

华中科技大学

本科生毕业设计[论文]

近藤海森堡晶格模型中反铁磁短程磁涨落与
近藤屏蔽竞争与共存

院 系 物理学院

专业班级 物理学 1202

姓 名 韩儒磊

学 号 U20121062

指导教师 叶方富、杨义峰

2016年6月12日

学位论文原创性声明

本人郑重声明：所呈交的论文是本人在导师的指导下独立进行研究所取得的研究成果。除了文中特别加以标注引用的内容外，本论文不包括任何其他个人或集体已经发表或撰写的成果作品。本人完全意识到本声明的法律后果由本人承担。

作者签名： 年 月 日

学位论文版权使用授权书

本学位论文作者完全了解学校有关保障、使用学位论文的规定，同意学校保留并向有关学位论文管理部门或机构送交论文的复印件和电子版，允许论文被查阅和借阅。本人授权省级优秀学士论文评选机构将本学位论文的全部或部分内容编入有关数据进行检索，可以采用影印、缩印或扫描等复制手段保存和汇编本学位论文。

本学位论文属于 1、保密口，在 年解密后适用本授权书

2、不保密口。

(请在以上相应方框内打“√”)

作者签名： 年 月 日

导师签名： 年 月 日

摘要

作为强关联体系的重要组成部分,重费米子系统近些年来被广泛关注。近藤晶格模型是研究重费米子系统的基本模型之一。近藤晶格模型以及它的变形可以解释重费米子化合物很多奇异的性质。在近藤晶格模型的基础上,考虑到稀磁金属中局域磁矩之间的 RKKY 相互作用,并把这部分唯像地用海森堡自旋交换表示,近藤海森堡晶格模型就这样被建立起来。

由传导电子与局域磁矩间的近藤屏蔽作用和局域自旋之间的 RKKY 相互作用会在重费米子化合物中共存并竞争,由于二者互相竞争重费米子化合物有着很多奇异的物理性质。我们会在二维晶格下,用近藤海森堡晶格模型分析 AFM 短程磁性涨落与近藤屏蔽在 0 温时共存与竞争的关系。

在理论方面,我们会用赝费米子表示、二次量子化、哈特利福克平均场近似等方法推导系统基态能量满足的自洽方程组。在数值计算的方面,我们会利用拟牛顿法对自洽方程进行求解,从各参量的变化中分析 AFM 短程磁性涨落与近藤屏蔽共存与竞争的关系。

关键词: 重费米子化合物、平均场理论、近藤海森堡晶格模型、近藤屏蔽、RKKY 相互作用

Abstract

As an strongly correlated electron system, the heavy-fermion system(HFS) has been concentrated on in recent years. Kondo lattice model is one of the basic models of heavy fermion systems. Kondo lattice model and its variants can explain a lot of Singular properties of heavy fermion compound. Considering the RKKY interaction between localized magnetic moments in dilute magnetic metal, which is phenomenologically expressed by Heisenberg spin exchange, Kondo Heisenberg lattice model was established on the basis of the Kondo lattice model.

RKKY interaction between the conduction electrons and localized magnetic moments and Kondo shield between the local spin will coexist and compete in heavy fermion compounds. Because of coexistence and competition between RKKY interaction and Kondo shield, heavy fermion compound has many exotic physical properties. In the two-dimensional lattice. We will use Kondo Heisenberg lattice model to analyze coexistence and competition between AFM fluctuation and short-range magnetic shield at $0k$ in the two-dimensional lattice.

Theoretically, we will use pseudo-fermion representation, the second quantization, HFM to derived the self-consistent equations which is related to the ground state energy. We will use the quasi-Newton method for solving the self-consistent equations in numerical calculation. In the end, we will analyze coexistence and competition between AFM fluctuation and short-range magnetic shield from each of the parameters.

Key Words: heavy fermion compound, Mean Field Theory, Kondo Heisenberg lattice model, RKKY, Kondo shield

目 录

摘要	I
Abstract	II
1 绪论	5
1.1 重费米子化合物	5
1.1.1 重费米子化合物及其物理性质	5
1.1.2 研究重费米子化合物的原因	5
1.1.2 研究重费米子化合物的方法	5
1.2 平均场理论	6
1.2.1 什么是平均场理论	6
1.2.2 平均场理论的优势与不足	6
1.3 本文的主体结构	6
2 建立近藤海森堡模型的理论基础	8
2.1 海森堡自旋交换模型	8
2.1.1 海森堡自旋交换模型的推导	8
2.1.2 关于海森堡模型的补充说明	10
2.2 局域磁矩理论	10
2.3 近藤效应	12
2.4 RKKY 相互作用	14
3 平均场方法	16
3.1 研究近藤问题的理论模型	16

3.1.1	近藤晶格模型	16
3.1.2	周期安德森模型	17
3.2	近藤海森堡晶格模型	17
3.3	AFM 短程磁涨落与近藤屏蔽竞争与共存	18
3.3.1	拟牛顿法	18
3.3.2	理论推导	20
3.3.2.1	自洽方程的推导	20
3.3.2.2	数值分析	24
3.3.3	不同情况的讨论	25
3.3.3.1	在 $J_h=0, n_c=1, t=1, t'=0, J_k=2$ 的情况下求解自洽方程。	25
3.3.3.2	在 $J_h=0, n_c=0.9$ (可变), $t=1, t'=0, J_k=2$ 的情况下求解自洽方程。	27
3.3.3.3	在 J_h 可变, $n_c=0.6\sim 1, t=1, t'=0\sim 0.3, J_k=2$ 的情况下求解自洽方程。 ...	34
3.3.3.4	小结	39
4	结论与展望	41
5	致谢	43
	参考文献	45
	附录	48

1 绪论

1.1 重费米子化合物

1.1.1 重费米子化合物及其物理性质

自 20 世纪以来,随着量子力学体系的发展与完善,凝聚态物理学发展迅速。通过凝聚态物理学,人们对电子、原子、分子、金属、绝缘体等概念有了全新的认识。上世纪七八十年代,Steglich 等人在关于超导体 CeCu_2Si_2 的实验中发现,在温度低于 10K 时,电子表现出了非常大的有效质量(大约为自由电子的 200 倍),并且在温度低于 0.5K 时,该系统出现了无法用电声耦合理论解释的超导电性。之后,我们把这种具有非常大有效质量电子的强关联体系称为重费米子体系。

重费米子化合物是重费米子系统中包含 4f 或 5f 电子的金属化合物。随着实验的发展,重费米子化合物表现出越来越多新奇的物理性质。例如,人们发现在费米面附近,重费米子化合物的电子态密度比正常金属要高 2 到 3 个数量级;在低温下,重费米子化合物有着很高的比热,1975 年发现的 CeAl_3 在 $T=0.2\text{K}$ 以下的电子比热系数 γ 为 $1620\text{mJ}\cdot\text{mol}^{-1}/\text{K}^2$,是正常金属的 1000 多倍;在磁化率方面,磁化率 χ 与电子电阻的 T^2 项系数 A 远高于普通金属;这些奇特的物理性质使重费米子体系成为了凝聚态物理学的重要分支。

1.1.2 研究重费米子化合物的原因

纵然,重费米子体系一般出现在很低的温度下(一般为 10k 以下),我们很难将之投入到生产生活中,但是它可以解释许多低温下的物理现象,从而弥补现今凝聚态理论的不足,为建立可以应用于高温情况下的更完善的理论奠定基础。

1.1.2 研究重费米子化合物的方法

以完善低温下的理论、探索适用于高温下的理论为目标,人们建立了很多描述该体系的物理模型,如近藤晶格模型、周期安德森模型。人们在研究这些物理

模型的过程中,完善了一些现有的方法并创造出了很多新的方法。目前,在数值计算方面,动力学平均场方法和量子蒙特卡罗方法被广泛应用,而在解析方面用的更多的则是平均场理论。

1.2 平均场理论

1.2.1 什么是平均场理论

所谓平均场理论,用一个合理的平均场代替实际问题中带有涨落效应的有效场。这样多体问题就被转化为了单体问题,紧接着我们便可以对角化计算相应的物理量,得出各物理量之间的自洽方程,再用解析或数值的方法解出自洽方程,进而得到系统各参量的值。本文所要讨论的 AFM 短程磁涨落与近藤屏蔽竞争与共存的关系问题就是建立在平均场体系下的。

1.2.2 平均场理论的优势与不足

对比重整化群方法或量子蒙特卡罗等数值计算方法,平均场的方法最大的优势就是物理图像简明。这也就是说,我们可以明确地知道各参数的物理意义。序参数的大小就代表着场的大小;序参数的变化就代表场随系统环境改变而产生的变化。因此,系统中各参量对能量的影响以及各参量之间竞争与共存的关系我们都可以直观的了解,进而可以对实验得到的现象进行分析,并预测将来实验中可能发生的现象。

平均场方法也有其不足之处。我们之前提到,平均场理论是在忽略多体关联涨落的情况下建立的。这也就是说,当多体系统中的关联涨落很强的时候,平均场理论并不适用。

1.3 本文的主体结构

本文第一章主要介绍了重费米子体系、重费米子化合物、平均场理论的概念以及它们的发展状况。

本文的第二章，我们要介绍建立近藤海森堡晶格模型的理论基础。首先，我们要介绍海森堡模型及其严格推导，它建立在量子力学的基础上，体现了自旋与自旋间的相互作用。之后的理论都是来自于海森堡模型。接着我们要介绍局域磁矩理论和 s-d 交换作用，前者解释了重费米子化合物中局域自旋产生的条件，而后者阐释了局域磁矩与传导电子相互作用的具体形式。在以上理论的基础上，我们要介绍近藤屏蔽作用以及 RKKY 互作用。近藤屏蔽效应描述了在稀磁金属中，传导电子和局域磁矩相互耦合，以至于局域磁矩间的关联被屏蔽的现象。而为了研究磁性金属的磁序，我们必须讨论局域磁矩间的相互耦合问题。我们把局域磁矩通过传导电子所产生的间接交换作用称之为 RKKY 互作用。在了解了本章的内容之后，我们就对下文中各模型的哈密顿量中各项的物理意义有了初步的认识，接着我们就可以讨论我们要研究的近藤海森堡模型。

本文第三章，我们首先要从近藤问题出发介绍研究重费米子体系的两大基础模型近藤晶格模型与周期安德森模型的建立过程。接着，我们要简单介绍一些用于不同情况下的平均场方法。之后，我们会重点介绍近藤海森堡模型，并在该模型下分析 AFM 短程磁涨落与近藤屏蔽竞争与共存的关系问题。在得到近藤海森堡晶格模型的哈密顿量之后，我们会用隶玻色子方法处理算符，并把自旋交换作用用二次量子化的形式表现出来。之后，用哈特里-福克近似对哈密顿量进行平均场处理，将哈密顿量对角化。接着，我们带入单占据约束条件，用拉格朗日不定乘子法得到系统取基态的条件—四个自洽方程。最后，我们会用数值的方法（以拟牛顿法为主）解出自洽方程，得到相应的物理量并对其进行分析。

本文第四章主要是我们对工作的总结和分析，我们会指出工作的不足之处以及对未来工作方向的展望。

2 建立近藤海森堡模型的理论基础

2.1 海森堡自旋交换模型

2.1.1 海森堡自旋交换模型的推导

海森堡模型用于计算自旋-自旋相互作用系统的能量。狄拉克首先在电子处于局域化状态且 $S=1/2$ 的背景下严格导出了海森堡模型。之后, P.W.Anderson 证明了在 $S>1/2$ 时, 海森堡模型同样适用。

下面, 我们来介绍一下在 $S=1/2$ 的情况下, 海森堡模型的推导

首先, 我们假设一个拥有 N 个格点, 且每个格点上都有一个未配对的局域 d 电子的系统。由于研究对象是局域化的电子的自旋, 显然在瓦尼尔表象下研究更为方便。我们把态矢量用瓦尼尔函数展开。

$$\Psi(r) = \sum_{l,\sigma} C_{l\sigma} a(r-l) \quad (2.1)$$

接着, 我们对电子间的库伦势算符 $\frac{e^2}{|r-r'|}$ 进行二次量子化操作, 此时态矢量 $\Psi(r)$

可以看作是位置表象下的产生(消灭)算符。这样我们可以得到电子间的自旋交换作用为

$$H_{ex} = -\frac{1}{2} \sum_{l,l'} \sum_{\sigma,\sigma'} j_{ll'} C_{l\sigma}^+ C_{l\sigma} C_{l'\sigma'}^+ C_{l'\sigma} \quad (2.2)$$

其中交换积分

$$j_{ll'} = e^2 \int \frac{a^*(r-l)a(r-l')a^*(r'-l')a^*(r'-l)}{|r-r'|} d^3r d^3r' \quad (2.3)$$

之后, 我们要引入一个本篇文章中要反复用到的约束条件——单占据约束。单占据约束要求每个格点上只有一个未配对的 d 电子, 格点间没有电子转移。这也就是说, 系统中没有电子空态与电子对态出现。关于, 这个约束条件的理论基础,

我们可以参考多体理论中的赫伯德模型。赫伯德模型指出一个电子要占据一个未被占据的格点，需要的能量为 E (事实上这是一条分布在 E 附近的能带)。如果第二个自旋相反的电子还要占据这个格点，需要的能量就为 $E+U$ (同样这也是一条分布在 $E+U$ 附近的能带)。如果，电子的涨落很小，无法使电子由 E 态跃迁到 $E+U$ 态，那么每一个格点就只有一个电子占据。单占据约束条件的数学表示是

$$\sum_{\sigma} C_{n\sigma}^+ C_{n\sigma} = 1 \quad (2.4)$$

由自旋算符和本征态的关系，我们可以令

$$C_{\uparrow}^+ C_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}$$

我们可以将自旋向上和自旋向下的本征态带入以上算符，来验证这个假设的正确性。将其带入单占据条件，我们可以得到

$$C_{\downarrow}^+ C_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$$

同理我们可以通过假设加验证的方法得到

$$C_{\uparrow}^+ C_{\downarrow} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, C_{\downarrow}^+ C_{\uparrow} = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}$$

当然，我们已经知道，在自旋表象下泡利自旋算符为

$$\begin{aligned} \sigma^x &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \\ \sigma^+ &= \sigma^x + i\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & 2 \\ 0 & 0 \end{pmatrix} \\ \sigma^- &= \sigma^x - i\sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 2 \end{pmatrix} \end{aligned}$$

这样，我们就可以得到产生与消灭算符与泡利自旋算符的关系

$$C_{i\uparrow}^+ C_{i\uparrow} = \frac{1}{2}(1 + \sigma^z), C_{i\downarrow}^+ C_{i\downarrow} = \frac{1}{2}(1 - \sigma^z)$$

$$C_{i\uparrow}^+ C_{i\downarrow} = \frac{1}{2}\sigma^+, C_{i\downarrow}^+ C_{i\uparrow} = \frac{1}{2}\sigma^-$$

将以上关系代入哈密顿量经过简单的计算，并略去常数项，我们可以得到

$$H_{ex} = -\sum_{i,l'} j_{ll'} S_l \cdot S_{l'} \quad (2.5)$$

其中， $S = \frac{1}{2}\sigma$ 。这就是海森堡模型在 $S=1/2$ 时的推导过程。至于略去常数项的原因，我们会在第三章的理论推导部分详细阐述。

2.1.2 关于海森堡模型的补充说明

由于交换作用，自旋晶格系统的基态是磁性离子自旋排列的有序状态。最常见的磁有序态有：铁磁序(交换积分 $j>0$)、反铁磁序(交换积分 $j<0$)和铁氧磁序(交换积分 $j<0$)。交换积分的大小表示自旋耦合的强弱，而符号代表自旋耦合的种类。这些性质会在我们之后的计算中起到非常重要的作用。

2.2 局域磁矩理论

根据量子力学，对于 d 壳层未填满的过渡元素，由于电子间具有库仑排斥作用，d 电子的自旋会按照 Hund 规则排列，从而形成自由原子的固有磁矩。但是我们并不知道把这些磁性原子掺入非磁性的金属中是否还会产生固有磁矩。

实验表明，并不是所有的磁性掺杂都会使合金带有磁性。Fe 掺杂和 Mn 掺杂的 Cu 合金中都会产生局域磁矩，但是 Ni 掺杂的 Cu 合金、Mn 掺杂的 Al 合金都不会产生局域磁矩。局域磁矩的产生对合金的物理性质会有巨大的影响。要了解局域磁矩的性质，首先，我们需要找到一套理论来判断局域磁矩的形成条件。

为了解决这一问题，安德森在 1961 年提出了单杂质安德森模型，也叫 s-d 混合模型。他认为要得到局域磁矩形成的原因就不能把 d 轨道的电子与 s 轨道的电子

单独考虑，我们要考虑他们之间的耦合作用。另外，d 电子间的库伦相互作用也对局域磁矩的形成有着重要影响。考虑到这些方面，我们得到了单杂质安德森模型的哈密顿量：

$$H = \sum_{k,\sigma} E_{k\sigma} n_{k\sigma} + \sum_{\sigma} E_{d\sigma} n_{d\sigma} + \frac{U}{2} \sum_{\sigma} n_{d\sigma} n_{d\sigma}^{-} + \sum_{k,\sigma} V_{kd} (C_{k\sigma}^{+} d_{\sigma} + d_{\sigma}^{+} C_{k\sigma}) \quad (2.6)$$

其中

$$E_{k\sigma} = E_k + \sigma\mu_B h, E_{d\sigma} = E_d + \sigma\mu_B h \quad (2.7)$$

哈密顿量中的这四项分别代表金属中传导电子海（s 电子）的能量、d 电子的能量、电子间的关联作用相和 s-d 混合项。电子间的关联作用我们在讨论单电子约束的时候提到过，当一个电子占据一个格点时，需要的能量为 E。如果该格点要占据第二个电子时，需要的能量就变成了 E+U。而 U 就是电子间的关联能。它是形成局域磁矩的重要原因。而 s-d 混合项表示的布洛赫态与局域态之间的相互转移。

在得到安德森单杂质模型的哈密顿量之后，我们要求系统的静态磁化率。之所以要求解静态磁化率，是因为只有静态磁化率出现发散点时才能证明系统中由局域磁矩存在。我们要利用双推迟格林函数的技巧，推导系统的静态磁化率。双推迟格林函数技巧见固体物理学的相关书籍。总之，在经过一系列操作后，我们得到系统的静态磁化率为

$$\chi = 2\mu_B^2 \frac{\rho_{d\sigma}(E_F)}{1 - U\rho_{d\sigma}(E_F)} \quad (2.8)$$

通过之前格林函数法得到的自洽方程我们可以知道，当 $1 - U\rho_{d\sigma}(E_F)$ 小于 0 时，系统的自由能极小，方程有稳定的磁性解。当 $1 - U\rho_{d\sigma}(E_F)$ 大于 0 时，方程的非磁性解不再稳定，只有稳定的磁性解。而 $1 - U\rho_{d\sigma}(E_F)$ 等于 0 的曲线被称为系统的磁性与非磁性的转变边界。

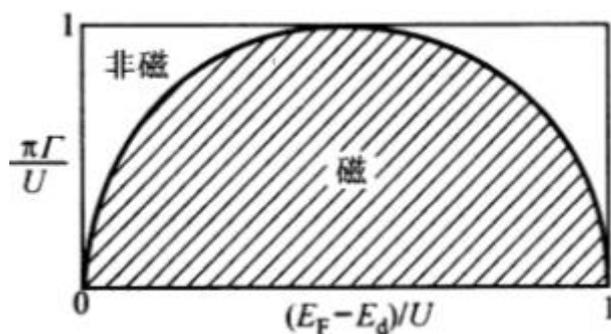


图 2-1 该图为周期安德森模型的非磁性与磁性区域分布。图中 Γ 为常数, 等于

$$\pi V_{kd}^2 \rho_F^0$$

上图为系统的磁性与非磁性的转变边界, 从图中我们可以看到只有当 $\frac{E_F - E_d}{U}$ 在 0 到 1 之间时系统才有可能形成局域磁矩。

2.3 近藤效应

1934 年, De Haas 等人在实验中发现 Au 的电阻会在一个特定温度 T_0 下出现极小值。他们发现 Au 中掺入了微量的磁性金属杂质。随后人们发现, 在一些非磁性金属中掺杂 3d 壳层未满足的磁性金属有时会观测到电阻值极小的现象。人们称其为“黄金电阻反常”。之后, 人们从实验数据中归纳出, 在扣除电子被热电子散射的电阻贡献后, 在 T_0 附近电阻会随温度呈对数变化

$$R_i = a - b \ln T$$

由于实验证明在出现电阻极小的现象的同时, 我们一定可以在金属中发现局域磁矩。基本可以肯定的是, 电阻极小现象与局域磁矩的作用有关。接着, 实验发现只有在磁性杂质浓度非常低的时候, 才会出现电阻极小值现象。所以, 我们基本可以排除电阻极小现象的原因来自于局域磁矩间的相互作用, 因为在磁性杂质浓度很低时, 局域磁矩之间的距离可以被看成是无穷远, 相互作用趋于 0。之后, 日本的 J.Kondo 认为电阻极小现象是由金属中的传导电子与局域自旋的相互作用导

致的，他建立了传导电子与局域磁矩间的 s-d 交换模型，通过二阶微扰的方法成功解释了电阻极小现象，人们把这个模型称之为近藤单杂质模型。

除了电阻极小现象，实验发现在零温时，金属的比热、磁化率等物理参数都会有反常现象，人们把这些反常现象统称为近藤效应。遗憾的是，近藤以及之后科学家的微扰理论并不能解释全部的近藤效应，人们逐渐发现，微扰理论在零温下对该模型并不适用。接着，实验发现，在零温时近藤效应是稀磁合金中传导电子与局域磁矩呈反铁磁耦合所特有的现象。日本物理学家 K. Yosida 在忽略费米面内电子间相互作用的前提下，通过 s-d 交换理论证明了当传导电子与局域磁矩呈反铁磁耦合时，近藤单态是系统的基态。这时，磁性杂质的磁矩会被传导电子屏蔽，这就是近藤屏蔽效应。

但是，忽略费米球内电子的相互作用显然过于粗糙。事实上在低温区近藤问题是很复杂的，当一个电子被磁性杂质散射时，磁性杂质的自旋取向也要变化，这样第二个电子在该杂质上的散射就受到了影响，这也就是说传导电子间会有间接的相互作用，这是一种关联效应。随着温度的降低，热涨落效应逐渐减小，关联作用逐渐被体现出来，费米球的内部事实上应该用多体理论来分析。1975 年，威尔逊用重整化群的方法（数值方法）证明了 0 温时的基态是近藤单态。1980 年，N. Andrei 与 P.B. Wiegmann 通过贝脱方案求得了这个问题的解析解，至此单杂质近藤问题才被完整解决。

另外，单杂质近藤问题中还有一个近藤温度的概念。当温度大于近藤温度时，磁性杂质表现为独立磁离子的特性，不会发生近藤屏蔽。只有温度小于近藤温度时，多体关联效应会使局域磁矩间的直接相互作用被传导电子屏蔽，系统为近藤单态。

2.4 RKKY 相互作用

RKKY 由其主要研究者 M.A.Ruderman、C.Kittel、T.Kasuya、K.Yosida 的姓名首字母组合而成，描述了稀磁合金中局域自旋间的间接相互作用。

1954 年，实验表明金属 Ag 在核磁共振实验中吸收线会有展宽，M.A.Ruderman 和 C.Kittel 把散射理论中的二次微扰论和核自旋与传导电子的自旋交换作用相结合，引入了核自旋间的有效相互作用成功的解释了这一现象。之后，T.Kasuya 为了解释锰铜金属的核磁共振超精细结构，首次引入了传导电子与局域自旋间的 s-d 交换模型，进而完善了这方面的理论。最后，K.Yosida 在计算中发现局域自旋间的间接交换作用会引起自旋不同的传导电子的密度起伏，进而给出了包含了局域自旋-局域自旋、电子自旋-局域自旋、电子自旋-电子自旋的哈密顿量。至此，局域自旋间相互作用的理论被完整的建立。

描述局域自旋间 RKKY 相互作用的哈密顿量可以写成

$$H_{RKKY} = \sum_{n,m} S_n \cdot S_m F(|R_n - R_m|) \quad (2.9)$$

其中相互作用强度函数为

$$F(|R|) = \frac{9\pi}{2} \left(\frac{J^2}{E_F} \right) \left\{ \frac{\cos 2k_F R}{(2k_F R)^3} - \frac{\sin 2k_F R}{(2k_F R)^4} \right\} \quad (2.10)$$

求和号上的 ‘ 表明求和时要除去 m 等于 n 的项。从 F(R) 的表达式可以看出，RKKY 作用具有长程的特点。当 R 较大时，F 随 R^{-3} 衰减，并以 $(2k_F)^{-1}$ 为周期振荡。从数学上看，相互作用强度函数可以当作

$$F(x) = \frac{\cos x}{x^3} - \frac{\sin x}{x^4} \quad (2.11)$$

该函数的图像为

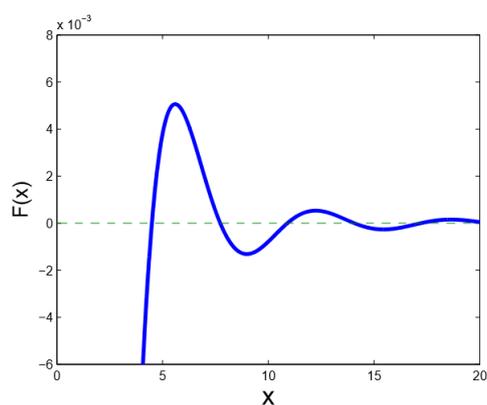


图 2-2 该图像为 RKKY 互作用的强度函数，随 R^{-3} 衰减，并以 $(2k_F)^{-1}$ 为周期振荡。

从图像中可以看出 $F(x)$ 函数会出现正负交替的现象，这也就说明局域磁矩间的关联作用不固定，根据 x 大小的不同会出现铁磁关联和反铁磁关联两种情况。

在我们的研究中，我们采用唯像的方法把 RKKY 的互作用强度函数看成是自旋相互作用的交换积分 J_h 。另外，由于我们是在导带电子填充数在半满附近分析问题，这时 x 在 2π 附近，局域磁矩间表现非反铁磁耦合。

3 平均场方法

3.1 研究近藤问题的理论模型

这里首先要说明的是,之前我们讨论的近藤单杂质模型、安德森单杂质模型虽然解决了稀磁金属中传导电子与局域磁矩间的关系,但是这两个模型描述的系统并不是重费米子系统,用两种模型求得的电子有效质量并不会在低温下变得很大。只有考虑晶格中局域磁矩之间的相干效应,系统在低温下才能表现出重费米子液体的行为。因此,近藤晶格模型和周期安德森模型这两个描述重费米子化合物的基本模型被建立起来。

3.1.1 近藤晶格模型

近藤晶格模型的哈密顿量为

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + J_K \sum_i s_i S_i \quad (3.1)$$

其中,第一项用二次量子化的形式表示传导电子海的动能,第二项用海森堡自旋交换作用描述 i 格点局域磁矩 S_i 与传导电子自旋 s_i 的近藤相互作用。

一般来说,我们用重费米子算符处理传导电子的自旋。

$$s_i = \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} c_{i\alpha}^+ \tau_{\alpha\beta} c_{i\beta} \quad (3.2)$$

其中, $\tau_{\alpha\beta}$ 是泡利矩阵。在把上式代入哈密顿量之后,我们就得到了近藤晶格模型完整的哈密顿量。

尽管近藤晶格模型是我们研究重费米子体系的基本模型,但遗憾的是,至今我们也只能算出近藤耦合强度 J_k 趋于 0 或无穷大时的精确解。我们依然不能在 J_k 为一般情况下得到系统的精确解。

3.1.2 周期安德森模型

周期性安德森模型的哈密顿量为

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + \sum_{i\sigma} \varepsilon_f f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + \sum_{i\sigma} V (c_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + f_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}) + U \sum_i n_{f\uparrow} n_{f\downarrow} \quad (3.3)$$

其中，第一项描述传导电子海的动能，第二项描述未考虑涨落的局域电子的动能，第三项描述局域 f 电子和传导 c 电子的耦合作用，V 表示耦合强度，第四项是 f 电子的关联能。

这个模型也是描述重费米子体系的基本模型。从哈密顿量中可以看出，不同于近藤晶格模型，周期性安德森模型考虑了局域电子的涨落，局域的 f 电子和传导的 s 电子可以互相转换。因此分析周期安德森模型要考虑三种情况。电子关联涨落很小的近藤极限、电子关联涨落很大的混合价极限以及它们两者之间的情况。一般来说，对于重费米子体系，f 电子的关联项一般都比较大，在分析问题中我们可以把 U 视为无穷大。在这种情况下，系统中就不存在 f 电子的双占据。我们可以用隶玻色子方法对该模型进行处理。

3.2 近藤海森堡晶格模型

从第二章的分析我们看出，局域磁矩间的 RKKY 相互作用对重费米子体系有着十分关键的作用。在近藤晶格模型的基础上，考虑局域磁矩间的 RKKY 相互作用，并唯像的用海森堡自旋交换作用代替 RKKY 相互作用，我们就得到了近藤海森堡模型。

近藤海森堡晶格模型的哈密顿量为

$$H = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} + J_K \sum_i S_i \cdot S_i + J_H \sum_{\langle ij \rangle} S_i \cdot S_j \quad (3.4)$$

哈密顿量中前两项与近藤晶格模型相同，第一项用二次量子化的形式表示传导电子海的动能，第二项用海森堡自旋交换作用描述 i 格点局域磁矩 S_i 与传导电子自旋 s_i 的近藤相互作用，第三项就是引入的 RKKY 互作用项， $\langle ij \rangle$ 表示我们只考虑最邻近局域磁矩间的 RKKY 互作用。

一般情况我们会用赝费米子的方法对近藤海森堡晶格模型中的自旋算符做处理。这个方法在下文的讨论中我们也会用到。

另外，由于近藤海森堡晶格模型中 J_H 只是一个唯像的表示，在于实验结果对比时，我们还要把 J_H 转换回去。但是无论如何，近藤海森堡晶格模型的结构简单，物理图像明确，为我们在理论上的分析提供了极大的便利。

3.3 AFM 短程磁涨落与近藤屏蔽竞争与共存

3.3.1 拟牛顿法

下面我来介绍一下，解决该问题用到的主要的数值计算方法----拟牛顿法。

拟牛顿法是解决非线性方程组的常用数值方法。它由一维牛顿法以及牛顿下山法衍生而来。假设，我们要求的非线性方程组为

$$\vec{f}(\vec{x}) = \vec{x}$$

于是，我们定义

$$\vec{F}(\vec{x}) = \vec{f}(\vec{x}) - \vec{x}$$

与一维牛顿法一样，我们用泰勒公式把函数展开

$$\vec{F}(\vec{x}) = \vec{F}(\vec{x}_0) + \frac{\partial \vec{F}(\vec{x})}{\partial \vec{x}} \Big|_{\vec{x}=\vec{x}_0} \cdot (\vec{x} - \vec{x}_0) + O$$

它的分量形式为

$$F_\alpha(\vec{x}) = F_\alpha(\vec{x}_0) + \sum_{\beta} F'_{\alpha\beta}(\vec{x}_0)(x_\beta - x_{0\beta})$$

之后, 我们定义雅可比矩阵

$$F'_{\alpha\beta} = \frac{\partial F_\alpha(\vec{x})}{\partial x_\beta}$$

之后, 我们便可以利用雅可比矩阵, 来更新我们的位移矢量。

$$\Delta\vec{x} = \vec{x} - \vec{x}_0 = -[F'(\vec{x}_0)]_{\alpha\beta}^{-1} \cdot \vec{F}(\vec{x}_0)$$

直到两次位移差的绝对值小于方程需要的精度为止。

这里要提的是, 并不是所有情况下都可以使用拟牛顿法求解非线性方程组。首先, 拟牛顿法的收敛性十分脆弱, 而且维数越高越是如此, 这也就意味着, 在求解高维非线性方程组时, 我们需要很好的初值才能保证方程组的根收敛; 另外, 因为在拟牛顿法中, 我们要对雅可比矩阵求逆, 然而事实上, 并不是所有雅可比矩阵都存在逆矩阵, 有时我们需要进行代数变换或采取一定的近似才能得到逆矩阵。例如, 我们要讨论的问题中, 由方程

$$\begin{aligned} n_c &= \frac{1}{N} \sum_{ka} \theta(-E_{ka}) \left[1 + C_a \frac{(\varepsilon_k - J_H \chi r_k - \lambda)}{W_k} \right] \\ 0 &= \chi + \frac{1}{N} \sum_{ka} \theta(-E_{ka}) \frac{1}{2} r_k \left[1 - C_a \frac{(\varepsilon_k - J_H \chi r_k - \lambda)}{W_k} \right] \\ 0 &= 1 + \frac{1}{N} \sum_{ka} \theta(-E_{ka}) \left[C_a \frac{J_k}{W_k} \right] \\ 1 &= \frac{1}{N} \sum_{ka} \theta(-E_{ka}) \left[1 - C_a \frac{(\varepsilon_k - J_H \chi r_k - \lambda)}{W_k} \right] \end{aligned}$$

其中

$$\begin{aligned} E_{ka} &= \frac{1}{2} [(\varepsilon_k + J_H \chi r_k + \lambda) + C_a W_k], C_1 = 1, C_2 = -1 \\ W_k &= \sqrt{(\varepsilon_k - J_H \chi r_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\varepsilon_k &= -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y - u \\ r_k &= \cos k_x + \cos k_y\end{aligned}$$

可知,在某次迭代中当 \mathbf{u} 和 λ 的变化不足以引起阶跃函数的变化时, λ 与 \mathbf{u} 在方程中的地位完全是等价的,且都以一次项的形式出现,四个自洽方程对二者的偏导必然是相等的,然而有两行(列)相等的矩阵并不存在逆矩阵。于是,在数值计算的过程中我们采取了把 $\lambda + \mathbf{u}$ 看成是一个参数,把 \mathbf{u} 或 λ 单独看成是一个参数,在这样的代换下,由于 $\lambda + \mathbf{u}$ 与 \mathbf{u} (λ) 的地位不等价,雅可比矩阵可以正常求出。事实上,在这个问题中,作为拉格朗日不定乘子, λ 或 \mathbf{u} 单独存在是没有物理意义的,而只有 λ 与 \mathbf{u} 的和才具有物理意义。因此,把这两项看成一项也是物理上的要求。

另外,由于数值计算不同于求解析解,有时雅可比矩阵中出现过小的数(本应该为 0),会导致矩阵无法求逆或是迭代发散。为避免这种情况出现,有时我们需要忽略机械精度以下的有效数字。但这并不是说,所有过小的数我们都要把它们看作是 0。我们要通过了解参数的物理意义区分参数何时计算为 0,何时严格为 0。对计算为 0 的数,进行上述操作是可行的。但是对于严格为 0 的数,任何操作都会破坏其物理意义。

3.3.2 理论推导

3.3.2.1 自洽方程的推导

首先说明,我们之后的讨论都建立在二维正方晶格的基础上。在经过之前的铺垫后,我们可以轻松的写出近藤—海森堡模型的哈密顿量。

$$\begin{aligned}H &= H_c + H_f + H_K \\ H_c &= -t \sum_{ij\sigma} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} + t' \sum_{\langle\langle ij \rangle\rangle} c_{i\sigma}^+ c_{j\sigma} - u \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \\ H_f &= J_H \sum_{\langle ij \rangle} S_i \cdot S_j + \sum_i \lambda_i (\sum_{\sigma} f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} - 1) \\ H_K &= J_K \sum_i S_i \cdot s_i\end{aligned} \tag{3.5}$$

总的哈密顿量被写成传导电子的哈密顿量 H_c 、局域磁矩的哈密顿量 H_f 和近藤屏蔽

的哈密顿量 H_k 。其中， H_c 包含的三项分别是最邻近传导电子间的相互作用、次邻近传导电子间的相互作用和传导电子海的总化学势； H_f 包含最邻近局域自旋间的 RKKY 相互作用和单占据约束带来的拉格朗日乘子项，之所以引入这项，是因为最后要对拉格朗日项求偏导以得到基态的能量（极小值）；第三项只包含传导电子与局域自旋的相互作用。

在得到哈密顿量之后，直接对其求解是不现实的。我们要采取一系列的方法使其对角化。首先，我们用赝费米子方法来表示自旋算符。

$$S_i = \sum_{\sigma_1 \sigma_2} f_{i\sigma_1}^+ \frac{\tau_{\sigma_1 \sigma_2}}{2} f_{i\sigma_2}, S_i = \sum_{\sigma_1 \sigma_2} c_{i\sigma_1}^+ \frac{\tau_{\sigma_1 \sigma_2}}{2} c_{i\sigma_2} \quad (3.6)$$

其中， $\tau_{\sigma_1 \sigma_2}$ 是泡利矩阵元。可以证明两个泡利矩阵元之间满足如下的关系。

$$\tau_{\sigma_1 \sigma_2} \cdot \tau_{\sigma_3 \sigma_4} = 2\delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} - \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\sigma_3 \sigma_4} \quad (3.7)$$

关于上式的证明，我们可以把泡利矩阵

$$\sigma^x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma^y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

代入验证，易知，第一项描述 x, y 方向的泡利矩阵元，第二项描述 z 方向的泡利矩阵元。

我们把赝费米子的算符以及泡利矩阵元之间的关系代入哈密顿量可知

$$\begin{aligned} S_i \cdot S_j &= \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4} (f_{i\sigma_1}^+ \frac{\tau_{\sigma_1 \sigma_2}}{2} f_{i\sigma_2}) (f_{j\sigma_3}^+ \frac{\tau_{\sigma_3 \sigma_4}}{2} f_{j\sigma_4}) \\ &= \frac{1}{4} \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4} f_{i\sigma_1}^+ f_{i\sigma_2} f_{j\sigma_3}^+ f_{j\sigma_4} (2\delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} - \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\sigma_3 \sigma_4}) \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} f_{i\sigma_1}^+ f_{i\sigma_1} f_{j\sigma_2}^+ f_{j\sigma_2} + \frac{1}{4} \end{aligned} \quad (3.8)$$

同理

$$S_i \cdot S_j = -\frac{1}{2} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} f_{i\sigma_1}^+ c_{j\sigma_1} c_{j\sigma_2}^+ f_{i\sigma_2} + \frac{1}{4} (2 - \sum_{\sigma_2} c_{j\sigma_2}^+ c_{j\sigma_2}) \quad (3.9)$$

事实上, 在计算中我们忽略了上述交换作用的常数项。具体原因在后文阐述。

我们可以看到哈密顿量中都是 4 算符项, 这样的项我们是很难将其对角化的。

因此, 我们引入了平均场参量来表示哈密顿量的近似解。其中, 平均场参量为

$$\chi = -\langle f_{i\uparrow}^+ f_{j\uparrow} + f_{i\downarrow}^+ f_{j\downarrow} \rangle, V = \langle c_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} \rangle \quad (3.10)$$

这里我们使用运用最为广泛的哈特里-福克近似。该近似的证明我们会在之后的双推迟格林函数法的部分介绍。

$$AB = \langle A \rangle B + A \langle B \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle \quad (3.11)$$

这样

$$\begin{aligned} H_f &= \frac{J_H}{2} \sum_{i,j=i+\delta} S_i \cdot S_j = \frac{J_H}{4} \sum_{i\delta\sigma} (\chi_\delta f_{i+\delta,\sigma}^+ f_{i\sigma} + \chi_\delta^* f_{i,\sigma}^+ f_{i+\delta,\sigma}) + \frac{J_H}{4} \sum_{i\delta} |\chi_\delta|^2 \\ H_k &= J_K \sum_i S_i \cdot S_j = -\frac{J_K}{2} \sum_{i\delta} (V c_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} + V^* f_{i\sigma}^+ c_{i\sigma}) + \frac{J_K}{2} \sum_i |V|^2 \end{aligned} \quad (3.12)$$

为了便于分析, 我们把瓦尼尔表象变换到布洛赫表象。

$$f_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k f_{k\sigma} e^{ikr}, c_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{k\sigma} e^{ikr}$$

这时, 总哈密顿量的三部分变换为

$$\begin{aligned} H_c &= \sum_{k\sigma} \varepsilon_k c_{k\sigma}^+ c_{k\sigma} \\ H_f &= J_H \sum_{k\sigma} \chi r_k f_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + J_H N |\chi|^2 \\ H_K &= -\frac{J_K}{2} \sum_{k\delta} (V c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} + V f_{k\sigma}^+ c_{k\sigma}) + \frac{J_K N}{2} |V|^2 \end{aligned} \quad (3.13)$$

其中

$$\begin{aligned} \varepsilon_k &= -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y - u \\ r_k &= \cos k_x + \cos k_y \end{aligned} \quad (3.14)$$

经过这一系列变换, 我们终于可以将哈密顿量进行对角化

$$H = \sum_{k\sigma} (c_{k\sigma}^+ \quad f_{k\sigma}^+) \begin{pmatrix} \varepsilon_k & -\frac{J_K V}{2} \\ -\frac{J_K V}{2} & J_H \chi r + \lambda \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\sigma} \\ f_{k\sigma} \end{pmatrix} + H_c$$

$$H_c = -N\lambda + J_H N |\chi|^2 + \frac{J_K N}{2} |V|^2$$

通过解矩阵的久期方程, 我们可以得到能量的表达式

$$H = \sum_{ka\sigma} (E_{ka} \alpha_{ka\sigma}^+ \alpha_{ka\sigma}) + H_c$$

$$E_{ka} = \frac{1}{2} [(\varepsilon_k + J_H \chi r_k + \lambda) + C_a W_k], C_1 = 1, C_2 = -1 \quad (3.15)$$

$$W_k = \sqrt{(\varepsilon_k - J_H \chi r_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2}$$

接着, 我们可以用量子统计物理的方法求得系统基态能量的表达式。具体推导请参见相关书籍。

我们最终得到

$$E_g = 2 \sum_{ka} E_{ka} \theta(-E_{ka}) + J_H N |\chi|^2 + \frac{J_K N}{2} |V|^2 - N\lambda \quad (3.16)$$

其中, θ 是阶跃函数, 当然我们也可以用品米分布函数来代替 θ 。

拉格朗日乘子法指出当能量对各参量的偏导数均为 0 时, 我们可以得到系统能量的极值, 这里我们得到的是系统能量的极小值, 即基态能量。因此, 我们得到四个自洽方程

$$0 = n_c + \frac{\partial E_g}{N \partial u}, 0 = \frac{\partial E_g}{N \partial \chi}, 0 = \frac{\partial E_g}{N \partial V}, 0 = \frac{\partial E_g}{N \partial \lambda} \quad (3.17)$$

n_c 是传导电子的填充数, 我们把能量 E_g 代入自洽方程中可得

$$\begin{aligned}
 n_c &= \frac{1}{N} \sum_{ka} \theta(-E_{ka}) \left[1 + C_a \frac{(\varepsilon_k - J_H \chi r_k - \lambda)}{W_k} \right] \\
 0 &= \chi + \frac{1}{N} \sum_{ka} \theta(-E_{ka}) \frac{1}{2} r_k \left[1 - C_a \frac{(\varepsilon_k - J_H \chi r_k - \lambda)}{W_k} \right] \\
 0 &= 1 + \frac{1}{N} \sum_{ka} \theta(-E_{ka}) \left[C_a \frac{J_k}{W_k} \right] \\
 1 &= \frac{1}{N} \sum_{ka} \theta(-E_{ka}) \left[1 - C_a \frac{(\varepsilon_k - J_H \chi r_k - \lambda)}{W_k} \right]
 \end{aligned} \tag{3.18}$$

其中

$$\begin{aligned}
 E_{ka} &= \frac{1}{2} [(\varepsilon_k + J_H \chi r_k + \lambda) + C_a W_k], C_1 = 1, C_2 = -1 \\
 W_k &= \sqrt{(\varepsilon_k - J_H \chi r_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2} \\
 \varepsilon_k &= -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y - u \\
 r_k &= \cos k_x + \cos k_y
 \end{aligned} \tag{3.19}$$

3.3.2.2 数值分析

当系统的近藤耦合强度 J_k 、RKKY 相互作用强度 J_H 、导带电子填充数 n_c 、最邻近传导电子间的相互作用系数 t 、次邻近传导电子间的相互作用系数 t' 确定之后，我们可以用数值的方法对自洽方程求解，进而可以得到系统的基态能量 E_g 。通过比较不同 J_k 、 J_H 、 n_c 、 t 、 t' 时系统的基态，我们可以得到系统的相图。

根据非线性方程组的数值理论，维数越高，方程组的收敛性就越脆弱。这也就是说，只有找到合适的初值，我们才能通过不断地迭代得到方程组的解。因此，直接求解 4 个自洽方程的方法是行不通的。我们应该先从特殊情况入手，再用特殊情况的解作为更一般情况的初值。不断重复这个过程，我们就可以得到最一般情况非线性方程组的解。

我们将用以拟牛顿法为主体的数值方法求解自洽方程，方程中各参量要先经过

无量纲化处理。

3.3.3 不同情况的讨论

下面我们要执行从特殊情况到一般情况的过渡

3.3.3.1 在 $J_H=0$, $n_c=1$, $t=1$, $t'=0$, $J_k=2$ 的情况下求解自洽方程。

这是该体系最简单的一种状态。从已知条件分析,在这种情况下, RKKY 相互作用被近藤屏蔽完全压制 ($J_H=0$); 导带电子半充满, 系统处于绝缘态 ($n_c=1$); 传导电子间只考虑最近邻的相互作用; 传导电子和局域自旋间有很大的近藤耦合强度 ($J_k=2$)。由以上参数, 我们可以化简自洽方程。首先, 由于 RKKY 相互作用被完全压制, 哈密顿量之中这部分将不复存在, 第二个自洽方程直接被消去, $\chi=0$ 。接着, 联立自洽方程 1, 4, 我们得到

$$\begin{aligned} \sum_{ka} \theta(-E_{ka}) C_a \frac{(\varepsilon_k - \lambda)}{W_k} &= 0 \\ \sum_{ka} \theta(-E_{ka}) &= 1 \end{aligned} \quad (3.20)$$

由 E_{ka} 的形式易知

$$\begin{aligned} E_{k-} - \lambda &= \frac{1}{2} [(\varepsilon_k - \lambda) - \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2}] < 0 \\ E_{k-} - \varepsilon_k &= \frac{1}{2} [(-\varepsilon_k + \lambda) - \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2}] < 0 \\ E_{k+} - \lambda &= \frac{1}{2} [(\varepsilon_k - \lambda) + \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2}] > 0 \\ E_{k+} - \varepsilon_k &= \frac{1}{2} [(-\varepsilon_k + \lambda) + \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2}] > 0 \end{aligned} \quad (3.21)$$

因此, ε_k 与 λ 是 E_{ka} 的渐近线。要满足 $\sum_{ka} \theta(-E_{ka})=1$ 的条件, E_{k+} 必须全部大于 0,

E_{k-} 必须全部小于 0. 此时 $\lambda = 0$. $\sum_{ka} \theta(-E_{ka}) C_a \frac{(\varepsilon_k - \lambda)}{W_k} = 0$ 可化简为

$\sum_k \frac{2t(\cos kx + \cos ky) + u}{W_k} = 0$ 。由于余弦函数的对称性 $\frac{2t(\cos kx + \cos ky)}{W_k}$ 对第一布里

渊区求和为 0, 所以 $u=0$.

综上所述, 四个自治方程被化简为

$$0 = 1 + \sum_k \frac{J_k}{W_k} \quad (3.22)$$

这样, 用一维的牛顿法可以直接求解方程。我们得到 v 随 J_k 变化的图像。这可以作为初值, 帮助我们求解更为复杂的自治方程。

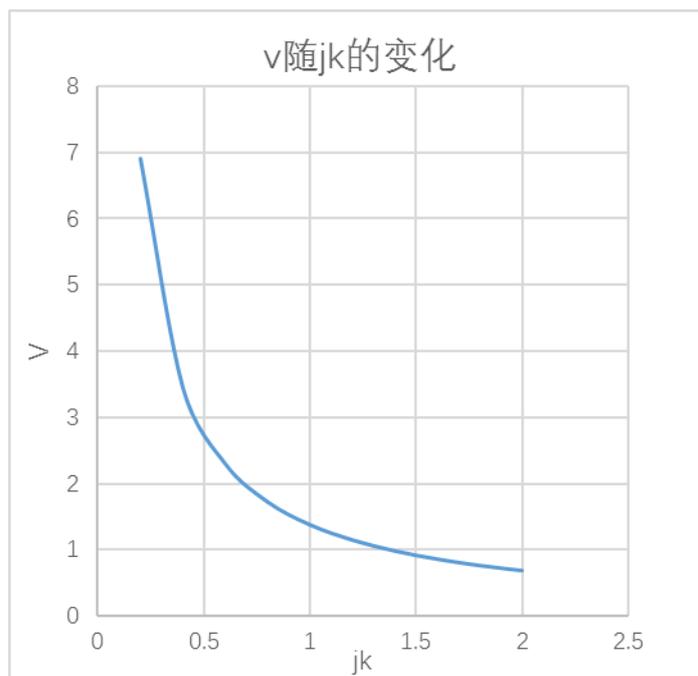


图 3-1 从图中可以看出 v 随 J_k 的增大而减小, 这是因为在能量的表达式中 J_k 与 v 以乘积的形式出现, 为了保证第一布里渊区中费米面的形状, 当传导电子和局域自旋的耦合变强时, v 就必须减小。

总结, 我们利用已知条件, 证明了当 $J_H=0$, $n_c=1$ 时, 拉格朗日乘子 λ 与 u 同时为 0, 进而把四个自治方程化成了一个, 并用一维牛顿法求出了方程的解, 并得

出了自洽参数 V 随 J_k 变化的图像。因为既没有考虑局域磁矩间的 RKKY 相互作用, 又没有考虑次紧邻传导电子间的相互作用, 这种情况几乎不可能出现在重费米子化合物中。但是, 通过对这种情况的研究, 我们不但可以估计其他参数的取值范围, 而且可以利用这组解作为初值, 分析其他相似情况的自洽方程, 如 $n_c=0.99$ 或 $J_h=0.1$ 。通过不断外推, 我们最终可以得到最一般情况的解。

3.3.3.2 在 $J_h=0$, $n_c=0.9$ (可变), $t=1$, $t'=0$ 、 $J_k=2$ 的情况下求解自洽方程。

从已知条件看, 这时 RKKY 相互作用完全被压制; 导带电子逐渐远离半充满; 保留最邻近传导电子间的相互作用, 忽略次临近导带电子的相互作用; 传导电子和局域自旋间有很大的近藤耦合强度。与情况一类似, 哈密顿量中的 RKKY 相互作用项被消去。自洽方程由四个变成三个。

联立方程 1, 4 可得

$$\begin{aligned} \sum_{ka} \theta(-E_{ka}) &= 0.95 \\ \sum_{ka} (1 + C_a \frac{(\varepsilon_k - \lambda)}{W_k}) &= 0.05 \end{aligned} \tag{3.23}$$

我们可以根据方程得到能量随 ε_k 变化的图像。

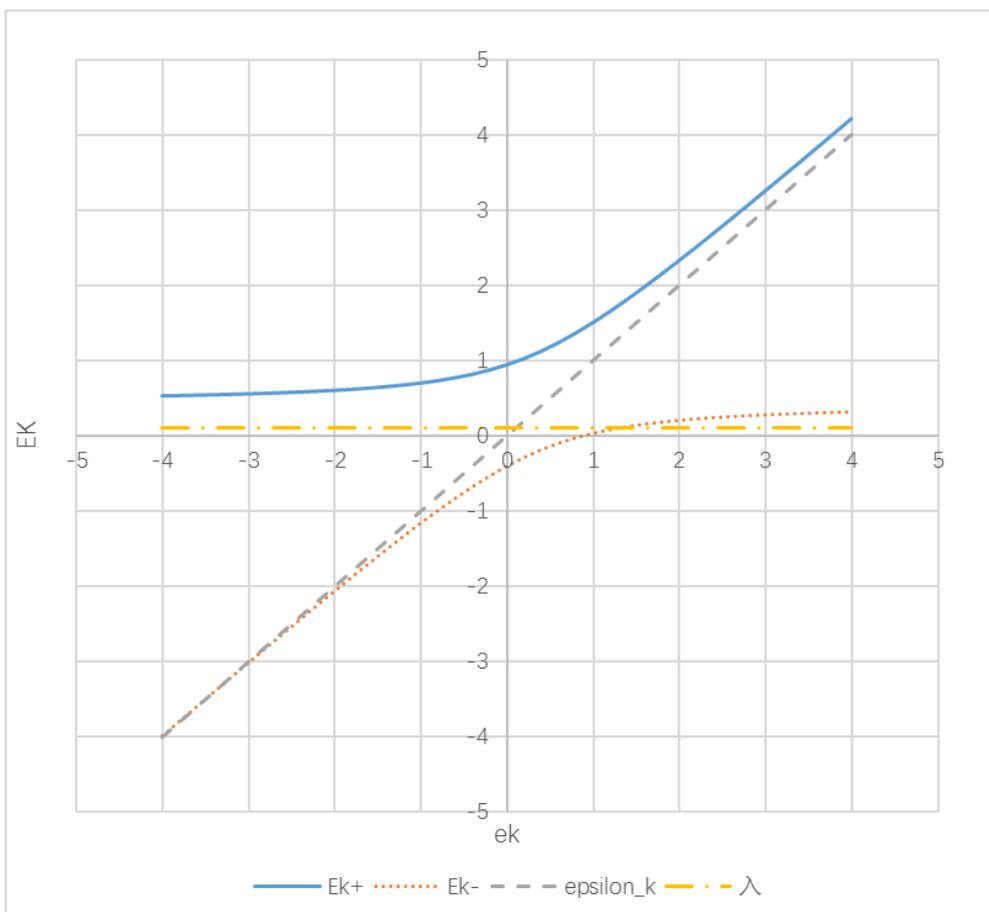


图 3-2 可以看出 ϵ_k 依然是能量函数的渐近线且能量的上半支依然大于 0, 但由于第一布里渊区费米面形状的改变, 我们必须改变拉格朗日乘子 λ , 使能量的下半支必须有一部分也大于 0。

从图中可以明显的看出, 能量的上半支恒大于 0, 这也使

$$\sum_{k+} \theta(-E_{k+}) = 0 \quad (3.24)$$

而能量的下半支, 有一部分大于 0, 所以

$$\sum_{k-} \theta(-E_{k-}) = 0.95 \quad (3.25)$$

另外, 由于我们之前求得的 $E_{k-} - \lambda = \frac{1}{2}[(\epsilon_k - \lambda) - \sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2}] < 0$, 结合上式,

由自洽方程求得的 λ 必须大于 0. 这也是解是否有物理意义的判据之一。

这样方程关于 a 的自由度可以消去, 最后 3 个自洽方程可以简化为

$$\begin{aligned}
 n_c &= \frac{1}{N} \sum_{k-} \theta(-E_{k-}) \left[1 - \frac{(\varepsilon_k - \lambda)}{W_k} \right] \\
 0 &= 1 - \frac{1}{N} \sum_{k-} \theta(-E_{k-}) \left[\frac{J_k}{W_k} \right] \\
 1 &= \frac{1}{N} \sum_{k-} \theta(-E_{k-}) \left[1 + \frac{(\varepsilon_k - \lambda)}{W_k} \right]
 \end{aligned} \tag{3.26}$$

其中

$$\begin{aligned}
 E_{k-} &= \frac{1}{2} [(\varepsilon_k + \lambda) - \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2}] \\
 W_k &= \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2} \\
 \varepsilon_k &= -2t(\cos kx + \cos ky) - u \\
 \theta(-E_{k-}) &= \frac{1}{1 + e^{\beta E_{k-}}}
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

可以看到，在这里我们把阶跃函数设为为费米分布。传导电子是费米子，而我们对自旋算符也做了赝费米子处理。这里用费米分布无疑是更为合理的。当然，在数值计算中我们也可以用传统的分段函数来描述阶跃函数，这不会对计算造成任何影响。

算法实现

我们用拟牛顿法与二分法结合起来求解这个非线性方程组。值得一提的是，这组自洽方程的收敛性十分脆弱，最后能否获得收敛的解很大程度上取决于初值的选择。事实上，上一种情况就是本情况 n_c 趋近于 1 时的极限。因此，我们在一开始可以令 n_c 趋近于 1，并把 λ 和 u 设为趋于 0 的初值。这样，经过迭代我们就可以得到收敛的解。之后，我们可以逐步减小 n_c 或 J_k ，并用上一种情况的解作为现情况的初值，从而得到不同 n_c 或和 J_k 方程的解。以下是主程序的伪代码。

主程序

Input: $X(1)$, $X(2)$, $X3$ 的猜值

Output: $X(1)$, $X(2)$, $X3$

program main

输入 $X(2), X3 \rightarrow X(2)$ 和 $X3$ 分别代表 $\lambda + \mu$, V , μ

设定出循环的精度 ϵ \rightarrow 3个解的方差, 结束循环的参数

猜测 $\lambda + \mu$, V 的初值 $X / -0.5, 0.6906 / \rightarrow X(1)$, $X(2)$ 的初值

猜测 μ 的初值 $X3 = -0.37 \rightarrow X3$ 的猜值

do while($\epsilon > 0.001$)

使用牛顿法计算 $\lambda + \mu$ 和 V

使用二分法计算 $\mu \rightarrow$ 用二分法得到下一轮循环的参数 $X3$

计算精度

end do

写出最后的结果

end program

首先我们确定 u , 对其中两个方程用拟牛顿法求解 λ 和 V , 然后代入得到的 λ 和 V 用二分法对另一个方程求出 u 。通过不断的迭代, 我们就能求出该方程组的根。

数据分析

首先, 我们要分析第一布里渊区费米面的大小随导带电子填充数 n_0 的变化。在计算中, 我们无法对第一布里渊区中的每一个点都进行分析, 我们可以选取第一布里渊区中的 10000 个点, 用该点的值作为该点周围点的平均值。进而, 我们就可以在第一布里渊区中进行求和、积分等操作。最终, 我们得到了该系统在第一布里渊区内的费米面。

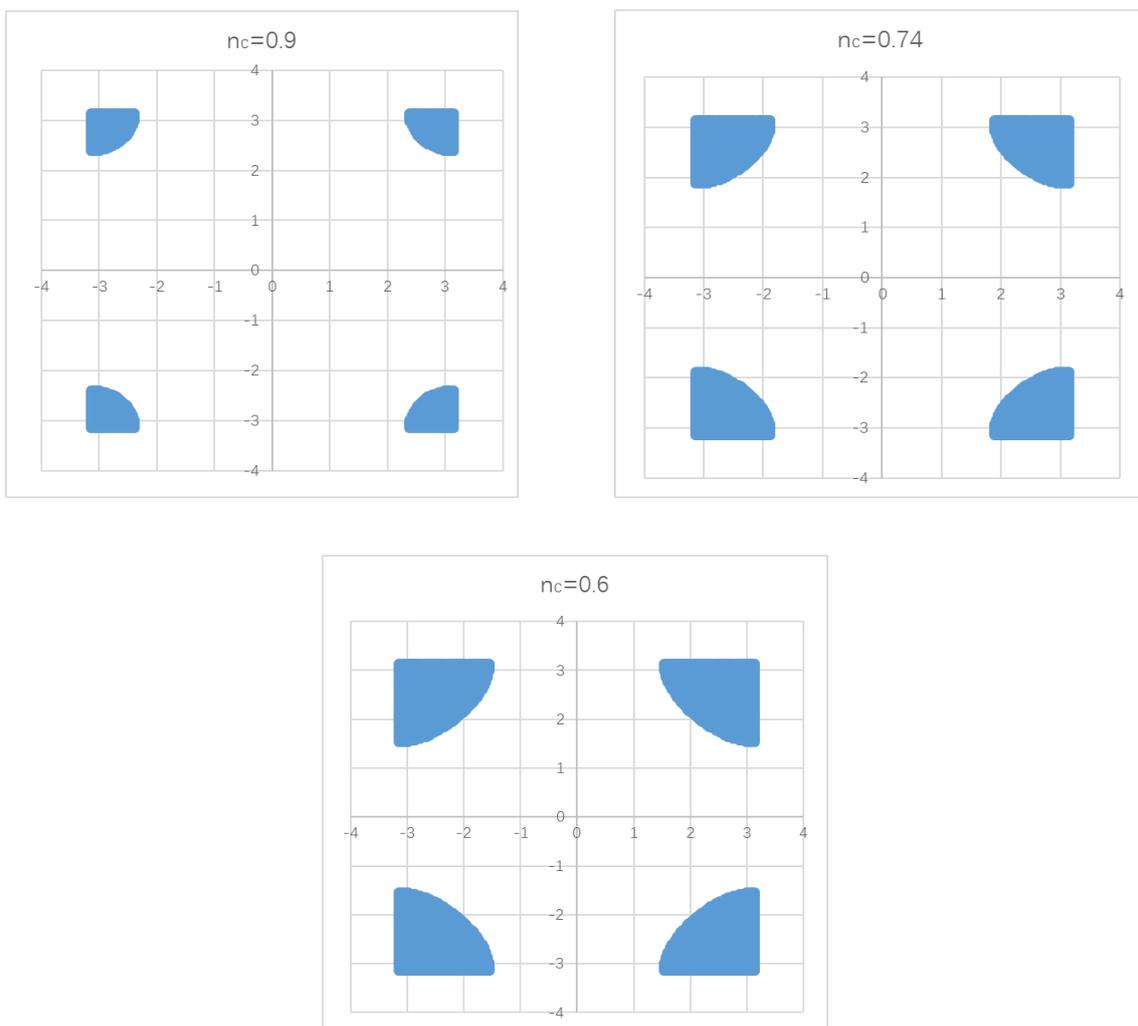


图3-3 以上三图分别是 n_c 等于0.9、0.74和0.6的情况，从单张图可以看出，费米面出现在布里渊区的四个角。这一点可以从 E_{k-} 的表达式或者图2中得到验证，只有当 ε_k 的值接近-4时，才有可能出现 E_{k-} 大于0的情况（这种情况对应费米面的外部）。

横向对比 n_c 等于0.9、0.74和0.6的费米面我们发现，当 n_c 越小时，费米面越大。

接着，我们可以得出平均场参数 V 以及拉格朗日乘子 $\lambda+u$ 随导带电子填充数 n_c 的变化。从公式上分析

$$\frac{1}{N} \sum_{k-} \theta(-E_{k-}) = \frac{1+n_c}{2} \tag{3.28}$$

$$E_{k-} = \frac{1}{2} [(\varepsilon_k + \lambda) - \sqrt{(\varepsilon_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2}]$$

当 n_c 越大时，第一布里渊区的费米面就越小，这就要求 E_{k-} 大于0的部分减少。从 E_{k-}

的公式上看, 当 $E_{k-}=0$ 时,

$$\varepsilon_k = \frac{(J_k V)^2}{4\lambda} \quad (3.29)$$

当 ν 增大时, 能量的 0 点向正方向移动, E_{k-} 大于 0 的部分减少, 可以满足费米面的要求。

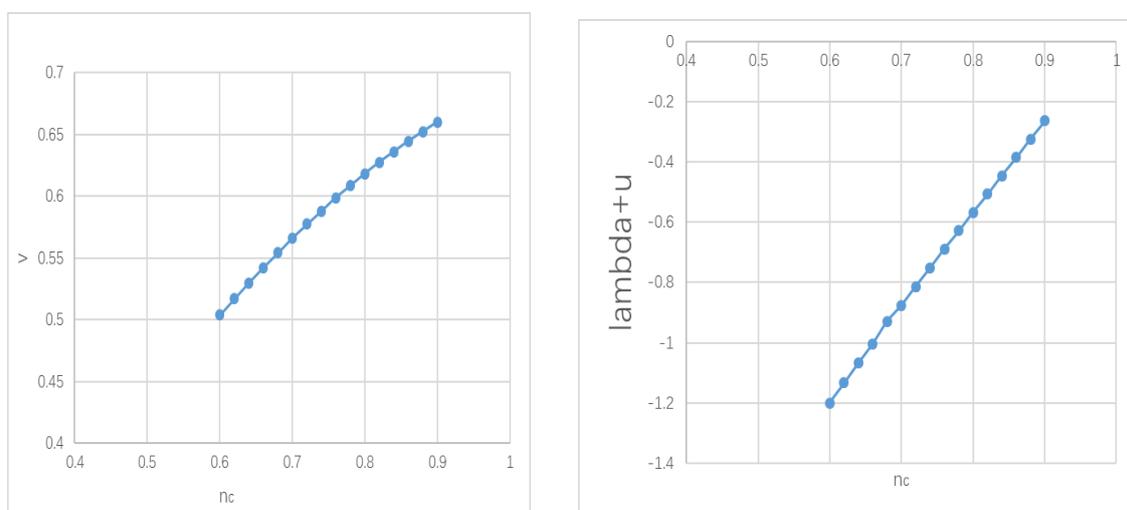


图 3-4, 左图是近藤屏蔽效应的平均场参数 ν 随导带电子填充数 n_c 变化的图像, 而右图是拉格朗日乘子随 n_c 变化的图像。 n_c 的增大, 要求系统在第一布里渊区的费米面要减小, 从分析中可以看出, ν 的增大可以满足这样的要求。

最后, 我们还可以得到近藤屏蔽效应的平均场参数 ν 与近藤耦合强度 J_k 之间的关系。通过程序的分析, 我们可以得到下表

J_k	τ	v	u
2	-0.2632	0.6596	-0.3776
1.9	-0.2632	0.6944	-0.3776
1.8	-0.2632	0.733	-0.3776
1.7	-0.2632	0.7761	-0.3776
1.6	-0.2632	0.8246	-0.3776
1.5	-0.2632	0.8796	-0.3776
1.4	-0.2632	0.9424	-0.3776
1.3	-0.2632	1.0149	-0.3776
1.2	-0.2632	1.0995	-0.3776
1.1	-0.2632	1.1994	-0.3776
1	-0.2632	1.3194	-0.3776

表 3-1 各平均场参数随 J_k 变化的表

从表中可以看出, v 会随着 J_k 的增大而减小, 而 λ 与 u 并不会随 J_k 变化。这一点很好用我们的理论解释。当传导电子间的近藤耦合作用强度增大时, 为了保证费米面的形状, 与之相关的平均场参数 v 只需要取一个比较小的值。同时, 近藤耦合强度与拉格朗日乘子在物理上并没有直接的联系, 因此当 J_k 变化时, 朗格朗日乘子不会随之改变。

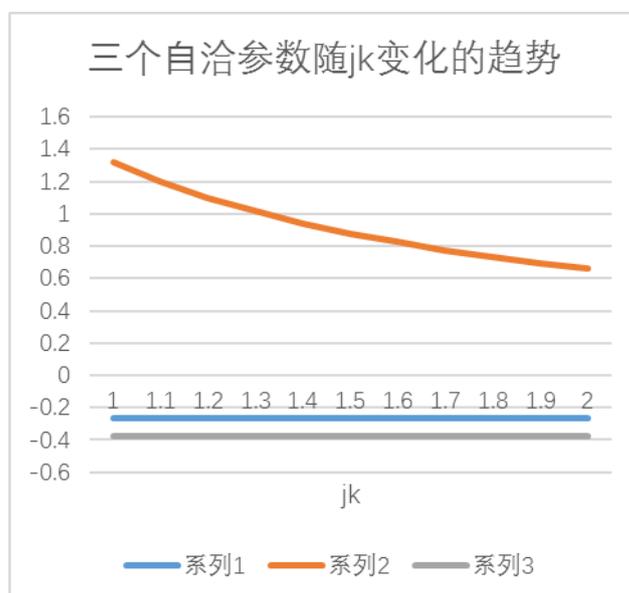


图 3-5, 上图是平均场参数 v , 拉格朗日乘子 $\lambda+u$ 和 u 随近藤屏蔽的耦合强度 J_k 变化的图像。为了保证费米面的形状, v 随着 J_k 的增大而减小。而拉格朗日乘子 $\lambda+u$ 和 u 并不会随着 J_k 变化而变化。

综上所述, 通过分析 $J_H = 0$, $n_c = 0.9$ (可变), $t = 1$, $t' = 0$ 、 $J_k = 2$ 的情况, 这

种情况没有考虑 RKKY 互作用, 或者可以认为 RKKY 互作用被近藤屏蔽作用完全压制。这时, 其他参数对近藤屏蔽的影响更为明显, 这有助于我们分析更复杂的情况。首先, 我们知道了在第一布里渊区费米面的分布与导带电子填充数 n_c 的大小有关, n_c 越小, 费米面越大。接着, 我们分析了其他自洽参数与 n_c 的关系, 这些自洽参数的值将作为初值, 代入到之后的研究中去。最后, 我们分析了自洽参数与近藤耦合强度 J_k 的关系, 明确了各参数对应的物理性质。

这里要补充的是 u 作为系统的化学势, λ 作为系统的拉格朗日乘子, 它们绝对的值是没有物理意义的, 我们可以通过改变 0 点的办法来人为的调控它们绝对的值。但是, 在 0 点确认之后, 它们绝对的值就具有了物理意义。由于在求自洽方程组的过程中, 我们使用了求偏导, 因此我们的计算中分析的全部都是变化量而非绝对量。这也是我们在推导海森堡自旋交换作用时舍去常数项的原因。

3.3.3.3 在 J_h 可变, $n_c=0.6\sim 1$, $t=1$, $t'=0\sim 0.3$ 、 $J_k=2$ 的情况下求解自洽方程。

通过对前两种情况的分析, 我们对近藤屏蔽作用有了充分的了解, 也得到了很多特殊情况下的初值。现在, 我们令 $J_H \neq 0$, 将 RKKY 引入到近藤晶格模型中, 分析近藤屏蔽与 RKKY 共存与竞争的关系。

首先, 我们考虑 $J_H \neq 0$, $t=1$, $J_k=2$, $n_c=1$ 的情况, 从下面的分析我们可以看到, 与其他情况相比, 这种情况最为简单。首先, 当 n_c 等于 1 时, 为保证第一布里渊区全部在费米面之内, 能量 E_{ka} 的上半支依然要求恒大于 0, 此时我们可以化简自洽方程为

$$\begin{aligned}
 0 &= \frac{1}{N} \sum_{ka} \frac{\varepsilon_k - J_H \chi r_k - \lambda}{W_k} \\
 0 &= \chi + \frac{1}{N} \sum_{ka} \frac{1}{2} r_k \left[1 + \frac{(\varepsilon_k - J_H \chi r_k - \lambda)}{W_k} \right] \\
 0 &= 1 - \frac{1}{N} \sum_{ka} \frac{J_k}{W_k}
 \end{aligned} \tag{3.30}$$

其中

$$\begin{aligned}
 W_k &= \sqrt{(\varepsilon_k - J_H \chi r_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2} \\
 \varepsilon_k &= -2t(\cos k_x + \cos k_y) + 4t' \cos k_x \cos k_y - u \\
 r_k &= \cos k_x + \cos k_y
 \end{aligned} \tag{3.31}$$

这是 3 参数的非线性方程组，我们可以用上文情况二的方法对其进行求解。

另外，初值的选择我们要着重介绍。显然，在加入新的参数 χ 之后，我们显然不能用情况二的初值对其进行求解，在考虑了局域磁矩间的 RKKY 相互作用后，两种情况的差距很大。这时我们应该令 J_H 趋近于 0，然后代入情况一的根作为初值，然后再逐步增加 J_H 的大小，用上一步的根当作下一步的初值，然后会得到各 J_H 对应的自洽参数，从中可以分析出近藤屏蔽和 RKKY 的竞争关系。

下表为在 $t' = 0.05$ 时，各自洽参数随 J_h 的变化，各数值都进行过无量纲化处理

J_h	$\lambda+u$	v	χ
1	-0.0306508	0.6200199	0.3610565
1.3	-0.0319877	0.5988232	0.3665234
1.6	-0.03262	0.5778149	0.3713096
1.9	-0.03342	0.5570489	0.375681
2.2	-0.03382	0.5366135	0.379721
2.5	-0.03433	0.5167015	0.3834178
2.8	-0.03456	0.4972666	0.3867224

表 3-2 各平均场参数随 J_h 变化的表

由上表我们可以做出平均场参数 V 和 χ 随 RKKY 耦合强度 J_h 变化的图像。由于此时 V 和 χ 同时不为 0，这说明在 J_h 与 J_k 的大小适中时，传导电子与局域磁矩间的近藤

屏蔽作用的确可以与 AFM 短程磁涨落共存。从图像中我们可以看出，随着 J_h 的增大，与近藤屏蔽有关的平均场参数 V 在减小，这说明 RKKY 耦合作用的增强可以抑制近藤屏蔽作用，二者存在竞争关系。从图像的趋势我们可以预测，在 RKKY 耦合作用特别强时，RKKY 甚至有可能杀死近藤屏蔽作用 ($V=0$)。而由于近藤屏蔽的耦合强度 J_k 没有变化，随着 J_h 的增大， χ 只是有着微小的变化。 χ 会有这样变化的原因是为了维持费米面的形状还是由于计算的误差，是我们下一步要探究的目标。

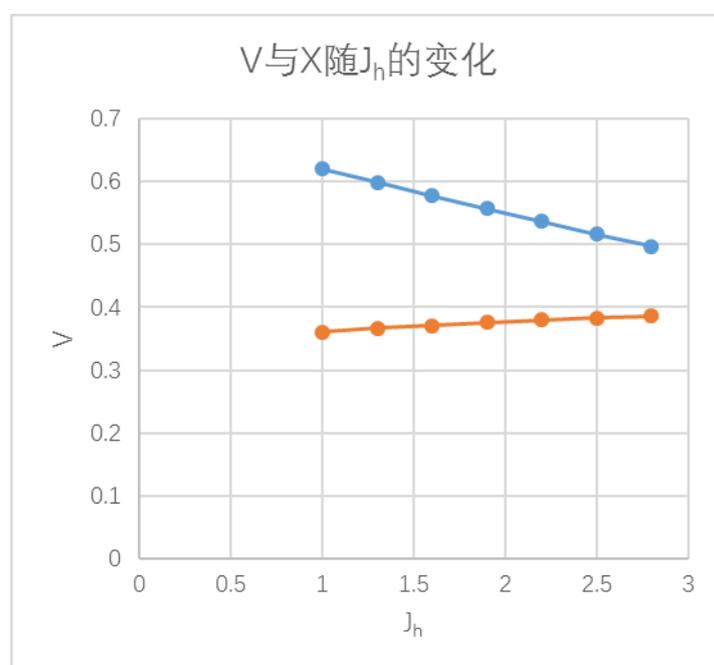


图 3-6 这是平均场参数 V 和 χ 随 RKKY 耦合强度 J_h 变化的图像。该图像表明了当 J_k 与 J_h 取值适中时，近藤屏蔽作用会和 AFM 短程磁涨落共存并互相压制。

讨论完以上情况，我们可以考虑导带电子远离半满的情况，为了运算的简单，我们先忽略次紧邻导带电子的相互作用，我们令 $n_c=0.95$ ，改变 RKKY 互作用的交换积分 J_h ，来观察其他参数的变化。首先，在计算中我们发现，直接带入 $n_c=1$ 时的结果方程是发散的，这就证明费米面大小的变化对整个系统影响很大，导带电

子填充数为 1 的解并不是方程组的近似解。我们之前的计算求得了 $J_h=0$, $n_c=0.95$ 的根, 我们在这个基础上逐步增加 RKKY 的耦合强度, 并最终得到了导带电子远离半满时, 自洽方程的根。

J_h	tao	v	x	u
0	-0.2632	0.6597	0	-0.2776
0.05	-0.264	0.6573	0.2526	-0.3987
0.06	-0.2644	0.657	0.2528	-0.4031
0.07	-0.2646	0.6566	0.253	-0.4067
0.08	-0.2645	0.6559	0.2531	-0.4113
0.09	-0.2647	0.65535	0.2533	-0.4156
0.1	-0.2648	0.6548	0.2538	-0.4199
0.15	-0.2655	0.6522	0.2552	-0.4413
0.17	-0.2657	0.651	0.2564	-0.4501

表 3-3 各平均场参数随 J_h 变化的表

在这次计算中, 我们发现当 RKKY 耦合强度增大到 0.17 时, $J_h=0.17$ 时的解并不能当作 $J_h=0.18$ 时的初值, 甚至 $J_h=0.171$ 时的初值也不行。此时我们遇到了方程的一个发散点, 而且由于我们计算方法的局限性, 我们无法跳过这个间断点, 继续计算 J_h 为其他数值的解。在之后的工作中, 我们将从物理上分析出现间断点的原因或者改变数值计算方法, 跳过这个间断点继续计算接下来方程的解。

但是, 无论如何, 我们得到了 $J_h=0\sim 0.17$ 时, 导带电子远离半满时自洽方程的解。我们由这些解做出参数 v 和 x 随 J_h 变化的图像。

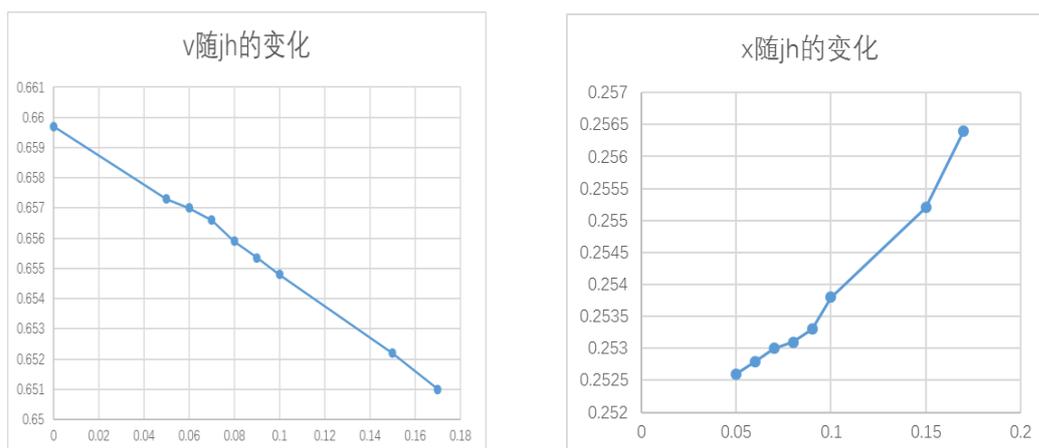


图 3-7 左图是 v 随 J_h 变化的图像，右图是 x 随 J_h 变化的图像。

从图像中可以看出在导带电子填充数远离半满时， v 会随 J_h 的增大而减小， x 会随 J_h 的增大而增大。

我们得出此时在第一布里渊区的费米面。费米面的分布可以佐证我们算法的正确性，但是我们仍不知道系统为什么会出现在发散点。

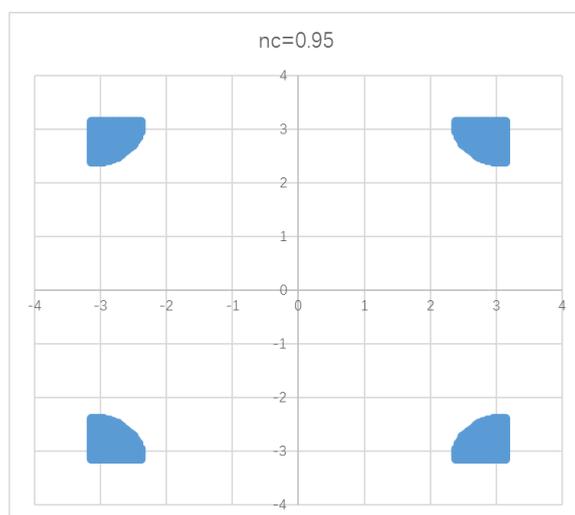


图 3-8 $n_c=0.95$ 时第一布里渊区的费米面

之后，我们画出 $J_h=0.05$, $n_c=0.95$, $t=1$, $t'=0$, $J_k=2$ 能量曲线

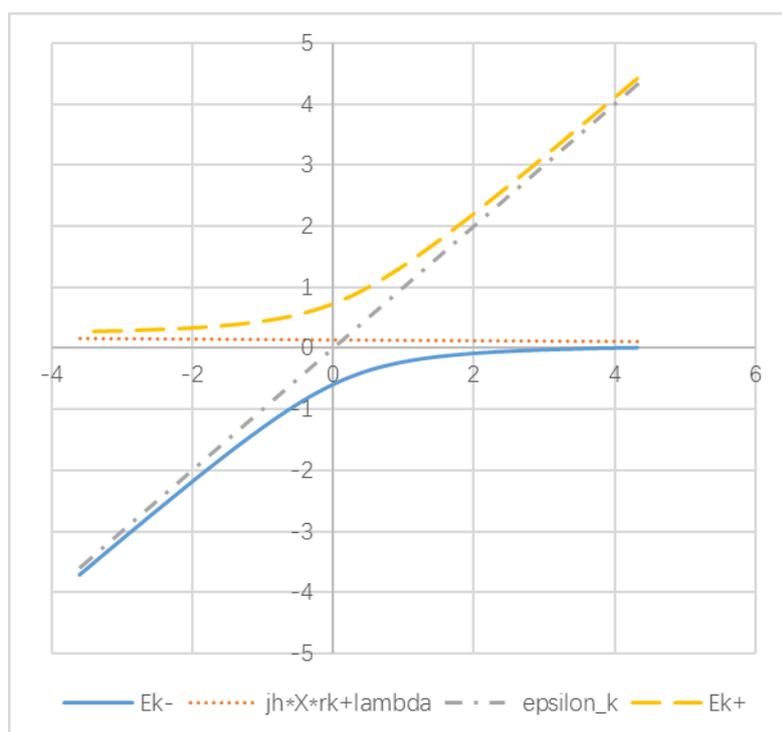


图 3-9 这是 $J_h=0.05$, $n_c=0.95$, $t=1$, $t'=0$, $J_k=2$ 能量曲线, ϵ_k 曲线和 $J_h \chi^* r k + \lambda$ 为能量曲线的渐进线。为保证费米面的分布, 能量的上半支恒大于 0, 能量的下半支在 ϵ_k 趋近于 4 的时候大于 0, 其余情况小于 0。

与之前的推导类似, 我们依然可以得出 ek 曲线和 $J_h \chi^* r k + \lambda$ 为能量曲线的渐进线。为保证费米面的分布, 能量的上半支必须恒大于 0, 能量的下半支在 ek 趋近于 4 的时候大于 0, 其余情况小于 0。这与我们理论上的分析相符。

3.3.3.4 小结

至此, 我们初步完成了对 AFM 短程磁涨落与近藤屏蔽竞争与共存问题的分析, 在分析问题的过程中, 我们完成了

- a. 从理论上得出了基态能量满足的自洽方程。
- b. 寻找到了求解部分情况自洽方程的方法: 从特殊情况逐步过渡到一般情况, 用特殊情况的解当作一般情况的初值。

c.在最后一种情况的分析中,从数据上看到了 AFM 短程磁涨落与近藤屏蔽的竞争与共存

但是,我们还有未完成的工作和要解决的问题

a. $J_h=0.17$ 时,方程出现发散的点,在物理上和数值上我们都未找到发散的原因。

b.据文献中分析, χ 小于 0 时,我们会得到不稳定的解,我们的工作中并没有计算出 χ 小于 0 的解。

c.在近藤晶格模型下,我们应该可以得到重费米子系统在态密度、比热、磁化率上反常的物理性质,得到各种情况的基态能量之后分析这些物理性质是我们下一步要进行的工作。

4 结论与展望

本文介绍了重费米子体系和平均场理论的发展以及在近藤海森堡晶格模型下用理论和数值的方法分析 AFM 短程磁涨落与近藤屏蔽竞争与共存的关系。

本文第一章介绍了重费米子体系的物理性质和研究重费米子体系的方法和平均场理论的优势与不足。

本文第二章，我们系统地介绍了近藤海森堡晶格模型建立的理论基础。我们首先分析并证明了模型建立的基础理论--海森堡自旋交换作用。之后，我们从局域磁矩的角度出发讨论了单杂质安德森模型，从关于近藤效应的实验出发讨论了近藤单杂质模型。之后，我们又讨论了局域自旋间的 RKKY 互作用。至此，近藤海森堡晶格模型建立的理论基础已经全部介绍完毕。

本文第三章是这次毕设的主要工作。首先，我们利用第二章的理论基础介绍了近藤晶格模型和周期安德森模型，二者都考虑到了局域磁矩通过传导电子表现出的相干效应，它们假设晶体每一个格点上都有局域电子存在，这些局域电子与周围的传导电子会产生近藤屏蔽，这使得电子的有效质量显著增加，系统成为了重费米子体系。接着，我们又在近藤晶格模型的基础上考虑了 RKKY 互作用，并唯像地用海森堡自旋交换表示这一互作用，从而建立了近藤-海森堡晶格模型。在得到这一模型之后，我们进入了对这次毕设的主要问题“AFM 短程涨落与近藤屏蔽的竞争与共存”的分析。首先，我们介绍了研究这一问题的主要数值工具--拟牛顿法的操作原理，分析了其中可能会出现错误的细节和这个方法本身带有的误差。

接着我们二维晶格的背景下得到了该问题近藤海森堡模型的哈密顿量。我们用平均场的方法对这个哈密顿量进行了对角化处理，最终用拉格朗日乘子法得到了系统基态能量满足的自洽方程。接着我们从最简单情况开始对自洽方程进行分析求解，并最终得到了一些自洽方程参数间的关系，从两个平均场参数中得出了在该模型下 AFM 短程涨落与近藤屏蔽会竞争与共存。

当然，我们的研究还有很多不足之处。首先，我们没有在全部情况下都求出系统自洽方程的解，因此最后我们也未能画出系统在零温时的相图。另外，我们也没有给出不同情况下基态能量的比较，讨论解的稳定性。

从以上的分析中我们可以看出，系统的外部条件有温度 T ，导带电子填充数 n_c ，近藤屏蔽的耦合参数 J_k ，RKKY 相互作用的耦合参数 J_h 。首先，我们可以把 0 温时的不同导带电子填充数、不同近藤耦合参数 J_k 、不同 RKKY 相互作用的耦合参数 J_h 的情况分析完全，得到 0 温时可以描述全部情况的理论体系。接着，我们可以去讨论有限温的情况。因为有限温时，系统中电子的费米分布要比 0 温时复杂的多，我们需要一套更完善的理论体系和数值处理工具才能处理有限温的情况。另外，各温度下系统在相变点或相变曲线处都有奇妙的物理性质，对系统相变的分析也是我们日后工作的目标。

5 致谢

首先我要由衷地感谢华中科技大学在这四年来对我的培养。学在华科，四年来华中科技大学一直用自己的行动诠释着这句话的真正含义。明德、厚学、求是、创新，这不仅仅是校训，也是四年来华科烙入我们的心中精神。

在这里我还要感谢华中科技大学物理学院的全体教师和工作人员。感谢蔡建明教授的在毕设期间对我工作的支持与指导。感谢吴书朝教授、胡忠坤教授、钱利华教授、叶贤基教授、崔建伟教授、涂良成教授、罗俊院士、李智华教授、陈长军教授、陆培祥教授、邵成刚教授、陆泽晃教授、吴颖教授、杨山清教授、刘世勇教授、祝晓松老师、梅建伟教授、袁松柳教授对我的悉心教导。其中特别感谢班主任钱利华教授，在学习上钱老师四年来对我的指点颇多，而在我迷茫无助的时候，钱老师也竭尽全力地为我提供了帮助。另外感谢刘惠平书记、姚洪辅导员以及学工组全体人员在生活上对我的支持。

这里我还要感谢中科院物理所的全体人员，是你们给我创造了一个舒适的学习环境和接触前沿物理知识的平台。我还要特别感谢杨义峰研究员在学习和生活上对我的帮助和指导。在毕业设计的几个月里，杨老师抽出了大量的时间，在学习上教授我知识、指导我养成正确的科研习惯、端正我科研的态度，在生活上也给予了我很大的帮助。在此我还要感谢北京应用物理与计算数学研究所刘瑜助理研究员在学术上给我的指导，在百忙之中刘瑜助理研究员花费了大量精力帮助我了解重费米子体系的发展状况并帮助我解决了很多毕业设计中的实际问题。另外，我还要感谢杨老师团队付召明副教授、谢能师兄、张树峰师兄、李宇师兄、刘敏

师姐、杜光乐师兄、徐远骥师兄、胡丹青师兄、俞楠师兄、黄东宸同学、何馨同学对我的帮助。

最后，我要感谢我的父母，是你们牺牲了一切，为我创造出了一个良好的学习和生活环境；是你们教会了我做人要勤劳、勇敢、诚实、善良；感谢你们23年来为我的付出，父母之恩，永世难忘。

参考文献

- [1] 刘瑜. 重费米子化合物中磁有序与超导电性的理论研究. 清华大学, 北京, 2012 1-49
- [2] 冯端, 金国钧. 凝聚态物理学(上卷). 高等教育出版社, 北京, 2003.
- [3] 李正中. 固体理论. 高等教育出版社, 北京, 2002. 390-437
- [4] 李广斌. 重费米子体系基态性质及相变的理论研究. 清华大学, 北京, 2011. 1-49
- [5] Phase diagram of the Kondo lattice C. Lacroix and M. Cyrot Phys. Rev. B 20, 1969
– Published 1 September 1979
- [6] Liu Yu, and Zhang Guang-Ming. Multiple Lifshitz transitions driven by short range antiferromagnetic correlations in the two-dimensional Kondo lattice model. J. Phys.: Conf. Ser. 391(2012), 012171.
- [7] LiHuan, and Liu Yu. Magnetic phase transition and the spin excitations in cluster antiferromagnetic $K_0.8Fe_{1.6}Se_2$. Eur. Phys. Lett. 98(2012), 47006.
- [8] Bucher B, Schlesinger Z, Canfield P C, et al. Kondo coupling induced charge gap in $Ce_3Bi_4Pt_3$. Phys. Rev. Lett., 1994, 72:522–525.
- [9] Kasaya M, Iga F, Negishi K, et al. A new and typical valence fluctuating system, YbB_{12} . Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 1983, 31–34, Part 1(0):437 – 438.
- [10] Izawa K, Suzuki T, Fujita T, et al. Metallic ground state of $CeNiSn$. Phys. Rev. B, 1999, 59:2599–2603.
- [11] L'ohneysen H v, Pietrus T, Portisch G, et al. Non-Fermi-liquid behavior in a

heavy-fermion alloy at a magnetic instability. *Phys. Rev. Lett.*, 1994, 72:3262–3265.

[12] Trovarelli O, Geibel C, Mederle S, et al. YbRh₂Si₂: Pronounced Non-Fermi-Liquid Effects above a Low-Lying Magnetic Phase Transition. *Phys. Rev. Lett.*, 2000, 85:626–629.

[13] Geibel C, Schank C, Thies S, et al. Heavy-fermion superconductivity at $T_c = 2\text{K}$ in the antiferromagnet UPd₂Al₃. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 1991, 84:1–2.

[14] Geibel C, Thies S, Kaczorowski D, et al. A new heavy-fermion superconductor: UNi₂Al₃. *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*, 1991, 83:305–306.

[15] Kim K H, Harrison N, Jaime M, et al. Magnetic-Field-Induced Quantum Critical Point and Competing Order Parameters in URu₂Si₂. *Phys. Rev. Lett.*, 2003, 91:256401.

[16] Sarrao J L, Morales L A, Thompson J D, et al. Plutonium-based superconductivity with a transition temperature above 18 K. *Nature*, 2002, 420(6913):297–299.

[17] Tsunetsugu H, Sigrist M, Ueda K. The ground-state phase diagram of the one-dimensional Kondo lattice model. *Rev. Mod. Phys.*, 1997, 69:809–864.

[18] Sigrist M, Ueda K, Tsunetsugu H. Ferromagnetism of the Kondo lattice in the low-carrier concentration limit. *Phys. Rev. B*, 1992, 46:175–183.

[19] Sarkar R, Khuntia P, Krellner C, et al. ³¹P NMR investigations on the ferromagnetic quantum critical system YbNi₄P₂. *Phys. Rev. B*, 2012, 85:140409.

[20] Beach K S D, Assaad F F. Coherence and meta magnetism in the two-dimensional Kondo lattice model. *Phys. Rev. B*, 2008, 77:205123.

[21] Martin L C, Bercx M, Assaad F F. Fermi surface topology of the two-dimensional Kondo lattice model: Dynamical cluster approximation approach. *Phys. Rev. B*, 2010, 82:245105.

[22] Capponi S, Assaad F F. Spin and charge dynamic soft he ferromagnetic and

antiferromagnetic two-dimensional half-filled Kondo lattice model. Phys. Rev. B, 2001, 63:155114.

[23] Watanabe H, Ogata M. Fermi-Surface Reconstruction without Breakdown of Kondo Screening at the Quantum Critical Point. Phys. Rev. Lett., 2007, 99:136401.

[24] Coleman P. New approach to the mixed-valence problem. Phys. Rev. B, 1984, 29:3035–3044.

[26] Fazekas P, Müller-Hartmann E. Magnetic and non-magnetic ground states of the Kondo lattice. Zeitschrift für Physik B Condensed Matter, 1991, 85:285–300.

[27] Hewson A C. The Kondo Problem to Heavy Fermions. Cambridge University Press, the United Kingdom, 1993

附录

A 推迟格林函数

我们定义格林函数为

$$G_R(t, t') = -i\theta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_{\pm 1} \rangle = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle \quad (\text{A.1})$$

其中, $\theta(t-t')$ 为阶跃函数。 $\langle \dots \rangle$ 表示统计平均, 对于正则系综

$$G_R(t, t') = -i\theta(t-t') \langle [A(t), B(t')]_{\pm 1} \rangle = \langle\langle A(t); B(t') \rangle\rangle \quad (\text{A.2})$$

可以证明, 格林函数具有 $G_R(t, t') = G_R(t-t')$ 的特点。于是我们把 t' 取为 0. 得到化简后的格林函数

$$G_R(t) = -i\theta(t) \langle [A(t), B]_{\pm 1} \rangle = \langle\langle A(t); B \rangle\rangle \quad (\text{A.3})$$

格林函数的傅里叶变换为

$$G_R(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_R(\omega) \exp[-i(\omega + i\eta)t] \quad (\text{A.4})$$

逆变换为

$$G_R(\omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt G_R(t) \exp[i(\omega + i\eta)t] \quad (\text{A.5})$$

其中, η 是趋于零的实数。在解决实际问题的过程中, 我们更多会用到格林函数的傅里叶逆变换形式。

0 温时的格林函数

当 $T=0$ 时, $\langle \dots \rangle$ 部分对系统的基态取平均, 我们根据(A.3)和(A.5)可以得到推迟格林函数的莱曼表示

$$G_R(w) = \sum_n \left\{ \frac{\langle 0|A|n\rangle\langle n|A|0\rangle}{w-w_{n0}+i\eta} \pm \frac{\langle 0|B|n\rangle\langle n|B|0\rangle}{w-w_{n0}+i\eta} \right\} \quad (A.6)$$

其中

$$w_{n0} = E_n - E_0 \quad (A.7)$$

由 (A.6) 可知 $G_R(w)$ 的极点在复平面的下半部分, 在上半部分 $G_R(w)$ 是解析函数。

在处理物理问题时, 一旦我们知道了格林函数, 就可以根据其极点得到

$w_{n0} = E_n - E_0$, 即系统的元激发能量。

有限温时的格林函数

在有限温时, $\langle \dots \rangle$ 部分对系统的各态取统计平均。用类似的方法也可以得到推迟格林函数的莱曼表示

$$G_R(w) = Z^{-1} \sum_{n,m} \exp(-\beta E_n) \frac{\exp[\beta(E_n - E_m)] \pm 1}{w - w_{n0} + i\eta} \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle \quad (A.8)$$

引入谱函数

$$A(w) = Z^{-1} \sum_{n,m} [\exp(-\beta E_m) \pm \exp(-\beta E_n)] \langle n|B|m\rangle \langle m|A|n\rangle \delta[w - (E_n - E_m)] \quad (A.9)$$

谱定理

根据(A.9), 我们可以得到格林函数的谱定理

$$\langle BA \rangle = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw \frac{\{-2\text{Im}G_R(w)\}}{e^{\beta w} \pm 1} dw \quad (\text{A.10})$$

谱定理又称涨落耗散定理, $\langle AB \rangle$ 可作为描述涨落的关联函数。格林函数只是上半复平面的解析函数, 我们还可以通过构造新的格林函数写出全平面的谱定理。

我们定义

$$G_a(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dw G_a(w) \exp[-i(w - i\eta)t] \quad (\text{A.11})$$

那么

$$G_a(w) = Z^{-1} \sum_{n,m} \exp(-\beta E_n) \frac{\exp[\beta(E_n - E_m)] \pm 1}{w - w_{n0} - i\eta} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle \quad (\text{A.12})$$

这样, 我们就得到了全平面解析的格林函数。最终, 我们得到全平面的谱定理

$$\langle BA \rangle = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{\langle\langle A|B \rangle\rangle_{w+i\eta} - \langle\langle A|B \rangle\rangle_{w-i\eta}}{e^{\beta w} \pm 1} dw \quad (\text{A.13})$$

格林函数的运动方程

我们利用海森堡运动方程

$$i \frac{dA(t)}{dt} = [A(t), H] = A(t)H - HA(t) \quad (\text{A.14})$$

可以求得格林函数的运动方程

$$i \frac{d}{dt} \langle\langle A(t); B \rangle\rangle = \delta(t) \langle [A, B]_{\pm} \rangle + \langle\langle [A(t), H]; B \rangle\rangle \quad (\text{A.15})$$

利用上式各项的傅里叶变换式

$$\begin{aligned}\delta(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega t} \\ iG'(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega \ll A | B \gg_{\omega} e^{-i\omega t} \\ \ll [A(t), H]; B \gg &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \ll [A(t), H] | B \gg_{\omega} e^{-i\omega t}\end{aligned}\tag{A.16}$$

于是，我们得到了复平面上格林函数的运动方程

$$\omega \ll A | B \gg_{\omega} = \ll [A, B]_{\pm} \gg + \ll [A(t), H] | B \gg_{\omega}\tag{A.17}$$

上式事实上是一组无穷序列， $\ll [A(t), H] | B \gg_{\omega}$ 可以反复用上式展开。这从一方面也说明了，对于多体问题是不可能严格求解的。因此在处理实际问题时，我们往往要对上式做切断近似。我们文中多次用到的哈特利-福克近似事实上就是一种对格林函数的切断近似。