下，玻色（费米）分布函数可以近似写成阶跃函数。当  $-D < \xi < D$  时，式 (3-22) 中的  $\text{Im}\Sigma_\chi$  可以近似写为：

$$\begin{aligned}\text{Im}\Sigma_\chi(\xi) &= \frac{1}{2} \int_{-D}^D dz \text{Im}G_b(z + \xi) [\Theta(-z) - \Theta(-z - \xi)] \\ &= \frac{1}{2} \int_0^\xi dz \text{Im}G_b(z),\end{aligned}\tag{4-1}$$

同样地，式 (3-24) 中的  $\text{Im}\Sigma_b$  也可以近似写成：

$$\begin{aligned}\text{Im}\Sigma_b(\xi) &= \frac{k}{2} \int_{-D}^D dz \text{Im}G_\chi(\xi - z) [\Theta(\xi - z) - \Theta(-z)] \\ &= \frac{k}{2} \int_0^\xi dz \text{Im}G_\chi(z),\end{aligned}\tag{4-2}$$

从上面两个式子可以看出，假设在  $-\xi_1 < \xi < \xi_2$  时， $\text{Im}G_b(\xi)$  取值为零，那么式 (4-1) 中的  $\text{Im}\Sigma_\chi(\xi)$  将同时得零，此时  $\text{Im}G_\chi(\xi)$  同样等于零。同样地，如果  $\text{Im}G_\chi(\xi)$  等于零，那么  $\text{Im}\Sigma_b(\xi)$  也等于零，也就是说  $\text{Im}G_b(\xi)$  也等于零。这样我们就证实了 spinon 和 holon 的谱函数中的能隙会同时出现。

在低温下，由于 spinon 和 holon 同时打开能隙，它们对热力学量的影响就可以忽略。此时只有导带电子会对熵等物理量有贡献。这表明系统在低温下可能会出现费米液体行为。从谱函数结果可以看出，在  $T/T_K = 0.04$  时，温度对应的能量正好落在能隙里。这表明在  $T = 0.04T_K$  附近，系统可能会出现费米液体行为。下面在对系统熵和局域磁化率的分析中，我们能看出，费米液体行为的确在这一温度附近开始出现。

## 4.2 熵

下面我们给出系统熵随温度变化的数值求解结果。系统的熵可以分为导带电子、spinon 和 holon 三个部分，即<sup>[25]</sup>：

$$S_{\text{tot}} = S_c + S_b + S_\chi,\tag{4-3}$$



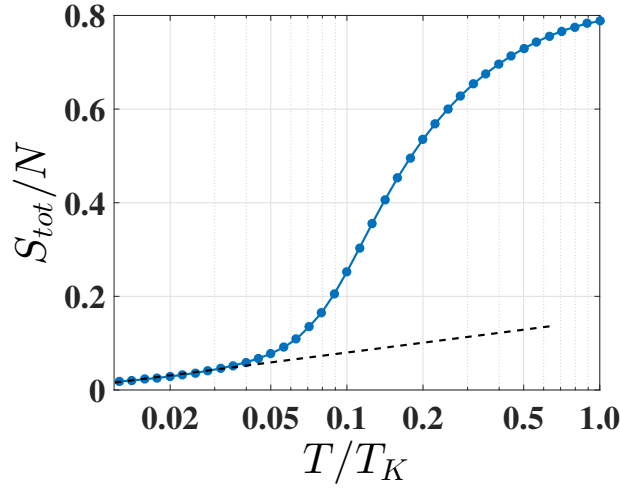
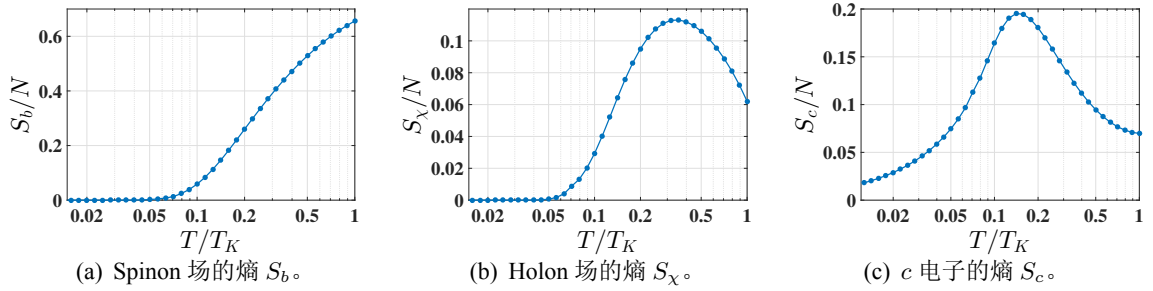

 图 4-2 总熵  $S$  的数值计算结果。


图 4-3 熵的三个分量的数值计算结果。

其中：

$$\begin{aligned}
 S_c &= \int \frac{-\beta^2 k}{2} \xi n_F(\xi) n_F(-\xi) \text{Re} \Sigma_c(\xi) d\xi, \\
 S_b &= \int \frac{\beta^2}{\pi} \xi n_B(\xi) n_B(-\xi) \left[ \arctan \left( \frac{\text{Im} G_b(\xi)}{-\text{Re} G_b(\xi)} \right) + \text{Re} G_b(\xi) \text{Im} \Sigma_b(\xi) \right] d\xi, \\
 S_\chi &= \int \frac{-\beta^2 k}{\pi} \xi n_F(\xi) n_F(-\xi) \left[ \arctan \left( \frac{\text{Im} G_\chi(\xi)}{-\text{Re} G_\chi(\xi)} \right) + \text{Re} G_\chi(\xi) \text{Im} \Sigma_\chi(\xi) \right] d\xi.
 \end{aligned} \tag{4-4}$$

图 4-3(a)、4-3(b) 和 4-3(c) 是对熵的三个部分的数值计算结果。我们可以看到，大致在  $T/T_K \approx 0.04$  左右， $S_b$  和  $S_\chi$  都逐渐趋于零。在  $T/T_K < 0.04$  后，总熵的三个分量里只有导带电子有非零贡献，即  $S_{\text{tot}} = S_c$ 。图 4-2 展示了系统的总熵的数值计算结果。大致在  $T/T_K < 0.04$  这一区间内，熵对温度呈线性依赖关系，与之相应的

比热系数  $(C/T) = \partial S/\partial T$  是常数，这是费米液体行为的一个标志。可以看到，熵出现费米液体行为的温度，与上面讨论的落在 spinon 和 holon 谱函数的能隙里的温度 ( $T/T_K \approx 0.04$ ) 基本一致。因此我们可以认为，系统在低温下熵的费米液体行为的出现与能隙打开有着密切的关联。

随着温度升高，我们预期体系的总熵在经历一个平滑的上升过程后，将逐渐趋于一个常数，此时体系中出现局域磁矩行为。这个常数的值是：

$$\begin{aligned}
 \frac{S}{N} &= \frac{1}{N} \ln \frac{(2S + N - 1)!}{(N - 1)!(2S)!} \\
 &= \frac{1}{N} (2S + N - 1) \ln(2S + N - 1) - \frac{1}{N} (N - 1) \ln(N - 1) - \frac{2S}{N} \ln(2S) \\
 &= \frac{N - 1}{N} \ln \frac{2S + N - 1}{N - 1} + \frac{2S}{N} \ln \frac{2S + N - 1}{2S} \\
 &= \ln(k + 1) + k \ln\left(1 + \frac{1}{k}\right) \\
 &\approx 0.955,
 \end{aligned} \tag{4-5}$$

我们的计算与这一结果定性一致。

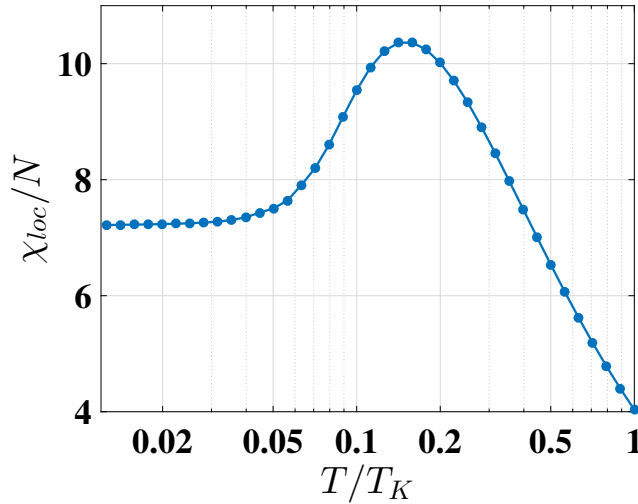


图 4-4 磁化率的数值计算结果。

### 4.3 磁化率

下面我们给出磁化率随温度变化的数值计算结果。局域磁化率的表达式为<sup>[25]</sup>：

$$\frac{\chi_{\text{loc}}}{N} = \frac{2}{\pi} \int d\xi n_{\text{B}}(\xi) \text{Im}G_b(\xi) \text{Re}G_b(\xi). \quad (4-6)$$

对局域磁化率的数值计算结果如图 4-4。大致在  $T/T_{\text{K}} < 0.04$  的低温区域内，磁化率趋于一个常量。此时局域磁矩被导带电子屏蔽，系统处于费米液体区域。这一温度范围与熵对温度出现线性行为的温度范围相符，并且与从谱函数中分析得出的费米液体行为出现的温度范围一致。随温度升高，磁化率逐渐增加，然后再下降。在温度更高的范围内，这一下降行为可能会演变为 Curie-Weiss 定律，并体现出局域磁矩的行为。

## 结 论

本文对 Kondo 模型中自旋算符的各种表示方法展开了研究，讨论了在用玻色子算符或费米子算符表示自旋时需要考虑的问题，例如对约束条件的处理等等；此外，我们还介绍了在处理具体问题时，不同表示方法的应用。然后将一种玻色子表示，即 Schwinger boson 表示方法应用在单杂质 Kondo 模型中，用格林函数方法推导出自洽方程并做数值计算。在对热力学量的计算结果中，我们能够看到 Schwinger boson 表示通过打开 spinon 和 holon 谱的能隙，使得体系的热力学量在低温下展现出费米液体行为。从而证实了玻色子表示也能够对低温下的 Kondo 效应有一个很好的描述。

文中对 Kondo 问题中的自旋表示的讨论仍存有一些局限性：Schwinger boson 表示是否能够很好地处理多杂质模型或晶格模型并展现出新的物理也是一个重要的问题。在数值计算的结果中，低温下谱函数中能隙出现的原因尚不明确。最后，其他的自旋表示是否也能很好地应用到单杂质近藤模型或近藤晶格模型中，是我们未来研究的重要问题。

## 参考文献

- [1] Quintanilla J, Hooley C. The strong-correlations puzzle[J]. *Physics World*, 2009, 22(6): 32-37.
- [2] 杨义峰, 谢能, 李宇. 重费米子二流体理论[J]. *物理学进展*, 2015, 35(5): 191-211.
- [3] Andres K, Graebner J, Ott E. 4f-Virtual-Bound-State Formation in CeAl<sub>3</sub> at Low Temperatures[J]. *Physical Review Letters*, 1975, 35(26): 1779-1782.
- [4] Steglich F, Aarts J, Bredl C D, et al. Superconductivity in the Presence of Strong Pauli Paramagnetism: CeCu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub>[J]. *Physical Review Letters*, 1979, 43(25): 1892-1896.
- [5] Löhneysen H, Pietrus T, Portisch G, et al. Non-Fermi-Liquid Behavior in a Heavy-Fermion Alloy at a Magnetic Instability[J]. *Physical Review Letters*, 1994, 72(20): 3262-3265.
- [6] Mathur N D, Grosche F M, Julian S R, et al. Magnetically mediated superconductivity in heavy fermion compounds[Z]. 1998.
- [7] Meissner W, Voigt B. Messungen mit Hilfe von flüssigem Helium XI Widerstand der reinen Metalle in tiefen Temperaturen[J]. *Annalen der Physik*, 1930, 399(7): 892-936.
- [8] Sarachik M P, Corenzwit E, Longinotti L D. Resistivity of Mo-Nb and Mo-Re Alloys Containing 1% Fe[J]. *Physical Review*, 1964, 135(4A): A1041-A1045.
- [9] Kondo J. Resistance Minimum in Dilute Magnetic Alloys[J]. *Progress of Theoretical Physics*, 1964, 32(1): 37-49.
- [10] Frölich H, Nabarro F. Orientation of Nuclear Spins in Metals[J]. *Proceedings of the Royal Society of London*, 1940, 175(962): 382-391.
- [11] Ruderman M A, Kittel C. Indirect Exchange Coupling of Nuclear Magnetic Moments by Conduction Electrons[J]. *Phys. Rev.*, 1954, 96: 99-102.
- [12] Kasuya T. A Theory of Metallic Ferro- and Antiferromagnetism on Zener's Model[J]. *Progress of Theoretical Physics*, 1956, 16(1): 45-57.
- [13] Yosida K. Magnetic Properties of Cu-Mn Alloys[J]. *Phys. Rev.*, 1957, 106: 893-898.
- [14] Doniach S. THE KONDO LATTICE AND WEAK ANTIFERROMAGNETISM[J]. *Physica B*, 1977, 91(B): 231-234.
- [15] Anderson P. Localized Magnetic States in Metals[J]. *Physical Review*, 1961, 124(1): 41-53.
- [16] Mahan D. Many-Particle Physics[M]. Springer US, 2000.
- [17] Schrieffer J, Wolff P. Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians[J]. *Physical Review*, 1966, 149(2): 491-492.
- [18] Auerbach A. Interacting electrons and quantum magnetism[M]. Springer New York, 1994.
- [19] Read N, Newns D. On the solution of the Coqblin-Schrieffer Hamiltonian by the large-*N* expansion technique[J]. *Journal of Physics C: Solid State Physics*, 1983, 16(22): 3273-3295.
- [20] Barnes S. New method for the Anderson model[J]. *Journal of Physics F: Metal Physics*, 1976, 6(7): 1375-1383.
- [21] Coleman P. New approach to the mixed-valence problem[J]. *Physical Review B*, 1983, 29(6): 3035-3044.
- [22] Holstein T, Primakoff H. Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet[J]. *Physical Review*, 1940, 58(30): 1098-1113.
- [23] Arovas D, Auerbach A. Functional integral theories of low-dimensional quantum Heisenberg models[J]. *Physical Review B*, 1988, 38(1): 316-332.

- [24] Parcollet O, Georges A. Transition from Overscreening to Underscreening in the Multichannel Kondo Model: Exact Solution at Large  $N$ [J]. Physical Review Letters, 1997, 79(23): 4665-4668.
- [25] Rech J, Coleman P, Zarand G, et al. Schwinger Boson Approach to the Fully Screened Kondo Model[J]. Physical Review Letters, 2006, 96(1): 016601.
- [26] Altland A, Simons B. Condensed Matter Field Theory[M]. Cambridge University Press, 2006.
- [27] Coleman P. Introduction to Many-Body Physics[M]. Cambridge U. Press, 2015.

## 致 谢

行文至此，我的本科四年生活也即将画上句点。回想起迈入大学校园的第一天，我遭到了北湖白鹅的热情追咬，这一幕仿佛就发生在昨天。一路走来，我得到了许多人帮助与陪伴。感谢与你们的相遇，让我不断成长。

感谢校外毕设导师杨义峰研究员对我的指导与帮助。18年杨老师来北理做的报告，让我第一次接触到凝聚态物理的思想，并萌生了求知的想法。在大四毕设期间，杨老师对待科研工作的热情与严谨细致的态度，也不断影响着我。

感谢龙卓青师兄和韩儒磊师兄在毕设期间给予我的帮助。卓青师兄每周末都会组织我们讨论一次毕设进度，并抽出了大量时间，一步步带我完成毕设题目。小韩师兄为我的毕设内容提出了很多宝贵建议，并在程序计算方面提供了强力的硬件支持。我还想衷心感谢组里的曹迎迎、程渊溟、陈佳林、董建军、黄东宸、胡丹青、秦琼、盛玉韬、王江帆、王梦凡、武振超、徐远骥、张本源、张帅康等所有的师兄师姐们还有康泽瑜同学，是你们的修改意见让我的毕业论文焕然一新！

我还想特别感谢陈天副教授的指导和鼓励。在本科科研期间，遇到问题和困难时陈老师总会耐心与我们讨论，并一直支持我们趁年轻要多尝试，遇到挫折要顶住，相信自己在成长。这给予了我莫大的鼓励，让我在前进时不会再迷茫。感谢张向东教授在本科期间给予我的教导，张老师丰富的学识和对待物理问题时敏锐的洞察力都使我受益匪浅。感谢孙亦凡副研究员和孔令军研究员为我提供了许多宝贵建议。

另外，我想感谢本科期间遇到的朋友和同学们。感谢邓晒栏、刘文星、孟晨曦、苏聪、张皞辰和张子瑞同学，每一次在课程学习中与你们的共同讨论、总结，都让我有了新的收获；感谢学习小组总群（目前更名为集体躺平不会写论文总群）的杜香瑾、郭子健、洪锦阳、钱伟康和童笑雪同学，每次有好吃的都会与我分享；感谢潘乃桥学长和张涵虚学长在科研实训期间耐心解答我的问题，并包容我每次在休息时间的打扰；感谢郑新根、冀婷婷、刘舟慧和侯赛赛等学长学姐在我做实验期间的帮助；感谢方言同学在我旁听量子场论过程中的陪伴和帮助，让我即使听不懂也能坚持上完整个学期的课。太多的感谢难以一一列举，祝我们大家都有光明的未来。

最后，感谢父母及家人对我无条件的照顾与支持，你们无私的爱时时刻刻给予了我依靠，让我能够勇敢地奔赴前方。