重费米子二流体理论

杨义峰^{1,2*},谢能¹,李宇¹

1. 中国科学院物理研究所,北京凝聚态物理国家实验室,北京 100190 2. 量子物质科学协同创新中心,北京 100190

摘要:强关联电子同时表现出局域和巡游的二重性,这是量子力学波粒二象性在凝聚态物理领域的表现,也是导致强关联材料中各种新奇量子效应的根源。本文以重费米子材料为例,探讨强关联 *f* 电子在该类材料中局域和巡游二重行为的实验表现,重点介绍重费米子的二流体唯象理论。这一理论成功解释了众多先前无法解释的实验现象,揭示了重费米子体系复杂行为背后的统一物理起源,为理解强关联系统包括铜氧化物和铁基超导材料中电子的奇异行为提供了一种新的思路,亟待更加深入的理论和实验探索。

关键词:强关联电子;重费米子;二流体理论

中图分类号: O469 文献标识码: A

DOI: 10.13725/j.cnki.pip.2015.05.002

目 录

I.	重费米子物理简介	191
II.	二流体理论的历史背景	194
III.	重费米子二流体理论	194
	A. 模型	195
	B. 正常态物性	196
	1. 磁性质	196
	2. 热性质	198
	3. 电输运性质	199
	C. 低温有序态	201
	1. 费米液体	202
	2. 磁有序态	202
	3. 量子临界行为	202
	4. 超导	204
IV.	实验进展	204
IV.	实验进展 A. 角分辨光电子能谱	204 204
IV.	实验进展 A. 角分辨光电子能谱 B. 缪介子自旋共振	204 204 205
IV.	实验进展A. 角分辨光电子能谱B. 缪介子自旋共振C. 新材料	204 204 205 205
IV. V.	 实验进展 A. 角分辨光电子能谱 B. 缪介子自旋共振 C. 新材料 理论进展 	204 204 205 205 206
IV. V.	 实验进展 A. 角分辨光电子能谱 B. 缪介子自旋共振 C. 新材料 理论进展 A. 隶玻色子近似 	204 204 205 205 206 206
IV. V.	 实验进展 A. 角分辨光电子能谱 B. 缪介子自旋共振 C. 新材料 理论进展 A. 隶玻色子近似 B. 单杂质 DMFT 	204 204 205 205 206 206 206
IV. V.	 实验进展 A. 角分辨光电子能谱 B. 缪介子自旋共振 C. 新材料 理论进展 A. 隶玻色子近似 B. 单杂质 DMFT C. NRG 	 204 205 205 206 206 206 206 206
IV. V.	 实验进展 A. 角分辨光电子能谱 B. 缪介子自旋共振 C. 新材料 理论进展 A. 隶玻色子近似 B. 单杂质 DMFT C. NRG D. DQMC 	204 205 205 206 206 206 206 206 207
IV. V.	 实验进展 A. 角分辨光电子能谱 B. 缪介子自旋共振 C. 新材料 理论进展 A. 隶玻色子近似 B. 单杂质 DMFT C. NRG D. DQMC E. DMRG 	204 205 205 206 206 206 206 206 207 207
IV. V. VI.	 实验进展 A. 角分辨光电子能谱 B. 缪介子自旋共振 C. 新材料 理论进展 A. 隶玻色子近似 B. 单杂质 DMFT C. NRG D. DQMC E. DMRG 结论和展望 	204 205 205 206 206 206 206 207 207 207

I. 重费米子物理简介

描述固体材料中电子的微观行为是凝聚态物理的 核心问题。当电子间的库仑相互作用较弱时,电子在 晶格中的运动可以近似采用单电子图像描述,在此基 础上发展起来的经典能带理论成功解释了普通金属、 绝缘体和半导体的基本性质。但是在包含过渡族金属 元素的 d 电子或镧系/锕系元素的 f 电子体系中,电 子间通常具有较强的库仑相互作用,导致单电子近似 失效,此时众多强关联电子之间的协同运动使得材料 在低温下呈现出许多新奇的量子现象^[1],如高温超导、 庞磁阻、重费米子等等。发展超越经典能带理论的强 关联电子理论,是目前凝聚态领域的一个重要前沿课 题。

在这篇文章中,我们简要介绍一类传统的强关联 电子体系,即重费米子体系。与常规金属不同,重费 米子材料在低温下具有非常大的比热系数,是铜、金 等常规金属的比热系数(~1 mJ/mol K²)的几百以 至上千倍。按照朗道的费米液体理论,如此大的比热 意味着材料中准粒子的有效质量可以达到自由电子 质量的几百乃至上千倍,所以这类材料被统一称作重 费米子或重电子材料^[2,3]。目前常见的重费米子材料 一般为包含 Ce,Yb,U 等稀土或锕系元素的*f*电 子金属化合物,也有少量的*d*电子材料如 LiV₂O₄^[4] 和 CaCu₃Ir₄O₁₂^[5]等。在这些材料中,局域在晶格上 的*f*或*d*电子形成局域磁矩,与自由运动的导带电子

Received date: 2015-08-26 *yifeng@iphy.ac.cn

文章编号: 1000-0542(2015)05-0191-21

在低温下发生集体杂化,产生运动迟缓的复合准粒子, 实验上表现出较大的有效质量。

由于电子的特征能量与其有效质量成反比关系, 因此重费米子材料的特征能量尺度很低,一般只 有 10~100 K 的量级,极易通过压力、磁场、掺杂 等实验手段进行调控。最近十多年来,随着材料制备 水平和实验技术的提高,重费米子领域涌现出大量 的新材料、新物理,不仅仅在很多材料中都观察到了 非常规超导、非费米液体、量子临界等重要的强关联 电子现象,还发现了如 CeCu₂Si₂ 中的高压超导相^[6], CeCoIn₅ 中强磁场诱导的 Q-相^[7],URu₂Si₂ 中的隐藏 序^[8],SmB₆ 中的拓扑表面态^[9,10]等具体材料中丰富 多样的奇异电子态。这些发现极大地充实了凝聚态物 理的研究内容,成为探索强关联电子现象和物理本质 的重要研究对象。

重费米子材料的发现源自 20 世纪上半叶对金属中 磁性杂质的散射效应的研究^[11]。1930年,德国物理学 家 Meissner 和 Voight 在实验上^[12] 观测到金 (Au) 的电 阻在温度 10 K 附近出现极小值, 10 K 以下反常增大。 这一反常的电阻极小值现象和超导的零电阻现象并驾 齐驱,引起了实验和理论上的极大兴趣,成为当时固 体物理学中的两大著名难题。但是直到 1964 年, 在超 导问题被 Bardeen、Cooper 和 Schrieffer 等人解决数 年后,才由美国贝尔实验室的 Sarachik 等人在实验上 给出了最确定性的证据,将电阻的极小值问题与金属 中磁性杂质对导带电子的散射联系起来^[13,14]:他们在 钼铌合金 (Mo_xNb_{1-x}) 中掺入 1% 铁 (Fe) 杂质,发 现当 Mo 的浓度增加到一定值时, Fe 杂质会表现出磁 性,同时电阻曲线中出现极小值,两者之间存在直接 关联。同年,日本科学家 Kondo 分析了导带电子与磁 性杂质之间由于反铁磁耦合导致的自旋翻转散射,对 散射过程进行微扰处理, 在相互作用的三阶项上发现 了电阻随温度降低呈现出 $-\log T$ 的发散行为,这一贡 献与声子散射的贡献结合起来, 解释了金属中电阻的 极小值现象^[15]。 此类自旋翻转散射后来被称为 Kondo 散射。

Kondo 散射有一个重要的特征温度, $T_{\rm K}$,称为 Kondo 温度,通常 $T_{\rm K} \approx \rho^{-1}e^{-1/J\rho}$,其中 ρ 是费米面附近导带电子的态密度,J是磁性杂质上的局域磁矩与导带电子自旋之间的反铁磁交换耦合强度^[16],本文中 Boltzmann 常数均设为 1。在 $T_{\rm K}$ 之上,导带电子与局域磁矩发生自旋翻转散射,其高阶相干过程的叠加对有效散射强度产生对数修正,随温度降低而增强,最终在 $T_{\rm K}$ 处发散。因而在 $T_{\rm K}$ 之下,体系处于强耦合区,微扰展开的处理方法失效,局域磁矩与导

带电子之间形成自旋单态,导带电子在磁性杂质周围 形成屏蔽云。电阻在接近零温时从对数发散的温度依 赖关系转变为 T² 的依赖关系并趋于饱和,表现为局域 费米液体的行为。同时由于重整化效应,f 电子能级被 重整化到费米能附近,在态密度上出现共振态,导致 很大的低温比热系数。

Kondo 问题在强关联电子系统的研究历史上发 挥了非常重要的作用[17],重费米子现象的发现就 是其中一个重要的例子。1975年,美国贝尔实验室 的 Andres 等人^[18] 发现 Ce 的金属化合物 CeAla 在温 度低于 0.2 K 时具有很大的线性比热系数 ($C = \gamma T, \gamma =$ 1620 mJ/mol K²),同时电阻表现为典型的费米液体行 为 ($\Delta \rho = AT^2, A = 35 \mu \Omega \text{ cm/K}^2$),表明其中的准粒 子具有很大的有效质量,这是实验上发现的第一个重 费米子材料。1979 年,德国科学家 Steglich 等^[19] 在 重费米子材料 CeCu₂Si₂ 中发现超导,无法用传统的基 于电声耦合的 BCS(Bardeen-Cooper-Schrieffer) 理论 解释。此前众多实验都表明磁性杂质对(常规)超导 具有很强的破坏作用,因此一般认为超导与磁是不相 容的, 而 Ce 在这里为 +3 价, 最外层有一个 f 电子, 高温下表现为磁性离子,这一发现改变了人们对超导 与磁的关系的认识。随着类似的超导现象在 UBe13^[20] 和 UPt₃^[21] 等更多重费米子材料中陆续被发现,非常 规超导现象开始引起了理论和实验上的关注, 与随后 的铜氧化物高温超导和铁基超导一起,逐渐开启了三 十多年来非常规超导研究的大门。

在大多数 Ce 基重费米子材料中, Ce 为 +3 价, 最外层只有一个 f 电子,由于很强的局域库仑排斥作 用,f 电子的电荷涨落被抑制,同时考虑到晶体场基态 (二重态),在低温下表现为自旋 1/2 的局域磁矩。这 些磁矩在晶格点阵上周期排布,形成周期性的自旋晶 格,并与导带电子之间发生集体耦合,不同于单杂质 的情况。因而对重费米子物理的理论研究,文献中经 常采用所谓的 Kondo 晶格模型^[3]

$$H = -t \sum_{i \neq j,\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + H.c.) + J \sum_{i} \vec{S}_{i} \cdot \vec{s}_{i}, \qquad (1)$$

其中第一项为导带电子的跃迁项,第二项中 \vec{S}_i 和 \vec{s}_i 分别代表局域磁矩和导带电子的自旋,两者通过 Kondo 耦合 J 联系起来。Kondo 晶格模型忽略了f电子的价态涨落,只考虑了其自旋自由度。在一些混价(mixedvalence)材料中,如很多 U 基材料,每个 U 离子最外 层有 2 个 5f电子,并且较为巡游,价态变化很重要, 还可能要考虑到不同的晶体场基态。这时就要采用周 期性 Anderson 模型^[3],

$$H = -t \sum_{i \neq j,\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + H.c.) + \varepsilon_f \sum_{i,\sigma} f_{i,\sigma}^{\dagger} f_{i,\sigma}$$
$$+ V \sum_{i,\sigma} (f_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma} + H.c.) + U \sum_i n_i^f n_i^f.$$
(2)

模型中第一项为导带电子的跃迁项,第二项为 f 电子的能级,第三项是导带电子和 f 电子的杂化项,第四项为 f 电子之间的局域库仑排斥。一般情况下,这两个模型目前尚无法严格求解,只能采用近似方法。

1977 年,美国斯坦福大学的 Doniach 利用平均 场近似分析了 Kondo 晶格模型的基态性质^[22]。由于 局域磁矩对导带电子的极化作用,晶格上相邻磁矩间 会产生间接的磁交换相互作用,即 Ruderman-Kittel-Kasuya-Yoshida (RKKY)相互作用^[23~25]: $T_{\rm RKKY} \propto J^2 \rho^{[26]}$ 。Doniach 提出体系的基态取决于 RKKY 作用 与 Kondo 效应的竞争。如图 1(a)所示,在 Kondo 耦 合 J 较小时, RKKY 作用占主导,体系表现为磁性基 态,随着 J 的增加,Kondo 温度指数增加,最终抑制 了 RKKY 作用,导致体系从磁有序态过渡到了费米液 体态 (Kondo 效应主导)。这一图像定性地解释了许多 材料的实验相图,得到了广泛的认可。

80 年代, Read, Newns^[27] 和 Coleman^[28] 等人发 展了所谓的隶玻色子 (slave boson) 近似方法,用于处 理单杂质 Kondo 问题,后来被推广到 Kondo 晶格模 型^[29~31]。如图 1(b) 所示,在这一近似下,局域的 *f* 轨道由于与导带电子的 Kondo 耦合被重整化到费米面 附近,形成平坦的 *f* 能带,进而与导带发生杂化,形 成杂化能带,其准粒子具有较大的有效质量。这一简 单的杂化图像可以解释光电导中的杂化能隙等一些实 验现象,但忽略了 *f* 电子强关联多体作用导致的复杂 行为如量子临界现象等。要描述这些现象,必须要考 虑*f* 电子之间的关联。清华大学的张广铭等人^[32,33] 在 这一方面作了很多工作,他们推广了平均场方法,考 虑进*f* 电子之间的磁性关联及超导配对,得到 Kondo 单态和磁有序态可以共存等重要结论。

超越简单平均场近似的理论工作目前主要有两类: 一类是基于强关联方法的数值计算,如斯其苗等人利 用扩展动力学平均场方法 (EDMFT)研究 Kondo 晶格 模型,解释 YbRh₂Si₂等材料中发现的局域量子临界 现象^[34],Kotliar等人结合密度泛函理论 (DFT)和动 力学平均场方法 (DMFT)研究 CeIrIn₅等材料,以解 释 f 电子随温度降低从局域到巡游的转变过程^[35,36], Assaad 等人也利用辅助场量子蒙特卡洛方法 (AFQM-C)研究了二维半满 Kondo 晶格模型的基态相图和有



图 1. (a) 重费米子 Doniach 相图。随着 Kondo 耦合系数 J 的增加, Kondo 效应增强, RKKY 相互作用逐渐被抑制, 体系逐渐从反铁磁相 (AFM) 过渡到费米液体 (Fermi Liquid)。(b) 重费米子杂化图像。局域的 f 电子能带由于 Kondo 耦合被重整化到费米面附近,与导带杂化形成比较平坦的 杂化能带

限温度的自旋及电荷动力学^[37]等;另一类是在平均场 近似基础上引入高阶的量子涨落效应,如 Senthil 等 人^[38]和 Pépin 等^[39]考虑了 U(1)规范涨落和 Kondo 玻 色子涨落对量子临界行为的影响,Abrahams 和 Wölfle 提出了临界准粒子理论,以解释 YbRh₂Si₂ 等重费米 子金属中的量子临界标度律^[40~42]等。

这些工作从不同角度研究重费米子物理, 但迄今 为止还没有一个能够比较全面地解释重费米子物理的 理论。如何系统梳理五花八门的实验现象,辨析背后 物理的共性和个性,是理解重费米子物理的关键。考 虑到这一点,我们采取了不同的思路,结合实验探索 重费米子材料中具有普适性的物理行为。我们认为, f 电子同时具有局域和巡游的二重行为, 这种二重性 可能是导致重费米子材料中丰富多变的演生现象的根 本原因。在此基础上,我们发展了重费米子的唯象的 二流体理论, 较好地解释了许多先前无法解释的实验 现象,形成了对重费米子物理的一些新的认识。这篇 文章将介绍相关的研究工作和最新进展: 第 II 部分从 一般的角度介绍凝聚态物理中的二流体现象,第 III 部分详细论述重费米子二流体理论的基本框架和内容, 第 IV 部分介绍最新的实验验证, 第 V 部分讨论二流 体现象的微观理论探索,最后是一个简短的总结和展 望。

II. 二流体理论的历史背景

二流体图像最早用于描述超导和液氦超流现象。 1934年,荷兰物理学家Gorter和Casimir提出了超导 电性的二流体唯象模型^[43],认为超导体中存在正常电 子和超流电子两种电子,两者互相渗透而又独立运动。 正常电子和金属中的自由电子一样受到晶格和其他电 子的散射,不形成超导;超流电子则不受散射,贡献电 流而不产生电阻。超导体内稳定电流的存在要求超导 电子不能被外电场加速,因此超导体内电场为零,即 使正常电子也不贡献电阻,不产生能耗,从而解释了 超导的零电阻行为。

液氮超流现象发现后,匈牙利科学家 Tisza 于 1938 年提出了超流相 (⁴He II) 的二流体模型,苏联 科学家 Landau 随后作了改进^[44]。氦元素原子核内有 两个质子,存在氦 3 和氦 4 两种同位素。氦 4 包含两个 中子,是玻色子,在临界温度 $T_{\lambda} = 2.18$ K 以下发生玻 色-爱因斯坦凝聚,体系从正常流体的 ⁴He I 相转变为 无粘滞的超流体 ⁴He II 相。二流体模型认为 ⁴He II 相 由两种流体组成,分别对应于基态的超流成分和由元 激发组成的正常成分。在 T_{λ} 温度以上,即 ⁴He I 相, 所有流体都为正常流体;在 T_{λ} 温度以下,正常流体成 分随温度降低逐渐转变为超流成分,最终在绝对零度 时完全超流。⁴He II 的物理性质由两种成分共同决定, 成功解释了 ⁴He II 毛细管实验中呈现出的超流现象、 圆盘实验中呈现出的阻尼运动、以及机械致热效应等 看似互相矛盾的各种奇异现象。

近些年来,强关联电子系统中的二流体现象也逐渐引起了人们的关注。2004年,Nakatsuji等人在分析重费米子材料 Ce_{1-x}La_xCoIn₅的比热和磁化率数据时,发现 *f* 电子的磁性比热和磁化率均可以分为两个部分,如比热可以写为^[45]:

$$C_{\text{MAG}}/T = [1 - f(T)](C_{\text{KI}}/T) + f(T)(C_{\text{HF}}/T),$$
 (3)

其中 C_{KI} 为实验测得的稀磁极限下 (x = 0.97,0.98)的 比热, C_{HF} 为巡游重电子的比热贡献, f(T) 是两种贡 献的相对权重。据此,他们提出 f 电子的行为可以用 一个类似的二流体模型描述。同年,Curro 等人^[46] 发 现这一模型也可以用来解释奈特位移对静态磁化率线 性关系的反常偏离。2008 年,Yang 和 Pines 等人^[47,48] 发现在奈特位移、霍尔系数、点接触谱等多种物理量 中均具有普适的温度演化行为。他们随后对二十多种 重费米子材料的不同实验结果,如电阻、磁化率、核磁 共振 (NMR)、霍尔系数、光电导等,进行了系统分析, 发现这些结果中的反常行为均起源于巡游重电子的演 生行为,可以用二流体模型统一解释。2012年,他们 进一步发展了这一想法,提出了比较系统的二流体唯 象理论框架^[49],给出了两种流体更为具体的描述,即 由部分杂化的局域 *f* 磁矩构成的自旋液体和由集体杂 化形成的巡游重电子,认为两种流体的共存与竞争是 描述重费米子物理的本质,并在此基础上定量地解释 了众多实验现象,包括低温磁性序与超导共存、量子 临界行为等等。

铜氧化物和铁基超导材料的正常态也具有类似 的二流体行为。上世纪 90 年代前后, Johnston^[50] 及 Nakano 等^[51]发现 La_{2-r}Sr_rCuO_{4-n} 的磁化率呈现 普适的标度行为; 2006 年, Barzykin 和 Pines 基于 这些实验,提出铜基超导的正常态也可以描述为两种 流体,即由局域磁矩形成的自旋液体和由巡游准粒子 形成的费米液体[52~54]。他们由此解释了铜氧化物中 的 NMR 等系列实验结果,并预言赝能隙现象与最近 邻局域磁矩间的反铁磁耦合存在密切关系。铁基超导 材料中正常态电子的二流体行为的实验证据主要来 源于 NMR 实验和非弹性中子散射 (INS) 实验。中国 人民大学的于伟强研究组通过对 Tl_{0.47}Rb_{0.34}Fe_{1.63}Se₂ 和 NaFe0.94Co0.06As 等铁基超导材料的奈特位移及自 旋-晶格弛豫率的测量分析[55,56],发现体系中存在类 似的由巡游电子和局域磁矩构成的两种共存流体:中 国科学院物理研究所的戴鹏程研究组[57,58]则在掺杂 的 BaFe₂As₂ 的中子散射实验中,发现了同时存在的由 巡游电子产生的低能激发和由局域磁矩产生的高能激 发,提出超导电性可能起源于高能磁激发诱导的低能 巡游电子配对。最近,清华大学的翁征宇研究组^[59]也 从理论上探讨了铁基材料中的二流体现象,认为体系 中同时存在局域磁矩形成的自旋液体和巡游电子,二 者之间通过洪德 (Hund) 耦合相互影响,产生了丰富的 物理现象。

这些工作表明,二流体现象是强关联电子系统中 普遍存在的现象,可能反映了强关联电子的本质物理 性质,是发展强关联电子理论要考虑的一个重要因素, 值得理论和实验的深入探讨。

III. 重费米子二流体理论

在这一章中,我们将详细介绍 Yang 和 Pines 等人 发展的重费米子二流体理论^[47~49],分为三个部分:二 流体基本模型(A节);正常态反常物性(B节)和对 低温反铁磁、超导等有序态的解释(C节)。

A. 模型

重费米子材料中 f 电子的局域和巡游的二重性 质在实验上有很多表现,这些实验现象构成了二流体 理论的物理基础。以 CeRhIn₅ 为例,在一定的压力 区间内同时存在局域反铁磁序与超导,核四极矩共振 (NQR)实验^[60] 证实两种序微观共存,Ce³⁺离子上 的一个 f 电子同时参与反铁磁和超导两种宏观量子态, 表现出局域和巡游的二重性。在二流体理论中,这种 局域和巡游的二重性被简化描述为由 f 电子形成的两 种近似独立的流体,一种是由局域自旋构成的自旋液 体,另一种是由巡游重电子构成的 Kondo 液体。



图 2. Kondo 晶格模型示意图

从 Kondo 晶格模型出发,这一图像有着自然的 物理起源。如图 2 所示, Kondo 晶格模型天然包含两 种组分,即局域的 f 电子磁矩和巡游的导带电子。高 温时,局域磁矩和导带电子之间的散射很弱,两种组 分近似独立:随着温度降低,两者之间的有效耦合逐 渐增强,导带电子由于受到自旋晶格的相干散射,运 动变得迟缓, 表现出重电子的行为; 另一方面, 晶格 自旋也受到导带电子的屏蔽,有效磁矩被削弱,发生 重整化效应。整个体系可以近似看作是缓慢运动的重 电子和被集体杂化修正的晶格自旋液体两种流体的微 观均匀混合。一般情况下,两种效应同时发生并相互 纠缠,两种组分不能视作独立的流体。但是如果两种 流体的运动在空间(动量)或时间(能量)上具有不 同的特征尺度,则类似于固体中区分晶格与电子运动 的 Born-Oppenheimer 近似,就可以将两者近似视作不 同的流体,加以区分处理。

重电子在物理上对应于导带电子与晶格自旋涨落

耦合形成的复合粒子。f 电子从局域到巡游的转变不是 相变,而是在广阔温度区间内发生的渐进行为。在这 个温度区间内,f 电子与导带电子发生集体杂化,由于 量子纠缠而形成了复合的巡游重电子态,导致 f 电子 逐渐退局域化,表现出巡游和局域的二重性质。Yang 和 Pines 发现 f 电子从局域到巡游的转变随温度具有 普适的演化行为,其中参与形成 Kondo 液体的 f 电子 权重为^[47]:

$$f(T) = f_0 \left(1 - \frac{T}{T^*} \right)^{3/2}, \tag{4}$$

其中 f₀ 反映了集体杂化的效率,依赖于外界参数如压力、磁场等;特征温度 T* 是一个重要的参量,后面会详细讨论。Kondo 液体中准粒子的有效质量随温度演化遵从:

$$m_{\rm KL}^* = m_h \left(1 + \ln \frac{T^*}{T} \right),\tag{5}$$

其中 m_h 是准粒子在 T* 处的有效质量。两式结合给出 了巡游重电子的态密度随温度演化的普适标度律:

$$\rho_{\rm KL} \propto \left(1 - \frac{T}{T^*}\right)^{3/2} \left(1 + \ln \frac{T^*}{T}\right),\tag{6}$$

这种普适性表明 f 电子从局域到巡游的转变过程具有 不依赖于材料细节的普适物理规律。后面我们会看到, 重电子这一性质在很多实验中都有表现。

与巡游部分不同,局域自旋液体的行为则依赖于 晶格结构等材料细节。在平均场近似下,考虑集体杂 化对 *f* 电子磁矩的屏蔽作用,局域自旋液体的动力学 磁化率 χ_l 可以近似写为^[49]

$$\chi_l(\boldsymbol{q},\omega) = \frac{f_l\chi_0}{1 - zJ_q f_l\chi_0 - \frac{i\omega}{\gamma_l}},\tag{7}$$

其中 $f_l = 1 - f(T)$ 为 f 电子参与形成局域自旋流体的 权重, $\chi_0 = C/T$ (C 是居里常数)是孤立的 f 电子局 域磁矩的磁化率, z 为配位数, γ_l 为自旋弛豫率, J_q 是局域 f 磁矩间的 RKKY 交换耦合系数,其具体形式 依赖于晶格结构,不具有普适性。

可以想象在实际材料中,两种流体彼此约束,既 共存又竞争,随温度或其他外界参量具有不同的变化 行为,两种行为的叠加导致实验的观测结果复杂多变, 难以总结出一般性的规律,长期以来无法给出比较系 统的解释。

为了理解 Kondo 液体的物理起源, Yang 等人 对 (6) 式中的特征温度 T* 进行了系统深入的分析^[48]。

他们发现在大部分重费米子材料中,*T** 比相应的单杂 质 Kondo 温度 *T*_K 高一个数量级,意味着 *T** 应有不 同于 Kondo 温度的物理起源。基于实验考虑,Yang 等人猜测 *T** 源自局域 *f* 磁矩间的 RKKY 相互作用。 图 3 给出了十多种重费米子材料中的 *T** 与单杂质 *T*_K 的对比^[48]。取 *T** = $cJ^2\rho$ (其中 ρ 是导带电子态密度, *c* 是依赖于材料的常数, *k*_B 为 Boltzmann 常数,可以 设为 1),则由 *T*_K = $\rho^{-1}e^{-1/J\rho}$,必然要求

$$J\rho = -1/\ln(T_{\rm K}\rho) = \sqrt{c^{-1}T^*\rho},$$
 (8)

其中 ρ 可以由对应的非磁性材料(如 CeCoIn₅ 对应 LaCoIn₅)的低温比热系数 γ 得到,Kondo 温标 $T_{\rm K}$ 则可以通过稀磁极限下的电阻、比热等测量结果,在考虑到掺杂引起的体积修正后估计。如 Ce_{0.01}La_{0.99}CoIn₅,其中 Ce 离子间的 f 电子自旋相互作用可以忽略,从而表现为单杂质Kondo 效应,通过适量加压可以对体积改变进行修正。由于 J 与 $T_{\rm K}$ 之间是对数依赖关系, $T_{\rm K}$ 的实验误差对 J 的估计值影响很小。



图 3. 一些重费米子材料的 T^* 、 $T_{\rm K}$ 和态密度 ρ 的关 系^[48]。其中虚线由公式 (8) 给定,实线为 CeRhIn₅ 从 1 GPa 到 5 GPa 的结果,图中误差表示 T^* 估计值的不确定性

从图 3 中可以看出,这些材料虽然具有不同的晶格结构和晶体场基态,但是实验所得的 T^* 和 T_K 都近 似满足公式 (8),并且具有相近的比例系数: $c \approx 0.45$ 。特别是图 3 中还给出了 CeRhIn₅ 随压力变化从 1 GPa 到 5 GPa 的数据 (1GPa 以下由于晶体场效应的影响无法从电阻准确估计 T^*),虽然 T_K 改变了近两个数量级,所得曲线仍然和公式 (8)一致,支持特征温标 T^* 起源于 RKKY 相互作用,而非传统所认为的 Kondo 温度。

以上结果表明, f 电子间的磁交换作用在 Kondo 晶格物理中发挥了关键作用,把局域的杂化效应传递

到了整个晶格,导致了 f 电子与导带电子之间的非局 域纠缠和集体响应。由此产生的重电子复合态不同于 单杂质 Kondo 共振态在空间上的简单叠加,而是晶格 自旋和导带电子集体协同的结果,包含了晶格自旋之 间的关联效应,是一种全新的量子物态。

B. 正常态物性

二流体理论可以定性或定量地解释重费米子正常 态的一些反常现象,如:

- 1. 磁化率低温下偏离居里--外斯定律;
- 核磁共振奈特位移低温下偏离对静态磁化率的线 性关系;
- 3. 自旋--晶格弛豫率随温度发生斜率的改变;
- 4. 磁熵低温下被抑制;
- 5. 电阻率温度曲线上的相干峰;
- 6. 点接触谱的低温非对称线型(Fano线型);
- 7. 拉曼谱线型的低温变化。

这些现象在重费米子材料中具有普遍性,很早已 经在实验上发现,但是一直缺乏比较系统的理论解 释。比如电阻率温度曲线上的相干峰一般归结为晶 格 Kondo 效应,而磁化率在相似温度处对居里–外斯 定律的偏离则在文献中普遍被解释为由晶体场效应导 致。

2008 年, Yang 等人^[48] 分析了近三十种重费米子 材料的实验数据,发现这些反常现象均发生在共同的 特征温标 *T** 处,因而应有共同的物理起源。在这一节 中,我们将利用二流体理论对这些反常现象给出一个 比较系统的解释。

1. 磁性质

a. 磁化率和奈特位移反常

在 NMR 实验中,带自旋的原子核的能级在外加 磁场下会出现塞曼(Zeeman)劈裂,但是核自旋与周 围极化电子的自旋之间的超精细耦合会使得能级出现 额外的改变,即奈特位移。一般来说,金属中奈特位 移 *K* 和电子的磁化率 χ 呈线性关系: $K = K_0 + A\chi_o$ 其中 *A* 为与温度无关的超精细耦合常数, K_0 为常数 项,通常起源于轨道的贡献^[61]。但是在重费米子材料 中,以图 4 所示的 CeCoIn₅ 为例^[62],这一线性关系 只在高温时成立,当温度降到 *T** 以下时就发生了偏离。由于在重费米子材料中,对磁化率的主要贡献来源于 *f* 电子,导带电子的贡献可以忽略,文献中往往认为是晶体场效应引起的 *f* 电子的轨道分布随温度发生了变化,导致了这一反常偏离。



图 4. CeCoIn₅ 不同原子核上测量的奈特位移和磁化率(实 线)的对比,在 $T^* \approx 50$ K 时二者偏离线性关系^[62]

二流体理论对此给出了新的解释^[46,47]:假设 Kondo 液体和自旋液体与原子核之间具有不同的超精细耦 合常数 A 和 B,则它们对磁化率 χ 和奈特位移 K 就 会有不同的贡献:

$$\chi = f(T)\chi_{\rm KL} + [1 - f(T)]\chi_{\rm SL} , \qquad (9)$$

和

$$K = K_0 + Af(T)\chi_{\rm KL} + B[1 - f(T)]\chi_{\rm SL}, \qquad (10)$$

其中 χ_{KL} 和 χ_{SL} 分别表示 Kondo 液体和自旋液体的 摩尔磁化率。在 T^* 以上,只有局域磁矩构成的自旋 液体 (导带电子的贡献为常数,且比较小可以忽略), f(T) = 0,因此奈特位移与磁化率之间显示为线性关 系 $K = K_0 + B\chi$ 。而在 T^* 以下,Kondo 液体出现, 由于 $\chi_{\text{KL}} \neq 0$,奈特位移与磁化率之间不再具有线性 关系,出现反常:

$$K_{\text{anom}} = K - K_0 - B\chi = (A - B) f(T)\chi_{\text{KL}}.$$
 (11)

如果我们进一步假设 Kondo 液体贡献的总磁化 率 *f*(*T*)χ_{KL} 正比于其态密度,则奈特位移反常具有 如公式 (6)所示的普适温度依赖行为。图 5 比较了十 几种材料中奈特位移反常的实验数据^[47],我们惊奇地 发现,奈特位移反常随温度变化的确呈现普适的演化 关系,不依赖于材料的细节,在很大的温度区间内符 合二流体理论的预言。这种不依赖于具体材料的晶格 和电子结构的普适行为意味着奈特位移反常与晶体场 效应无关,从而为二流体理论提供了重要的实验支持,同时表明巡游重电子的产生遵循某种与具体材料无关的普遍性的组织原则。



图 5. 一些重费米子材料中奈特位移反常随温度的演化^[47]。 实线为 Kondo 液体的态密度

b. 自旋-晶格弛豫率

按照一般的 Moriya 公式^[63], NMR/NQR 实验中的自旋--晶格弛豫率 $1/T_1$ 与动力学磁化率 $\chi(q, \omega)$ 之间 满足如下关系:

$$\frac{1}{T_1} = \gamma^2 T \lim_{\omega \to 0} \sum_{\boldsymbol{q}} F(\boldsymbol{q})^2 \frac{\mathrm{Im}\chi(\boldsymbol{q},\omega)}{\omega}.$$
 (12)

其中 γ 为原子核的旋磁比, *F*(*q*) 为与晶格相关的结构 因子。可以想象,两种流体的存在意味着自旋–晶格弛 豫率也有两个来源,与巡游重电子和晶格自旋液体的 耦合均会导致核自旋的弛豫^[64],

$$1/T_1 = [1 - f(T)]/T_{1\rm SL} + f(T)/T_{1\rm KL}, \qquad (13)$$

其中 T_{1SL} 和 T_{1KL} 分别对应晶格自旋液体和巡游重电 子的本征贡献。图 6 给出了 CeCoIn₅ 的自旋-晶格弛豫 率 $1/T_1$ 在不同压强下的测量结果^[64]。 实验发现,在 很多重费米子材料中, T_1 在 T^* 之上都不随温度变化, 意味着 T_{1SL} 是与温度无关的常数。将这一结论推广到 低温,利用以上公式对 CeCoIn₅ 的实验数据进行分析 发现, $T_{1KL}T \sim T + T_0$,其中 T_0 为常数。这一结果类 似于在铜氧化物超导中发现的二维反铁磁量子临界涨 落的行为,其中 T_0 表征系统偏离量子临界点的距离。 图 6 中实线为采用上述公式拟合所得曲线,我们看到 理论与实验观测结果吻合;点线是晶格自旋液体的贡 献,低温下对实验值的偏离反映了重电子的贡献。



图 6. CeCoIn₅ 在不同压力下的自旋--晶格弛豫率随温度的变 化^[64]。实线为理论拟合,虚线为局域磁矩的贡献。插图给出 了 T_1 (T^*) 随 T^* 的变化



图 7. 一些重费米子材料的自旋-晶格弛豫率 T_1^{-1} 与 $(1 - T/T^*)^{3/2}$ 的线性关系^[65]。箭头表示对线性关系的偏离

在量子临界点附近, $T_0 \approx 0$,因而在很大的温度 区间里 ($T \gg T_0$), $T_{1\text{KL}}$ 近似为常数。结合 f(T)的公 式,二流体理论预言 $1/T_1$ 也具有普适的温度演化^[65]:

$$\frac{1}{T_1} = \frac{1}{T_{1\text{SL}}} + \left(\frac{1}{T_{1\text{KL}}} - \frac{1}{T_{1\text{SL}}}\right) f_0 \left(1 - \frac{T}{T^*}\right)^{3/2}.$$
 (14)

图 7 将几种材料在量子临界点附近的 1/T₁ 与 (1 – T/T*)^{3/2} 对比^[65],发现这些材料在很大温度范围内

的确满足以上公式预言的线性关系,进一步验证了自旋--晶格弛豫率的二流体公式。

2. 热性质

温度高于 T* 时, f 电子完全局域化, 假若基态为 二重态,则磁熵接近饱和值 Rln2(R 为气体常数)。 温度低于 T* 时, 部分 f 电子与导带电子集体杂化(纠 缠),形成巡游重电子^[49]。因而在二流体理论中,总磁 熵应该是两种流体的贡献之和:

$$S(T) = [1 - f(T)] S_{\rm SL}(T) + f(T) S_{\rm KL}(T).$$
(15)

公式中 S_{SL} 和 S_{KL} 分别代表局域磁矩和巡游重电子的本征磁熵。对温度求导数得到比热系数,

$$\gamma = \frac{\mathrm{d}S(T)}{\mathrm{d}T}$$

$$= [1 - f(T)] \frac{C_{\mathrm{SL}}(T)}{T} + f(T) \frac{C_{\mathrm{KL}}(T)}{T}$$

$$+ \frac{\mathrm{d}f(T)}{\mathrm{d}T} \left(S_{\mathrm{KL}} - S_{\mathrm{SL}}\right). \tag{16}$$

与公式 (3) 不同,此表达式中多出了 f(T) 的温度 导数项,反映了两种流体的权重随温度变化的效应。 公式中巡游重电子的比热系数满足普适的标度关 系 $C_{\text{KL}}/T \propto [1+\ln(T^*/T)]$,对温度积分可得 $S_{\text{KL}}(T)$ $\propto T[2 + \ln(T^*/T)]$ 。假设 f 电子从局域磁矩到巡游 重电子的转变是连续的,不存在熵变,则 $S_{\text{KL}}(T^*) =$ $S_{\text{SL}}(T^*) = R \ln 2$,可以得到 T^* 以下重电子的磁熵 为^[49]:

$$S_{\rm KL}(T) = R \ln 2 \frac{T}{2T^*} \left[2 + \ln \left(\frac{T^*}{T} \right) \right].$$
 (17)

如果低温存在磁性等长程序,则 Kondo 液体的普适标度律不再成立,以上公式在低温下需要修正。同样若f电子完全退局域化,在低温下形成重费米液体,则比热系数中的对数发散会被截断,假设截断温度为 T_L ,则 $f(T < T_L) = 1$,在此温度之下体系中只存在 Kondo 液体,总的低温比热系数可以近似估计为

$$\gamma_h \sim \frac{S_{\rm KL}\left(T_{\rm L}\right)}{T_{\rm L}} = \frac{R\ln 2}{2T^*} \left[2 + \ln\left(\frac{T^*}{T_{\rm L}}\right)\right],\qquad(18)$$

其中 $T_{\rm L}$ 的具体数值可由实验确定(见 III. C 节)。一般情况下,必须要考虑到局域磁矩的贡献。如果我们取一个粗糙的近似, $S_{\rm SL}(T) = R \ln 2$,认为正常态下局域磁矩的内禀熵不随温度变化,则

$$S(T) = R \ln 2 \left\{ [1 - f(T)] + f(T) \frac{T}{2T^*} \left[2 + \ln \left(\frac{T^*}{T} \right) \right] \right\}.$$
(19)

结合公式 (16) 可以计算出总的比热系数。图 8 对比了 几种重费米子材料的低温比热系数的实验测量结果与 理论预言值,两者之间总体上符合^[49]。



图 8. 几种重费米子材料的比热系数的理论与实验对比^[49]

3. 电输运性质

(1) 霍尔系数

重费米子材料的霍尔系数具有非常复杂的温度依赖行为,长期以来缺乏系统的理论解释。1987年,Fert和 Levy 提出晶格上局域自旋会对导带电子产生斜散射 (skew scattering)^[66],导致霍尔系数出现反常温度依赖: $R_s = r_l \rho \chi$,其中 r_l 是常数, ρ 为纵向电阻, χ 是磁化率。总的霍尔系数为: $R_H = R_0 + R_s$,其中 R_0 来源于导带电子的正常贡献。Fert和 Levy 的理论很好地解释了霍尔系数在高温区的温度变化,但是却无法解释 T^* 以下的行为。

2004 年, Hundley 等人发现 CeMIn₅ (M=Co, Rh, Ir) 系列材料的霍尔系数在高温几乎不随温度变化,意味着斜散射的效应可以忽略,即 $r_l \approx 0$,但是在低温下却出现反常增大^[67]。2008 年,Yang 和 Pines 分析了他们的数据^[48],发现霍尔系数的反常增加恰好出现在相干温度 T^* 以下,并且其温度依赖行为与二流体理论预言的重电子普适标度律一致,如图 9 所示^[49],表明 Kondo 液体对霍尔系数的贡献不遵循 Fert 和 Levy提出的斜散射规律,而是与电阻无关,只与 Kondo 液体的磁化率成正比。2009 年,Yang 由此提出重费米子霍尔系数的二流体公式^[68]:

$$R_H = R_0 + r_l \rho \chi_l + r_h \chi_h. \tag{20}$$

公式右边的 $r_l \rho \chi_l$ 和 $r_h \chi_h$ 两项分别是局域磁矩和 重电子的贡献,具有不同的规律,其中 $\chi_l = [1 - f(T)]\chi_{SL}$ 和 $\chi_h = f(T)\chi_{KL}$ 为两种流体各自对磁化



图 9. CeMIn₅ 和 Ce_{1-x}La_xCoIn₅ 的霍尔系数随温度变化的 标度行为^[49]



图 10. URu₂Si₂ 霍尔系数随温度的变化^[68]。实线为理论拟 合,虚线代表 Kondo 液体和局域磁矩斜散射的贡献。插图 中 χ 、 χ _l、 χ _h 对应总磁化率和二流体分析给出的局域磁矩及 重电子对磁化率的贡献

率的贡献, 实验上可以通过对奈特位移与磁化率的联合分析确定。高温时只有 f 局域磁矩,因而霍尔系数与磁化率和电阻的乘积成线性关系, $R_s^l = r_l \rho \chi$,回归到 Fert 和 Levy 的斜散射公式;而在 T^* 以下的相干区,新出现的巡游重电子的不同贡献, $R_s^h = r_h \chi_h$,导致了对 Fert 和 Levy 的公式的偏离。图 10 给出了对 URu₂Si₂ 的实验数据的理论拟合^[68],公式中的 R_0 和 r_l 可以通过高温 ($T > T^*$) 拟合得到,因而低温下只有一个自由参数 r_h ,但在 18.5 K 低温隐藏序出现以上的整个温度区间内都给出了与实验定量符合的结果。

可以看到,两种流体对霍尔系数的贡献具有非常 不同的温度依赖性,因而总的霍尔系数表现出复杂的 温度依赖行为,缺乏简单的规律性,阻碍了理论认识 的发展。在 CeMIn₅ 系列材料中,局域磁矩的贡献由 于未知的原因被抑制,重电子 Kondo 液体的贡献才显 现出来,展现出简单的标度行为,使得对霍尔系数的 进一步分析成为可能。

(2) Fano 干涉效应

在点接触谱 (PCS) 和扫描隧道谱 (STS) 中,微分 电导 dI/dV 可以反映出体系中的集体激发和载流子 的态密度等重要性质。对重费米子材料的 PCS 的实验 研究已经有三十年的历史^[69],STS 的研究在最近几年 也有突破性的实验进展^[70~72],都发现电导谱在低温下 普遍呈现非对称的线型 (如 CeCu₆^[73], CeCoIn₅^[74,75] 等)。

2009 年, Yang 基于导带电子和 f 电子的杂化图像 在理论上预言了重电子的 Fano 干涉效应^[76]: 低温下, 重费米子体系中的导带电子与 f 电子局域磁矩集体杂 化,使得 f 电子产生退局域化,从而探针中的电子可 以通过两个通道进入重费米子材料,或直接隧穿到导 带,或隧穿到晶格上的 f 能带。如图 11 所示,类似于 光的双缝干涉效应,入射电子在这两个通道之间也会 发生干涉^[77]。



图 11. 重费米子 Fano 干涉效应示意图。*t_f*和 *t_c*分别表示扫 描隧道显微镜(STM)探针中的电子进入 *f* 能带和导带两个 不同通道的隧穿系数

理论上,低温下导带电子与 f 电子之间发生集体 杂化,将 f 电子的能级重整化到了费米能级附近,在 隶玻色子方法近似下,体系的低能有效哈密顿量可以 写为

$$H = \sum_{k,m} \left[\varepsilon_k c^{\dagger}_{km} c_{km} + \varepsilon_0 f^{\dagger}_{km} f_{km} + V \left(c^{\dagger}_{km} f_{km} + H.c. \right) \right], \qquad (21)$$

其中 c_{km} 和 f_{km} 是第 m 个轨道(自旋)上的导带电 子和 f 电子的湮灭算符, ε_0 和 V 是重整化后的 f 能级 及其与导带电子的杂化强度。假设金属探针与样品间 的耦合可通过以下哈密顿量来描述,

$$H_t = \sum_{k,m} \left(M_{fkm} f_{km}^{\dagger} t + M_{ckm} c_{km}^{\dagger} t + H.c. \right), \quad (22)$$

其中 *t* 是探针上电子的湮灭算符, *M* 是隧穿矩阵, 简 单计算可得体系的微分电导为

$$G(V,T) = g_0 + \int g_I(E) T(E) \frac{\mathrm{d}f(E-V)}{\mathrm{d}V} \mathrm{d}E$$

$$\approx g_0 + g_I T(V), \qquad (23)$$

其中 f(E) 是费米分布函数, g_0 为背景电导, T(E) 具有 Fano 线型

$$T(E) = |q - \tilde{E}|^2 / (1 + \tilde{E}^2),$$
 (24)

其中参数 $q = M_{fkm}/M_{ckm}$ 代表探针与两个不同通道 间的有效耦合强度的比率, $\tilde{E} = (E - \varepsilon_0)/V$, $g_I(E)$ 是一个与能量有关的系数:

$$g_I(E) \propto \rho_t \sum_{ikm} |M_{ckm}|^2 \delta(E - \varepsilon_{ik}),$$
 (25)

其中 ρ_t 为金属探针的态密度, ε_{ik} 为第 *i* 个杂化能带。 在 STS 实验中,由于空间上的局域性,每个 *k* 点的隧 穿几率相同, *M_{ckm}* 无动量依赖性,所以 *g_I*(*E*) 正比于 态密度,从而可以明显地看出导带与 *f* 能带之间的杂 化能隙。而在 PCS 实验中,不同的 *k* 点具有不同的隧 穿几率, *g_I*(*E*) 是动量空间的加权平均,具有比较复杂 的形式,不能简单地反映态密度的信息,再加上热或 关联效应,电导曲线上的能隙往往被抹平。假设 *g_I*(*E*) 是常数,则如图 12 所示^[62],在 *q* = 0 或 ∞ 的极限下, 探针只与导带或 *f* 电子单独耦合,微分电导 d*I*/dV 曲 线在零偏压处出现共振峰或谷;而对一般的 *q*,两个通 道之间存在干涉,会导致特定偏压下电导被抑制,出 现典型的非对称 Fano 线型。

图 13 给出了对 CeCoIn₅ 的 PCS 实验数据的理 论拟合,在考虑了偏压和温度对平均场参数的影响后, 利用 Fano 线型公式很好地解释了 PCS 随温度和偏压 的变化^[76]。在一些材料中,电导曲线在很高温度时已 经显现出非对称性,这可能是由于导带电子态密度的 非对称性或晶体场效应导致。对 YbAl₃ 和 CeRhIn₅ 等 材料的实验分析表明^[48],非对称性在 *T**之下伴随重 电子的出现才变得更为显著。Fano 效应揭示了巡游重 电子作为复合粒子的物理本质,与二流体的理论预期 一致。

在 Yang 的工作之后,有更多的理论^[78,79]和实 验^[72,80~82]都证实了重费米子材料中的 Fano 干涉现象,



图 12. 微分电导随偏压的 Fano 曲线示意图^[62], q 是 Fano 参数

特别是在 URu₂Si₂ 隐藏序^[83]和 SmB₆ 表面态^[84,85]的 研究中也发现了 Fano 线型,为理解两种复杂现象的物 理机理提供了重要信息。



图 13. CeCoIn₅ 在不同温度下的点接触电导谱的理论拟合 (实线)^[76]

C. 低温有序态

二流体图像成功描述了重费米子材料正常态的物 理性质,解释了许多令人困惑的实验现象。2012年, Yang 和 Pines 考虑到两种流体在低温下的不稳定性, 将体系低温下磁或超导等基态长程序与二种流体在正 常态的温度演化联系起来^[49,86],提出了新的二流体理 论框架,更加全面地描述了重费米子物理。

图 14 给出了二流体理论预言的普适相图^[49]:在特征温度 *T**以下广阔的温度区间和压强范围内同时存在



图 14. 二流体理论预言的重费米子相图^[49]

着重电子 Kondo 液体和局域自旋液体,两种流体既共存又竞争,在低温下由于各自磁或电的不稳定性而形成各种不同的有序态,如自旋液体可以产生局域的磁性序,Kondo液体可以形成超导、巡游磁性序或费米液体态等等。在二流体理论框架下,杂化效率 f₀ 是调节基态的重要参量,受到外界压力或磁场的调控。f₀的大小决定了f 电子巡游或局域部分的权重:

- 当 f₀ > 1 时,杂化较强,所有 f 电子在一定温度 T_L 之下都转化为巡游重电子,在更低温度时形成费米液体或超导。T_L 即为退局域化温度,满足 f (T_L) = 1,其大小与 f₀ 相关。
- 2. 当 f₀ < 1 时,杂化较弱, f(T) 在零温时也小于 1,因而低温下一直存在由未杂化的 f 电子形成的局域磁矩。这些剩余磁矩受 RKKY 交换作用的影响,在有限温度 T_N 下会形成局域的磁长程序。实验表明,在反铁磁相变附近部分巡游重电子可能会发生重新局域化^[87,88],未重新局域化的巡游重电子在更低温度下有可能形成超导,导致超导与反铁磁共存。
- 3. f₀ = 1 时, f 电子在零温处完全退局域化,体系处于量子临界点附近,强烈的量子临界涨落可能会诱导巡游重电子发生超导配对。

杂化效率 f₀的大小也会影响到正常态,因而在二 流体理论中,低温基态与高温正常态的行为之间存在 密切关系。下面我们将结合图 14,从费米液体、磁有 序态、量子临界行为、超导四个方面介绍二流体理论 对重费米子低温有序态的理解。

1. 费米液体

如上所述,
$$f(T_{\rm L}) = 1$$
 定义了退局域化温度 $T_{\rm L}$,
 $T_{\rm L}(p) = T^*(p) \left[1 - f_0(p)^{-2/3} \right].$ (26)

在 $T_{\rm L}$ 之下所有的 f 电子都从局域磁矩转变为了巡游 重电子^[49]。上式要求 $f_0 \ge 1$: 当 $f_0 = 1$ 时, $T_{\rm L} = 0$, 实验表明此处费米面会发生突变^[89];而当 $f_0 > 1$ 时, $T_{\rm L} > 0$,费米面的变化是渐进的,在 $T_{\rm L}$ 附近存在很强 的涨落,巡游重电子受到强烈的散射,导致在 T_{L} 附近 表现为反常的费米液体行为,引起一系列的反常现象, 如电阻系数出现峰值(如 CeCoIn⁵^[90]),霍尔系数发生 较大的变化(如 YbRh₂Si₂^[91])等等。在更低温度 $T_{\rm FL}$ 下,才开始出现定义良好的准粒子,表现出传统的朗 道费米液体行为,即电阻呈现 T^2 的依赖关系。在此费 米液体区,二流体理论有一些定量的预言。图 8 对比 了一些材料中的低温比热系数,理论预期与实验结果 基本一致^[49]。

2. 磁有序态

在平均场近似下,局域自旋液体的磁化率可以用 公式(7)来描述。当 $f_0 < 1$ 时, $f_l(0) \neq 0$,零温下剩 余未杂化的局域磁矩可以形成磁有序态,转变温度 T_N 满足:

$$zJ_Q f_l(T_N) \chi_0(T_N) = 1,$$
 (27)

即,

$$T_{\rm N} = \eta T^* f_l \left(T_{\rm N} \right), \tag{28}$$

其中 Q 为磁性长程序的波矢,参数 $\eta = CzJ_Q/T^*$ 反 映了阻挫对 T_N 的影响, $f_l(T_N) = 1 - f(T_N)$ 则反映了 集体杂化对 T_N 的抑制。二流体理论进一步预言, f 电 子在形成磁性序时的有效局域磁矩被削减为,

$$\mu^2 = f_l \left(T_{\rm N} \right) \mu_0^2. \tag{29}$$

结合两式得到,

$$T_{\rm N} = \eta T^* \frac{\mu^2}{\mu_0^2}.$$
 (30)

以 CeRhIn₅ 为例,随着外加压力的增加, T^* 升高, 而 μ 变小,因此 $T_N(p)$ 有一个极大值,如图 14 所 示^[49]。图 15 给出了 CeRhIn₅ 的 T_N 和有效磁矩等随 压力变化的实验结果^[49],实线或虚线为理论拟合,二 者基本符合。



图 15. CeRhIn₅ 的 Néel 温度 T_N 和有效磁矩^[92,93]的理论拟 合 (线)^[49]

3. 量子临界行为

在量子临界区,体系的低能激发不仅仅包含了磁 性序参量的涨落,也包含了费米子自由度的低能激发, 呈现出复杂的反常量子临界现象,电阻、磁化率、比 热等物理量也随温度出现非常规的标度行为^[94,95],迄 今仍缺乏比较系统的理论解释。二流体理论包含局域 自旋的磁性涨落和费米面附近的巡游重电子,可以同 时处理两种自由度及其相互作用,有可能为理解重费 米子材料中的反常量子临界现象提供新的思路。在这 一节中,我们简要介绍一些相关的研究进展,主要是 量子临界点在磁场和外加压力下的移动,以及部分物 理量的标度行为。

我们首先讨论量子临界点在磁场和外加压力下的 移动。在一些重费米子材料如 CeCoIn₅ 和 YbRh₂Si₂ 中,实验表明^[90,96,97]反铁磁量子临界点会随外加磁场 改变,即临界压力 p_c 是磁场的函数,从而在 p - H 相 图上形成一条量子临界线,如图 16(a)和图 17(a)所 示^[98]。在二流体理论中,局域磁性序的量子临界点由 方程 $f_0(p, H) = 1$ 决定,此处退局域化温度 $T_L = 0$, f 电子的局域性完全被抑制,局域反铁磁序消失。对压 力和磁场作微扰展开,假设^[98]

$$f_0(p,H) = f_0(p) \left[1 + (\eta_H H)^{\alpha} \right], \qquad (31)$$

$$f_0(p) \approx 1 + \eta_p \left(p - p_c^0 \right),$$
 (32)

则量子临界点的位置满足:

$$p_{\rm c}\left(H\right) = p_{\rm c}^0 - \frac{1}{\eta_{\rm p}} \frac{\eta_{\rm H}^{\alpha} H^{\alpha}}{1 + \eta_{\rm H}^{\alpha} H^{\alpha}}.$$
 (33)

上式中 α 反映了磁场对杂化效率的修正, p_c^0 是零磁场下的量子临界压力, η_p 是材料决定的常数。通常而言,

对 Ce 基化合物, $\eta_{\rm p} > 0$, 外加压力对集体杂化起促进 作用; 而对 Yb 基化合物, $\eta_{\rm p} < 0$, 压力会抑制集体杂 化。在 CeCoIn₅ 中, NMR 实验发现特征温标 *T** 不随 磁场变化^[99], 因而磁场的效应主要体现在 f_0 的改变 上。

图 16(a) 和图 17(a) 给出了对 CeCoIn₅ 和 YbRh₂Si₂ 的量子临界线的理论拟合^[98],发现对 CeCoIn₅, $\alpha = 2$; 而对 YbRh₂Si₂, $\alpha = 0.8$ 。不同 的 α 值表明两种材料具有非常不同的量子临界行为。



图 16. (a) CeCoIn₅ 的 p - H 相图和对量子临界线的理论 拟合 (实线); (b) CeCoIn₅ 的 T - H 相图和对退局域化温 度 $T_{\rm L}(H)$ 的理论拟合 (实线)^[98]

在有限温度下,固定外界压力,可以得到退局域 化温度 T_L 随磁场的变化,即

$$T_{\rm L}(H) = T^* \left[1 - \left(\frac{1 + \eta_{\rm H}^{\alpha} H_{\rm QC}^{\alpha}}{1 + \eta_{\rm H}^{\alpha} H^{\alpha}} \right)^{2/3} \right], \qquad (34)$$

其中 H_{QC}^{α} 为该压力下的临界磁场。图 16(b) 和图 17(b) 给出了两个材料在常压下 T_{L} 随磁场的变化^[98],符 合二流体理论的预言(实线)。图 17 中还给出了 对 YbRh₂Si₂ 的反铁磁转变温度 $T_{N}(H)$ 和 $T_{N}(p)$ 的 理论拟合,也和实验定量符合。

Yang 和 Pines 进一步发现,量子临界点附近电子的有效质量和比热系数随磁场满足如下标度行为:

$$m^* = m_0 \left[\frac{T^*}{T_{\rm L}(H)} \right]^{\alpha/2},$$
 (35)

$$\gamma_{\rm QC}\left(H\right) = \gamma_0 \left[\frac{T^*}{T_{\rm L}\left(H\right)}\right]^{\alpha/2}.$$
 (36)



图 17. (a) YbRh₂Si₂ 的 p - H 相图和对量子临界线的理 论拟合(实线),插图为对反铁磁转变温度 $T_N(p)$ 的理论拟 合(实线); (b) YbRh₂Si₂ 的 T - H 相图和对退局域化温 度 $T_L(H)$ 及 $T_N(H)$ 的理论拟合(实线)^[98]

如果取 Kadowaki-Woods 比率 $A(H)/\gamma(H)^2$ 为常数 (其中 A(H) 为电阻系数: $\rho(H,T) = \rho_0 + A(H)T^2$), 则有

$$A(H) = \frac{A_0}{T^{*2}} \left[\frac{T^*}{T_{\rm L}(H)} \right]^{\alpha},$$
(37)

其中 A₀ 是与磁场无关的系数。图 18 给出了对 YbRh₂Si₂ 的电阻系数的理论拟合^[98],验证了以上公 式。



图 18. YbRh₂Si₂ 的电阻系数随磁场变化的实验与理论(实 线)比较^[98]

以上结果进一步验证了二流体理论。目前实验认为,CeCoIn₅中的量子临界点为自旋密度波 (SDW) 类型^[100],而YbRh₂Si₂则呈现非常规的局域量子临界行

为^[101]。这两类不同的量子临界行为体现在特征参数 α 的不同取值上,其物理意义有待更深入的研究。

4. 超导

在量子临界点附近,局域反铁磁序被抑制,其低 能量子临界自旋涨落可能诱导巡游重电子产生超导配 对^[102]。NMR 实验揭示了重电子的量子临界自旋涨落 在超导凝聚中发挥的关键作用。

以 CeCoIn₅ 为例,二流体分析发现^[64],NMR 奈特位移反常在超导温度 T_c 之上具有普适的 Kondo 液体标度行为,不依赖于实验中所测量的原子核,反映了重电子的本征温度演化;而在 T_c 之下,则出现 BCS 理论预言的 d 波超导的典型行为,表明低温超导相确实是重电子 Kondo 液体的凝聚。理论拟合得到的超导能隙 $\Delta(0)/T_c \sim 4.5$ 及比热跃变 $\Delta C/C \sim 4$,均和其他实验符合^[100,103]。同时,利用公式 (14) 对自旋–晶格弛豫率 $1/T_{1KL}$ 在 T^* 之下满足^[53,64]

$$T_{1\rm KL}T \propto (T+T_0), \qquad (38)$$

类似于铜基超导中的准二维磁性量子临界涨落,揭示 了 CeCoIn₅ 中重电子的隐藏的磁性量子临界行为。我 们认为这是导致重电子超导配对的微观根源。这一结 果与最近基于 STM、NMR 和中子散射实验进行的理 论分析一致^[104]。

在此基础上, Yang 和 Pines 推广了早期铜氧化物 高温超导中自旋涨落诱导超导配对的图像,并结合二 流体理论,提出重费米子超导转变温度 T_c 满足^[86]:

$$T_{\rm c}(p) = 0.14T_{\rm m}^* \exp\left(-\frac{1}{N_{\rm F}(p,T_{\rm c})V(p)}\right)$$
$$= 0.14T_{\rm m}^* \exp\left(-\frac{1}{\eta\kappa(p)}\right)$$
(39)

其中 $\kappa(p) = N_{\rm F}(p, T_{\rm c})T^*$ 是无量纲的态密度, $\eta(p) = V(p)/T^*$ 反映了准粒子与自旋涨落之间的耦合强度。 $T_{\rm m}^* = T^*(p_{\rm L})$ 为超导峰值处的特征相干温度,代表了 自旋涨落的特征能量,类似于 BCS 理论中的 Debye 频率。引入 $T_{\rm m}^*$ 是由于实验上发现重费米子材料的最 高 $T_{\rm c}$ 与 $T_{\rm m}^*$ 之间存在标度关系^[86,105]。

以上公式中,由于态密度随温度降低呈对数发散, 其截断温度直接影响了 T_c的大小。分析表明,超导相 随外加压力呈现穹顶(dome)结构,并且如图 19 所 示,可以划分为三个区域^[86]:

当 p > p_L 时,超导相之上为费米液体。截断温度 T_L(p)随着压力增加而变大,低温下重电子



图 19. 二流体理论预言的重费米子超导相图^[86]。在区域 I 中, T_L 以下局域磁矩与导带电子完全杂化,只有巡游重电子 存在:在区域 II 中,集体杂化不完全,巡游重电子和剩余的 局域磁矩共存:在区域 III 中, T_N 以下剩余的局域磁矩形成 反铁磁序,同时仍然存在着重电子。在 T_c 以下,量子临界涨 落诱导重电子配对形成超导 (SC)

的态密度随之降低,导致 T_c 随压力的增加而下降。

- 2. 当 p < p_N 时,截断温度为 T_N(p) 或 T₀(p), f 电子随压力减小趋向局域化,重电子权重减少,态密度减小,T_c 也随之降低。在此区域中,由于同时存在局域和巡游的 f 电子,可能出现局域反铁磁序与超导相共存。
- 在量子临界点附近,截断温度为 T_c(p) 自身,超 导转变温度必须通过公式 (39) 自洽求解。

上述公式定量预言了 T_c 对压力的依赖行为,并且 由于 $\kappa(p)$ 在实验上可以通过比热测量估计, $\eta(p)$ 与压 力近似无关,可以由超导转变温度的最大值估计,因而 公式中没有多余的自由参数。图 20 给出了对 CeCoIn₅ 和 CeRhIn₅ 的理论拟合^[86],与实验定量相符。这又一 次验证了二流体理论的有效性,同时表明在二流体理 论框架下,将量子临界涨落与准粒子的重整化两种强 关联效应分开作简化近似处理是可行的,抓住了重费 米子超导的本质物理。

IV. 实验进展

重费米子二流体理论不但解释了众多先前的实验 结果,也得到了一些新实验的支持,本章将介绍几个 典型的实验进展。

A. 角分辨光电子能谱

角分辨光电子能谱(ARPES)提供了重电子温度演化的直接信息。2012年,沈志勋组利用 ARPES



图 20. CeCoIn₅ 和 CeRhIn₅ 的 p - T 相图^[86]。实线为二流 体理论的拟合

对 YbRh₂Si₂ 中重电子态的温度演化进行了细致的测量和分析^[106],发现在 $T^* = 50 \pm 10$ K 以下重电子态开始出现并随温度降低逐渐增强,与二流体理论的预言一致。图 21 给出了他们的实验结果^[106]。可以看到,在 45 K 以下,费米能附近逐渐出现了一个新的准粒子峰,对应于新形成的巡游 f 电子,其谱权重在 T^* 以下随温度降低逐渐增强。

目前,理论上对重电子及其费米面的温度演化尚存在不同认识,利用 ARPES 测量实际重费米子材料中的费米面演化是一个重要的前沿课题。

B. 缪介子自旋共振

2009 年, Ohishi 等人借助缪介子自旋共振 (μ SR) 对重费米子材料 (Ce_{1-x}La_x)₂IrIn₈ 进行了系统的测 量^[107]。他们发现在所有的样品中,缪介子奈特位移 在一定温度下都会偏离与磁化率的线性关系。他们 排除了晶体场效应的影响,得到了类似于核磁共振奈 特位移反常的现象。图 22 给出了 $x \leq 0.5$ 时的实验 结果^[107], μ SR 奈特位移反常完全符合公式 (6) 给出 的 Kondo 液体普适标度律,为二流体理论提供了有力 支持。

此外,对CeIrIn₅^[108]、CePt₂In₇^[109]、U₂Pt₂Sn^[110]



图 21. YbRh₂Si₂ 的角分辨光电子谱^[106]。(a) 温度小于 45 K 时,在费米能附近出现准粒子峰;(b) 温度低于 T^*_{ARPES} 时,准粒子谱权重随温度降低逐渐增强

等材料的最新研究,以及一些光电导、STM 等新的实验也都验证了二流体理论的预言。



图 22. $(Ce_{1-x}La_x)_2$ IrIn₈ 奈特位移反常的标度行为^[107],实 线为二流体理论的预言

C. 新材料

二流体理论的预言在一些新发现的重费米子材料 中也得到了验证。此处我们简要介绍一种新型的 *d* 电 子重费米子化合物,CaCu₃Ir₄O₁₂,为中国科学院物理研究所的程金光等人最近采用高压方法合成的钙钛矿材料^[5]。

如图 23(a) 和 (b) 所示^[5],实验发现此材料在温度 为 80 K 时呈现出一系列的反常现象:磁化率开始偏离 高温的居里–外斯定律,电阻偏离了与温度的线性关系 等。这些反常现象与二流体理论预言的重费米子特征 行为非常类似,特别是低温下,比热系数对温度呈现 对数依赖 [图 23(c)],并且磁化率在 $T^* = 80$ K 附近 出现平台。能带计算发现,Cu²⁺上只有一个空穴,占 据了较窄的 d_{xy} 能带,存在很强的局域库仑相互作用, 并且与周围 Ir 上较为巡游的 d 电子能带杂化。这些研 究表明 CaCu₃Ir₄O₁₂ 与常规的 f 电子重费米子材料类 似,是一种少见的 d 电子重费米子材料。



图 23. CaCu₃Ir₄O₁₂ 磁化率 $\chi(T)$ 、电阻 $\rho(T)$ 、磁性比 热 $C_{\rm m}(T)$ 等随温度的变化^[5]

类似的行为在新近合成的 LaCu₃Ir₄O₁₂ 材料中也 被发现,同样符合二流体理论的预言,其特征温度 *T** 为 150 K^[111]。二流体理论所揭示的重费米子物理的本 质特征引导了新型重费米子材料的实验探索。

V. 理论进展

二流体唯象理论获得了极大的成功,理解其背后 的微观机理是目前面临的首要理论问题。在这一章中, 我们简要介绍相关的理论探索,包括采用隶玻色子近 似、单杂质动力学平均场理论 (DMFT)、数值重整化 群 (NRG)、行列式量子蒙特卡罗 (DQMC) 和密度矩阵 重整化群 (DMRG) 等方法进行的研究工作。

A. 隶玻色子近似

2006 年, Barzykin 利用隶玻色子近似在大 N 极限下计算了周期性 Anderson 模型的比热和磁化率,考虑到费米面附近较为平坦的杂化能带的贡献,可以将这两个量写作两分量的形式,从而得到了一个权重函数^[112]:

$$f(T) = 1 - Nn_f(\varepsilon_f), \qquad (40)$$

其中 $n_f(\varepsilon_f)$ 是巡游 f 电子的占据数, f(T) 代表了二 流体理论中局域部分的权重。这一结果虽然定量上与 二流体理论的唯象预言不符,并且还忽略了 f 电子间 很强的 RKKY 交换关联效应,但物理图像简单清晰, 值得进一步研究。二流体理论的微观描述的建立,最 终可能需要引入新的平均场近似方案。

B. 单杂质 DMFT

2007 年, Kotliar 小组利用单杂质 DMFT 结合第 一性原理方法,首次对 CeIrIn₅ 的 4*f* 电子能谱进行了 细致的计算分析^[35]。他们发现 *f* 电子在室温时紧密地 束缚在 Ce 离子周围,表现出完全的局域性,其谱权重 主要聚集在能量 –2.5 eV 和 3 eV 附近,在费米面处几 乎为零。直到 50 K 以下,*f* 电子的态密度才随着温度 降低快速增加,在费米面处逐渐形成一个尖锐的准粒 子峰,呈现出巡游的性质。Yang 和 Pines 发现此准粒 子峰的高度随温度的变化与二流体理论预言的 Kondo 液体态密度的温度演化行为一致(图 24)^[47],后来的 计算更进一步地验证了这一结果^[113]。单杂质 DMFT 虽然也不包含 *f* 电子间的反铁磁关联,但是其计算结 果与二流体预言一致的背后应有更深刻的物理根源, 有待更加细致深入的分析。

C. NRG

2011 年, Jian-Xin Zhu 小组利用NRG方法研究了 两杂质Anderson模型^[114]。如图 25 所示^[114],他们发 现体系中存在两个基本的温标:高温温标 $T_{\rm H}$ 对应于 准粒子的形成,低温温标 $T_{\rm L}$ 对应于准粒子开始表现 出费米液体行为。在二流体理论中,这两个温标分别 对应 T^* 和 $T_{\rm FL}$ 。他们发现,在很大的参数区间内,



图 24. LDA+DMFT 计算得到的 CeIrIn₅ 准粒子峰态密度 (实线) 与 Kondo 液体态密度的比较^[47]

 $T_{\rm H}$ 源自两杂质体系从自旋单态到自旋三重态的激发, 此时 $T_{\rm H} \gg T_{\rm L}$, RKKY 相互作用占主导,但是低温 下仍然形成重电子,与二流体理论的预期一致;只 在很强杂化时, $T_{\rm H}$ 才趋近单杂质的 Kondo 温度,此 时 $T_{\rm H} \sim T_{\rm L}$ 。他们同时发现,RKKY 作用在高温时 会促进重电子的形成,符合二流体理论的预期,而不 是如 Doniach 相图所示简单地抑制费米液体。这为理 解 T^* 的微观起源和 RKKY 作用的物理提供了新的认 识。



图 25. NRG 计算中得到的各个能标随杂化强度 V 的变化^[114],虚线为理论拟合值

D. DQMC

2014 年, Scalettar 小组利用 DQMC 计算了二维 半满周期性 Anderson 模型的磁化率和奈特位移^[115]。 图 26 给出了他们得到的奈特位移反常随温度的变化, 虚线为二流体理论的预言^[115],可以看到两者在特征 温标 *T** 之下很大的温度区间内近似符合。目前这一 工作只考虑了 *f* 电子半满的情况,此时体系为绝缘体, DQMC 计算中没有符号问题。为了研究巡游重电子的 演化,有待将其推广到更一般的偏离半满的情况。



图 26. DQMC 计算给出的奈特位移反常与 Kondo 液体态密度 (虚线)的比较^[115]

E. DMRG

最近,我们利用密度矩阵重整化群 (DMRG) 方法 研究了一维 Kondo-Heisenberg 模型,通过分析局域自 旋从局域到巡游的转变过程,探讨 *f* 电子局域和巡游 二重性的微观根源^[116]。

在 Kondo-Heisenberg 模型中,局域自旋的关联谱 在动量空间的积分是个与 Kondo 耦合无关的常量,因 而局域自旋的状态的改变体现为自旋关联谱在动量空 间的分布的变化。如图 27(a) 所示^[116],我们发现随 着 $J_{\rm K}$ 的增加,这一分布逐渐从 $k = \pi$ 处尖锐的峰 状结构转变为在整个空间比较均匀的分布,反映了局 域自旋从强的链内 Heisenberg 耦合到强的局域近藤 耦合的转变。这一转变同时伴随着导带电子在动量空 间从小费米面到大费米面的过渡 [图 27(b)], 意味着 费米面的变化与链内反铁磁关联的抑制是一致的,与 实验发现的反铁磁量子临界点处费米面的突然变化符 合。此外,在强 J_K 极限下,局域自旋的自旋关联谱 在比较均匀的背景上出现一个新的峰,对应大费米面 的特征波矢,表明局域自旋参与了大费米面的形成。 这种巡游性源自局域自旋涨落与导带电子的耦合,意 味着巡游重电子是一种复合粒子。更有意思的是,在 中间 $J_{\rm K}$ 区 ($J_{\rm K}/t = 2.3$ 附近),关联谱上出现多峰 结构,分别对应链内反铁磁关联及大小费米面两种费 米波矢 [图 27(a)], 这就表明局域自旋不但与链内其 他自旋发生关联,也同时与导带电子发生纠缠,参与 到大费米面的形成中,表现出局域和巡游的二重性质, 如图 27(c) 所示。据此,我们提出局域自旋关联谱在动 量空间的谱权重的转移可以作为反映其局域和巡游性 质的序参量,为二流体理论中的杂化参量提供了一个 微观的描述。



图 27. DMRG 给出的自旋关联谱和粒子占据数的计算结果。 (a) f 电子的动量空间自旋关联谱随 $J_{\rm K}$ 的演化, k_1 和 k_2 对 应大费米面和小费米面的散射峰; 插图中面积 A 表示 $J_{\rm K} = 0$ 和强耦合极限对比下的谱权重转移; (b) 导带电子在动量空 间的分布随 $J_{\rm K}$ 的演化,其中 $k_{\rm F}^{\rm S}$ 对应小费米面, $k_{\rm F}^{\rm L}$ 对应 大费米面; (c) 一维 Kondo-Heisenberg 模型二流体行为示意 图。箭头表示 f 电子局域磁矩,圆点表示自由的导带电子。 在不完全杂化时 ($f_h < 1$), f 电子部分和导带电子纠缠在一 起,部分仍然保持磁矩,表现出巡游和局域的二重性; 完全 杂化时 ($f_h = 1$), f 电子磁矩全部被导带电子屏蔽,表现出 完全的巡游性^[116]

以上结论虽然是基于一维 Kondo-Heisenberg 模型, 但是局域自旋的纠缠性质并不局限于一维系统,类似 的结论在二维或三维真实体系应该仍然成立。如何将 以上结果推广到高维系统,并从中提炼出反映 *f* 电子 局域或巡游性的"本征序参量",是我们下一阶段研究 的主要目标。

VI. 结论和展望

综上所述,二流体理论为认识重费米子物理提供 了一个简单的物理图像。在 f 电子局域和巡游二重性 的基础上,通过引入两种共存流体的简单假设,二流 体理论系统解释了大量先前无法解释的实验观测结果, 发现了正常态的巡游重电子普适标度律和 Fano 干涉效应,建立了描述体系各种低温有序态的简单模型。二流体理论所预言的普适标度律表明 *f* 电子的演化规律 是与具体材料的细节无关的物理行为,重电子态是一种新的量子物态。

与通常基于 Kondo 物理的方案不同,二流体理论 更多地强调局域磁矩之间反铁磁耦合的作用,认为重 费米子物理是导带电子与背景自旋晶格反铁磁涨落发 生集体杂化或纠缠的结果,理解晶格自旋涨落在电子 演化或费米面的变化中所发挥的作用应是发展重费米 子理论的核心问题。

二流体理论目前仍然是一个基于实验的唯象理论。 在微观层面上,两种流体如何共存,如何产生不稳定 性,如何导致不同的量子临界现象,以及如何引起重 电子的超导配对等等,都是需要继续深入研究的课题。 实验上,利用中子散射等测量技术直接观测电子局域 和巡游的二重属性,或借助 STM 和 ARPES 等手段在 实空间或动量空间观测重电子态的产生和演化,将会 为微观理论的发展提供重要的指引。

局域和巡游二重性是强关联电子系统的普遍现象, 不仅出现在重费米子体系,也同样存在于其他的强关 联电子系统如铜基和铁基超导中。这种局域和巡游的 二重性体现了电子动能与其局域库仑排斥势的竞争, 表明两者处于近似均衡的中间状态,无法利用单纯的 局域或巡游的简单极限进行描述。重费米子二流体理 论的成功表明在这种局域和巡游二重性的新的概念基 础上,有可能为理解强关联电子的复杂行为构建简单 的理论框架。

感谢国家重点基础研究发展计划(批准号: 2015CB921303)、国家自然科学基金(批准号: 11174339)、中国科学院B类战略性先导科技专项(批准号: XDB07020200)和"百人计划"项目的支持。

参考文献

- [1] Coleman P. Ann. Henri. Poincaré, 2003, 4: Suppl. 2, S559-S580
- [2] Stewart G R. Rev. Mod. Phys., 1984, 56(4): 755-787
- [3] Misra P. Heavy-Fermion Systems, New York. Elsevier, 2008
- [4] Kondo S, Johnston D C, Swenson C A, Borsa F, Mahajan A V, Miller L L, Gu T, Goldman A I, Maple M B, Gajewski D A, Freeman E J, Dilley N R, Dickey R P, Merrin J, Kojima K, Luke G M, Uemura Y J, Chmaissem O, Jorgensen J D. Phys. Rev. Lett., 1997, 78(19): 3729-3732
- [5] Cheng J G, Zhou J S, Yang Y F, Zhou H D, Matsubayashi K, Uwatoko Y, MacDonald A, Goodenough J

B. Phys. Rev. Lett., 2013, **111**(17): 176403

- [6] Yuan H Q, Grosche F M, Deppe M, Geibel C, Sparn G, Steglich F. Science, 2003, **302**(12): 2104-2107
- [7] Kenzelmann M, Gerber S, Egetenmeyer N, Gavilano J L, Strässle T, Bianchi A D, Ressouche E, Movshovich R, Bauer E D, Sarrao J L, Thompson J D. *Phys. Rev. Lett.*, 2010, **104**(12): 127001-127004
- [8] Mydosh J A, Oppeneer P M. Rev. Mod. Phys., 2011, 83(4): 1301-1322
- [9] Dzero M, Sun K, Galitski V, Coleman P. Phys. Rev. Lett., 2010, 104(10): 106408
- [10] Lu F, Zhao J Z, Weng H M, Fang Z, Dai X. Phys. Rev. Lett., 2013, 110(9): 096401
- [11] 张广铭, 于禄. 物理, 2007, 36(6): 434-442
- [12] Meissner W, Voight G. Ann. Phys., 1930, 7: 892-936
- [13] Sarachik M P, Corenzwit E, Longinotti L D. Phys. Rev., 1964, 135(4A): A1041-A1045
- [14] Kondo J. J. Phys. Soc. Jpn., 2005, 74(1): 1-3
- [15] Kondo J. Prog. Theor. Phys., 1964, 32(1): 37-49
- [16] Hewson A C. The Kondo Problem to Heavy Fermions, Cambridge Univ. Press, 1993
- [17] Kouwenhoven L, Glazman L. Phys. World, 2001, Jan.: 33-38
- [18] Andres K, Graebner J E, Ott H R. Phys. Rev. Lett., 1975, 35(26): 1779-1782
- [19] Steglich F, Aarts J, Bredl C D, Lieke W, Meschede D, Franz W, Schäfer H. Phys. Rev. Lett., 1979, 43(25): 1892-1986
- [20] Ott H R, Rudigier H, Fisk Z, Smith J L. Phys. Rev. Lett., 1983, 50(20): 1595-1598
- [21] Stewart G R, Fisk Z, Willis J O, Smith J L. Phys. Rev. Lett., 1984, 52(8): 679-682
- [22] Doniach S. Physica B, 1977, 91B: 231-234
- [23] Ruberman M A, Kittle C. Phys. Rev., 1954, 96(1): 99-102
- [24] Kasuya T. Prog. Theor. Phys., 1956, 16(1): 58-63
- [25] Yosida K. Phys. Rev., 1969, **106**(5): 893-898
- [26] von Löhneysen H, Rosch A, Vojta M, Wölfle P. Rev. Mod. Phys., 2007, 79(3): 1015-1061
- [27] Read N, Newns D M. J. Phys. C, 1983, 16: 3273-3295
- [28] Coleman P. Phys. Rev. B, 1984, 29(6): 3035-3044
- [29] Read N, Newns D M, Doniach S. Phys. Rev. B, 1984, 30(7): 3841-3844
- [30] Millis A J, Lee P A. Phys. Rev. B, 1987, 35(7): 3394-3414
- [31] Auerbach A, Levin K. Phys. Rev. Lett., 1986, 57(7): 877-880
- [32] Zhang G M, Yu L. Phys. Rev. B, 2001, 62(1): 76-79
- [33] Li G B, Zhang G M. Phys. Rev. B, 2010, **81**(9): 094420
- [34] Si Q, Rabello S, Ingersent K, Smith J L. Nature (London), 2001, 413: 804-808
- [35] Shim J H, Haule K, Kotliar G. Science, 2007, 318(12): 1615-1617
- [36] Haule K, Yee C H, Kim K. Phys. Rev. B, 2010, 81(19): 195107
- [37] Capponi S, Assaad F F. Phys. Rev. B, 2001, 63(15): 155114
- [38] Senthil T, Vojta M, Sachdev S. Phys. Rev. B, 2004, 69(3): 035111
- [39] Paul I, Pépin C, Norman M R. Phys. Rev. Lett., 2007, 98(2): 026402
- [40] Wölfle P, Abrahams E. Phys. Rev. B, 2001, 84(4): 041101(R)

- [41] Abrahams E, Wölfle P. Proc. Nal. Acad. Sci. USA, 2012, 109(9): 3238-3242
- [42] Abrahams E, Schmalian J, Wölfle P. Phys. Rev. B, 2014, 90(4): 045105
- [43] Gorter C J, Casimir H B G. Physica, 1934, 1(1-6): 306-320
- [44] Landau L D, Lifshitz E M. Statistical Physics I, Oxford: Pergomon Press, 1980
- [45] Nakatsuji S, Pines D, Fisk Z. Phys. Rev. Lett., 2004, 92(1): 016401
- [46] Curro N J, Young B L, Schmalian J, Pines D. Phys. Rev. B, 2004, 70(23): 235117
- [47] Yang Y F, Pines D. Phys. Rev. Lett., 2008, 100(9): 096404
- [48] Yang Y F, Fisk Z, Lee H O, Thompson J D, Pines D. Nature (London), 2008, 454: 611-613
- [49] Yang Y F, Pines D. Proc. Nal. Acad. Sci. USA, 2012, 109(45): E3060-E3066
- [50] John D C. Phys. Rev. Lett., 1989, 62(8): 957-960
- [51] Nakano T, Oda M, Manable C, Momono N, Miura Y, Ido M. Phys. Rev. B, 1994, 49(22): 16000-16008
- [52] Barzykin V, Pines D. Phys. Rev. Lett., 2006, 96(24): 247002
- [53] Barzykin V, Pines D. Adv. Phys., 2009, 58(1): 1-65
- [54] Pines D. J. Phys. Chem. B, 2013, 117: 13145-13153
- [55] Ma L, Ji G F, Dai J, He J B, Wang D M, Chen G F, Normand B, Yu W Q. *Phys. Rev. B*, 2011, 84(22): 220505(R)
- [56] Ji G F, Zhang J S, Ma L, Fan P, Wang P S, Dai J, Tan G T, Song Y, Zhang C L, Dai P C, Normand B, Yu W Q. Phys. Rev. Lett., 2013, **111**(10): 107004
- [57] Dai P C, Hu J P, Dagotto E. Nat. Phys., 2012, 8(10): 709-718
- [58] Wang M, Zhang C L, Lu X Y, Tan G T, Luo H Q, Song Y, Wang M Y, Zhang X T, Goremychkin E A, Maier T A, Yin Z P, Haule K, Kotliar G, Dai P C. Nat. Commun., 2013, 4: 2874
- [59] You Y Z, Weng Z Y. New J. Phys., 2014, 16(2): 023001
- [60] Mito T, Kawasaki S, Kawasaki Y, Zheng G Q, Kitaoka Y, Aoki D, Haga Y, Onuki Y. Phys. Rev. Lett., 2003, 90(7): 077004
- [61] Curro N J. Rep. Pro. Phys., 2009, 72: 026502
- [62] 杨义峰. 物理, 2014, 43(2): 80-87
- [63] Moriya T. Prog. Theor. Phys., 1956, 16(1): 23-44
- [64] Yang Y F, Urbano R, Curro N J, Pines D, Bauer E D. Phys. Rev. Lett., 2009, 103(19): 197004
- [65] Yang Y F, Pines D, Curro N J. arXiv: 1410.0452
- [66] Fert A, Levy P M. Phys. Rev. B, 1987, 36(4): 1907-1916
- [67] Hundley M F, Malinowski A, Pagliuso P G, Sarrao J L, Thompson J D. Phys. Rev. B, 2004, 70(3): 035113
- [68] Yang Y F. Phys. Rev. B, 2013, 87(4): 045102
 [69] Park W K, Greene L H. J. Phys. Condens. Matter,
- 2009, **21**(10): 103203
- [70] Schmidt A R, Hamidian M H, Wahl P, Meier F, Balatsky A V, Garrett J D, Williams T J, Luke G M, Davis J C. Nature (London), 2010, 465(7298): 570-576
- [71] Ernst S, Kirchner S, Krellner C, Geibel C, Zwicknagl G, Steglich F, Wirth S. Nature (London), 2011, 474(7351): 362-366
- [72] Aynajian P, da Silva Neto E H, Gyenis A, Baumbach R E, Thompson J D, Fisk Z, Bauer E D, Yazdani A.

Nature (London), 2012, 486(7402): 201-206

- [73] Moser M, Wachter P, Franse J J, Meisner G P, Walker
 E. J. Magn. Magn. Mater., 1986, 54: 373-374
- [74] Hasselbach K, Kirtley J R, Lejay P. Phys. Rev. B, 1992, 46(9): 5826-5829
- [75] Park W K, Sarrao J L, Thompson J D, Greene L H. Phys. Rev. Lett., 2008, **100**(17): 177001
- [76] Yang Y F. Phys. Rev. B, 2009, **79**(24): 241107(R)
- [77] Fano U. Phys. Rev., 1961, **124**(6): 1866-1878
- [78] Maltseva M, Dzero M, Coleman P. Phys. Rev. Lett., 2009, 103(20): 206402
- [79] Wölfle P, Dubi Y, Balatsky A V. Phys. Rev. Lett., 2009, **105**(24): 246401
- [80] Lee W C, Park W K, Arham H Z, Greene L H, Phillips P. Proc. Nal. Acad. Sci. USA, 2015, 112(3): 651–656
- [81] Park W K, Tobash P H, Ronning F, Bauer E D, Sarrao J L, Thompson J D, Greene L H. Phys. Rev. Lett., 2012, 108(24): 246403
- [82] Fogelström M, Graf M J, Sidorov V A, Lu X, Bauer E D, Thompson J D. Phys. Rev. B, 2014, 90(10): 104512
- [83] Aynajian P, da Silva Neto E H, Parker C V, Huangb Y, Pasupathyc A, Mydoshd J, Yazdania A. Proc. Nal. Acad. Sci. USA, 2010, 107(6): 10383-10388
- [84] Zhang X H, Butch N P, Syers P, Ziemak S, Greene R L, Paglione J. *Phys. Rev. X*, 2013, 3(1): 011011
- [85] Rossler S, Jang T H, Kim D J, Tjeng L H, Fisk Z, Steglich F, Wirth S. Proc. Nat. Acad. Sci. USA, 2014, 111(4): 4798-4802
- [86] Yang Y F, Pines D. Proc. Nal. Acad. Sci. USA, 2014, 111(12): 18178-18182
- [87] Shirer K R, Shickley A C, Dioguardi A P, Crocker J, Lin C H, apRoberts-Warren N, Nisson D M, Klavins P, Cooley J C, Yang Y F, Curro N J. Proc. Nal. Acad. Sci. USA, 2012, 109(45): E3067-E3073
- [88] apRoberts-Warren N, Dioguardi A P, Shockley A C, Lin C H, Crocker J, Klavins P, Pines D, Yang Y F, Curro N J. Phys. Rev. B, 2011, 83(6): 060408(R)
- [89] Shishido H, Settai R, Harima H, Onuki Y. Physica B, 2006, 92: 378–380
- [90] Zaum S, Grube K, Schäfer R, Bauer E D, Thompson J D, von Löhneysen H. *Phys. Rev. Lett.*, 2011, **106**(8): 087003
- [91] Paschen S, Lühmann T, Wirth S, Gegenwart P, Trovarelli O, Geibel C, Steglich F, Coleman P, Si Q. Nature (London), 2004, 432(7019): 881-885
- [92] Aso N, Ishii K, Yoshizawa H, Fujiwara T, Uwatoko Y, Chen G F, Sato N K, Miyake K. J. Phys. Soc. Jpn., 2009, 78(7): 073703
- [93] Llobet A, Gardner J S, Moshopoulou E G, Mignot J M, Nicklas M, Bao W, Moreno N O, Pagliuso P G, Goncharenko N, Sarrao J L, Thompson J D. *Phys. Rev. B*, 2004, **69**(2): 024403
- [94] Hegger H, Petrovic C, Moshopoulou E G, Hundley M F, Sarrao J L, Fisk Z, Thompson J D. Phys. Rev. Lett., 2000, 84(21): 4986-4989

- [95] Park T, Ronning F, Yuan H Q, Salamon M B, Movshovich R, Sarrao J L, Thompson J D. Nature (Londo) 2005, 440(2): 65-68
- [96] Ishida K, Okamoto K, Kawasaki Y, Kitaoka Y, Trovarelli O, Geibel C, Steglich F. Phys. Rev. Lett., 2002, 89(10): 107202
- [97] Ronning F, Capan C, Bauer E D, Thompson J D, Sarrao J L, Movshovich R. *Phys. Rev. B*, 2006, **73**(6): 064519
- [98] Yang Y F, Pines D. Proc. Nal. Acad. Sci. USA, 2014, 111(6): 8398-8403
- [99] Urbano R R, Young B L, Curro N J, Thompson J D, Pham L D, Fisk Z. Phys. Rev. Lett., 2007, 99(14): 146402
- [100] Sidorov V A, Nicklas M, Pagliuso P G, Sarrao J L, Bang Y, Balatsky A V, Thompson J D. Phys. Rev. Lett., 2002, 89(15): 157004
- [101] Stockert O, Steglich F. Annu. Rev. Condens. Matter Phys., 2011, 2: 79-99
- [102] Scalapino D J. Rev. Mod. phys., 2012, 84(4): 1383-1417
- [103] Kohori Y, Taira H, Fukazawa H, Kohara T, Iwamoto Y, Matsumoto T, Maple M B. J. Alloys Compd., 2006, 408–412: 51-53
- [104] Dyke J S V, Massee F, Allan M P, Davis J C S, Petrovic C, Morr D K. Proc. Nal. Acad. Sci. USA, 2014, 111(32): 11663-11667
- [105] Curro N J, Caldwell T, Bauer E D, Morales L A, Graf M J, Bang Y, Balatsky A V, Thompson J D, Sarrao J L. Nature (London), 2005, 434: 622-625
- [106] Mo S K, Lee W S, Schmitt F, Chen Y L, Lu D H, Capan C, Kim D J, Fisk Z, Zhang C Q, Hussain Z, Shen Z X. Phys. Rev. B, 2012, 85(24): 241103(R)
- [107] Ohishi K, Heffner R H, Ito T U, Higemoto W, Morris G D, Hur N, Bauer E D, Sarrao J L, Thompson J D, MacLaughlin D E, Shu L. Phys. Rev. B, 2009, 80(12): 125104
- [108] Kambe S, Tokunaga, Sakai H, Chudo H, Haga Y, Matsuda T D, Walstedt R E. Phys. Rev. B, 2010, 81(14): 140405(R)
- [109] Shockley A C, apRoberts-Warren N, Nission D M, Kuhns P L, Reyes A P, Yaun S, Curro N J. Phys. Rev. B, 2013, 88(7): 075109
- [110] Tran L M, Nowak B, Tran V H. Phys. Rev. B, 2011, 84(22): 224406
- [111] Li M R, Retuerto R, Deng Z, Sarkar T, Sánchez-Benítez J, Croft M C, Dasgupta T S, Das T, Tyson T A, Walker D, Greenblatt M. Chem. Mat., 2015, 27: 211
- [112] Barzykin V. Phys. Rev. B, 2006, 73(9): 094455
- [113] Choi H C, Min B I, Shim J H, Haule K, Kotliar G. Phys. Rev. Lett., 2012, 108(1): 016402
- [114] Zhu L J, Zhu J X. Phys. Rev. B, 2011, 83(19): 195103
- [115] Jiang M, Curro N J, Scalettar R T. Phys. Rev. B, 2014, **90**(24): 241109(R)
- [116] Xie N, Yang Y F. Phys. Rev. B, 2015, **91**(19): 195116

Two-fluid theory for heavy fermion materials

Yang Yi-Feng 1,2* , Xie Neng 1 , Li Yu 1

1. Beijing National Laboratory for Condensed Matter Physics and Institute of Physics, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

2. Collaborative Innovation Center of Quantum Matter, Beijing 100190, China

The dual (simultaneously localized and itinerant) nature of strongly correlated electrons can be traced back to the particle-wave duality in quantum mechanics and is the origin of numerous exotic quantum phenomena in correlated materials. Here we discuss the various experimental aspects of this dual behavior of f-electron and focus on the phenomenological two-fluid theory recently developed for heavy fermion materials. The two-fluid theory has been quite successful in explaining many puzzling experiments and revealing the common nature of the complex behaviors of many heavy fermion compounds. It provides a new avenue for understanding the exotic properties of strongly correlated systems including cuprates and iron-based superconductors and demands further theoretical and experimental investigations.

Key words: strongly correlated electrons; heavy fermions; two-fluid theory