

---

---

# 西安交通大学

## 毕业设计(论文)考核评议书

理学院 院 材料物理 系(专业) 材物21 班级

指导教师对学生 黄东宸 所完成的课题为 重费米子关联效应

---

的毕业设计(论文)进行的情况,完成的质量及评分的意见: 黄东宸同学的本科毕业设计论文“重费米子关联效应”通过近藤模型的分析,分析一维的格点局域磁矩链和格点附近被假定为连续分布的传导电子,采取平均场近似得到了基态下的自洽方程和基态相图;通过二维正方晶格情形的推导,得到了近藤屏蔽相与铁磁相的自洽方程。该论文写作态度较认真,工作量饱满,结构完整,格式基本规范,数据可靠,分析合理,基本达到了西安交通大学本科毕业设计论文要求,同意其参加毕设答辩。

---

指导教师建议成绩: 良好

指导教师 卢学刚

2016年6月15日

## 毕业设计(论文)评审意见书

评审意见: 黄东宸的本科论文“重费米子关联效应”从近藤晶格模型出发,得到零温下该系统的五个相——自旋极化与非极化型铁磁有序相,自旋极化与非极化型铁磁有序近藤屏蔽共存相,以及近藤屏蔽顺磁相的基态相图;同时类比一维情形,分析得到了二维正方晶格的一般形式自洽方程组与近藤屏蔽与铁磁相之下的自洽方程。论文写作态度认真,格式规范,工作量饱满,结论合理,达到了本科毕业设计的论文要求,表明该生基本掌握了本门学科的基础理论和相关专业知识,同意该生进行毕设

论文答辩。

---

---

评阅教师建议成绩： 良好

评阅人 张晖 职称 副教授

2016 年 6 月 15 日

# 毕业设计(论文)答辩结果

理学院 院

材料物理 系(专业)

毕业设计(论文)答辩组对学生 黄东宸 所完成的课题为 重费米子关联效应

---

的毕业设计(论文)经过答辩,其意见为 该论文工作量较饱满, 写作认真, 态度端正, 数据可靠, 图表清晰。答辩过程中讲述清楚, 回答问题基本正确。建议成绩为良。

---

---

并确定成绩为 良好

---

毕业设计(论文)答辩组负责人 王亚平

答辩组成员 王亚平 杨森

赵铭姝 卢学刚

张垠 \_\_\_\_\_

2016 年 6 月 15 日

论文题目：重费米子关联效应

学生姓名：黄东宸

指导教师：杨义峰（校外） 卢学刚（校内）

## 摘 要

强关联电子系统是当前凝聚态物理研究中的一个前沿问题。重费米子是其中的代表。于重费米子系统之中，被近似处理成 $f$ 电子的局域磁矩与传导电子之间不可忽略强电子关联诱导出了诸多物理性质。

近藤晶格模型是研究这类问题的一个基本模型，其中包含了局域磁矩与传导电子之间的相互作用——传导电子对局域磁矩的屏蔽作用以及经由传导电子的局域磁矩之间的 RKKY 相互作用，前者可以诱导出顺磁性近藤单态，后者可以诱导出长程铁磁有序，两者的竞争与共存是此模型研究的主要问题。

本文从近藤晶格模型出发，分析其中磁有序和近藤屏蔽的竞争与共存，讨论并得到此情形之下得到零温下该系统的五个相——自旋极化与非极化型铁磁有序相，自旋极化与非极化型铁磁有序近藤屏蔽共存相，以及近藤屏蔽顺磁相的基态相图

最后，本文还从自由能表达式出发，类比一维情形，分析并得到了二维正方晶格的一般形式自洽方程组与近藤屏蔽与铁磁相之下的自洽方程。

**关键词：**强关联系统；重费米子；平均场；近藤晶格；

**Title: The Correlation Effects of Heavy Fermion.**

**name: Dongchen Huang**

**Supervisor: Yifeng Yang, Xuegang Lu**

## ABSTRACT

Heavy fermion system represents strong correlation, which is a frontier of modern condensed matter research. To deal with that system, 4f electron can be seen as local electron. And the ignorance of the strong correlation effect between 4f electron and conduct one cannot lead to the illumination of much physical property.

The Kondo lattice model, which contains the interaction between local electron and conduct one is generally accepted as the fundamental of heavy fermion system. The interaction can be divided into two parts, one is the screen of local magnetism generated by conduct electron, the other is so-called RKKY interaction which forms long-range order magnetism.

To deal with the competence and co-existence of magnetic order and Kondo screen in ground state, we need to consider the Kondo lattice Model. We attain five phases in 0K. In detail, they are spin-polarized/ non-spin-polarized ferromagnetism(FM) phase as well as coexistence phase and the Kondo screen screening phase.

Finally we also analyze the 2-D square lattice, gain self-coexistence equations of Kondo screening phase and FM phase.

**KEY WORDS:** Heavy fermion; Kondo lattice; Strong correlation system; Mean field

## 目 录

1 绪论.....	1
1.1 强关联电子系统.....	1
1.2 重费米子研究历史.....	1
1.3 近藤问题.....	2
1.3.1 单杂质近藤问题.....	2
1.4 本文的理论结构和所采用的方法。.....	3
2 本文所采用的模型及方法.....	4
2.1 近藤-海森堡模型.....	4
2.2 格林函数的应用.....	5
2.2.1 推迟格林函数与谱定理.....	5
2.2.2 具有相互作用电子系统的谱函数.....	8
2.2.3 格林函数的运动方程.....	10
2.3 数值算法简介.....	12
2.3.1 牛顿法简介.....	12
2.3.2 下降法.....	16
3 近藤屏蔽与铁磁有序的竞争与共存.....	18
3.1 模型推导.....	18
3.2 利用平均场近似处理模型.....	22
3.3 自洽方程推导.....	25
3.3.1 平均场参数的引入.....	25
3.3.2 利用格林函数推导自洽方程.....	27
3.4 不同情形之下的自洽方程.....	31
3.4.1 顺磁近藤屏蔽相的研究.....	33
3.4.2 铁磁有序相（自旋极化型）.....	36
3.4.3 铁磁有序相（非自旋极化型）.....	39
3.4.4 铁磁与近藤屏蔽共存相（自旋极化型）.....	41
3.4.5 铁磁与近藤屏蔽共存相（非自旋极化型）.....	44
3.5 基态相图.....	46
4 二维情形的初步研究.....	48
4.1 一般形式之下方程的推导.....	48
4.2 能量小于零的方程的一般形式.....	49

## 目 录

---

4.3 针对不同模型对方程进行简化.....	50
4.3.1 针对近藤屏蔽相简化方程.....	50
4.3.2 铁磁相之下的自治方程.....	51
4.4 再探一般方程.....	52
5 结论与展望.....	56
5.1 结论.....	56
5.2 展望.....	56
参考文献.....	57
附 录.....	59
二维近藤晶格模型之下的费米面拓扑：基于动态团簇近似方法.....	59
模型哈密顿量与动态团簇近似.....	60
致 谢.....	63



---

# 1 绪论

凝聚态物理学主要研究宏观物理体系，与微观体系之中常用约化普朗克常数 $\hbar$ 不同的是，由于宏观的数量级非常大，一般达到 $10^{23}$ 数量级，此时微观理论之下离散的能量变为连续。此外，会出现一些微观层面难以出现的情况，例如 P.W.Anderson 所言的“More is different”。

## 1.1 强关联电子系统

凝聚态物理学中的一个最前沿的重要分支，电子之间的量子多体关联效应不可以忽略。在需要应用强关联电子体系的地方，传统的单电子近似，微扰论就难以适用。虽然单电子近似及以此为基础的能带论首次定量表现出了绝缘体，导体，半导体之间的差异性。但是在强关联材料中越来越显示出其局限性。首先就是高温超导体的理论上，高温超导系统是典型的强关联系统，其难以为 BCS 理论所解释，重费米子超导体作为首先发现的高温超导体，在强关联电子系统之中有重要地位，其机理的明确对于强关联理论有重大意义。

至于强关联的表现形式，就表现在电子之间强烈的量子关联。例如，首先就是自旋磁矩之间的关联效应，其二是电荷——电荷，其三为电荷——磁矩之间的关联，这些关联是强关联系统典型的表现形式。

## 1.2 重费米子研究历史

重费米子系统具有典型的特征，顾名思义就是电子（准电子）的有效质量非常大，为普通金属的千倍以上，这个数量级不能忽略。费米面附近的态密度和普通金属具有数量级上的差距，从微观上看，其中一个重要机理就是运动的导带电子与其背景晶格上的自旋场耦合，这类材料具有众多新奇的量子临界现象。

从实验上看这类材料主要聚集在稀土或者铜系元素的金属间化合物上，在实验中也发现的诸多新奇特征，例如在 1975 年，Andres<sup>[1]</sup>发现 $\text{CeAl}_3$ 中的比热系数( $C = \gamma T$ 中的 $\gamma$ )在温度小于 0.2K 时高达 $1620\text{mJ} \cdot \text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-2}$ ，与金，铜等比热系数约为 $1\text{mJ} \cdot$

$\text{mol}^{-1} \cdot \text{K}^{-2}$ 的普通金属相比，足足多了三个数量级。

此外，Steglich<sup>[2]</sup>1979年也发现了重费米子化合物 $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$ 中也存在重费米子特性，更令人吃惊的是超导电性竟然在温度低于0.5K的极低温度下出现，这标志着一种难以应用常规BCS理论解释的超导材料被发现，类似的重费米子化合物中发现的超导称为重费米子超导体。

此外，还有下一小节中介绍的近藤问题也是重费米子化合物之中的一个奇异现象。

### 1.3 近藤问题

大量的4f与5f电子在重费米子材料中屡见不鲜，这些电子都没有配对。它们的存在并且与传导电子之间具有大量的关联效应，使得重费米子材料中出现了一些奇异性质。

这类相互作用，例如局域磁矩与传导电子相互作用，首次发挥显著作用的场合是稀磁合金的电阻研究工作中，这是一个单杂质局域磁矩与传导电子之间的相互作用问题，单杂质局域磁矩的存在将会导致系统的电阻存在奇异行为(下一小节中将详细阐述)，这个问题称为单杂质近藤问题<sup>[5][4][3]</sup>，重费米子系统应用的则是更加复杂的近藤晶格模型，但是基本物理背景差异不大，我们先阐述近藤问题的历史和研究背景。

#### 1.3.1 单杂质近藤问题

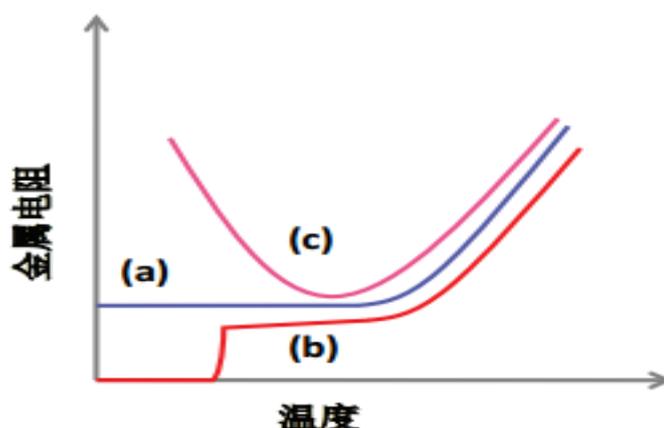


图 1-1 不同材料的电阻随温度变化曲线<sup>[18]</sup>

如上图所示，大多数金属的电阻随着温度的降低而降低，但某些存在非磁性散射的金属中，存在一个剩余电阻，如(a)曲线所示。也有很多金属在低温下会呈现超导效应，即存在某个临界温度 $T_c$ ，当温度比其小时，电阻突变为零，如(b)曲线所示。重费

米子材料却与上述两种情况不同，其电阻必须呈曲线(c)，对于这个问题的解释及其类似问题称为近藤问题。问题的得名来源于日本人 J. Kondo，他认为电子与杂质磁矩不能用经典散射理论解释，必须采用量子方法。

他认为，即使磁性杂质浓度非常低 ( $10^{-4}\%$ )，仍然能够发现电阻反常效应，因此磁性杂质之间的相互作用可以忽略，电阻反常应该与磁性散射有关。为此，他采用了 s-d 交换模型来描述单磁性杂质原子与传导电子之间发生的磁性散射，从此得到了电阻反常现象的合理解释<sup>[6]</sup>。后来物理学家 Yosida<sup>[8]</sup>指出，如果杂质自旋为  $\frac{1}{2}$ ，由于磁性杂质与传导电子之间存在反铁磁型交换作用，并且这个交换作用由 s-d 交换模型描写；一个新的基态就会出现，它们将会在低温下形成一个能量更低的基态——零自旋近藤单态，传导电子屏蔽将会削减磁性杂质的磁矩，换言之，磁性杂质的磁矩被屏蔽了，形成了一个顺磁基态，这种效应被称为近藤屏蔽效应。

重整化群方法的引入给近藤问题带来了新的解决方案，Wilson 通过提出实空间重整化群的数值方法<sup>[7]</sup>，严格得到了零温下的系统基态，并且证明其就是近藤单态，某些性质诸如非零温时的磁化率等可观测量能够符合实验。最终，近藤问题完全解决于 1980 年，通过 Bethe 假设方案，Andrei 与 Wiegmann 成功地求出单杂质近藤问题之严格解析解<sup>[3]</sup>，至此，单杂质近藤问题被完全解决。

此外对于重费米子系统，还有许多模型，例如周期性安德森模型，赫伯德模型，这些可以查阅文献[4]。

## 1.4 本文的理论结构和所采用的方法。

本文采用近藤-海森堡模型<sup>[11]</sup>来研究零温度下近藤屏蔽与铁磁有序的竞争与共存，主要分为四个部分：

第一部分为第二章，简介了本文所采用的近藤晶格模型以及理论推导中所需的格林函数方法。最后还讨论了数值求解方程中所采用的牛顿法等数值算法。

第二部分为第三章，详细讨论了零温度下近藤屏蔽与铁磁有序的竞争与共存，并得到了各个相之下自洽方程的解析解或者数值解，并且进行了一些讨论。

第三部分为第四章，将第三章中的问题推广至二维，类比一维问题简单推导了二维晶格之下的各种相以及满足的自洽方程。

第四部分为结论与展望，将本文的不足以及下一步可能的进展。

## 2 本文所采用的模型及方法

本章将对本文中所采用的方法，近藤-海森堡模型，格林函数方法，数值求解问题的牛顿法和下降法给与一定的介绍。

### 2.1 近藤-海森堡模型

本文采用近藤晶格模型来研究强关联电子体系，近藤晶格模型是在近藤问题的基础之上由 S. DONIACH<sup>[15]</sup>所提出，S. DONIACH 将近藤问题的单杂质模型扩展为近藤晶格模型，以及在晶体的每一个子晶格之中，均存在发生局域磁矩的传导电子的交换作用，并且以此作用进行耦合。因此，这个模型的哈密顿量可以写成形式：

$$H = \sum_k \epsilon_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} + J_k \sum_i s_i \cdot S_i \quad (2.1)$$

上式之中，第一项是传导电子的动能部分（二次量子化形式，并且进行了傅里叶变换），第二项就是传导电子磁矩<sup>①</sup>（小写 s）和局域磁矩（大写 S）之间的交换作用<sup>[16]</sup>。其中的  $J_k$  表示近藤问题之中的交换积分。

在进一步的应用之中，还有 RKKY 相互作用值得单独考虑，这项局域磁矩之间，以传导电子为中介的相互作用是造成长程磁有序的一个源头，近藤屏蔽作用于 RKKY 相互作用的竞争形成了丰富的物理性质。

这一项相互作用可以唯象地引入模型之中，考虑到这是各个格点之上的局域磁矩之间的相互作用，而我们一直的磁性中的海森堡模型就能够满足这一条件只需要加入一个类似铁磁性海森堡模型中的交换项就可以了，记为：

$$H = \sum_k \epsilon_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} + J_k \sum_i s_i \cdot S_i + J_H \sum_{ij} S_i \cdot S_j \quad (2.2)$$

上式中相比(2.1)新增的一项中  $J_H$  为交换积分，下标 H 表示海森堡型的交换作用。

至于  $J_H$  与  $J_k$  的关系，有不同的表达，可以选取  $J_H = \alpha J_k^2$  表示二阶相互作用，这可以见于参考文献[13]和[14]。

值得一提的是，在近藤模型之中，传导电子是假定空间连续分布的，自然作为描述电子状态的自旋变量也应该随着空间连续分布，每一个电子的自旋值也就自然转化

<sup>①</sup> 电子自旋和磁矩之间满足  $m = \frac{e\hbar}{2mc} s$ ，因此可以直接由自旋算符表示磁矩

成了按照空间分布的自旋密度。公式(2.1)与(2.2)中的电子自旋密度  $s$  都应该这样理解。

## 2.2 格林函数的应用

本小节主要包含本文中需要用到的格林函数部分，诸如谱定理，运动方程，并针对这些情形做了介绍。

### 2.2.1 推迟格林函数与谱定理

在海森堡绘景中，如果给定了两个与时间有关的算符  $A$  与  $B$ ，推迟格林函数定义为：（接下来的讨论中，为了方便我们选取约化普朗克常数  $\hbar$  为 1）

$$G(t, t') = -i\theta(t - t') \langle [A(t), B(t')]_{\pm} \rangle \quad (2.3)$$

这样一个格林函数具有以下几个性质在接下来的讨论之中会起到重要作用

首先， $G(t, t') = G(t - t')$  说明这样一个与两个时间有关的格林函数仅仅与时间差有关，也就是说，这其实是一个一元函数，证明如下：

以算符  $A$  为例海森堡绘景之下的算符为

$$A = e^{iHt} A e^{-iHt}$$

将上述格林函数之中取平均的意义理解为正则系综取平均，也就是说

$$\langle A \rangle = Z^{-1} \sum_n e^{-\beta E_n} \langle n | A | n \rangle$$

利用熟知的矩阵的迹的乘积的轮换不变性关系  $Tr(ABC) = Tr(CAB) = Tr(BCA)$  讨论格林函数之中对易括号的第二项：

$$\langle e^{iHt} A e^{-iHt} e^{iHt'} B e^{-iHt'} \rangle$$

我们能够得到如下关系：

$$e^{iH(t-t')} A e^{-iH(t-t')} B$$

也就是说对易括号的第二项为：

$$A(t - t') B \quad (2.4)$$

按照同样的计算方式，我们一样可以考察对易括号的第二项  $B(t') A(t)$

现将其在海森堡绘景中写出来，我们可以得到

$$\langle e^{iHt'} B e^{-iHt'} e^{iHt} A e^{-iHt} \rangle$$

同样利用矩阵迹的轮换不变性关系，我们可以得到

$$B e^{iH(t-t')} A e^{-iH(t-t')}$$

现在将其转为海森堡绘景，我们可以得到

$$B A(t-t') \tag{2.5}$$

这样也就证明了格林函数仅仅为两个时间变量差的函数也就是说证明了  $G(t, t') = G(t - t')$ 。

其次，我们说明格林函数和系统的元激发密切相关，可以通过格林函数确定系统的元激发谱。

因为我们需要得到关于频率的信息，故做傅里叶变换是一个非常常见的思路，我们将格林函数做傅里叶变换。

$$G(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} G(t) e^{i\omega t} dt$$

其中由于上面已经证明了格林函数为一个仅仅与时间相关的一元函数，故我们直接将自变量定义为时间  $t$ 。

$$G(t) = -i \langle [A(t), B(0)]_{\pm} \rangle$$

考察最简单的情形，绝对零度，对各个态的平均也就直接转化为对基态的平均，并将时间因子提出来，我们可以得到：

$$\langle A(t)B(0) \rangle = \sum_n \langle 0|A|n \rangle \langle n|B|0 \rangle e^{-i\omega_n t} \tag{2.6}$$

同样的计算可以得到对易括号的另一项：

$$\langle B(0)A(t) \rangle = \sum_n \langle 0|B|n \rangle \langle n|A|0 \rangle e^{i\omega_n t} \tag{2.7}$$

将上述两个表达式直接带入格林函数之中并进行傅里叶变换，其中有一个地方需要处理如下：

在格林函数的计算之中会碰到积分  $\int_0^{+\infty} e^{i\omega t} dt$ ；很明显，这个积分的结果可以理解为  $\delta$  函数的一半（ $\delta$  函数是偶函数，且定义为  $\delta(x) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} dt$ ）这个积分会在零点发散，为了使这个积分收敛，注意到如下事实：

$$\int_0^{\infty} e^{i(\omega+i\eta)t} dt = -\frac{1}{i(\omega+i\eta)} \tag{2.8}$$

在积分时我们就可以形式地利用上式，并且再令  $\eta \rightarrow +0$  即可。换句话说就是将  $\omega$  形式地看成一个复变量，亦即做如下替换

$$\omega \rightarrow \omega + i(0+) \quad (2.9)$$

当然，积分下限为负无穷，上限为零的积分为了使其收敛有时也会类似处理：

$$\omega \rightarrow \omega - i(0+) \quad (2.10)$$

进行上述处理之后，格林函数最终收敛，计算结果就是所谓的格林函数的莱曼表示：

$$G(\omega) = \sum_n \frac{\langle 0|A|n \rangle \langle n|B|0 \rangle}{\omega - \omega_{n0} + i\eta} \pm \frac{\langle 0|B|n \rangle \langle n|A|0 \rangle}{\omega + \omega_{n0} + i\eta} \quad (2.11)$$

很明显，这个函数在上半平面解析，奇点均分布于下半平面，也能够很明显的读出奇点为 $\omega_{n0} - i\eta$ 和 $-\omega_{n0} - i\eta$ 。注意到 $\omega_{n0}$ 表示系统第  $n$  个能级与基态之间的跃迁频率，这个频率与能量差仅仅差别一个常数，因此这个量，从而格林函数的奇点，切丁了系统的元激发谱。

从格林函数的莱曼表示出发，我们能够得到格林函数里面的重要定理——谱定理，现叙述如下：

为证明定理，首先需要将格林函数推广至非零温状态，在零温下平均值仅仅是对基态温度取平均；而非零温下，我们必须按照吉布斯正则分布取平均值，此时，格林函数将会被写成：

$$G(t) = -i\theta(t)Z^{-1} \sum_{nm} (e^{-\beta E_n} \langle n|A|m \rangle \langle m|B|n \rangle e^{i\omega_{nm}t} \pm \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle e^{-i\omega_{nm}t})$$

上式中  $Z$  是配分函数。

注意到  $n, m$  是哑指标，故可以将这两个下标对换，此时我们针对求和式中第一项进行哑指标的对换，得到：

$$G(t) = -i\theta(t)Z^{-1} \sum_{nm} e^{-\beta E_m} \langle m|A|n \rangle \langle n|B|m \rangle e^{-i\omega_{nm}t} \pm e^{-\beta E_n} \langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle e^{-i\omega_{nm}t} \quad (2.12)$$

写成按照正则分布求平均的常见形式，需要将 $e^{-\beta E_n}$ 这一项提出，因此我们能够得到下列一般形式：

$$G(t) = -i\theta(t)Z^{-1} \sum_{nm} e^{-\beta E_n} \langle m|A|n \rangle \langle n|B|m \rangle (e^{-\beta(E_m - E_n)} \pm 1) e^{-i\omega_{nm}t} \quad (2.13)$$

接下来按照一般步骤，讨论谱，必须进行傅里叶变换，结果为

$$G(\omega) = Z^{-1} \sum_{nm} e^{-\beta E_n} \frac{\langle m|A|n \rangle \langle n|B|m \rangle (e^{-\beta(E_m-E_n)} \pm 1)}{\omega - \omega_{nm} + i\eta} \quad (2.14)$$

我们可以引入谱函数，定义为

$$A(\omega) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(\omega) \quad (2.15)$$

将(2.14)取分母有理化之后取虚部就能够直接计算出谱函数，结果是：

$$A(\omega) = Z^{-1} \sum_{nm} e^{-\beta E_n} (\langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle) (e^{\beta(E_n-E_m)} \pm 1) \delta(\omega - \omega_{nm}) \quad (2.16)$$

得到谱函数之后我们就可以来得到谱定理，谱定理的形式很简单，考察下列积分

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A(\omega)}{e^{\beta(E_n-E_m)} \pm 1} d\omega$$

将A(ω)的形式直接带入上式，进行计算，对ω的积分与δ函数抵消，分子分母中共有的 $e^{\beta(E_n-E_m)} \pm 1$ 项可以进行约分，最终得到下列结果：

$$I = Z^{-1} \sum_{nm} e^{-\beta E_n} (\langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle)$$

针对上式再回顾吉布斯正则分布之下的平均值表达式，我们可以得到谱定理的最终形式：

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A(\omega)}{e^{\beta(E_n-E_m)} \pm 1} d\omega = \langle BA \rangle \quad (2.17)$$

从上式可以看出，知道谱函数就能够直接求出算符乘积的平均值。这是利用格林函数求解算符平均值从而构造方程的一个有力工具。

### 2.2.2 具有相互作用电子系统的谱函数

在上一节中引入的谱函数在本文中将有重要作用，使用的方法将在本节阐明。

为计算相互作用系统之中的谱函数，需要引入产生和消灭算符；为此我们首先将上一节要论的正则系综情形推广至巨正则系统，推广步骤如下：

考察正则系统与巨正则系综的差别可以发现：对于正则系综，配分函数以其倒数 $Z^{-1}$ 出现；而巨正则系综之中，配分函数也以其倒数 $Z_G^{-1}$ 的形式出现，这一点可以直接类比推广。再考察具体形式，正则系统之中指数上的因子以 $-\beta E_n$ 的形式出现， $n$ 为系统的第 $n$ 个状态；巨正则系综之中指数上的因子以 $-\beta(E_n - \mu N)$ 的形式出现，其中 $n$ 表

征系统的第  $n$  个状态， $\mu$  为化学式， $N$  为第  $n$  个状态下的粒子个数。

也就是说可以做如下代换

$$E_n \rightarrow E_n - \mu N \equiv E'_n$$

有了上述思路，我们可以直接将正则系综之中的谱函数(2.16)改写为下列形式：

$$A(\omega) = Z_G^{-1} \sum_{nm} e^{-\beta E'_n} (\langle n|B|m \rangle \langle m|A|n \rangle) (e^{\beta(E'_n - E'_m)} \pm 1) \delta(\omega - \omega_{nm}) \quad (2.18)$$

在含有相互作用的系统之中，我们一般采用二次量子化方法，引入产生算符  $C_{\mathbf{k}\sigma}$  与消灭算符  $C_{\mathbf{k}\sigma}^+$ ，在考察谱定理的形式(2.17)之后，再对比我们所求得的状态密度形式：

$$n_{\mathbf{k}\sigma} = \langle C_{\mathbf{k}\sigma}^+ C_{\mathbf{k}\sigma} \rangle$$

我们就发现必须令  $B = C_{\mathbf{k}\sigma}^+$  和  $A = C_{\mathbf{k}\sigma}$ ；这样就能够得到相关结果，此时谱函数的形式可以改写为：

$$A(\omega) = Z_G^{-1} \sum_{nm} e^{-\beta E'_n} |\langle n|C_{\mathbf{k}\sigma}^+|m \rangle|^2 (e^{\beta(E'_n - E'_m)} \pm 1) \delta(\omega - \omega_{nm})$$

正负号的问题上，我们考虑到电子遵循费米-狄拉克分布，因此推广中很自然地在这个问题上取正号，因此，谱函数的一般形式为：

$$A(\omega) = Z_G^{-1} \sum_{nm} e^{-\beta E'_n} |\langle n|C_{\mathbf{k}\sigma}^+|m \rangle|^2 (e^{\beta(E'_n - E'_m)} + 1) \delta(\omega - \omega_{nm}) \quad (2.19)$$

为了应用谱定理，我们需要将谱定理的从正则分布推广至巨正则分布的情形。因此，我们将谱定理的形式从(2.17)变化到如下情形：

$$I = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A(\omega)}{e^{\beta(\omega - \mu)} + 1} d\omega = \langle BA \rangle \quad (2.20)$$

注意到费米分布的形式，在考虑  $A$ 、 $B$  分别为具体的消灭算符与产生算符，我们得到：

$$n_{\mathbf{k}\sigma} = \langle C_{\mathbf{k}\sigma}^+ C_{\mathbf{k}\sigma} \rangle = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{e^{\beta(\omega - \mu)} + 1} d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} A(\mathbf{k}, \omega) f(\omega) d\omega \quad (2.21)$$

上式中，我们引入了费米分布  $f(\omega)$ 。

从上式出发，我们可以看出，谱函数  $A(\mathbf{k}, \omega)$  的物理意义是状态按照能量的分布，利用分布函数的定义，分布函数必须可以归一化，我们也就顺便得到了谱函数的归一化条件。

$$\int_{-\infty}^{+\infty} A(\mathbf{k}, \omega) d\omega = 1$$

在本文的应用中，一个常见的情形是考察自旋已经给定情况之下的粒子分布 $n_\sigma$ ，这个分布可以如下讨论：

$$n_\sigma = N^{-1} \sum_j \langle C_{j\sigma}^+ C_{j\sigma} \rangle$$

为此，我们做傅里叶变换将表征格点的下标 $j$ 换成表征状态的 $\mathbf{k}$ ，我们得到：

$$n_\sigma = N^{-1} \sum_k \langle C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} \rangle \quad (2.22)$$

从上式出发，再次应用谱定理(2.20)，我们能够得到：

$$n_\sigma = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) N^{-1} \sum_k A(\mathbf{k}, \omega) d\omega \quad (2.23)$$

为方便记，我们引入局域态密度 $\rho_\sigma(\omega)$ ，定义为：

$$\rho_\sigma(\omega) = N^{-1} \sum_n A(\mathbf{k}, \omega)$$

再考虑谱函数的定义(2.15)，局域态密度就能够写成：

$$\rho_\sigma(\omega) = N^{-1} \sum_k A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{N\pi} \sum_k \text{Im}G(\omega) \quad (2.24)$$

### 2.2.3 格林函数的运动方程

求解格林函数对于电子系统性质的分析非常重要，求解格林函数一个重要而常见的方法就是采用运动方程方法，在本文中这个方法将会用于求解格林函数，现在对此加以介绍。

上一节定义的全格林函数可以同时记及推迟和超前两个部分，此时，这样的格林函数称为双时格林函数，我们可以将其具体写成如下形式：

$$G(t) = \begin{cases} -i\theta(t) \langle [A(t), B]_{\pm} \rangle & (t > 0) \\ i\theta(-t) \langle [A(t), B]_{\pm} \rangle & (t < 0) \end{cases} \quad (2.25)$$

在上述定义中 $t > 0$ 的部分为推迟格林函数；反之， $t < 0$ 的部分称为超前格林函数。按照讨论的一般规则，我们选取海森堡绘景，因此含时算符 $A$ 呈形式 $A = e^{iHt} A e^{-iHt}$ ， $A$ 随时间的变化有算符对时间变化的一般规律所决定，亦即：

$$i \frac{dA}{dt} = A(t)H - HA(t)$$

从上式出发我们可以计算格林函数对时间的微商：

$$i \frac{d}{dt} \ll A; B \gg_{\omega} = \delta(t) \langle [A(t), B]_{\pm} \rangle - i\theta(t) \langle [A(t), H], B \rangle$$

同时我们有：

$$i \frac{d}{dt} \ll A; B \gg_{\omega} = \delta(t) \langle [A(t), B]_{\pm} \rangle + i\theta(-t) \langle [A(t), H], B \rangle$$

将上述两式合并，我们就得到了格林函数随时间的变化方程：

$$i \frac{d}{dt} \ll A; B \gg_{\omega} = \delta(t) \langle [A(t), B]_{\pm} \rangle + \ll [A(t), H], B \gg_{\omega} \quad (2.26)$$

为了进一步求解格林函数，我们做傅里叶变换变换到频率空间，并且注意到下面两个公式：

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} e^{-i\omega t} d\omega \quad (2.27)$$

上式为  $\delta$  函数的傅里叶展开式。

$$i\dot{G}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} \omega G(\omega) e^{-i\omega t} d\omega \quad (2.28)$$

上式为格林函数的傅里叶展开式对时间的微商。

将(2.27)和(2.28)直接带入(2.26)之中进行计算，注意到  $A$  算符为电子的湮灭算符， $B$  算符为电子的产生算符，针对电子（费米子）情形，这两个算符的对易关系为 1。

$$[C_{k\sigma}, C_{k\sigma}^+] = 1$$

因此我们得到格林函数的运动方程：

$$\omega \ll A|B \gg_{\omega} = 1 + \ll [A(t), H], B \gg_{\omega} \quad (2.29)$$

我们针对上述方程进行一点讨论，从上述方程中可以看出，每一个格林函数均与其高阶的格林函数相关。这就导致了格林函数的严格求解一般是求解一组无穷函数序列的和，这一般并不能严格求出，多体问题中此问题尤甚。为求解格林函数，我们一般会采取截断近似，换句话说就是求解至某一阶为止，以后的项统统记为零，也就是说将其忽略。

我们应用这个方法求解一个常见的例子。

某一个系统中，哈密顿量可以写成形式

$$H = H_0 + H_{\text{int}}$$

第一项表示动能项，引入产生消灭算符之后写成：

$$H = \sum_{k\sigma} E_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma}$$

第二项就是复杂多变的相互作用项。

利用方程(2.29)，这个系统的单粒子格林函数满足如下方程：

$$\omega \ll C_{k\sigma} | C_{k\sigma}^+ \gg_{\omega} = 1 + \ll [C_{k\sigma}, H_0] | C_{k\sigma}^+ \gg_{\omega} + \ll [C_{k\sigma}^+, H_{int}] | C_{k\sigma}^+ \gg_{\omega} \quad (2.30)$$

我们来计算上述求和式中的第二项

$$\begin{aligned} [C_{k\sigma}, H] &= [C_{k\sigma}, \sum_{k'\sigma'} E_{k'} C_{k'\sigma'}^+ C_{k'\sigma'}] \\ &= \sum_{k'\sigma'} E_{k'} [C_{k'\sigma'}, C_{k\sigma}^+] C_{k'\sigma'} \end{aligned}$$

将对易关系的结果直接带入可以得到：

$$[C_{k\sigma}, H] = E_k C_{k\sigma} \quad (2.31)$$

将上述结果带入(2.30)，并化简；可以得到格林函数所满足的方程为：

$$(\omega - E_k) \ll C_{k\sigma} | C_{k\sigma}^+ \gg_{\omega} = 1 + \ll [C_{k\sigma}^+, H_{int}] | C_{k\sigma}^+ \gg_{\omega} \quad (2.32)$$

从上式出发，可以简便地得到自由粒子的格林函数，但是要按照（2.2.1）节之中对格林函数的处理，引入一个复的无穷小量，因此得到：

$$\ll C_{k\sigma} | C_{k\sigma}^+ \gg_{\omega} = \frac{1}{\omega - E_k + i0} \quad (2.33)$$

(2.32)式的处理中可以引入自能修正函数 $\Sigma(\mathbf{k}, \omega)$ ，定义为：

$$\ll [C_{k\sigma}^+, H_{int}] | C_{k\sigma}^+ \gg_{\omega} = \Sigma(\mathbf{k}, \omega) \ll C_{k\sigma} | C_{k\sigma}^+ \gg_{\omega} \quad (2.34)$$

因此，格林函数也就可以写成如下形式：

$$\ll C_{k\sigma} | C_{k\sigma}^+ \gg_{\omega} = \frac{1}{\omega - E_k + i0 + \Sigma(\mathbf{k}, \omega + i0)} \quad (2.35)$$

## 2.3 数值算法简介

本小节中介绍两种常用的数值算法——牛顿法和下降法。

### 2.3.1 牛顿法简介

作为常用的数值计算方法，牛顿法在知道充分进的解的近似值之后是一个很好的选择现在我们将思路叙述如下。为了讲述清楚，介绍之中分为一维情形和一般情形。

求解非线性方程的近似方法总是将其转化为一个相关的线性辅助问题。例如在一维情形下，已知解  $x$  一个较好的近似  $x^n$  后求解方程：

$$f(x) = 0$$

可以对应如下一个线性辅助问题：

$$f(x^n) + f'(x^n)(x - x^n) = 0 \quad (2.36)$$

我们辅助问题的解记为 $x^{n+1}$ 因此，我们就能够得到解的一个更好地近似：

$$x^{n+1} = x^n - \frac{f(x^n)}{f'(x^n)} \quad (2.37)$$

下图则明确表现了牛顿法在一维情况之下的运算过程：

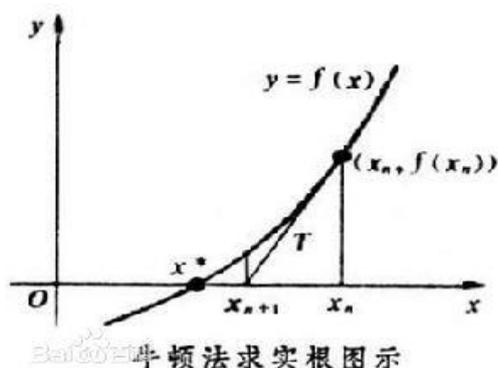


图 2-1 牛顿法图示

重复上述步骤就能够得到所考虑的非线性方程的解，这就是一维状态下的牛顿法。该方法几何意义就是利用切线来近似函数，通过迭代得到更为精确的解，迭代问题需要考虑收敛性，收敛性的问题将会在下面的一般情形之中予以解决。

仅仅说明一维问题并不足以解决本文中面对的方程，求非线性泛函方程的解才是更为一般的情况。

给定 $F(x)$ 为从线性赋范空间  $H$  映射到线性赋范空间  $Y$  的算子，其中  $Y$  与  $H$  可以相同也可以不相同，相应空间中的范数也可以记为 $\|\cdot\|_H$ 和 $\|\cdot\|_Y$ ，如果 $h \in H$ 且满足 $o(\|h\|_H) \rightarrow 0$ 和条件

$$\|F(x+h) - F(x) - Ph\|_Y = o(\|h\|_H) \quad (2.38)$$

那么从线性赋范空间  $H$  映射到线性赋范空间  $Y$  的算子  $P$  就称为  $F$  的导算子。此时，将  $P$  记为  $F'(x)$ 。

作为例子我们说明一下这与平常所说导数（多元函数情形之下为雅克比矩阵）之间的联系。

若是给定：

$$x = (x_1, x_2, \dots, x_n)^T \quad (2.39)$$

与

$$F = (f_1, f_2, \dots, f_n)^T \quad (2.40)$$

按照多元函数微分的定义，我们可以得到：

$$\begin{aligned} f_i(x_1 + h_1, x_2 + h_2, \dots, x_n + h_n) & \quad (2.41) \\ &= f_i(x_1, x_2, \dots, x_n) + \sum_{j=1}^n \frac{\partial f_i(x_1, x_2, \dots, x_n)}{\partial x_j} \\ & \quad + o(\|h\|_H) \end{aligned}$$

对照定义(2.38)，我们可以发现在多元函数情形之下，导算子 $F'(x)$ 也就变回熟悉的多元函数下的“导数”——雅克比矩阵。

若是假定某个 $X$ 为方程 $F(X) = 0$ 的解，而且我们已经知道一个距离精确解比较近的合理近似 $x^n$ ，那么我们按照导算子的定义，我们有：

$$\|F(X) - F(x^n) - F'(x^n)(X - x^n)\|_Y = o(\|X - x^n\|_H) \quad (2.42)$$

由于上式等号右边是一个小量，因此我们就将左边的值近似为零。此时可以得到：

$$F(x^n) + F'(x^n)(X - x^n) \approx F(X) \quad (2.43)$$

再次注意到 $X$ 是方程 $F(X) = 0$ 的解，因此我们能够得到：

$$F(x^n) + F'(x^n)(X - x^n) \approx F(X) = 0 \quad (2.44)$$

若是假定导算子可以，并且认定上述线性方程就是原问题的一个很好的近似，将上述方程的解认定为比 $x^n$ 更接近精确解，并记为 $x^{n+1}$ ，因此：

$$x^{n+1} = x^n - (F'(x^n))^{-1} F(x^n) \quad (2.45)$$

这样不停地迭代下去，这个过程称为牛顿法。

迭代过程需要考察收敛性，从下面的讨论可以知道，牛顿法的收敛速度并不慢。

给定三个正数 $a, a_1, a_2$ ，其中 $0 \leq a_1 \leq a_2 < \infty$ ，并且 $\Omega_a = \{x: \|x - X\|_H < a\}$ 。针对任意 $x \in \Omega_a$ 和任意的 $y$ ，有：

$$\|F(x)^{-1}y\|_H \leq a_1 \|y\|_Y \quad (2.46)$$

针对任意的 $u_1, u_2 \in \Omega_a$ ，有：

$$\|F(u_1) - F(u_2) - F'(u_2)(u_1 - u_2)\|_Y \leq a_2 (\|u_1 - u_2\|_H^2) \quad (2.47)$$

引入记号 $c = a_1 a_2$ 和 $b = \min\{a, c^{-1}\}$ ，就可以说明牛顿法的收敛性：

在给定条件(2.46)和(2.47)以及 $x^0 \in \Omega_a$ ，牛顿法的迭代过程(2.45)将会按照如下速度收敛：

$$\|x^n - X\|_H \leq c^{-1} (c^{2^n} \|x^0 - X\|_H^{2^n}) \quad (2.48)$$

证明:

由于已知初始条件  $x^0 \in \Omega_b$ , 首先我们利用归纳法证明针对任意一个整数  $n$ , 均满足  $x^n \in \Omega_b$ , 但是考虑到  $b$  的定义, 有  $b \leq a$ , 因此我们有  $x^n \in \Omega_b$ 。首先考虑表达式:

$$\|F(X) - F(x^n) - F'(x^n)(X - x^n)\|_Y \quad (2.49)$$

上式完全符合公式(2.47), 仅仅需要令  $u_1 = X$ ,  $u_2 = x^n$ , 故直接利用公式得到:

$$\|F(X) - F(x^n) - F'(x^n)(X - x^n)\|_Y \leq a_2 (\|X - x^n\|_H^2) \quad (2.50)$$

上式中  $X$  是要求的解, 故  $F(X) = 0$ , 因此式(2.49)可以写成:

$$\|F(x^n) + F'(x^n)(X - x^n)\|_Y \quad (2.51)$$

考虑到牛顿迭代法的过程(2.44), 并按照迭代过程将解记为  $x^{n+1}$ 。将  $F(x^n) = -F'(x^n)(x^{n+1} - x^n)$  代入(2.42)中, 可以得到:

$$\|F'(x^n)(X - x^{n+1})\|_Y \quad (2.52)$$

注意到以上表达式为线性赋范空间  $Y$  的范数, 将上式视为(2.46)的右边, 为应用左边, 必须选取一个  $x \in \Omega_a$ , 又根据归纳假设  $x^n \in \Omega_a$ , 有注意到将  $x$  选取为  $x^n$  之后  $F'(x^n)$  可以与其逆相互抵消, 因此我们应用(2.46), 故我们得到:

$$a_1^{-1} \|F(x^n)^{-1} F'(x^n)(X - x^{n+1})\|_H \leq \|F'(x^n)(X - x^n)\|_Y \quad (2.53)$$

进一步化简等式左边可以得到:

$$a_1^{-1} \|X - x^{n+1}\|_H \leq a_2 (\|X - x^n\|_H^2) \quad (2.54)$$

不等号两边同时乘以正数  $a_1$  得到:

$$\|X - x^{n+1}\|_H \leq c (\|X - x^n\|_H^2) \quad (2.55)$$

针对上式利用归纳假设  $x^n \in \Omega_b$ , 能够得到:

$$\|X - x^{n+1}\|_H \leq cb * b \quad (2.56)$$

由于  $b = \min\{a, c^{-1}\}$  因此  $cb = \min\{ac, 1\}$ , 因此将上式化简, 有:

$$\|X - x^{n+1}\|_H \leq cb * b \leq b \leq 1 \quad (2.57)$$

这就证明了  $x^{n+1} \in \Omega_b$ , 因此根据数学归纳法原理, 命题成立。为了证明定理, 用(2.55)开始迭代, 引入记号  $\rho_n = \|X - x^n\|_H$ 。

我们有:

$$c\rho_n \leq c^2\rho_{n-1} \leq \dots \leq (c\rho_0)^{2^n}$$

不等号两边同时除以  $c$  就证明了定理：

$$\|x^n - X\|_H \leq c^{-1} (c^{2^n} \|x^0 - X\|_H^{2^n}) \quad (2.58)$$

而公式(2.57)则是保证了  $x^n$  可以收敛到解  $X$ 。

在牛顿法的实际应用（本文将其用于求解非线性方程组的解）之中，最难计算的是雅克比矩阵的逆部分，为了计算简便我们采用技巧：

定义一组数列  $\{n_k\}$ ，当  $n_k \leq n < n_{k+1}$  之时将牛顿法的迭代公式(2.45)改写为：

$$x^{n+1} = x^n - (F'(x^{n_k}))^{-1} F(x^n) \quad (2.59)$$

采用上式的能够节约计算逆矩阵的时间但是会增大误差，我们利用迭代次数的增加来进行弥补。

### 2.3.2 下降法

牛顿法的收敛区域常常难以找到，尤其是在较为复杂的计算之中，初值的选取非常关键。因此在利用牛顿法迭代之前可以利用某个收敛性更好的方法来寻找初值。故在计算的初始阶段采用某个下降法来替换牛顿法是值得的。

下降法的一般思想很简单，就是所谓的最陡下降法，亦即给定一个函数  $\Phi(x)$  之后按照如下规则寻找近似解：

$$x^{n+1} = x^n - \delta_n \text{grad}(\Phi(x^n)) \quad (2.60)$$

就是常用的线性化方法，利用线性近似来，线性近似中的斜率为函数的梯度，负梯度是函数下降最快的方向，这个方法由此得名。我们根据式(2.60)可以求得解的下一个近似。其中，函数值  $\Phi(x^n)$  能够直接计算出来，步长  $\delta_n$  的计算需要考量误差，为了保证较小的误差，我们可以如下确定其形式：

$$\min_{\delta_n} \Phi(x^n - \delta_n \text{grad}(\Phi(x^n))) \quad (2.61)$$

通过上式确定步长  $\delta_n$  之后进行迭代就能够不断进行下去。

下图明确表现了下降法的执行过程：

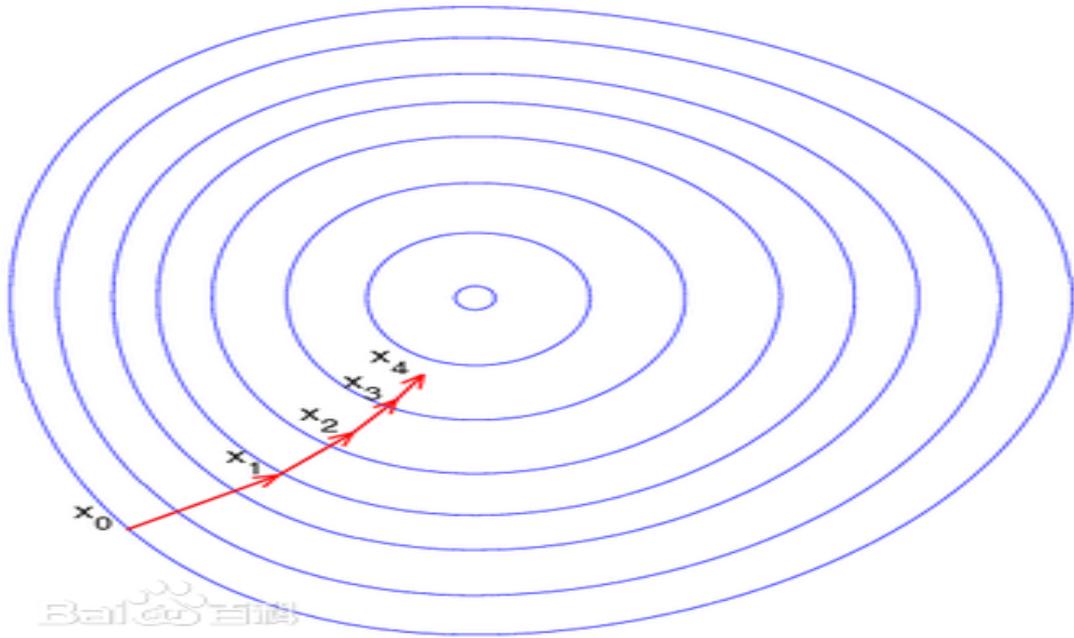


图 2-2 梯度下降法执行过程图示

最常用的一种求解非线性方程的方法是在牛顿法的开始阶段将求解转化为求解某个泛函的极小值。在最简单的情况之下，该泛函可以选取为：

$$\Phi(\mathbf{x}) = \sum_{i=1}^m (\lambda_i (f_i(\mathbf{x}))^2 \quad (2.62)$$

如果已经求出了一组解的近似值  $\bar{\mathbf{x}}^n = (x_1^n, x_2^n, \dots, x_m^n)$ ， $m$  和  $n$  是某个整数，并且已经求出了一个下降的方向满足  $|\Delta| = 1$ ，将下降方向的各个分量写出，为  $\Delta = (\Delta_1, \Delta_2, \dots, \Delta_m)$ ，那么沿着某个方向的方向导数可以计算出来，假定求导数的步长  $\epsilon$ ，导数为：

$$l_i = \frac{f_i(\mathbf{x}^n + \epsilon\Delta) - f_i(\mathbf{x}^n)}{\epsilon} \quad (2.63)$$

利用方向导数可以将函数线性化，在直线  $\mathbf{x} = \mathbf{x}^n + t\Delta$  上，我们可以得到函数的线性近似值：

$$f_i(\mathbf{x}) = f_i(\mathbf{x}^n) + tl_i \quad (2.64)$$

因此，根据下降法的一般原理，下一个坐标值  $\mathbf{x}^{n+1} = \mathbf{x}^n + t\Delta$  应该选取为：

$$\min_t \sum_{i=1}^m (\lambda_i (f_i(\mathbf{x}^n) + tl_i)^2 \quad (2.65)$$

因此只需要确定步长  $t$  就可以利用下降法确定下一个坐标。

### 3 近藤屏蔽与铁磁有序的竞争与共存

#### 3.1 模型推导

上一章中我们得到的近藤晶格模型，其哈密顿量可以写成形式：

$$H = \sum_k \epsilon_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} + J_k \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_i \quad (3.1)$$

第一项很明显就是用二次量子化形式所表达的动能项， $\epsilon_k$ ，即为传导电子<sup>①</sup>动能。其中 $\mathbf{S}_i$ 就是所考察第  $i$  个格点上的自旋算符， $\mathbf{s}_i$ 即为所考察格点的自旋密度算符，这时由于传导电子被假定为连续分布而引起的。

为了分析上述模型，我们采取常用的二次量子化方法来处理第二项所表示的交换作用。根据二次量子化的一般步骤，利用传导电子的产生和湮灭算符（ $C_{k\sigma}^+$ 、 $C_{k\sigma}$ ）我们可以将自旋密度算符表示为：

$$\mathbf{s}_i = \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^+ \mathbf{S}_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'} \quad (3.2)$$

直接利用自旋矩阵并不方便，我们一般使用泡利矩阵来表示自旋，泡利矩阵定义为：

$$\mathbf{s} = \frac{1}{2} \boldsymbol{\sigma} \quad (3.3)$$

由于自旋变量已经取为 $\sigma$ ，为了不混淆，我们利用另一个希腊字母 $\tau$ 来表示泡利矩阵。因此自旋密度算符就可以表示为：

$$\mathbf{s}_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma}^+ \boldsymbol{\tau}_{\sigma\sigma'} c_{i\sigma'} \quad (3.4)$$

同理，由于  $f$  电子的局域性非常强，波函数随着距离快速收敛， $f$  电子构成了局域磁矩的实际来源，因此局域电子的产生和湮灭算符就可以利用  $f_{k\sigma}^+$ 、 $f_{k\sigma}$  所表示，根据与推导传导电子的二次量子化形式(3.4)类似的推导过程，我们可以直接写出针对局域自旋的二次量子化结果，为：

<sup>①</sup> 常常称为 c (conduct) 电子

$$S_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} f_{i\sigma}^+ \tau_{\sigma\sigma'} f'_{i\sigma} \quad (3.5)$$

值得一提的是从上述模型之中可以得到的若干结论。

首先,有泡利不相容原理,每一个局域电子所可能的状态均最多有一个电子占据,因此近藤晶格模型之中的假设:在每一个格点上,都存在  $f$  电子(局域磁矩),这样一个条件可以表达为:

$$n_f = \sum_{\sigma\sigma'} f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma'} = 1 \quad (3.6)$$

此外,  $S$  算符作为自旋算符,具有角动量算符的一般性质,其对易关系可以写成:选取 ( $\hbar = 1$ )。

$$[S_i, S_j] = i\epsilon_{ijk} S_k \quad (3.7)$$

其平方  $S^2$  可以直接求出:

$$S^2 = S(S+1) = \frac{1}{2} * \left(\frac{1}{2} + 1\right) = \frac{3}{4} \quad (3.8)$$

但是如果直接利用近藤晶格模型(2.1)计算,我们会漏掉  $f$  电子的局域性条件;因此,为了显式地表示出  $f$  电子的局域性,我们在哈密顿量中加上一个约束进行限制,数学上说,就是添加上一个拉格朗日乘子,由于能量最小原理,这个问题类似多元函数的极值的算法。

按照计算拉格朗日乘子的一般步骤,拉格朗日乘子可以写成:

$$\sum_i \lambda_i (\sum_{\sigma} f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} - 1) \quad (3.9)$$

因此近藤晶格模型的哈密顿量可以写成:

$$H = \sum_k \epsilon_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} + J_k \sum_i S_i \cdot S_i + \sum_i \lambda_i (\sum_{\sigma} f_{i\sigma}^+ f_{i\sigma} - 1) \quad (3.10)$$

为了处理交换作用,我们首先证明一个泡利矩阵(仍然用  $\tau$  表示)计算常用的性质:

$$\tau_{\sigma_1\sigma_2} \tau_{\sigma_3\sigma_4} = 2\delta_{\sigma_1\sigma_4} \delta_{\sigma_2\sigma_3} - \delta_{\sigma_1\sigma_2} \delta_{\sigma_3\sigma_4} \quad (3.11)$$

表达式中  $\delta$  函数表示当且仅当两个下标相等的情形,函数值为 1, 否则函数值为 0. 证明可以直接利用矩阵形式进行计算。

首先,左边的值只能取为  $\pm 1$  或者 0. 等号左边取 1 的一个条件是  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$  并且  $\sigma_3 = \sigma_4 = 1$ , (为对应矩阵形式,在这里 1 并不是指自旋值的两倍,而是矩阵的行与列的指标. 指标是状态的编号,编号的规则是自旋值  $\frac{1}{2}$  的状态编为 1, 自旋值  $-\frac{1}{2}$  的状态编

为 2。) 将条件直接带入右边等式，发现两边的值相等。等式左边取得 1 的另一个条件是： $\sigma_1 = \sigma_2 = 2$  并且  $\sigma_3 = \sigma_4 = 2$ ，将这个条件带入等号右边，发现仍然相等。

等号左边取值-1 的一个条件是  $\sigma_1 = \sigma_2 = 2$  并且  $\sigma_3 = \sigma_4 = 1$ ，把这个条件带入，可以发现两边相等。而等号左边取值-1 的另一个条件是  $\sigma_1 = \sigma_2 = 1$  并且  $\sigma_3 = \sigma_4 = 2$ ，把这个条件直接带入等式右边进行计算，仍然得到-1。

在其他的条件之下，等号左边都只能得到零，将条件形式写出就是：

$$\sigma_1 \neq \sigma_2 \text{ 或者 } \sigma_3 \neq \sigma_4 \quad (3.12)$$

将条件(3.12)带入(3.11)等号右边，可以得到等号右边为零，因此等号两边相等。

这样就证明了公式(3.11)。

证明公式(3.11)以后我们可以利用其处理哈密顿量中的交换作用项  $J_k \sum_i s_i \cdot S_i$ ，直接进行二次量子化，将(3.4)与(3.5)直接带入，可以得到：

$$s_i \cdot S_i = \frac{1}{4} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} c_{i\sigma_1}^+ s_{\sigma_1 \sigma_2} c_{i\sigma_2} \sum_{\sigma_3 \sigma_4} f_{i\sigma_3}^+ \tau_{\sigma_3 \sigma_4} f_{i\sigma_4} \quad (3.13)$$

将求和号写在前面，有：

$$s_i \cdot S_i = \frac{1}{4} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\sigma_3 \sigma_4} c_{i\sigma_1}^+ \tau_{\sigma_1 \sigma_2} c_{i\sigma_2} f_{i\sigma_3}^+ \tau_{\sigma_3 \sigma_4} f_{i\sigma_4} \quad (3.14)$$

由于传导电子和局域电子是两种不同而互相独立考虑的电子，因此这关于这两种电子的产生和消灭算符可以随意交换位置，因此可以得到：

$$s_i \cdot S_i = \frac{1}{4} \sum_{\sigma_1 \sigma_2} \sum_{\sigma_3 \sigma_4} c_{i\sigma_1}^+ \tau_{\sigma_1 \sigma_2} \tau_{\sigma_3 \sigma_4} c_{i\sigma_2} f_{i\sigma_3}^+ f_{i\sigma_4} \quad (3.15)$$

可以看到，出现了两个泡利矩阵相乘的情形，这时我们依然需要利用公式(3.11)进行化简，因此可以得到

$$s_i \cdot S_i = \frac{1}{4} \sum_{\sigma_1 \sigma_2 \sigma_3 \sigma_4} c_{i\sigma_1}^+ (2\delta_{\sigma_1 \sigma_4} \delta_{\sigma_2 \sigma_3} - \delta_{\sigma_1 \sigma_2} \delta_{\sigma_3 \sigma_4}) c_{i\sigma_2} f_{i\sigma_3}^+ f_{i\sigma_4} \quad (3.16)$$

将求和负号计算出来，考虑到 $\delta$ 函数，我们可以得到求和式的第一项为：

$$\frac{1}{4} * 2 \sum_{\sigma_1 \sigma_2} c_{i\sigma_1}^+ c_{i\sigma_2} f_{i\sigma_2}^+ f_{i\sigma_1} \quad (3.17)$$

同时按照同样的步骤，可以得到求和式的第二项为：

$$-\frac{1}{4} \sum_{\sigma_1 \sigma_3} c_{i\sigma_1}^+ c_{i\sigma_1} f_{i\sigma_3}^+ f_{i\sigma_3} \quad (3.18)$$

为了进一步的分析，在这类对于单类电子算符的二次乘积之中，有一个常用的技巧是进行配方，配成完全平方式，按照这个思路，我们来处理(3.17) 和(3.18)。

针对(3.17)我们注意到电子的占有数只能为零或者一，换句话说就是产生和湮灭两次的值必须是零。亦即：

$$c_{i\sigma_1}^+ c_{i\sigma_1}^+ = c_{i\sigma_1} c_{i\sigma_1} = 0 \quad (3.19)$$

针对  $f$  电子，这个关系同样成立，有：

$$f_{i\sigma_1}^+ f_{i\sigma_1}^+ = f_{i\sigma_1} f_{i\sigma_1} = 0 \quad (3.20)$$

在配方的时候，我们将相同自旋的产生和湮灭算符放在一起，并且不同电子的算符分开。因此，在将前面对格点坐标  $i$  的求和计入之后，并且注意到  $f_{i\sigma_2}^+ f_{i\sigma_1}$  之间满足反对易关系。我们可以得到：

$$-\frac{1}{4} * 2 \sum_i c_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} c_{i\downarrow} f_{i\downarrow}^+ + c_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} c_{i\uparrow} f_{i\uparrow}^+ + c_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} c_{i\downarrow} f_{i\downarrow}^+ + c_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} c_{i\uparrow} f_{i\uparrow}^+ \quad (3.21)$$

将求和式中的项前两项视为交叉项进行配方，可以得到最终结果：

$$-\frac{1}{4} \sum_i (c_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} + c_{i\downarrow} f_{i\downarrow}^+)^2 + (c_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} + c_{i\uparrow} f_{i\uparrow}^+)^2 \quad (3.22)$$

分析其物理意义，可以知道这一项表示局域自旋与传导电子自旋的涨落变化。能够表示我们需要的近藤屏蔽效应。

不过配方之后，为保持等号成立。我们需要加上二次项：

$$\frac{1}{4} \sum_i c_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} c_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} + c_{i\downarrow} f_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} f_{i\downarrow}^+ + c_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} c_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} + c_{i\uparrow} f_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} f_{i\uparrow}^+$$

利用(3.19)和(3.20)，上式为零。

接下来我们来处理(3.18)，同样将相同自旋的产生和湮灭算符放在一起，并且注意到关于传导电子与局域电子之间的产生和湮灭算符是互相对易的，我们得到：

$$-\frac{1}{4} \sum_i c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} f_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} + c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} f_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} f_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} + c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} f_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow}$$

这样再计入(3.21)之中的后两个求和项，注意到  $f$  电子之间的产生消灭算符的反对易性。我们可以分别因式得到最终结果为

$$\frac{1}{4} \sum_i (c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow}) (f_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} - f_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow}) \quad (3.23)$$

这一项在引入下一节的平均场参数之后会有更明白的物理意义。

这样，我们就得到了交换作用的最终形式：

$$\begin{aligned} J_k \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{S}_i = & -\frac{J_k}{4} \sum_i (c_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow})^2 + (c_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} + c_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow})^2 \\ & + \frac{J_k}{4} \sum_i (c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow}) (f_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} - f_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow}) \end{aligned} \quad (3.24)$$

### 3.2 利用平均场近似处理模型

两个物理量的乘积可以采用平均场近似将波动性消除，也就是说：已知两个物理量  $A$ ， $B$ 。平均场近似可以采取：

$$AB \approx \langle A \rangle B + A \langle B \rangle - \langle A \rangle \langle B \rangle$$

首先注意到(3.24)之中求和式的第一项，表示横向自旋涨落和翻转，故这一项做平均之后的平均场参数应该表示近藤屏蔽作用使得形成自旋为零的自选单态。因此，平均场序参数可以写成形式：

$$V = \langle c_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} + c_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} \rangle = \langle c_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} + c_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} \rangle \quad (3.25)$$

另外我们考虑传导电子粒子数的态密度  $n_c < 1$  且比较小的情形，这就是所谓的远离半满情形，文献[]中指出在这个时候系统相比于反铁磁长程有序状态，更倾向于铁磁长程有序状态，表示铁磁序可以利用磁矩来表示，根据磁矩与自旋之间的关系  $\mathbf{m} = \frac{e\hbar}{2mc} \mathbf{s}$ ，我们可以直接考察自旋  $\mathbf{s}$ 。因此可以认为传导电子与局域电子的自旋磁矩满足下列关系：

$$\mathbf{m}_f = \langle S_i^z \rangle = \frac{1}{2} \langle f_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} - f_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} \rangle \quad (3.26)$$

以及

$$\mathbf{m}_c = \langle s_i^z \rangle = \frac{1}{2} \langle c_{i\uparrow}^+ c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^+ c_{i\downarrow} \rangle \quad (3.27)$$

以上两个公式都能够直接选择相应的状态来进行直接验证。有了一项这两个定义，我们就可以说明(3.24)求和式第二项的物理意义了。

这一项表示传导电子自旋极化与局域电子自旋极化之间的耦合，回忆之前提到的 RKKY 相互作用的机理，以及 RKKY 相互作用使得系统倾向于铁磁有序或者反铁磁长程有序，(3.24)求和式第二项造成系统的铁磁有序（反铁磁长程有序）在我们要考虑的

粒子数态密度较小时不会出现)。

引入平均场序参数之后我们将统一求和的下标, 改为统一对状态求和, 因此我们必须要对哈密顿量进行傅里叶变换:

$$f_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k f_{k\sigma} e^{ik \cdot r_i} \quad c_{i\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k c_{k\sigma} e^{ik \cdot r_i} \quad (3.28)$$

经过直接的带入计算可以得到哈密顿量的形式为:

$$H = \sum_{k\sigma} \begin{pmatrix} c_{k\sigma}^+ & f_{k\sigma}^+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \epsilon_k + \frac{J_k m_f}{2} \sigma & -\frac{J_k V}{2} \\ -\frac{J_k V}{2} & \lambda + \frac{J_k m_f}{2} \sigma \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_{k\sigma} \\ f_{k\sigma} \end{pmatrix} + N \left( \frac{J_k V^2}{2} - J_k m_c m_f - \lambda \right) \quad (3.29)$$

按照一般步骤, 为了求解准粒子的能量本征谱, 我们需要将哈密顿量对角化, 亦即求解久期方程:

$$\begin{vmatrix} \epsilon_k + \frac{J_k m_f}{2} \sigma - E & -\frac{J_k V}{2} \\ -\frac{J_k V}{2} & \lambda + \frac{J_k m_f}{2} \sigma - E \end{vmatrix} = 0 \quad (3.30)$$

求解方程之后我们解出能量:

$$E_{k\sigma}^{\pm} = \frac{1}{2} \left( \epsilon_k + \lambda + \frac{J_k}{2} (m_c + m_f) \sigma \pm \sqrt{\left( \epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2} (m_f - m_c) \sigma \right)^2 + J_k^2 V^2} \right) \quad (3.31)$$

我们利用格林函数和谱定理的方法来求出自洽方程。根据已知条件和所有算符, 描述这个系统的格林函数最多有四个, 分别记为  $\ll c_{k\sigma} | c_{k\sigma}^+ \gg_{\omega}$ ,  $\ll f_{k\sigma} | f_{k\sigma}^+ \gg_{\omega}$ ,  $\ll c_{k\sigma} | f_{k\sigma}^+ \gg_{\omega}$ ,  $\ll f_{k\sigma} | c_{k\sigma}^+ \gg_{\omega}$ , 下面我们将逐个求出格林函数来描述这个系统。

已知单粒子的双时格林函数满足运动方程:

$$\ll c_{k\sigma} | c_{k\sigma}^+ \gg_{\omega} = 1 + \ll [c_{k\sigma}, H] | c_{k\sigma}^+ \gg_{\omega} \quad (3.32)$$

采用截断近似到一阶, 我们可以得到:

$$(\omega - \epsilon_{k\sigma}) \ll c_{k\sigma} | c_{k\sigma}^+ \gg_{\omega} = 1 + \left( \frac{J_k V}{2} \right)^2 \frac{1}{\omega - \lambda_{\sigma}} \ll c_{k\sigma} | c_{k\sigma}^+ \gg_{\omega}$$

因此可以求出格林函数为:

$$\langle\langle c_{k\sigma}|c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \frac{\omega - \lambda_{\sigma}}{(\omega - \epsilon_{k\sigma})(\omega - \lambda_{\sigma}) - \left(\frac{J_k V}{2}\right)^2} \quad (3.33)$$

采用同样的步骤可以计算下一个单粒子格林函数 $\langle\langle f_{k\sigma}|f_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega}$

$$(\omega - \lambda_{\sigma}) \langle\langle f_{k\sigma}|f_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = 1 + \left(\frac{J_k V}{2}\right)^2 \frac{1}{\omega - \epsilon_{k\sigma}} \langle\langle f_{k\sigma}|f_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega}$$

整理上式可以得到格林函数：

$$\langle\langle f_{k\sigma}|f_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \frac{\omega - \epsilon_{k\sigma}}{(\omega - \epsilon_{k\sigma})(\omega - \lambda_{\sigma}) - \left(\frac{J_k V}{2}\right)^2} \quad (3.34)$$

我们可以讨论下一组格林函数 $\langle\langle c_{k\sigma}|f_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega}$ 和 $\langle\langle f_{k\sigma}|c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega}$ ，考虑运动方程和哈密顿量的非对角元中的对称性，我们可以认为这两个格林函数相等，因此我们可以仅需要计算其中一项即可，我们选择计算 $\langle\langle f_{k\sigma}|c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega}$ 。利用格林函数的运动方程：

$$\langle\langle f_{k\sigma}|c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = 1 + \langle\langle [f_{k\sigma}, H]|c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} \quad (3.35)$$

将哈密顿量带入上式进行计算可以得到：

$$(\omega - \lambda_{\sigma}) \langle\langle f_{k\sigma}|c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} \approx -\frac{J_k V}{2} \langle\langle c_{k\sigma}|c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} \quad (3.36)$$

综合上式可以得到：

$$\langle\langle f_{k\sigma}|c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = \langle\langle c_{k\sigma}|f_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} = -\frac{\frac{J_k V}{2}}{\omega - \lambda_{\sigma}} \langle\langle c_{k\sigma}|c_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_{\omega} \quad (3.37)$$

可以利用谱函数定理来求解电子态密度：

$$\rho_{\sigma}(\omega) = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, \omega) = -\frac{1}{N\pi} \sum_{\mathbf{k}} \text{Im}G(\omega)$$

我们可以得到：

$$\rho_c^{\sigma} = \rho_c^0 [\theta(\omega - \omega_{1\sigma})\theta(\omega - \omega_{2\sigma}) + \theta(\omega - \omega_{3\sigma})\theta(\omega - \omega_{4\sigma})] \quad (3.38)$$

以及：

$$\rho_f^{\sigma}(\omega) = \left( \frac{\frac{J_k V}{2}}{\omega - \lambda_{\sigma}} \right)^2 \rho_c^{\sigma} \quad (3.39)$$

$$\rho_{cf}^{\sigma}(\omega) = -\frac{\frac{J_k V}{2}}{\omega - \lambda_{\sigma}} \rho_c^{\sigma}$$

其中 $\theta$ 函数应该是阶跃函数的表示，自变量大于等于零函数值为一；反之，函数值

为零。

另外符号 $\omega_{1\sigma}$ ,  $\omega_{2\sigma}$ ,  $\omega_{3\sigma}$ ,  $\omega_{4\sigma}$ 表示自旋取值为 $\sigma$ 的二次量子化之后形成的准粒子的能带边界。我们现在将他们显式地写出来：

$$\omega_{1\sigma} = \frac{1}{2}(-D + \lambda + \frac{J_k}{2}(m_c + m_f)\sigma) - \sqrt{\left(\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2}(m_f - m_c)\sigma\right)^2 + J_k^2 V^2} \quad (3.40)$$

$$\omega_{2\sigma} = \frac{1}{2}(D + \lambda + \frac{J_k}{2}(m_c + m_f)\sigma) - \sqrt{\left(\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2}(m_f - m_c)\sigma\right)^2 + J_k^2 V^2} \quad (3.41)$$

$$\omega_{3\sigma} = \frac{1}{2}(-D + \lambda + \frac{J_k}{2}(m_c + m_f)\sigma) + \sqrt{\left(\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2}(m_f - m_c)\sigma\right)^2 + J_k^2 V^2} \quad (3.42)$$

$$\omega_{4\sigma} = \frac{1}{2}(D + \lambda + \frac{J_k}{2}(m_c + m_f)\sigma) + \sqrt{\left(\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2}(m_f - m_c)\sigma\right)^2 + J_k^2 V^2} \quad (3.43)$$

### 3.3 自洽方程推导

#### 3.3.1 平均场参数的引入

得到了态密度, 我们就可以求出自洽方程, 在上面所考虑的平均场近似问题之中, 我们注意到这个系统是由一系列平均场近似所产生的平均场参数所描述的, 因此我们注意到其中所有的平均场参数为:

传导电子的化学势 $\mu$  (这个参数出现在费米分布之中是能带填充的上限), 然后是我们所定义的两个平均场参数, 分别是表示传导电子磁矩以及有效磁化强度的 $m_c$ 和局域电子(f电子)磁矩以及有效磁化强度的 $m_f$ 。最后一个就是所考虑的描述近藤屏蔽的

近藤屏蔽平均场参数  $V$ 。一共五个，而所有算组二次型的平均值也一共五个。下面我们将其一一写出：

所有的平均场产生消灭算符的二次组合分别为  $\langle C_{k\uparrow}C_{k\uparrow}^+ \rangle$ 、 $\langle C_{k\downarrow}C_{k\downarrow}^+ \rangle$ 、 $\langle f_{k\uparrow}f_{k\uparrow}^+ \rangle$ 、 $\langle f_{k\downarrow}f_{k\downarrow}^+ \rangle$ 、 $\langle c_{k\sigma}^+f_{k\sigma} \rangle$ 、 $\langle c_{k\sigma}f_{k\sigma}^+ \rangle$ ，一共六个，下面将一一讨论。其中，电子密度  $n_c$  被视为已知，亦即这个量将被视为外生变量，在计算中会直接给定。

首先是  $\langle C_{k\uparrow}C_{k\uparrow}^+ \rangle$ ，表示自旋向上的准粒子态密度，对所有状态求和之后就与自旋向上的传导电子相关，就是其有效磁矩。仔细分析可以发现，这一部分由传导电子本来的部分  $n_c$  和极化部分  $m_c$  构成，注意到表达式中的自旋为向上，因此这两部分应该用加号连接。再考虑到定义(3.27)，我们有：

$$N(n_c + 2m_c) = 2 \sum_k \langle C_{k\uparrow}C_{k\uparrow}^+ \rangle$$

其中  $N$  为电子数，整理有：

$$(n_c + 2m_c) = \frac{2}{N} \sum_k \langle C_{k\uparrow}C_{k\uparrow}^+ \rangle \quad (3.44)$$

同理，我们可以考虑  $\langle C_{k\downarrow}C_{k\downarrow}^+ \rangle$ ，这个量表示自旋向下的准电子的态密度，根据上述讨论可以类推知道这个量的求和为传导电子密度  $n_c$  减去极化部分  $m_c$ ，因此我们可以类似得到：

$$(n_c - 2m_c) = \frac{2}{N} \sum_k \langle C_{k\downarrow}C_{k\downarrow}^+ \rangle \quad (3.45)$$

其后的两项是关于局域电子（ $f$  电子）的，其与传导电子的情形差异并不是很大，最只要的差异是局域电子由于不能移动，在每一个格点上都有着，因此其态密度  $n_f$  恒为 1。与传导电子类似考虑可以知道针对  $\langle f_{k\uparrow}f_{k\uparrow}^+ \rangle$ ，应该用加号来连接局域电子原来磁矩和被极化的部分  $m_f$ ，因此，我们能够仿照对于传导电子的讨论得到最终结果：

$$(1 + 2m_f) = \frac{2}{N} \sum_k \langle f_{k\uparrow}f_{k\uparrow}^+ \rangle \quad (3.46)$$

对于  $\langle f_{k\downarrow}f_{k\downarrow}^+ \rangle$ ，自然就是局域电子必然存在的常数 1 和被极化所必须减去的有效磁矩  $m_f$ ，因此我们可以得到下一个表达式：

$$(1 - 2m_f) = \frac{2}{N} \sum_k \langle f_{k\downarrow}f_{k\downarrow}^+ \rangle \quad (3.47)$$

到此为止，单纯由传导电子与局域电子的产生消灭算符所构成，并用以表示系统

状态的平均值已经讨论完毕，接下来讨论的就是两类电子之间的耦合作用，表征这些的耦合作用通常由包含两类电子算符的乘积的平均值所组成。就是剩余的  $\langle c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} \rangle$  与  $\langle c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} \rangle$  两项。而剩余的平均场序参数仅仅剩下  $V$ ，为了简便我们在书写以此  $V$  的定义。

$$V = \langle c_{i\uparrow}^+ f_{i\uparrow} + c_{i\downarrow} f_{i\downarrow}^+ \rangle = \langle c_{i\downarrow}^+ f_{i\downarrow} + c_{i\uparrow} f_{i\uparrow}^+ \rangle \quad (3.48)$$

从定义中可以直接对照发现，我们需要讨论的算符不会单独出现，而是以其和的形式出现，因此前面四个算符中等号右边出现的因子 2 就不再出现。我们先直接写出  $V$  的公式，具体的形式讨论将与格林函数联系起来，应用谱定理再予以阐述。

平均场序参数  $V$  表示为：

$$V = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} \rangle \quad (3.49)$$

### 3.3.2 利用格林函数推导自洽方程

既然上一节中已经将各个平均场序参数与产生消灭算符的平均值联系起来，并且都对状态  $\mathbf{k}$  进行求和，一个很自然的想法就是利用格林函数和谱定理往下推演，这样就能够得到自洽方程。格林函数谱定理的形式为：

$$n_{\sigma} = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, \omega) d\omega = \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \rho(\omega) d\omega \quad (3.50)$$

上式中  $f(\omega)$  为按照能量的状态分布函数，一般根据所讨论的情形选取，本文中所讨论的都是电子（费米子），因此  $f(\omega)$  在本文全部理解为费米分布函数：

$$f(\omega) = \frac{1}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1}$$

其中， $\mu$  为化学势。

让我们首先考虑(3.44)式，与之相应的格林函数为(3.33)，与之相应的态密度为(3.38)，在引入态密度之后，态密度就是所谓的谱函数。根据格林函数的谱定理，在有限温度之下这个公式为：

$$\frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle c_{k\uparrow} c_{k\uparrow}^+ \rangle = \frac{2}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{\mathbf{k}} \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} d\omega$$

注意到谱函数与态密度的关系：

$$\rho_{\sigma}(\omega) = N^{-1} \sum_{\mathbf{k}} A(\mathbf{k}, \omega)$$

我们可以直接利用态密度得到第一个方程：

$$\begin{aligned} \frac{2}{N} \sum_k \langle C_{k\uparrow} C_{k\uparrow}^+ \rangle &= \frac{2}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_k \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} d\omega \\ &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \rho_c^\uparrow d\omega \end{aligned} \quad (3.51)$$

按照同样的步骤，我们可以讨论(3.45)式，我们需要处理的表达式为：

$$\frac{2}{N} \sum_k \langle C_{k\downarrow} C_{k\downarrow}^+ \rangle$$

按照同样的步骤，我们利用谱定理写出自洽方程，不过此时的态密度需要改写成 $\rho_c^\downarrow$ 。

$$\begin{aligned} \frac{2}{N} \sum_k \langle C_{k\downarrow} C_{k\downarrow}^+ \rangle &= \frac{2}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_k \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} d\omega \\ &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \rho_c^\downarrow d\omega \end{aligned} \quad (3.52)$$

至此，相关传导电子的方程就已经讨论完全了。接下来需要讨论局域电子的情形。

对于局域电子，我们首先分析表达式

$$\frac{2}{N} \sum_k \langle f_{k\uparrow} f_{k\uparrow}^+ \rangle$$

这个表达式呈产生湮灭算符的二次形式，我们可以同样按照传导电子的情形应用谱定理进行计算。只不过表示传导电子态密度 $\rho_c^\uparrow$ 需要替换成表征 f 电子态密度的 $\rho_f^\uparrow$ 的根据(3.52)类似的计算，我们给出结果

$$\frac{2}{N} \sum_k \langle f_{k\uparrow} f_{k\uparrow}^+ \rangle = \frac{2}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_k \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} d\omega = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \rho_f^\uparrow d\omega$$

但是进一步考虑到 $\rho_c^\uparrow$ 、 $\rho_f^\uparrow$ 之间的关系(3.39)：

$$\rho_f^\sigma(\omega) = \left( \frac{\frac{J_k V}{2}}{\omega - \lambda_\sigma} \right)^2 \rho_c^\sigma$$

我们可以得到最终结果为：

$$\begin{aligned} \frac{2}{N} \sum_k \langle f_{k\uparrow} f_{k\uparrow}^+ \rangle &= \frac{2}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_k \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} d\omega = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \rho_f^\uparrow d\omega \\ &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \left( \frac{\frac{J_k V}{2}}{\omega - \lambda_\uparrow} \right)^2 \rho_c^\uparrow d\omega \end{aligned} \quad (3.53)$$

我们接下来考虑准粒子自旋向下情形，在此情形下我们需要计算的表达式为(3.47):

$$\frac{2}{N} \sum_k \langle f_{k\downarrow} f_{k\downarrow}^+ \rangle$$

完全与讨论自旋向上情形一致，我们得到:

$$\begin{aligned} \frac{2}{N} \sum_k \langle f_{k\downarrow} f_{k\downarrow}^+ \rangle &= \frac{2}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_k \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} d\omega = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \rho_f^\downarrow d\omega \quad (3.54) \\ &= 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \left( \frac{J_k V}{\omega - \lambda_\downarrow} \right)^2 \rho_c^\downarrow d\omega \end{aligned}$$

到现在为止，局域  $f$  电子的情形就讨论完了。就剩下最后一项——两类电子之间的近藤屏蔽相互作用  $V$ (3.49):

$$V = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} \rangle$$

首先针对上式  $\langle c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} \rangle$ ，来应用谱定理:

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} \rangle &= \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{k\sigma} \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} d\omega \quad (3.55) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) (\rho_{cf}^\uparrow + \rho_{cf}^\downarrow) d\omega \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \left( \left( \frac{J_k V}{\omega - \lambda_\uparrow} \right) \rho_c^\uparrow + \left( \frac{J_k V}{\omega - \lambda_\downarrow} \right) \rho_c^\downarrow \right) d\omega \end{aligned}$$

借用谱定理，我们回头讨论近藤屏蔽项  $V$  的算符表示形式，在那里的讨论之中，我们直接忽略了表达式  $\langle c_{k\sigma} f_{k\sigma}^+ \rangle$ ，我们现在将要证明选取这两个表达式之一都是合理的。

如果近藤屏蔽参数定义为:

$$V = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle c_{k\sigma} f_{k\sigma}^+ \rangle$$

那么有谱定理，仿照计算(3.55)，我们有:

$$\begin{aligned}\frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} \rangle &= \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{k\sigma} \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} d\omega \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) (\rho_{fc}^\uparrow + \rho_{fc}^\downarrow) d\omega\end{aligned}$$

为了表示区分，我们在表示态密度是将表示两类电子的下标进行的一个对换。注意到这两个算符对应的格林函数满足关系(3.37)：

$$\langle\langle f_{k\sigma} | C_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega = \langle\langle c_{k\sigma} | f_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega = -\frac{\frac{J_k V}{2}}{\omega - \lambda_\sigma} \langle\langle C_{k\sigma} | C_{k\sigma}^+ \rangle\rangle_\omega$$

我们可以认为两个态密度是直接相等，因此：

$$\begin{aligned}\frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} \rangle &= \frac{1}{N} \int_{-\infty}^{+\infty} \sum_{k\sigma} \frac{A(\mathbf{k}, \omega)}{e^{\beta(\omega-\mu)} + 1} d\omega & (3.56) \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) (\rho_{fc}^\uparrow + \rho_{fc}^\downarrow) d\omega \\ &= \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) (\rho_{cf}^\uparrow + \rho_{cf}^\downarrow) d\omega \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \left( \left( \frac{\frac{J_k V}{2}}{\omega - \lambda_\uparrow} \right) \rho_c^\uparrow + \left( \frac{\frac{J_k V}{2}}{\omega - \lambda_\downarrow} \right) \rho_c^\downarrow \right) d\omega\end{aligned}$$

到此为止，我们关于系统五个平均场参数：传导电子的化学势 $\mu$ （这个参数出现在费米分布之中是能带填充的上限）。以及我们所定义的两个平均场参数，分别是表示传导电子磁矩以及有效磁化强度的 $m_c$ 和局域电子（f 电子）磁矩以及有效磁化强度的 $m_f$ 和描述近藤屏蔽的近藤屏蔽平均场参数  $V$  的五个自治方程都已经全部推倒出来，我们将其汇总在下面：

$$(n_c + 2m_c) = \frac{2}{N} \sum_k \langle C_{k\uparrow} C_{k\uparrow}^+ \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \rho_c^\uparrow d\omega \quad (3.57)$$

$$(n_c - 2m_c) = \frac{2}{N} \sum_k \langle C_{k\downarrow} C_{k\downarrow}^+ \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \rho_c^\downarrow d\omega \quad (3.58)$$

$$(1 - 2m_f) = \frac{2}{N} \sum_k \langle f_{k\downarrow} f_{k\downarrow}^+ \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \left( \frac{\frac{J_k V}{2}}{\omega - \lambda_\downarrow} \right)^2 \rho_c^\downarrow d\omega \quad (3.59)$$

$$(1 + 2m_f) = \frac{2}{N} \sum_k \langle f_{k\uparrow} f_{k\uparrow}^+ \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \left( \frac{J_k V}{\omega - \lambda_{\uparrow}} \right)^2 \rho_c^{\uparrow} d\omega \quad (3.60)$$

$$V = \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} \rangle$$

$$= - \int_{-\infty}^{+\infty} f(\omega) \left( \left( \frac{J_k V}{\omega - \lambda_{\uparrow}} \right) \rho_c^{\uparrow} + \left( \frac{J_k V}{\omega - \lambda_{\downarrow}} \right) \rho_c^{\downarrow} \right) d\omega \quad (3.61)$$

### 3.4 不同情形之下的自洽方程

在本文接下来所需要考虑的情形之中，方程(3.57)-(3.61)就可以进一步简化，首先我们所考虑的状态是零温  $T = 0K$ 。在这个状态之下，所有物理体系都会处于其能量最低的状态——基态，但是由于泡利不相容原理仍然存在，分布函数只能最大取到 1，即每一个状态都占据了电子，根据化学势的定义，就会排到化学势为止（如下图所示）：

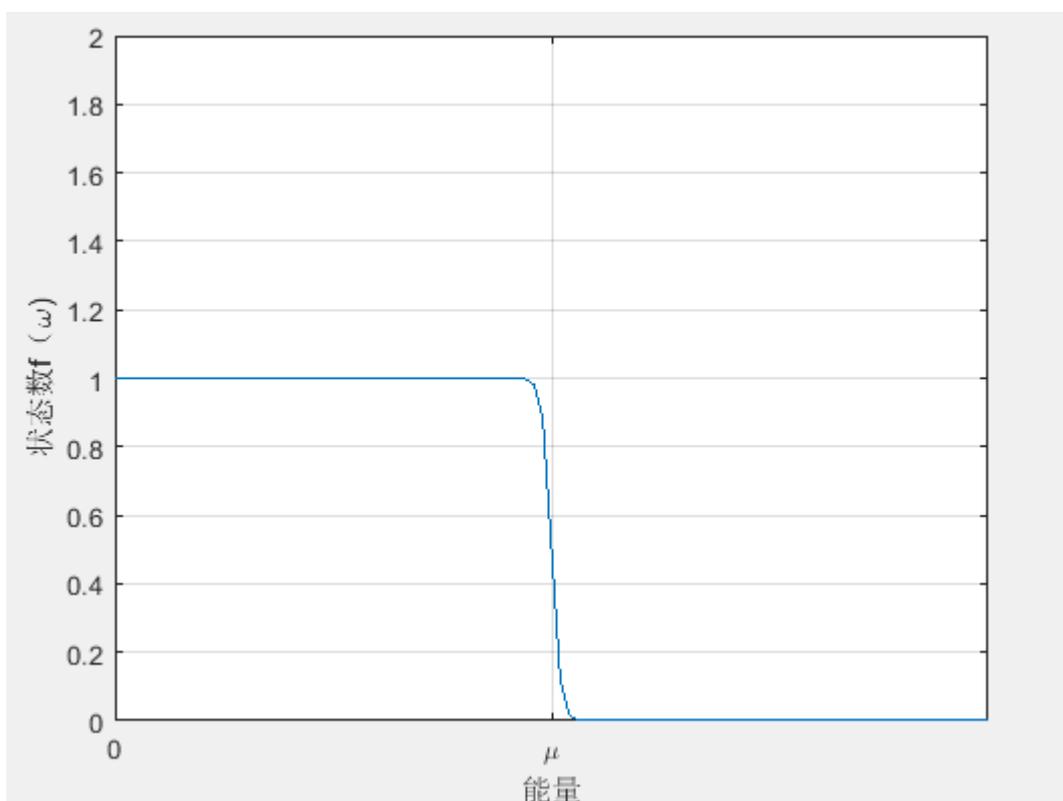


图 3-1 状态数-能量函数关系

因此我们可以得到  $f(\omega) = 1$ 。

至于传导电子的态密度，本文中仅仅考虑最简单的情形——常数态密度。也就是说再引入能量分布和半宽  $D$  之后，态密度  $\rho_c$  写成形式：

$$\rho_{c\sigma} = \frac{1}{2D} (\theta(\omega + D) + \theta(D - \omega))$$

考虑到  $\theta$  函数的性质，我们可以将两项合并写成

$$\rho_{c\sigma} = \frac{1}{2D} (\theta((\omega + D)(D - \omega))) \quad (3.62)$$

在加入零温条件和条件(3.62)之后方程组的一般形式就会简化为下列形式：

$$(n_c + 2m_c) = \frac{2}{N} \sum_k \langle C_{k\uparrow} C_{k\uparrow}^+ \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_c^\uparrow d\omega \quad (3.63)$$

$$(n_c - 2m_c) = \frac{2}{N} \sum_k \langle C_{k\downarrow} C_{k\downarrow}^+ \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_c^\downarrow d\omega \quad (3.64)$$

$$(1 - 2m_f) = \frac{2}{N} \sum_k \langle f_{k\downarrow} f_{k\downarrow}^+ \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{J_k V}{\omega - \lambda_\downarrow} \right)^2 \rho_c^\downarrow d\omega \quad (3.65)$$

$$(1 + 2m_f) = \frac{2}{N} \sum_k \langle f_{k\uparrow} f_{k\uparrow}^+ \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{J_k V}{\omega - \lambda_\uparrow} \right)^2 \rho_c^\uparrow d\omega \quad (3.66)$$

$$\begin{aligned} V &= \frac{1}{N} \sum_{k\sigma} \langle c_{k\sigma}^+ f_{k\sigma} \rangle \\ &= - \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \left( \frac{J_k V}{\omega - \lambda_\uparrow} \right) \rho_c^\uparrow + \left( \frac{J_k V}{\omega - \lambda_\downarrow} \right) \rho_c^\downarrow \right) d\omega \end{aligned} \quad (3.67)$$

进一步的就需要根据具体的物理背景，现有的研究表明：

当传导电子态密度  $n_c$  小于 0.82 时，传导电子与局域电子之间倾向反铁磁耦合；经由传导电子的局域磁矩之间形成的 **RKKY** 相互作用则是倾向于铁磁耦合，因此本文所考虑的情况下  $J_k > 0$ 。

为了简化方程，我们可以从物理地考虑有可能存在的各种情况，各种状态，具体

可以分为顺磁的近藤屏蔽相，磁有序的铁磁相以及这两种相的共存相这三类。根据电子填充的不同，我们在后两相中还可以分为自旋极化和非自旋极化两类。

### 3.4.1 顺磁近藤屏蔽相的研究

我们已经知道传导电子对于局域磁矩会存在近藤屏蔽作用。这个作用的存在会使得局域磁矩的表现减弱，因此就会存在这样一种状况——在传导电子密度 $n_c$ 非常大的时候会出现很强的近藤屏蔽，局域磁矩的存在在小范围内就可以近似成为单杂质近藤问题，从单杂质近藤问题的思路处理，当传导电子密度 $n_c$ 非常大就会出现一个相——近藤屏蔽相。而这个相是顺磁的。因此我们接下来就考虑近藤屏蔽顺磁相之下的方程。

首先由于顺磁相为磁无序相，因此表征磁有序的平均场序参数 $m_c, m_f$ 必须为零，而表示近藤屏蔽的平均场序参数 $V$ 不为零。故我们有条件

$$V \neq 0, m_c = 0, m_f = 0 \quad (3.68)$$

讲上述条件带入一般形式地方程组(3.63)-(3.67)，首先我们注意到方程(3.63)与(3.64)都化成同一个表达式：

$$n_c = \frac{2}{N} \sum_k \langle C_{k\uparrow} C_{k\uparrow}^+ \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \rho_c d\omega$$

在考虑到态密度的具体形式以及化学势为电子填充的上限，再考虑到能带底部为电子填充的下限，我们就得到近藤屏蔽相中的第一个方程：

$$n_c = \frac{\mu - \omega_1}{D} \quad (3.69)$$

接下来让我们来考虑方程(3.65)与(3.66)，由于 $m_f$ 被置零，因此连个方程都化简为：

$$1 = \frac{2}{N} \sum_k \langle f_{k\uparrow} f_{k\uparrow}^+ \rangle = 2 \int_{-\infty}^{+\infty} \left( \frac{J_k V}{\omega - \lambda} \right)^2 \rho_c d\omega$$

将上述积分求出，同样计入态密度的具体形式以及化学势为电子填充的上限，能带底部为电子填充的下限，就能够得到近藤屏蔽相的第二个方程：

$$1 = \left( \frac{J_k V}{2} \right)^2 * \left( \frac{1}{\omega_1 - \lambda} - \frac{1}{\mu - \lambda} \right) * \frac{1}{D} \quad (3.70)$$

剩余的方程(3.67)在处理是也类似考虑态密度的具体形式和化学势及能带底部对电子填充的影响，将积分直接计算出来，我们可以得到关于近藤屏蔽相的第三个方程：

$$1 = \frac{J_k V}{2D} (\ln(\omega_1 - \lambda) - \ln(\mu - \lambda)) = \frac{J_k V}{2D} \ln \frac{(\omega_1 - \lambda)}{(\mu - \lambda)} \quad (3.71)$$

至此为止，我们就得到了描述近藤屏蔽相的方程(3.69)(3.70)(3.71)。这个方程可以按照步骤解析求解如下：

在(3.71)两边取 e 指数，得到

$$u \equiv e^{\frac{2D}{J_k}} = \frac{\omega_1 - \lambda}{\mu - \lambda} \quad (3.72)$$

我们的思路是利用可以由外生变量确定的 u 表示各个待求变量。首先我们需要消去  $\omega_1 - \lambda$  项，因此我们有：

$$n_c D = (\mu - \lambda) - (\omega_1 - \lambda) \quad (3.73)$$

$$\omega_1 - \lambda = (\mu - \lambda) - n_c D$$

$$u = 1 - \frac{n_c D}{\mu - \lambda}$$

其次利用第二个方程(3.70)，我们可以看到：

$$1 = \left(\frac{J_k V}{2}\right)^2 \frac{1}{\mu - \lambda} \left(\frac{1}{u} - 1\right) * \frac{1}{D} \quad (3.74)$$

将(3.73)第三式带入上式，有

$$\frac{(J_k V)^2}{4D} \frac{1 - u}{n_c D} \frac{1 - u}{u} = 1$$

因此求出近藤屏蔽参数 V 的表达式为：

$$V^2 = \frac{4D^2 n_c u}{J_k^2 (1 - u)^2} \quad (3.75)$$

接下来的的想法是将  $\omega_1 - \lambda$  用已知量表示出来将上式带入(3.74)，我们有

$$\frac{n_c D u}{(1 - u)^2} \frac{1}{\mu - \lambda} \left(\frac{1}{u} - 1\right) = 1 \quad (3.76)$$

整理有：

$$\mu - \lambda = \frac{n_c D}{1 - u} \quad (3.77)$$

将上式带入(3.73)第二式，我们就表示出了  $\omega_1 - \lambda$ ：

$$\omega_1 - \lambda = n_c D \left(\frac{1}{1 - u} - 1\right) = n_c D \frac{u}{1 - u} \quad (3.78)$$

利用  $\omega_1$  为费米子能带下边界的表达式：

$$\frac{1}{2}(-D + \lambda - \sqrt{(-D - \lambda)^2 + J_k^2 V^2})$$

我们可以得到  $\lambda$  的表达式：

$$\lambda = \frac{Du}{1-u}(1-n_c)$$

我们可以这样得到化学势的表达式，首先由方程：

$$n_c D + \lambda = \mu - (\omega_1 - \lambda)$$

将 $\omega_1 - \lambda$ 和 $\lambda$ ：的值带入有：

$$n_c D + \frac{Du}{1-u}(1-n_c) = \mu - n_c D \frac{u}{1-u}$$

整理，我们得到化学势的表达式为：

$$\mu = n_c D + \frac{Du}{1-u} \tag{3.79}$$

到此为止，我们就已经得到了近藤屏蔽相之下所有自洽参数的解析解。下面进行讨论：

首先讨论近藤屏蔽序参数  $V$ ， $D$  作为能带半宽可以事先给定，现在假定为 1； $n_c$  作为传导电子密度是外生的。考虑到近藤屏蔽相的物理，我们给一个较大的值  $n_c = 0.7$ ，我们可以画出近藤屏蔽相随着耦合强度  $V$  的变化图：

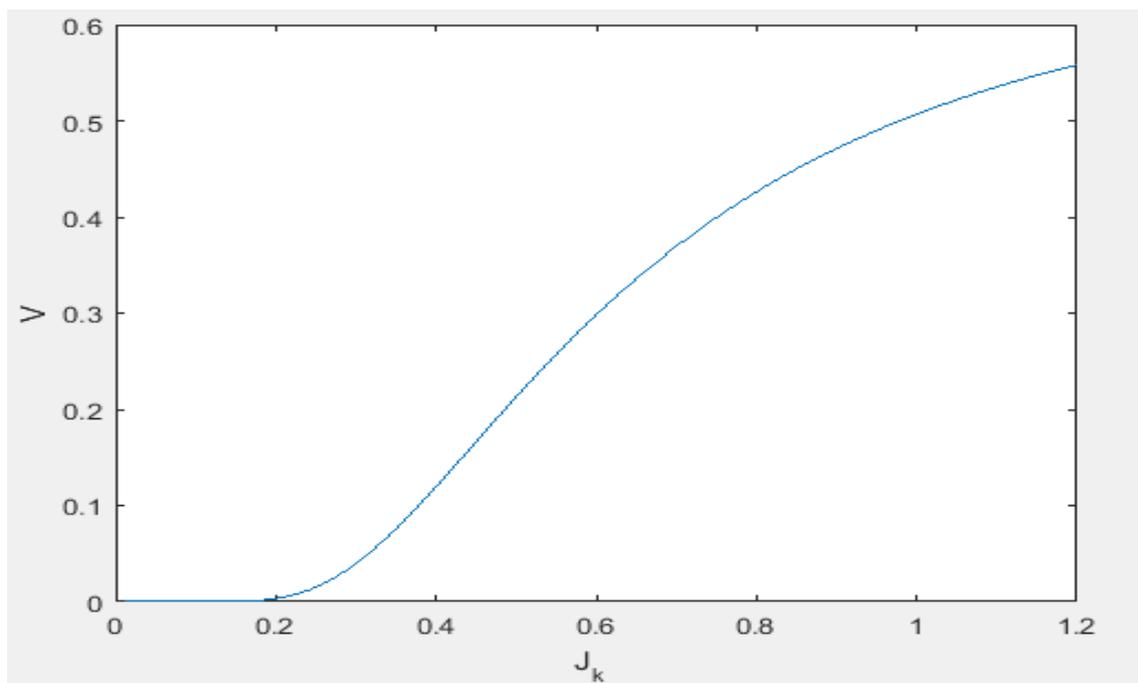


图 3-2 近藤屏蔽  $V$  随耦合电强度变化

从上图中可以看出，随着耦合强度交换积分 $J_k$ 的不断扩大，近藤屏蔽参数  $V$  从 $J_k = 0.2$ 起开始显著不为零，然后急剧增大，随后 $J_k = 0.8$ 附近增幅趋于平缓直至 $J_k$ 很大，近藤屏蔽参数  $V$  仍然没有突破 0.6.

接下来是化学式随着耦合强度 $J_k$ 变化图。

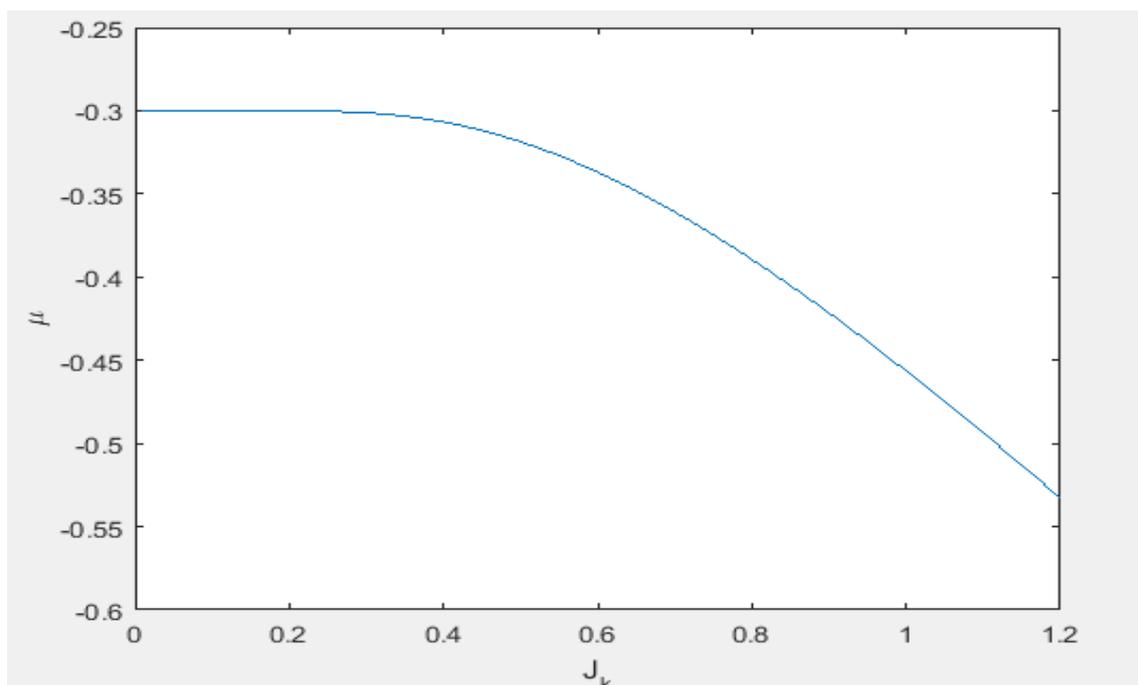


图 3-3 化学势随着耦合强度变化

从上图中可以发现，在耦合强度较小（0.25 以下）时，化学势会出现一个平台，一直保持在 $-0.3$ ，对比近藤屏蔽项  $V$ ，可以发现在越过 0.2-0.26 这一个阶段后，这两个相都开始急剧变化，屏蔽越来越厉害，化学势也越来越减小，最后就呈直线下降。

### 3.4.2 铁磁有序相（自旋极化型）

从问题的物理背景考虑，当近藤屏蔽作用非常弱，在极限状态下为零时，传导电子和局域电子完全不发生交换作用。此时二次量子化后的准粒子就有了实际的对应。就称为了标准的传导电子和自旋子（由于没有空间自由度，仅仅存在自旋自由度，因此得名）。此时自然有标准的铁磁长程有序结构，而根据铁磁序的定义，在基态之下，所有的自旋都会取得最大值，适当选取坐标轴后可以定义为 $\frac{1}{2}$ ，因此我们能够得到如下结果：

$$m_f = \langle S_z \rangle = \frac{1}{2} \quad (3.80)$$

这个结果也可以在下文之中从自洽方程解出。

从上述考虑，我们能够得到的铁磁有序相之下序参量的条件是：

$$V = 0 \quad (3.81)$$

进一步的考虑就需要计入能带的填充，首先是电子的化学势较小，能带部分填充。而自旋极化的存在可以使得自旋的简并被解出，因此此时自旋向下的传导电子能带能

量更低；反之对于局域电子则是优先填充自旋向上的能带。因此由于自旋简并分离，根据自旋向上的能带是否被填充，我们就得到了铁磁相之下的两种情形，自旋极化型铁磁相与非自旋极化型铁磁相。

本小节所考虑的就是自旋极化型的铁磁相，为此，我们先将能带绘制如下：

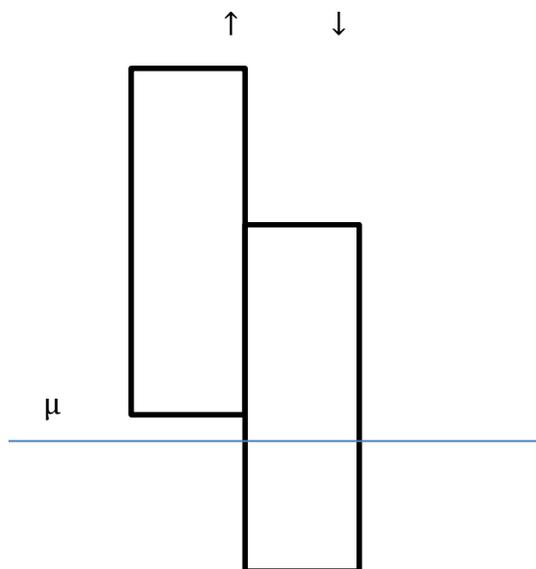


图 3-4 自旋极化型铁磁相传导电子能带填充示意图

在考虑了传导电子能带填充之后我们接下来考虑局域电子的自旋填充，与传导电子情形相反，局域电子有限填充自旋向下的能带。

我们将能带绘制如下：

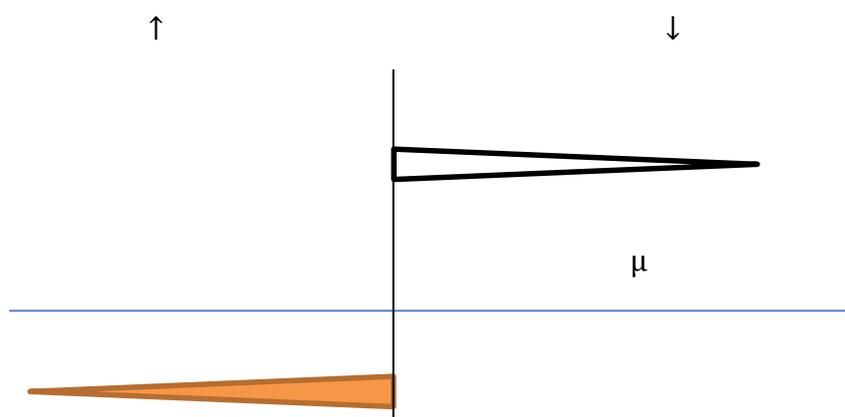


图 3-5 自旋极化型铁磁相局域电子能带填充示意图

从能带填充中我们可以确定一般形式方程，之中确定积分的上下界，其中下界为费米子能带下边界 $\omega_1$ ，上界则根据能带填充图可以确定为化学势 $\mu$ ，因此，我们能够

直接得到自旋极化型铁磁有序相中的方程组：

注意到近藤屏蔽参数 $V = 0$ ，方程(3.65)右边为零（局域电子没有填充下能带）(3.67)左右两边都恒为零我们能够得到。

$$n_c + 2m_c = 0 \quad (3.82)$$

$$n_c - 2m_c = \frac{1}{D}(\mu + D + \frac{J_k m_f}{2}) \quad (3.83)$$

$$1 - 2m_f = 0 \quad (3.84)$$

上述方程中 $m_f$ ， $m_c$ 都可以直接解出如下：

$$m_c = -\frac{n_c}{2} \quad m_f = \frac{1}{2} \quad (3.85)$$

得到上述结果之后我们能够很容易地求出化学势，直接带入第二个方程即可：

$$\mu = 2n_c D - D + \frac{J_k}{4} \quad (3.86)$$

在这一个状态中，所需平均场序参数均与外生变量 $n_c$ ， $J_k$ 呈线性关系，如下图所示：

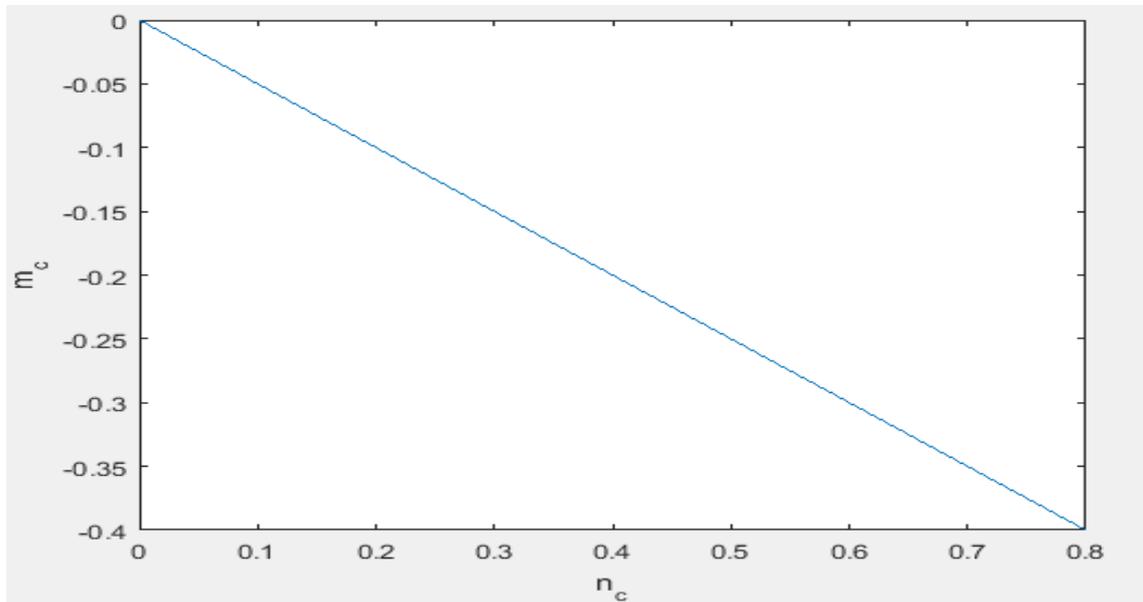


图 3-6 自旋极化铁磁相传导电子磁矩与传导电子密度

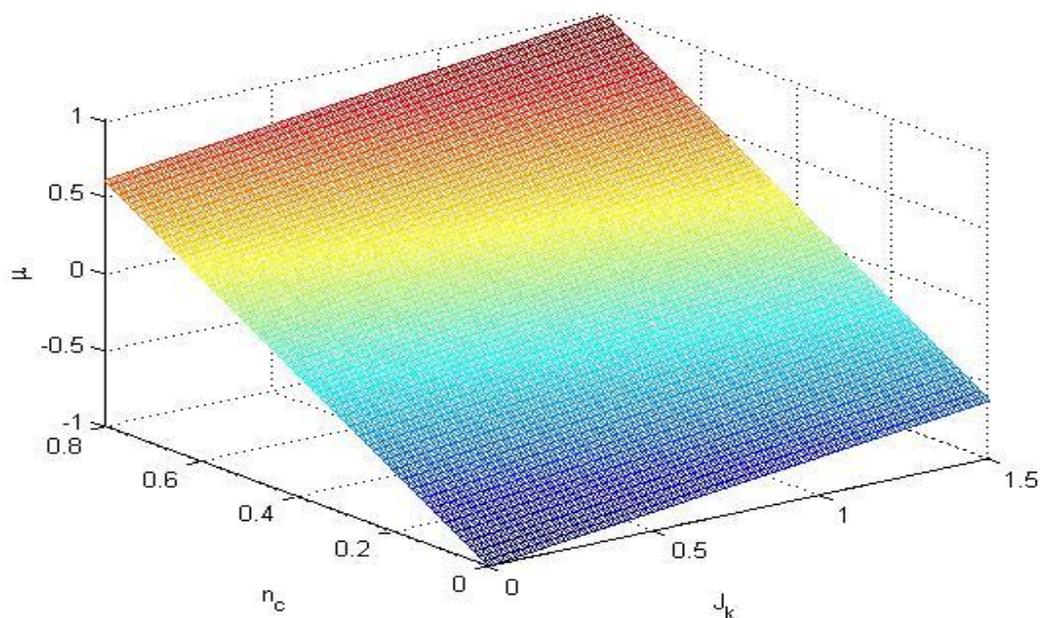


图 3-7 自旋极化铁磁相中的化学势

从上图中可以看出，化学势在三维空间中表现为一个平面。

### 3.4.3 铁磁有序相（非自旋极化型）

从上一小节的分析可以明白，其实自旋极化与非自旋极化型图像仅仅存在于能带填充是否达到了自旋向上的能带部分，在非自旋极化相中，能带的填充可以这样分析：

对于局域电子，能带的填充没有任何变化，仍然仅仅填充了自旋向上的部分，但是在传导电子的情形之中，这一情况就大大不同，化学势已经大于自旋向上的能带底部，如下图所示：

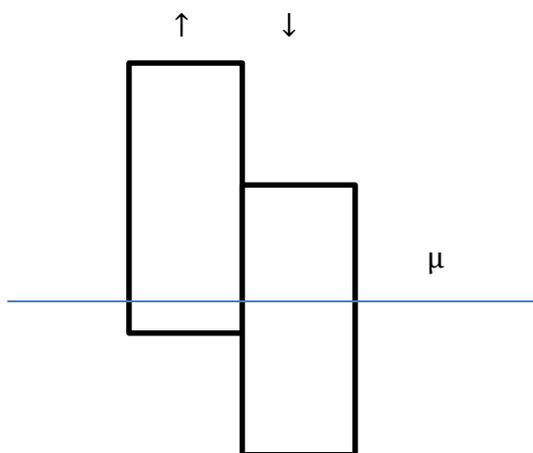


图 3-8 非自旋极化相中的能带填充

因此，描述非极化铁磁相的方程会有重大变化，积分上限将出现自旋向上的部分，

我们将其写出来：

$$n_c + 2m_c = \frac{1}{D}(\mu + D - \frac{J_k m_f}{2}) \quad (3.87)$$

$$n_c - 2m_c = \frac{1}{D}(\mu + D + \frac{J_k m_f}{2}) \quad (3.88)$$

$$1 - 2m_f = 0 \quad (3.89)$$

直接求解上述方程组，首先得到

$$m_f = \frac{1}{2} \quad (3.90)$$

这与铁磁相的基态相吻合。在铁磁基态中，各个格点的自旋要取到最大值，最小值可以改变坐标轴方向得到最大值。

$$\mu = (n_c - 1)D \quad (3.91)$$

化学势随着传导电子态密度线性增加，与耦合强度 $J_k$ 没有了关系。

$$m_c = -\frac{J_k}{8D} \quad (3.92)$$

注意到如果去 $j_k/D$ 这一个数作为变量，传导电子极化就是一个常数 $-\frac{1}{8}$ 。下面将化学势的图像画出：

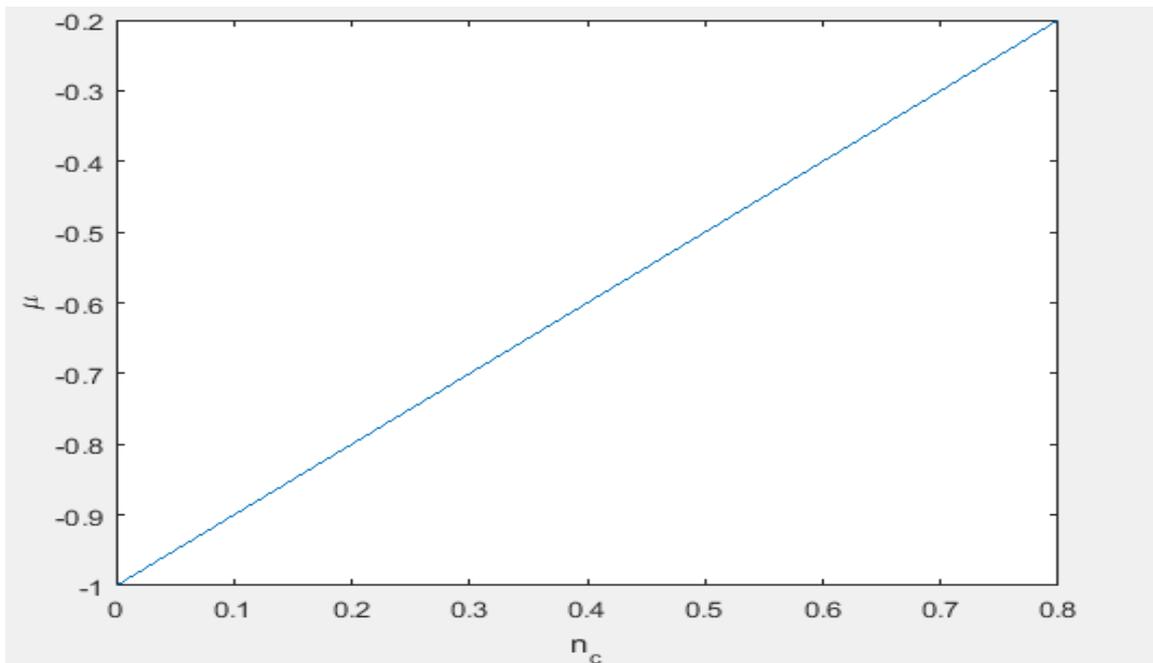


图 3-9 自旋极化相中传导电子化学势

综合两个状态下的化学势图可以看出，处于铁磁态之下的一个共同重要特点是化

学势随着传导电子密度线性增加。

不过这两个相之间确实满足一定条件，从能带图中就可以看出，系统处于自旋极化铁磁态的条件是

$$\omega_{1\downarrow} < \mu < \omega_{1\uparrow} \quad (3.93)$$

将能带下界表达式代入，可以直接得到满足的条件为

$$\mu < \frac{J_k}{4D} \quad (3.94)$$

与之相应，在铁磁相的出现范围内，非极化铁磁相出现的条件是：

$$\mu > \frac{J_k}{4D} \quad (3.95)$$

### 3.4.4 铁磁与近藤屏蔽共存相（自旋极化型）

接下来我们讨论共存相，同样根据准电子的自旋简并分离，出现了自旋向上和自旋向下的能带，自旋向下的能带能量较低，准电子优先填充自旋向上的能带。因此，我们与铁磁相类似讨论，如果化学势没有超过自旋向上的能带，这称为非自旋极化的铁磁有序近藤屏蔽共存相，与之相反若是化学势超过自旋向下的能带，就称之为自旋极化的铁磁有序近藤屏蔽共存相。

本节研究自旋极化的铁磁有序近藤屏蔽共存相。

为研究自旋极化型铁磁有序近藤屏蔽共存相，我们必须要把能带结构画出来：

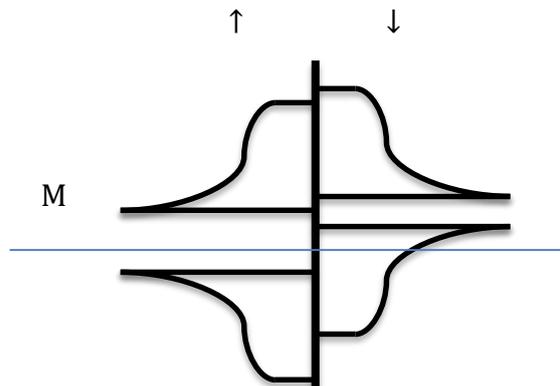


图 3-10 自旋极化型铁磁近藤屏蔽共存相能带填充

在自旋极化型共存相中，自旋向上的准粒子能带被完全填满，对应到实际的传导电子与局域电子，也就是说  $n_{c\uparrow} + n_{f\uparrow} = 1$ 。系统总自旋（局域电子与传导电子自旋之和）的平均值以及自旋磁矩的定义，我们就可以直接得到：

$$m_c + m_f = \frac{1 - n_c}{2} \quad (3.96)$$

这时，我们也可以直接将一般形式方程组中的积分算出，得到自洽方程组，注意的是在自旋向上的能带上，积分上界是能带上界 $\omega_{2\uparrow}$ ，积分下界就是能带下边界 $\omega_{1\uparrow}$ 而在自旋向下的准粒子相中，积分上界是化学势 $\mu$ ，积分下界就是能带下边界 $\omega_{1\downarrow}$ 。确定了积分上下边界，我们就能够直接将积分计算出来。

因此，直接计算基本就得到自洽方程组，如下所示：

$$n_c + 2m_c = \frac{1}{D}(\omega_{2\uparrow} - \omega_{1\uparrow}) \quad (3.97)$$

$$n_c - 2m_c = \frac{1}{D}(\mu - \omega_{1\downarrow}) \quad (3.98)$$

$$1 + 2m_f = \frac{J_k^2 V^2}{4D} \left( \frac{1}{\omega_{2\uparrow} - \lambda_{\uparrow}} - \frac{1}{\mu - \lambda_{\uparrow}} \right) \quad (3.99)$$

$$1 - 2m_f = \frac{J_k^2 V^2}{4D} \left( \frac{1}{\omega_{1\downarrow} - \lambda_{\downarrow}} - \frac{1}{\mu - \lambda_{\downarrow}} \right) \quad (3.100)$$

$$1 = \frac{J_k}{4D} \ln \left( \frac{(\omega_{1\uparrow} - \lambda_{\uparrow})(\omega_{1\downarrow} - \lambda_{\downarrow})}{(\omega_{2\uparrow} - \lambda_{\uparrow})(\mu - \lambda_{\downarrow})} \right) \quad (3.101)$$

这个方程组的解析解很难求出，为此，我们利用牛顿法数值求解上述方程得到：

首先针对近藤屏蔽相  $\mathbf{V}$ ，我们选取传导电子密度 $n_c = 0.65$ ，绘制出  $\mathbf{V}$  与交换积分  $\mathbf{V}$  的解如下：

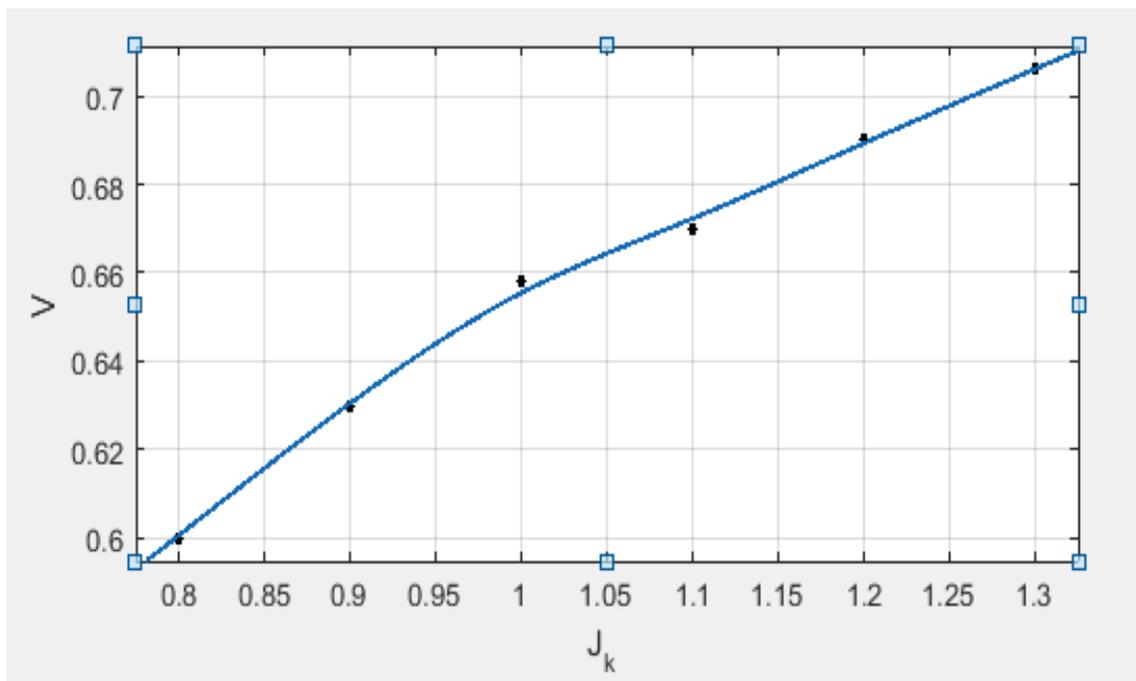


图 3-11 铁磁与近藤屏蔽共存相（自旋极化型）交换积分 $J_k - V$ 关系图

从上图可以看出，交换耦合强度越大，那么近藤屏蔽参数也就越大。

接下来是关于磁矩 $m_c$ 的解：

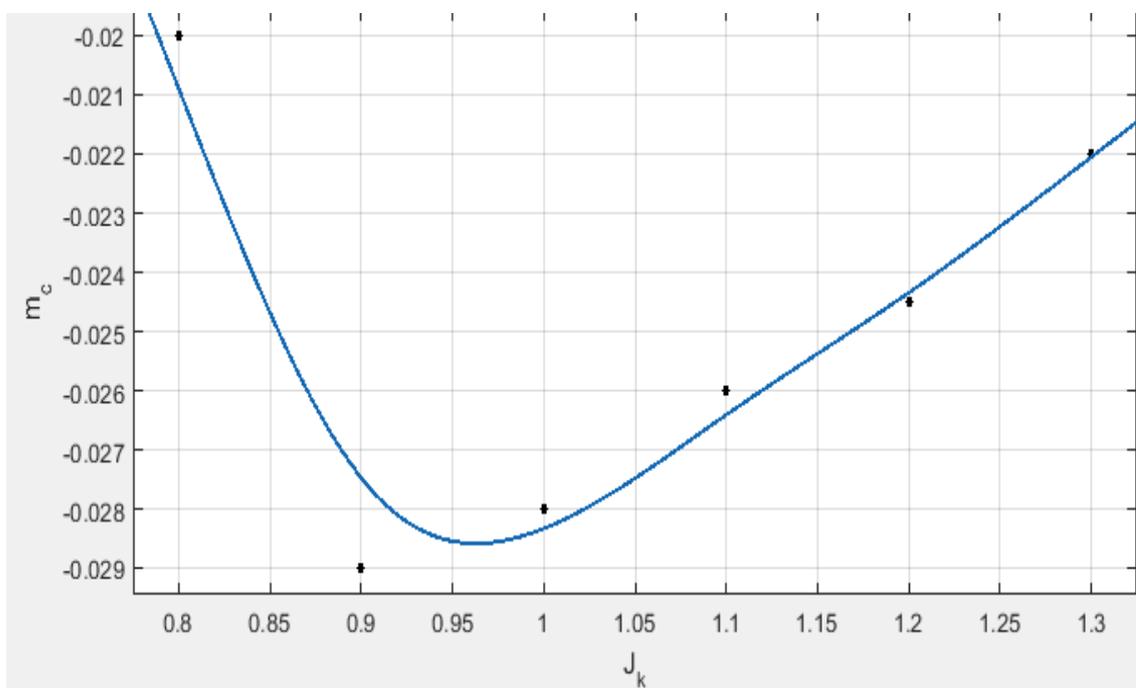


图 3-12 铁磁与近藤屏蔽共存相（自旋极化型）交换积分 $J_k - m_c$ 关系图

从上图可以看出随着交换积分 $J_k$ 的不断增大，磁矩 $m_c$ 有一个极小值拟合过后可以得知这个极小值在 $J_k = 0.95$ 附近。

而局域电子磁矩 $m_f$ 的解如下图所示：

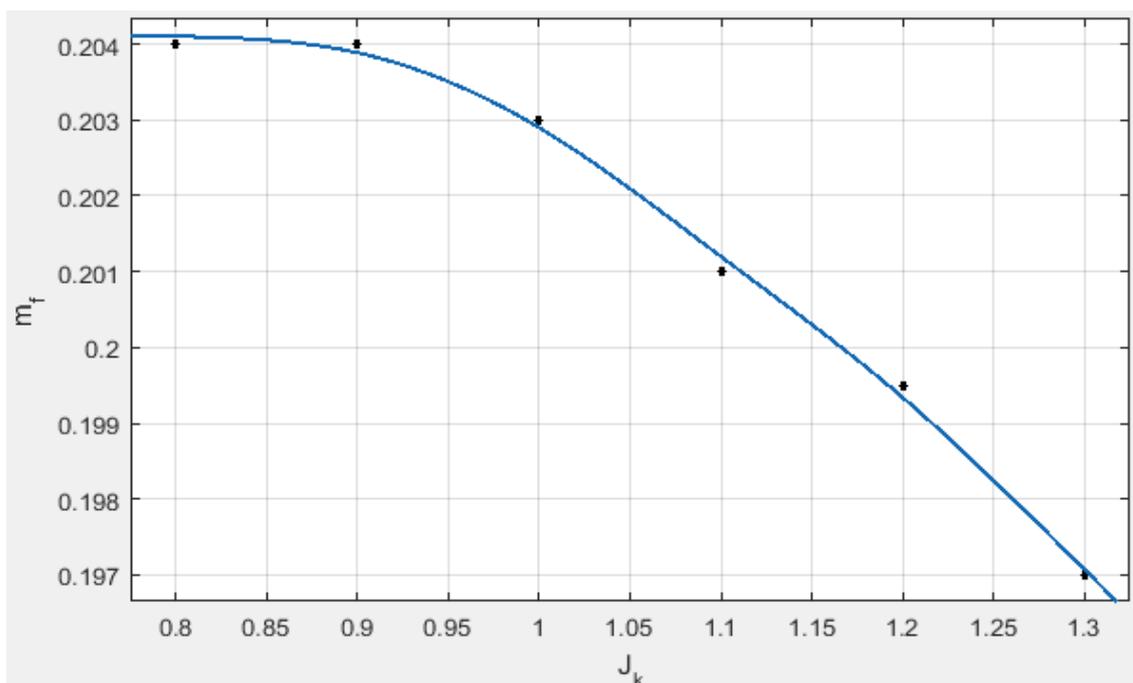


图 3-13 铁磁与近藤屏蔽共存相（自旋极化型）交换积分 $J_k - m_f$ 关系图

从上图可以知道当耦合强度较小时，自旋磁矩还没有太大的下降趋势，但是随着耦合强度的急剧增大，那么局域磁矩也就快速减小，这也表现了传导电子和局域磁矩之间的耦合，关联强度对于局域磁矩的有效值有很大影响，符合近藤物理的图像。

### 3.4.5 铁磁与近藤屏蔽共存相（非自旋极化型）

非自旋极化型铁磁与近藤屏蔽共存相的情况和自旋极化型的情形类似，我们可以利用化学势的大小进行鉴别，为此，我们先将能带画出

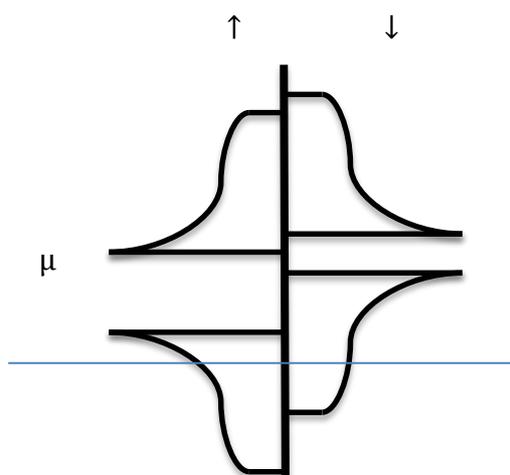


图 3-14 铁磁与近藤屏蔽共存相（非自旋极化型）能带图

从上图来看，系统自旋向上的能带与自旋向下的能带均没有填满，类比已经讨论过的自旋极化型的情况，我们可以得到：

在一般形式方程组(3.63)-(3.67)的积分中，针对自旋向上的部分与自旋向下的部分相同，积分上界必须是化学势 $\mu$ ，而不是自旋极化型中的 $\omega_{2\uparrow}$ 。为此我们能够很容易地写出自洽方程组：

$$n_c + 2m_c = \frac{1}{D}(\mu - \omega_{1\uparrow}) \quad (3.102)$$

$$n_c - 2m_c = \frac{1}{D}(\mu - \omega_{1\downarrow}) \quad (3.103)$$

$$1 + 2m_f = \frac{J_k^2 V^2}{4D} \left( \frac{1}{\omega_{1\uparrow} - \lambda_{\uparrow}} - \frac{1}{\mu - \lambda_{\uparrow}} \right) \quad (3.104)$$

$$1 - 2m_f = \frac{J_k^2 V^2}{4D} \left( \frac{1}{\omega_{1\downarrow} - \lambda_{\downarrow}} - \frac{1}{\mu - \lambda_{\downarrow}} \right) \quad (3.105)$$

$$1 = \frac{J_k}{4D} \ln \left( \frac{(\omega_{1\uparrow} - \lambda_{\uparrow})(\omega_{1\downarrow} - \lambda_{\downarrow})}{(\mu - \lambda_{\uparrow})(\mu - \lambda_{\downarrow})} \right) \quad (3.106)$$

这个方程组的解析解同样很难求出，为此，采用和上一节中讨论的式子一样的解法，采用数值算法进行求解，我们选取传导电子密度 $n_c = 0.65$ 结果如下图所示：

在这个相中，我们给出了一定范围内局域磁矩 $m_f$ 随着交换积分 $J_k/D$ 变化的数值解。

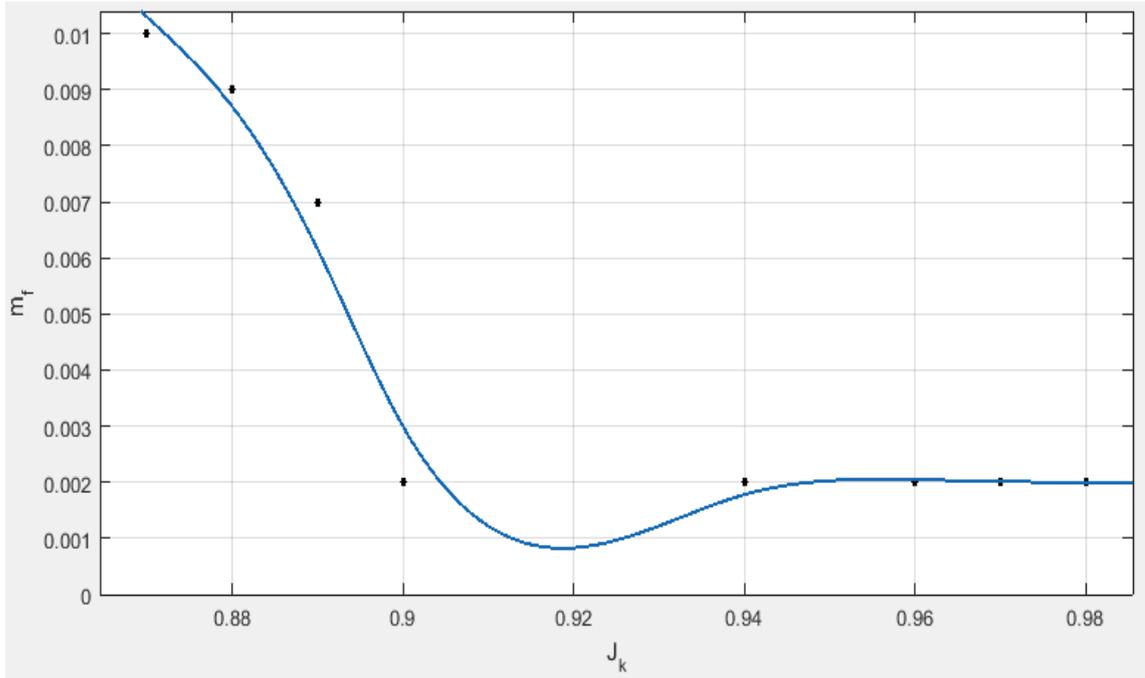


图 3-15 铁磁与近藤屏蔽共存相（非自旋极化型）局域磁矩与交换积分关系图

### 3.5 基态相图

根据能量最小值以及平均场序参数在边界的变化就能够在 $n_c, J_k$ 的二维区域中确定各个相个相区，得到相图。首先某些相变界（例如两类铁磁相之间的相变界）就能够直接解析求出，为一条直线。其他的则需要参考基态能量值，利用能量最小原理求出能量值。

为此，我们将相图绘制出来：

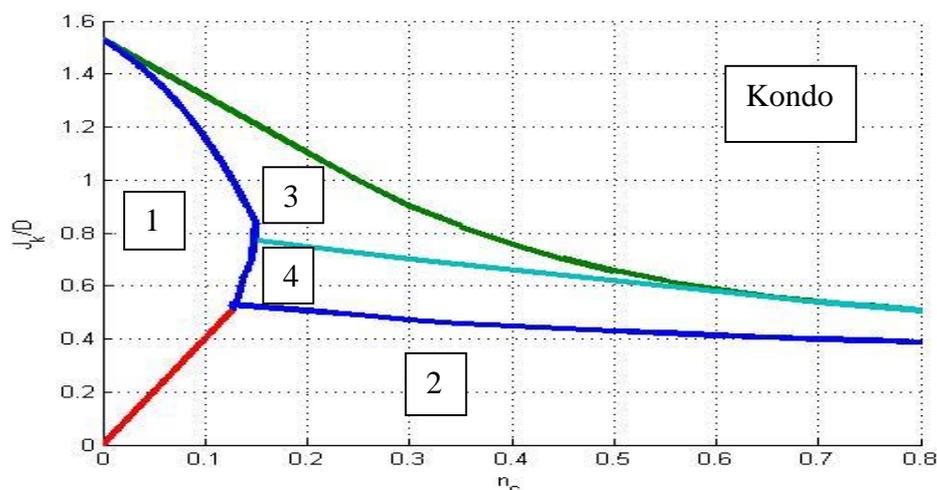


图 3-16 基态相图

上图中 1 表示自旋极化铁磁相，2 表示非自旋极化铁磁相，34 表示共存相区，3 表示非自旋极化共存相，4 表示自旋极化共存相，Kondo 表示近藤屏蔽相区。

我们可以借助物理规律定性分析和解释相图，首先如果把相图分为三个相，铁磁相，共存相，近藤屏蔽相，也就是说我们合并自旋极化相与非极化相的相区。我们注意到两条相界面都是左上方-右下方倾斜，以及 $J_k$ 的增大在某种程度上与 $n_c$ 的增大，亦即在相变上两者可以相互替代。

这并不是偶然的，而是物理规律造成的，从近藤屏蔽的图像上看，传导电子针对周围的局域磁矩呈屏蔽作用，而传导电子同时也和局域磁矩进行反铁磁耦合， $J_k$ 的增大同样是造成局域磁矩的屏蔽。而造成磁有序的 RKKY 相互作用则是二阶作用，因此相边界呈左上方-右下方倾斜趋势。因此如果给定一个 $J_k$ ，随着传导电子密度的增加系统会逐渐从铁磁相变化到共存相，进而变化到近藤屏蔽顺磁相。

至于自旋极化相与非极化相的相区分布同样和物理背景之中传导电子密度相关，传导电子密度较低时有限填充低能带，考虑到共存相和铁磁相中自旋极化的定义相反，我们就能够得到首先是自旋极化铁磁相的系统在增大一定的传导电子密度之后就会发生相变进入到非极化铁磁相。对于共存相则是相反，随着传导电子密度 $n_c$ 的增大，原来处于非自旋极化相的系统就发生相变进入自旋极化相。当然， $n_c$ 增大到一定数量之后都会因为屏蔽作用过于强大而进入了近藤屏蔽顺磁相。

## 4 二维情形的初步研究

本章中，我们类比上一章的一维情形，针对二维晶格进行简单的讨论，并且推导出各个相的自洽方程，尽可能揭示其物理意义。

### 4.1 一般形式之下方程的推导

采用二维正方晶格的色散关系如下表示：

$$\epsilon_{ck} = -2t(\cos(k_x) + \cos(k_y)) - \mu$$

此时已经取次近邻相之交换积分 $t_1$ 为零，为此我们可以根据准粒子能量和自由能进行计算。

我们已经知道：

$$E_{\vec{k}\sigma} = \frac{1}{2}(\epsilon_{\vec{k}} + \lambda + \frac{J_k(m_c + m_f)\sigma}{2}) - \sqrt{\left(\epsilon_{\vec{k}} - \lambda + \frac{J_k(m_f - m_c)\sigma}{2}\right)^2 + (J_kV)^2}$$

$$F = -\frac{2}{\beta} \sum_{k\sigma} \ln(1 + e^{-\beta E_{k\sigma}}) + N\left(\frac{J_kV^2}{2} - J_k m_c m_f - \lambda - \mu_c n_c\right)$$

注意到 $\beta$ 非常大，在 $E_{k\sigma}$ 为负值时可以直接用对数项中后面一项来近似代替，而 $E_{k\sigma}$ 小于零的时候，对数中第二项很小，故可以直接令其为零，而一的对数为零，故可以直接计算得到下列形式：

$$E_g = 2 \sum_{k\sigma} E_{k\sigma} \theta(-E_{k\sigma}) + N\left(\frac{J_kV^2}{2} - J_k m_c m_f - \lambda - \mu_c n_c\right) \quad (4.1)$$

为了寻找具体的方程形式以便简化方程，我们注意到作为基态能量， $E_g$ 必须作为参数的极小值点，也就是说当表达式中没有极小值时这个情形不予考虑。

考虑 $\theta$ 函数的特殊性，这个函数在自变量大于零时函数值为一，我们可以依据这个

函数的性质简化方程，故我们首先考虑能量均大于零的值，这时基态能量表达式(4.1)中第一项很显然为零，故我们得到能量大于零时的基态能量表达式：

$$E_g = N \left( \frac{J_k V^2}{2} - J_k m_c m_f - \lambda - \mu_c n_c \right)$$

针对上面一个能量表达式我们知道其一阶导数必须为零，亦即

$$\nabla E_g = 0$$

但是我们注意到这个能量表达式没有驻点，也就是说这个能量表达式并不是我们需要找寻的能量表达式，进一步可以得出，在基态下的能量必须至少有一项小于零。

## 4.2 能量小于零的方程的一般形式

由于 $E_{k\sigma}$ 会因为自旋变量的取值而有所不同必须对两个值大于零的情况进行分类讨论，故而接下来假定 $k$ 不变而仅仅针对自旋变量进行讨论。

首先是两者均小于零的情况，在这种情况下基态能量写成

$$E_g = 2 \sum_{k\sigma} E_{k\sigma} + N \left( \frac{J_k V^2}{2} - J_k m_c m_f - \lambda - \mu n_c \right) \quad (4-4)$$

根据 (4.3)一阶导数必须为零，这样可以得到基态能量关于各个序参量的自治方程，其中，序参量为 $m_c$ ,  $m_f$ ,  $V$ ,  $\lambda$ ,  $\mu$ 。

$$\frac{\partial E_g}{\partial m_c} = 0 \quad \frac{\partial E_g}{\partial m_f} = 0 \quad \frac{\partial E_g}{\partial \lambda} = 0 \quad \frac{\partial E_g}{\partial V} = 0 \quad \frac{\partial E_g}{\partial \mu} = 0$$

注意到如下表达式，直接对能量进行求导可以得到。

$$\frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial m_f} = \frac{1}{2} \left( \frac{J_k}{2} \sigma - \frac{(\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2} (m_f - m_c) \sigma) \frac{J_k}{2} \sigma}{2 \sqrt{(\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2} (m_f - m_c) \sigma)^2 + (J_k V)^2}} \right)$$

$$\frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial m_c} = \frac{1}{2} \left( \frac{J_k}{2} \sigma + \frac{(\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2} (m_f - m_c) \sigma) \frac{J_k}{2} \sigma}{2 \sqrt{(\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2} (m_f - m_c) \sigma)^2 + (J_k V)^2}} \right)$$

$$\frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial \lambda} = \frac{1}{2} \left( 1 + \frac{\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2}(m_f - m_c)\sigma}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2}(m_f - m_c)\sigma)^2 + (J_k V)^2}} \right)$$

$$\frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial V} = - \frac{J_k^2 V}{2\sqrt{(\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2}(m_f - m_c)\sigma)^2 + (J_k V)^2}}$$

$$\frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial \mu} = \frac{1}{2} \left( -1 + \frac{\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2}(m_f - m_c)\sigma}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2}(m_f - m_c)\sigma)^2 + (J_k V)^2}} \right)$$

将上述五个偏导数带入就能够得到五个自治方程，分别为：

$$\Sigma_{k\sigma} 2 \frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial m_c} - N J_k m_f = 0 \quad (4.5)$$

$$\Sigma_{k\sigma} 2 \frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial m_f} - N J_k m_c = 0 \quad (4.6)$$

$$2 \Sigma_{k\sigma} \frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial V} - N J_k V = 0 \quad (4.7)$$

$$2 \Sigma_{k\sigma} \frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial \lambda} - N = 0 \quad (4.8)$$

$$2 \Sigma_{k\sigma} \frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial \mu} - N n_c = N n_c \quad (4.9)$$

上述五个方程即为一般形式下的方程，但是没有注意到 $E_{k\sigma}$ 会因为自旋变量取值不同而导致基态能量的形式不同，那样会导致对自旋变量的求和消失，亦即仅仅对动量空间的变量求和，自旋变量取正值或者负值。

其次可以讨论针对不同的自旋变量 $\theta$ 函数的取值会不同值的情形，这时在自旋变量取值不同所对应的 $\theta$ 函数值分别为零和一。

### 4.3 针对不同模型对方程进行简化

#### 4.3.1 针对近藤屏蔽相简化方程

根据一维模型中的计算以及近藤屏蔽相的定义可以知道：近藤屏蔽相为一顺磁相，

传导电子将局域磁矩屏蔽，局域磁矩并不显示出磁性，换句话说就是具有下列物理性质：

$$V \neq 0 \quad m_c = m_f = 0 \quad (4.10)$$

将上述条件带入方程中可以对方程加以简化。首先，近藤屏蔽态下的基态能量改写成：

$$E_g = 2 \sum_{k\sigma} E_{k\sigma} + N \left( \frac{J_k V^2}{2} - \lambda - \mu n_c \right) \quad (4.11)$$

其中 $E_{k\sigma}$ 可以简化为

$$E_{k\sigma} = \epsilon_k + \lambda - \sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2} \quad (4.12)$$

按照同样的思路，我们可以得到关于自洽参量 $\mu$ ， $\lambda$ 的方程组：

$$\sum_{k\sigma} \left( 1 + \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2}} \right) - N = 0 \quad (4.13)$$

$$\sum_{k\sigma} \left( -1 + \frac{\epsilon_k - \lambda}{\sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2}} \right) = 2Nn_c \quad (4.14)$$

由于近藤屏蔽相中自旋简并，在上述表达式中并不显式相关，故而可以将自旋项直接相加，亦即对上述相直接对自旋变量求和，求和的结果就是上述方程求和号以内的相直接翻倍。 $\epsilon_k$ 仍然是仅计入最邻近项的二维情形：

$$\epsilon_k = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - \mu$$

### 4.3.2 铁磁相之下的自洽方程

若是传导电子的密度很小，局域磁矩可以视为几乎完全不被屏蔽，应该会有一个长程铁磁有序状态的存在，此时很明显的近藤屏蔽参数 $V$ 就是零，关于局域磁矩的平均场参数应该取到最大值 $1/2$ ，至于传导电子磁矩相关的平均场参数暂时不能确定，需要综合考虑自洽方程来进行确定。综合来看，铁磁相之下我们得到可如下条件：

$$V = 0 \quad m_f = \frac{1}{2} \quad (4.15)$$

对此，基态能量的形式可以简化为：

$$E_g = 2\sum_{k\sigma} E_{k\sigma} \theta(-E_{k\sigma}) + N \left( 0 - \frac{J_k m_c}{2} - \lambda - \mu n_c \right) \quad (4.16)$$

能量的表达式亦可加以简化：

$$2E_{k\sigma} = \epsilon_k + \lambda + \frac{J_k}{2} \left( \frac{1}{2} + m_c \right) \sigma - \sqrt{\left( \epsilon_k - \lambda + \frac{J_k}{2} \left( \frac{1}{2} - m_c \right) \sigma \right)^2} \quad (4.17)$$

针对 $E_{k\sigma}$ 的讨论需要打开根号，若是假定能够直接打开，不讨论正负号，那么得到的能量表达式为：

$$2E_{k\sigma} = 2\lambda + J_k m_c \sigma \quad (4.18)$$

在这个问题中发现 $m_c$ 的值会因为对自旋变量的取值而消失，故而可以上述假定并不正确，也就是说 $E_{k\sigma}$ 不能都是负值，必须随着自旋变量的变化取到一个正值和一个负值。

若是假定自旋向上的能量更大，对于自旋变量为一的那一项，根据 $\theta$ 函数的性质，就为零。那么基态能量可以直接写成下列形式：

$$E_g = 2\sum_k E_{k-} + N \left( 0 - \frac{J_k m_c}{2} - \lambda - \mu n_c \right) \quad (4.19)$$

同理，若是假定自旋向下的能量更大，对于自旋变量为负的那一项就是零，可以类比上述公式直接写出结果为：

$$E_g = 2\sum_k E_{k+} + N \left( 0 - \frac{J_k m_c}{2} - \lambda - \mu n_c \right) \quad (4.20)$$

但是在一般情况下，有时 $\mathbf{k}$ ， $\sigma$ 都能直接决定 $\theta$ 函数的取值， $\theta$ 函数的取值并不能够直接由自旋变量的取值决定。这个时候不能应用上述方程，必须利用下一小节所采用的一般形式方程。

#### 4.4 再探一般方程

再次考虑一般情形之下的方程，现在不仅仅计入自旋变量，需要注意到 $\vec{\mathbf{k}}$ 也是影响能量的一个因素，针对第一布里渊区求和之时，这个量会影响到 $\theta$ 函数的取值，因此在更为复杂的情形之下必须将倒格矢与自旋这两个变量一同考虑，不能单独从自旋变量拿掉 $\theta$ 函数，这样就能够得到更为一般的方程形式。

其中，基态能量自然仍然遵从(4.1)，但是需要注意的是 $\theta$ 函数在零点并不可导。对于自洽方程的推导会造成一些影响，不过，我们可以采取一个比较合理的形式来代替 $\theta$

函数。

注意到这样一个事实，在零温下，电子气的分布遵循泡利不相容原理，而且从能量最小一直排布至费米能级处；但是注意到电子作为费米子，其分布遵循费米分布函数：

$$f = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon - \mu}{T}} - 1}$$

因此在计算时可以考虑利用温度很低时的费米分布函数来代替 $\theta$ 函数，另外，在零温下，化学势也就是费米能级，并且注意到费米分布函数是能量和化学势的函数，因此基态能量可以改写成。

$$E_g = 2 \sum_{k\sigma} E_{k\sigma} f(-E_{k\sigma}, \mu) + N \left( \frac{J_k V^2}{2} - J_k m_c m_f - \lambda - \mu_c n_c \right) \quad (4.21)$$

按照 4.1 节中的推导过程，自洽方程仍然满足一阶导数为零的条件，也就是 (4.3) 式，故参照上一节中的推导，我们可以按照一样的思路进行。

首先， $E_{k\sigma}\theta(-E_{k\sigma})$  针对平均场序参数、传导电子以及局域电子磁矩的导数并不改变，仍然可以直接利用 4.1 节中的结果，引入费米分布函数的导数记为  $f'$ ，那么按照熟知的两个函数乘积的求导规则

$$(uv)' = u'v + v'u$$

在最一般的形式之下，原来的自洽方程组(4.5)-(4.9)就会被改写为：

$$2 \sum_{k\sigma} \left( \frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial m_c} f \right) - N J_k m_f = 0 \quad (4.22)$$

$$2 \sum_{k\sigma} \frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial m_f} f - N J_k m_c = 0 \quad (4.23)$$

$$2 \sum_{k\sigma} \frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial V} f - N J_k V = 0 \quad (4.24)$$

$$2 \sum_{k\sigma} \frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial \lambda} f - N = 0 \quad (4.25)$$

$$2 \sum_{k\sigma} \left( \frac{\partial E_{k\sigma}}{\partial \mu} f + f' E_{k\sigma} \right) - N n_c = N n_c \quad (4.26)$$

通过对比，可以发现最一般形式之下的方程组比前一组除了增加费米分布函数之外，在基态能量对化学式的导数为零的这一个方程中增加了费米分布函数对于化学式的导数，由此可以期待化学式项会起到重大作用。

仍然可以根据一般形式方程讨论铁磁相和近藤屏蔽相。我们讨论近藤屏蔽相，序参数所满足的条件仍然不变，为：

$$V \neq 0 \quad m_c = m_f = 0 \quad (4.27)$$

基态能量的表达式并没有发生明显的变化，可以从如下过程看出：

首先注意到：

$$E_{k\sigma} = \epsilon_k + \lambda - \sqrt{(\epsilon_k - \lambda)^2 + (J_k V)^2} \quad (4.28)$$

和

$$E_g = 2 \sum_{k\sigma} E_{k\sigma} + N \left( \frac{J_k V^2}{2} - \lambda - \mu n_c \right) \quad (4.29)$$

其次，将上述条件直接带入一般形式方程(4.22)-(4.26)可以得到此情形之下的自治方程组。类似地后我们可以类似得到铁磁相之下的自治方程组，铁磁相的条件仍然不变：

$$m_f = \frac{1}{2} \quad V = 0 \quad (4.30)$$

将以上条件直接代入一般形式的方程组中就能够直接得到铁磁相之下的自治方程。

综合以上推导过程，尤其是两类方程组的推导差异，主要是在 $\theta$ 函数之上，这个函数是一维链状模型中所不存在的，我们需要对其做进一步的讨论。

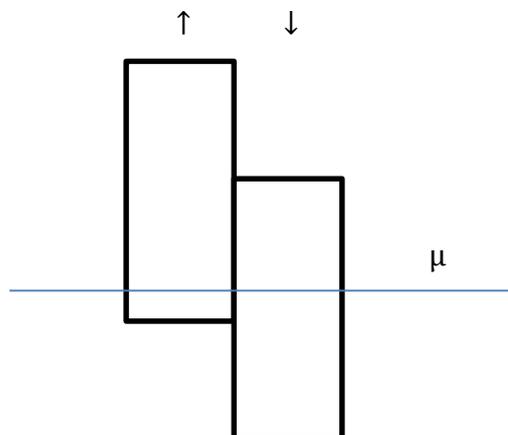


图 4-1 电子填充

首先，二维晶格应该与一维情形一样，自旋极化的存在使得自旋的简并发生分离，这就产生了一个主要问题：准电子将如何填充？

自旋的劈裂使得原有能带分为上能带与下能带，如果假定下能带能量较低则粒子优先填充下能带，那么 4.2 与 4.4 中两组方程的差异性就可以用一维下的图来定性说明。

如图所示， $\theta(-E_{k\sigma})$  是波矢与自旋的函数，这个函数的取值则决定了相应状态之下能带的占据，这一点从能量对于布里渊区的求和可以看出；即函数值为零——该状态上没有电子，函数值为一，这个状态上占据了电子。这样就 very 明确，当系统的化学势在两能带边界附近，并且其中一条能带的能带顶和另一条能带的能带底差距不大之时，再探一般方程 4.4 节中的方程退化至 4.2 节中的情形。

## 5 结论与展望

### 5.1 结论

本文通过近藤模型的分析，分析一维的格点局域磁矩链和格点附近被假定为连续分布的传导电子，采取平均场近似得到了基态下的自洽方程和基态相图。相区中一共可以分为三个大相区，铁磁相区，近藤屏蔽顺磁相区以及铁磁近藤屏蔽共存相区；进一步细分可以得到五个相区，铁磁和共存相这两类相区都可以进一步细分为自旋极化与非自旋极化相。

最后本文还进行了二维正方晶格情形的推导，类比一维情形，利用吉布斯分布，求出自由能利用零温下  $F = E$  得到能量，此后利用能量极小原理，亦即能量对各个序参数的梯度为零，就得到了近藤屏蔽相与铁磁相的自洽方程。

### 5.2 展望

在求解二维的自洽方程之时并没有得到理想的结果，因为其实际的数值计算所采用的算法需要有很强的鲁棒性，在下一步的计算中，我们期望使用一个鲁棒性很好的算法来求解二维下的问题，这一个方面有可能采取拟牛顿法、遗传算法或者是多种算法的联合应用，最终我们就要讨论实际情况——三维晶格及各种布拉菲格子的情形。

此外，在本次计算中，RKKY 相互作用并没有显式地表现出来，如果使用近藤-海森堡模型或许有更合适的结果。

## 参考文献

- [1] Andres.K, Graebner.J.E, Ott.H.R. 4 *f*-Virtual-Bound-State Formation in CeAl<sub>3</sub> at Low Temperatures[J]. Phys. Rev. Lett., 1975, 35:1779–1782.
- [2] 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]. Phys. Rev. Lett., 1979, 43:1892–1896.
- [3] Hewson.A.C. The Kondo Problem to Heavy Fermions[M]. Cambridge University Press, the United Kingdom, 1993.
- [4] 李正中, 固体理论[M]. 高等教育出版社, 北京, 2002.
- [5] 冯端, 金国钧, 凝聚态物理学(上卷)[M]. 高等教育出版社, 北京, 2003.
- [6] Kondo.J. Resistance minimum in dilute magnetic alloys[J]. Prog. Theor. Phys., 1964, 32:37–49.
- [7] Wilson.K.G. The renormalization group: Critical phenomena and the Kondo problem[J]. Rev.Mod. Phys., 1975, 47:773–840.
- [8] Yosida.K. Bound State Due to the s–d Exchange Interaction[J]. Phys. Rev., 1966, 147:223–227.
- [9] Zhu.J.X, Martin.I, Bishop.A.R. Kondo Stripes in an Anderson-Heisenberg Model of Heavy Fermion Systems[J]. Phys. Rev. Lett., 2008, 100:236403.
- [10] Coleman.P, Andrei.N. Kondo-stabilised spin liquids and heavy fermion superconductivity[J],Journal of Physics: Condensed Matter, 1989, 1(26):4057.
- [11] Guang-Bin Li ,Guang-Ming Zhang and Lu Yu Kondo screening coexisting with ferromagnetic order as a possible ground state for Kondo lattice systems[J]. Phys.Rev.B 81, 094420 2010
- [12] Lacroix.C and Cyrot.M,Phase diagram of the Kondo lattice[J].Phys.Rev.B.VOL 20, Number 5,Sep.1979.
- [13] Iglesias.J.R, Lacroix.C, Coqblin.B. Revisited Doniach diagram: Influence of short-range antiferromagnetic correlations in the Kondo lattice[J]. Phys. Rev. B, 1997, 56:11820–11826.
- [14] Coqblin B, Lacroix C, Gusmao M A, et al. Band-filling effects on Kondo-lattice properties[J] Phys. Rev. B, 2003, 67:064417.
- [15] Doniach S. The Kondo lattice and weak antiferromagnetism[J]. Physica B+C, 1977, 91(0):231– 234.
- [16] L.D.朗道, E.M.栗弗席兹, 《理论物理学教程第三卷-量子力学(非相对论

理论）》[M]，高等教育出版社，北京。， 2008。

[17] H.C.巴赫瓦洛夫，热依德科夫，柯别里科夫 《数值方法》[M]，高等教育出版社，北京，2014.

[18] 刘瑜，重费米子化合物中磁有序与超导电性的理论研究[D]，清华大学，北京，2012。

## 附录

## 二维近藤晶格模型之下的费米面拓扑：基于动态团簇近似方法

L.C.Martin, M.Bercx, and F.F Assaad

**摘要：**我们阐述了拓展的动态团簇近似计算方法，此方法基于二维近藤晶格模型下的量子蒙特卡洛算法。我们所发展的特别算法使得针对自发反铁磁对称性破缺的模拟成为可能。通过显式地计算顺磁与反铁磁相中单粒子谱函数，我们可以跟踪铁磁箱变之中费米面的变化。进一步，我们计算了 16 个轨道的结果，这些结果明晰了三种费米面拓扑的存在。顺磁金属相至反铁磁金属相的变化是连续箱变，近藤屏蔽作用并没有消解，同时我们也发现了一系列处于反铁磁相之下的重费米子能带。当系统处于反铁磁相并且有序磁矩增大，费米面神奇地变化为局域磁矩与反铁磁相之中收到冻结时的费米面。

### 引言

重费米子系统通常为独特的能量标度所分类而表征。近藤温标， $T_k \propto e^{-\frac{W}{J}}$ ， $W$  为能带宽度， $J$  为超交换项，这表明了对局域磁矩的屏蔽作用。这个屏蔽作为一个多体效应囊括了传导电子与局域电子的自旋。在一定的温度下，通常这个温度与近藤温标一个数量级，顺磁相重费米液体衍生并与连续、布洛赫型，作为屏蔽电子云与独立磁矩的叠加关联。甚至在近藤极限下，也就是说在杂质自旋的张罗均予以忽略的情况下，这个顺磁态为一个大费米面与鲁丁格(Luttinger)量（包括局域磁矩与传导电子）锁表征。这个关于金属状态的统一的温标通常很小，或者换句话说，与效应的量级一样。

近藤屏蔽作用通常与 RKKY 作用相互竞争，RKKY 通过传导电子之间的磁极化将局域磁矩之间关联起来。RKKY 作用通常为  $J^2 \chi_c(\vec{q}, \omega = 0)$  所表征，此处  $\chi_c$  与传导电子自旋极化程度相关。

近藤屏蔽作用——倾向于顺磁相与 RKKY 相互作用——倾向于铁磁有序相之间的相互竞争是量子相变的核心问题，进一步的研究仍然存在争议。

现在，两个根本的背景已经提到量子相变领域的台面上，，在标准的 Hertz-Mills 图像中，重费米液体的准粒子经过相变和自旋密度波的转变之后仍然保持完整。尤其是，针对重费米子系统  $Ce_{1-x}La_xRu_2Si_2$  的中子散射实验已经表明反铁磁序参量的涨落对于此相关的相变而言至关重要并且这个转变在 Hertz-Mills 框架之下能够得到很好的解释。

另一方面，既然很多实验发现诸如针对  $CeCu_{6-x}Au_x$  的波矢量独立自旋极化实验和  $YbRh_2Si_2$  中的低温霍尔效应都不能为现有理论所解释。在现有理论框架下，量子相变点与重费米子状态中准粒子的消失密切相关，而相变过程之中费米面的拓扑结构重组应该是需要注意的一点。

近期针对  $CeIn_3$  与  $CeRh_{1-x}Co_xIn_5$  的实验表明费米面拓扑的变化在表征磁有序-无序转变的量子相变点上不一定发生。实际上，甚至在  $YbRh_2Si_2$  这种已经表明费米面拓扑结构的重组能够通过或正或负的化学压力的应用而对应到量子相变点两边。

于本论文中，我们通过近藤晶格模型中费米面拓扑的明确计算表征上述问题。在这个问题中，最简单的近藤晶格模型描述了一系列自旋为 1/2 的局域磁矩，这些磁矩来源于原子  $f$  轨道的电子，通过超交换作用  $J$ ，这些电子与金属之间的可自由移动的传导电子反铁磁耦合。

通过着眼于近藤晶格模型给出的基态，我们展示了细致的动态团簇近似计算。为模拟铁磁有序相，我们将态团簇近似方法进一步拓展，使之能够描述对称性破缺的反铁磁有序态。我们绘制出作为  $J/t$  与传导电子密度  $n_c$  函数的铁磁相图，最后我们关注了单电子谱函数与费米面变化的情况。本文将以如下结构展开。模型和动态团簇近似方法的应用在第二部分讨论。半满填充与空穴掺杂作为例子将于第三部分和第四部分讨论。第五部分将会作为中介。本论文为我们之前一系列工作的拓展，一些前期工作已于之前发表。

## 模型哈密顿量与动态团簇近似

我们所考虑的近藤晶格模型如下所示：

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} [\epsilon(\mathbf{k}) - \mu] c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger c_{\mathbf{k}, \sigma} + J \sum_{\mathbf{i}} \mathbf{S}_{\mathbf{i}}^c \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{i}}^f. \quad (1)$$

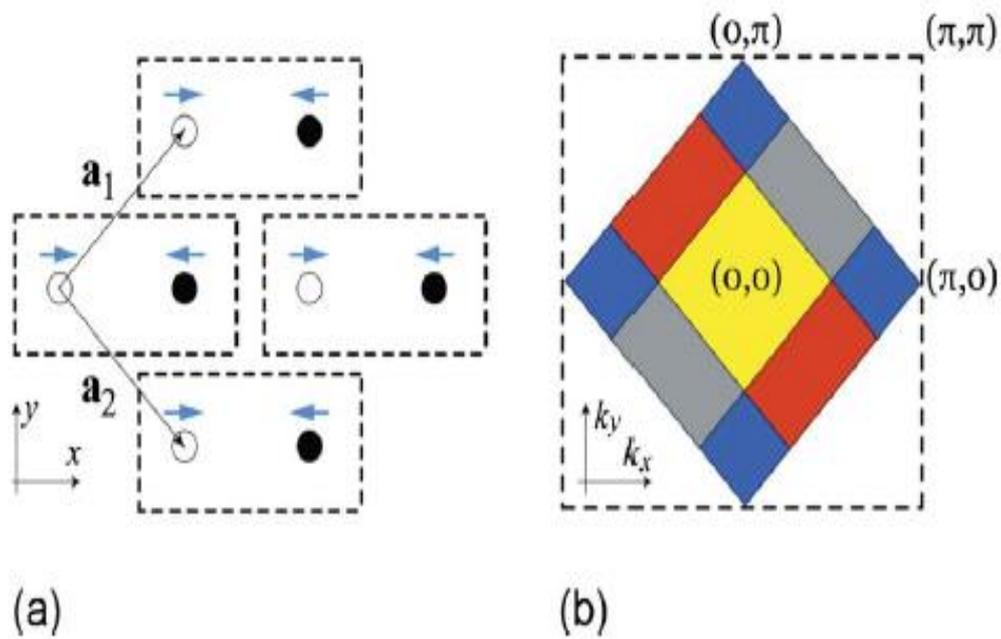
算符  $c_{\mathbf{k}, \sigma}^\dagger$  是电子的产生算符，在布洛赫表象之下具有波矢  $\vec{k}$  和  $Z$  方向的自旋  $\sigma = \uparrow, \downarrow$

耦合常数  $J > 0$ ，自旋项亦可用泡利自旋矩阵表示为  $\mathbf{S}_i^r = \frac{1}{2} \sum_{s,s'} c_{i,s}^+ \boldsymbol{\sigma}_{s,s'} c_{i,s'}$  利用局域电子的产生算符  $f_{i,\sigma}^+$  可以同样将  $\mathbf{S}_i^f$  表示成类似的形式。化学式用  $\mu$  表示。近藤晶格模型的定义之中包含  $f$  轨道电子的涨落以及诸如单位  $f$  电子占据一个  $f$  电子轨道等限制。作为对此模型的进一步学习，我们推荐读者阅读参考文献 36。

半满状态之下的电子-空穴对称性仅仅存在于跃迁局限在最近邻相的正方晶格内部，同时化学式被置零的情形之下。我们引入次近邻交换项  $t'$  来修成表达式  $\epsilon_{\mathbf{k}} = -2t(\cos k_x + \cos k_y) - 2t'[\cos(k_x + k_y) + \cos(k_x - k_y)]$ 。我们将会看到由于有限的  $t'$  电子-空穴对称性会被破坏，这一点将导致处于半满填充和较低的  $J/t$  情形之下，准粒子能带的一个变化。我们先假定  $t'/t = -0.3$ ，这个选择保证了对半满填充有微小偏离下主要金属状态自旋极化仍然在  $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$  达到顶峰。因此，反铁磁序作为一个和上述情形不相匹配的自旋状态被呈现。

为了求解上述模型，我们利用动态团簇近似方法（参见参考文献 37 和 38），此方法保留了时间的涨落因此可以应用于近藤效应但是要忽略比团簇尺度更大的空间涨落。这个法子建立在动量空间中的大区域和  $\mathbf{k}$  空间中小块的区域动量的不变性。通过逐渐定义小块区域，动态团簇近似方法允许存储自能之中动量独立的部分。

动态团簇近似的标准应用自然是相变过程中的不变量。为了估计相变不变量之外的部分，动态团簇近似方法能够被应用于具有包含  $N_u$  个原始晶格中的子晶格的大晶格之中，一个广泛的晶格可以用  $\bar{\mathbf{x}} = \mathbf{x} + \mathbf{r}_\mu$  来进行描写， $\mathbf{x}$  是大晶格之中的矢量，而  $\mathbf{r}_\mu$  中的下标  $\mu$  是子晶格的代号。在这片文章中，我们假定  $\mu$  最多到 2，折是产生反铁磁序的最低要求。简约布里渊区可以用如下边界表征  $\mathbf{b}_1 = \pi(1,1)$  和  $\mathbf{b}_2 = \pi(1,-1)$  我们假定晶格常数并不改变。这个大晶格和简约布里渊区将在图 1 呈现。



## 致 谢

大学四年，光阴荏苒，弹指一挥间，转眼就到了毕业的时候，本论文应该是大学最后的一项工作。

本文的写作过程中中国科学院物理研究所杨义峰研究员以及北京应用物理与计算数学研究所刘瑜助理研究员给予了大力协助，对我的诸多问题给与了指导。课题组的张树峰师兄，刘敏师姐，徐远骥师兄亦功不可没。

最后，感谢西安交通大学卢学刚老师对于琐碎、繁杂的毕业论文工作的大力帮助和支持，其认真复杂的态度使我受益颇多。