

博士学位论文

一维近藤-海森堡模型的密度矩阵重整化群研究

作者姓名	谢 能	
指导教师	杨义峰 研究员	
	中国科学院物理研究所	
学位类别	理学博士	
学科专业	理论物理	
研究所	中国科学院物理研究所	

2016年5月

A study of the one-dimensional Kondo-Heisenberg model by the density matrix renormalization group method

By Neng Xie

A Dissertation Submitted to University of Chinese Academy of Sciences In partial fulfillment of the requirement For the degree of Doctor of Science

> Institute of Physics Chinese Academy of Sciences

> > May, 2016

摘 要

近年来,由Yang和Pines引入的二流体唯象理论揭示了重费米子领域诸多的实验谜团,同时提供了一个处理近藤晶格模型问题的可操作的理论框架。这个理论基于同时显示局域和巡游行为的f电子的二重性,此性质起源于局域f电子和巡游导带电子间的集体杂化行为。为了理解重费米子体系中的杂化行为,我们利用严格的密度矩阵重整化群方法,研究了一维近藤-海森堡模型,以下即是我们的主要工作内容:

(1)利用密度矩阵重整化群方法,我们研究了一维近藤-海森堡模型中局域和巡游行为的相互作用。通过导带电子动量分布与局域自旋自旋关联谱的分析,我们发现由于集体杂化的影响,局域自旋同时表现出局域和巡游的行为。我们首次引入了一个微观观测量来刻画局域自旋的退局域化程度,即局域自旋自旋关联谱的谱权重转移。这个参数与费米面和反铁磁关联能的演化密切相关,并且反应出非局域杂化的特点。我们的工作提供了一个可能的f电子退局域化的微观描述,同时也在理论上支持了重费米子体系中的二流体现象。

(2)我们采用密度矩阵重整化群方法,研究了一维近藤-海森堡模型中近藤空穴引起的杂化振荡。在实空间,此杂化表现出周期性振荡类型,并从近藤空穴处到链端呈指数衰减行为。在弱耦合、中间耦合和强耦合区的振荡行为中,我们在动量空间发现了分别与小费米面,大费米面和自旋电荷分离相联系的三个特征波矢。进一步地分析振荡行为的空间形式和指数衰减长度后,我们指出导带电子的电荷密度分布与f电子的磁关联函数共同决定了重费米子系统中的杂化物理过程。在非半满情形时,前者起主要作用;在半满情形时,杂化由后者主导。

(3)针对导带中包含非平庸拓扑态的半满受限费米子的一维近藤-海森堡 模型,我们通过密度矩阵重整化群方法,研究了体系中拓扑态与近藤物理的相 互作用。我们在分析了导带电子边缘态的密度分布、局域自旋与导带电子的局 域杂化以及自旋能隙后,确认了在有限的临界近藤耦合*J*^c_K处,体系存在从拓扑 态到近藤单态的相变。我们还发现在导带电子近似双占据的拓扑边缘态处具有 退耦合的效应,在临界近藤耦合*J*^c_K之下,限制了此位置的近藤单态的形成,并 使系统的自旋能隙保持关闭。 关键词: 重费米子体系,二流体理论,密度矩阵重整化群,近藤-海森堡模型, 集体杂化

Abstract

Recently, a phenomenological two-fluid theory introduced by Yang and Pines reveal many experimental puzzles in heavy fermion systems and provide a practical and theoretical framework to solve the Kondo lattice model. This theory is based on the dual nature of the f electrons showing both itinerant and localized behaviors, which stems from the collective hybridization between the localized f electrons and itinerant conduction electrons. To investigate the hybridization behavior in heavy fermion systems, we study the one-dimensional Kondo-Heisenberg model through the exact density matrix renormalization group methods, and the following are the main contents of our research:

(I) We study the interplay of localized and itinerant behaviors in the onedimensional Kondo-Heisenberg model by the density matrix renormalization group method. By the analysis of the momentum distribution of conduction electrons and spin-correlation spectrum of local spins, we find that local spins show simutaneously itinerant and localized behaviors, and attribute it to the results of collective hybridization. We firstly introduce a microscopic measuring parameter, i.e. the spectral weight transfer of spin-correlation spectrum, to characterize the degree of itinerancy of local spins. This parameter have a closely relationship with the evolution of the Fermi surface and the antiferromagnetic correlation energy and show a nonlocal hybridization behaviors. Our work provide a possible microscopic description of the delocalization of f electrons and theoretically support the two fluid behaviors in heavy fermion systems.

(II) Kondo hole induced hybridization oscillations in the one-dimensional Kondo-Heisenberg model is studied by the density matrix renormalization group method. In real space, the hybridization show a pattern of periodic oscillation and decay exponentially from the Kondo hole to the boundary of the chain. We also find that there are three characteristic wave vectors for the oscillations from weak to intermediate and strong coupling regime in the momentum space, resulting from small and large Fermi surface and spin-charge separation respectively. Moreover, an analysis of spacial patterns and exponential decay length in the oscillations indicate that both charge density distribution of conduction electrons and f electrons' magnetic correlations impact the process of the hybridization in heavy-fermion systems. In half-filling case, the latter dominate the hybridization; and in the other case, the former play the key role.

(III) To investigate the interplay of topological state and Kondo physics, a one-dimensional Kondo-Heisenberg model that contains half-filling trapped fermions with nontrivial topological state in the conduction band, is studied by the density matrix renormalization group methods. We analyze the density profile of the end state of conduction electrons, the local hybridization and the spin gap in the system, and confirm that there is a phase transition from topological state to Kondo singlet state at finite critical Kondo coupling J_K^c . We also find that the topological end state with approximately double occupied conduction electrons have a decouple effect, which restricts the formation of Kondo singlet in the same lattice site and keep the spin gap closing in the system below J_K^c .

Keywords: heavy fermion system, two-fluid theory, density matrix renormalization group, Kondo-Heisenberg model, collective hybridization

目 录

摘要 …		i
Abstra	$\mathbf{ct} \cdots \cdots$	iii
目录…		v
第一章	引言	1
1.1	重费米子材料	1
	1.1.1 基本特点	1
	1.1.2 重费米子超导	2
	1.1.3 拓扑近藤绝缘体	3
1.2	重费米子基本物理	4
	1.2.1 近藤效应	5
	1.2.2 RKKY相互作用	6
	1.2.3 基本模型 ······	7
1.3	论文结构 ······	8
第二章	重费米子体系的二流体理论	11
2.1	概述	11
2.2	特征温度T*·····	12
2.3	近藤液体普适标度律 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	14
2.4	杂化效率 f_0 和二流体相图	15
2.5	二流体理论的微观进展	17
	2.5.1 解析进展	17
	2.5.2 数值进展	18
2.6	本章小结	19

第三	章	密度矩阵重整化群数值方法	21
3.	.1	背景介绍	21
		3.1.1 严格对角化 ······	21
		3.1.2 数值重整化群 ······	22
3.	.2	DMRG简介 ······	23
		3.2.1 超块与约化密度矩阵	24
		3.2.2 DMRG算法 ······	25
		3.2.3 算符与关联函数	27
		3.2.4 对称性与好量子数	28
3.	.3	哈密顿量的构造和本征值求解	30
		3.3.1 自然基构造近藤-海森堡模型	30
		3.3.2 lanzcos算法求解基态波函数	32
3.	.4	本章小结	34
	_		
第四:	草	一维近滕-海森堡模型局域与巡游的相互作用	35
4.	.1	概述	35
4.	.2	模型与方法	36
4.	.3	结果与分析	36
		4.3.1 动量空间的关联函数分析	36
		4.3.2 杂化参数的微观定义 ······	39
		4.3.3 补充计算	42
4.	.4	讨论	43
4.	.5	本章小结	44
笛五 [:]	音	一维近藤-海森堡模型中近藤空穴诱导的杂化振荡	45
5	1		45
5.	· •	1次1个 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	
0.	.2	概述	46
5	.2	概述 模型和方法 与带电子非半满情形	46 46

vii

	5.3.2 动量空间分析	48
	5.3.3 指数衰减拟合	51
5.4	导带电子半满情形	52
5.5	讨论 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	52
5.6	本章小结	53
第六章	一维系统拓扑边缘态与近藤耦合的相互作用	55
6.1	概述	55
6.2	导带电子的拓扑态	56
	6.2.1 模型的设计	56
	6.2.2 拓扑态的计算	57
6.3	拓扑边缘态与近藤作用	59
	6.3.1 导带电子密度分布	60
	6.3.2 局域杂化	61
	6.3.3 自旋能隙	62
6.4	相图	63
6.5	本章小结	64
第七章	总结和展望 ······	65
附录 A	DMRG计算举例 ·······	67
附录 B	贝里相位和陈数 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	71
B.1	贝里相位、贝里联络与贝里曲率	71
B.2	陈数的计算	73
参考文	鈬 ·····	77
简历···		89
发表文词	章目录 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·	91

viii -	一维近藤-海森堡模型的密度矩阵重整化群研	Ŧ究
致谢 · · · · · · · · · · · · · · · · · · ·		93
学位论文原创性声明和使用授权说明 ·		95

表 格

3.1	近藤-海森堡模型单格点基矢的表示	30
-----	------------------	----

3.2 近藤-海森堡模型单格点基矢在算符 c_{\uparrow}^{\dagger} 、 c_{\downarrow}^{\dagger} 、 S_{f}^{+} 和 S_{f}^{z} 作用下的变化 31

插 图

1.1	部分铜基超导体和重费米子超导体的超导转变温度 <i>T</i> _c 与自旋涨 落特征温度T _c 的函数关系网 T 与T近似表现为维性关系 摘	
	自引文 [5]。	3
1.2	近藤绝缘体杂化图像。巡游导带电子的能带与局域f电子的能带 经过杂化后,形成了两条重整化的重费米子能带。费米面穿过两 条重费米子能带的带隙,体系表现为绝缘体。	4
1.3	低温下,三类典型金属的电阻行为。稀磁合金宿主金属的电阻表 现出随温度降低呈对数增加的行为(红线),贵金属表现出与温 度无关的剩余电阻行为(蓝线),以及简单金属表现出电阻消失 的超导现象(绿线)。修改自引文 [27]。	5
1.4	Doniach相图。在近藤耦合较小时,RKKY相互作用占主导,体 系处于磁有序态。在近藤耦合较大时,近藤效应占主导,体系进 入费米液体区域。在二者的临界近藤耦合处,可能存在量子临界 点。	7
2.1	二维近藤晶格模型图示。局域自旋通过自旋交换作用形成自旋液体。导带电子由于受到局域自旋的近藤耦合作用,使得自身运动 变得缓慢,表现出重电子行为。摘自引文 [47]。	12
2.2	Ce基、U基和Yb基等部分重费米子材料的 T^* 、 T_K 与态密度 ρ 的关系。虚线来自公式2.1,实线是CeRhIn ₅ 在不同压强下(从1GPa到5C的变化。摘自引文 [49]。	Pa) 13
2.3	二十多种重费米子材料的奈特位移反常随温度的变化。实线取 自公式2.7,标记了近藤液体的态密度随温度的演化。摘自引 文 [51]。	15
2.4	基于二流体理论中的杂化效率f ₀ 的重费米子相图。f ₀ 可由外界参数如压强和磁场等调制。摘自引文 [56]。 ······	16

土刀 戸 /

2.5	(a) CeIrIn ₅ 中Ce的4f电子态密度在10K和300K时的LDA+DMFT计	-
	算结果,摘目引又[62]。(b) 近滕浟体态密度(点标记) 与LDA+D. 質如+由子太密度准粒子條享度随泪度涼化结果(空线) 如比较	MF'I't†
	病的/电子忽雷反推拉了峰高反随血反演化结末(头线)的比较。 摘自引文 [51]。 ····································	19
3.1	数值重整化群算法过程图示。参考自引文 [65]。	22
3.2	一维无限深势井(宽度为L和2L)的单粒子低能本征态示意图。	23
3.3	系统块和环境块构成超块的示意图。参考自引文 [65]。	24
3.4	密度矩阵重整化群无限体系算法过程示意图。	26
3.5	密度矩阵重整化群有限体系算法过程示意图。	27
4.1	(a) 导带电子动量分布 n_k ; (b) n_k 的导数 dn_k/dk 。参数为 $n^c = 0.72 \pi J_H/t = 0.5$ 。图中虚线分别标记了小费米面和大费米面的 波矢 $k_F^S = 0.36 \pi \pi k_F^L = 0.86 \pi$ 。摘自引文 [74]。	37
4.2	(a) 局域自旋的自旋关联谱。(b) 局域自旋与导带电子的杂化 谱。参数为 $n^c = 0.72 \pi J_H / t = 0.5$ 。插图示意 $S^{ff} \oplus J_K = 0$ 与有限 J_K 处的面积差 $A(J_K)$,用于 $f_A(J_K)$ 的计算。摘自引文 [74]。	38
4.3	二流体行为的图像说明。在弱耦合和中间耦合区域,杂化参数 <i>f_h <</i> 1,局域自旋部分地与导带电子发生纠缠。摘自引文 [74]。	39
4.4	(a) 建议的杂化参数 f_A , 平均杂化强度 f_S 以及 $ dn_k/dk $ 的最大值随 J_K 变化图; (b) f_A 与归一化的反铁磁关联能 f_E 随 J_K 变化的比较。摘自引文 [74]。	40
4.5	(a) 动量分布 n_k ; (b) 局域自旋的关联谱 $S^{ff}(k)$; (c) 杂化参数 f_A 、 f_E 以及 $ dn_k/dk $ 的最大值随 J_K 的变化。参数设定为 $J_H/t = 0.5$, $N = 50$ 以及 $n^c = 0.2$ 和0.4。(d) 动量分布; (e) 自旋关联 谱; 以及 (f) 参数 f_A 、 f_E 以及 $ dn_k/dk $ 最大值随 J_K 的变化。对应参数为 $N = 30,50$ 和80, $J_H/t = 0.5$, $n^c = 0.72$ 。修改自引 文 [74]。	41

5.1	不同近藤耦合强度下,系统掺杂近藤空穴后与掺杂前若干物理 量的相对变化。(a)与(d)导带电子密度相对变化值δ <i>n</i> ^c ;(b)	
	与 (e) 局域杂化相对变化值 $\delta \mathcal{V}_i$; (c) 与 (f) 局域自旋自旋关联	
	函数相对变化值 δ_{χ_i} 。导带电子平均占据数为 $n^c=0.2$ 或 0.8 ,链	
	$\bigstar N = 100$.	47
5.2	图5.1中 $n^c = 0.2$ 情形下对应的傅里叶分量(Fourier componen-	
	t)。(a) $\delta n^{c}(k)$; (b) $\delta \mathcal{V}(k)$; 以及 (c) $\delta \chi(k)$ 。图中垂直虚线为	
	与 $2k_F^S$ 、 $2k_F^L$ ($2\pi - 2k_F^L$) 和 $4k_F^L$ ($4k_F^L - 2\pi$) 相关的散射峰。	49
5.3	公式5.4的拟合图示。(a) δn_i^c 与(b) $\delta \mathcal{V}_i$, $n^c = 0.8, J_K/t = 1.6$ 。(c)	
	δn_i^c 与(d) $\delta \mathcal{V}_i$, $n^c = 0.2, J_K/t = 4$ 。图中实线为公式拟合曲线。.	50
5.4	对数坐标下, $\delta \chi_i$ 与 $\delta \mathcal{V}_i$ 随 $i - 51$ 的变化, $J_K/t = 0.8, 1.6$ 。插图	
	为 $J_K/t = 0.8$ 时, $\delta \chi_i$ 与 $\delta \mathcal{V}_i$ 的实空间振荡分布。参数取 $n^c = 1$,链	
	$\bigstar N = 100.$	51
6.1	公式6.6中矢量 $\mathbf{d}(k)$ 的三维空间图示。(a)参数取为 $\lambda = 0, \mu =$	
	1; (b) 参数取为 $\lambda = 0.5, \mu = 1$ 。格点数 $N = 100$ 。	57
6.2	随相位 δ 变化的系统能谱。(a)参数取为 $\lambda = 0, \mu = 1;$ (b)参数	
	取为 $\lambda = 0.5, \mu = 1$ 。格点数 $N = 100$ 。	58
6.3	系统导带电子密度分布图。点标记为来源于DMRG对公式6.9的	
	计算结果,实线为来源于公式6.8计算的半满能带处填充电子密	
	度分布,二者十分吻合。格点数 $N = 40$, $\lambda = 0.5, \mu = 1$ 。相	
	$\dot{\Box}\delta = -0.75\pi, -0.25\pi, 0.25\pi$ 和0.75 π 。	59
6.4	系统特殊相位和格点位置的(a)导带电子密度分布 n_i^c 和(b)局	
	域杂化 \mathcal{V}_i 随近藤耦合的变化。格点数 $N = 40$, $\lambda = 0.5$, $\mu = 1$ 。 · · ·	61
6.5	不同相位下系统自旋能隙随近藤耦合的变化。格点数 $N = 40$,	
	$\lambda = 0.5, \mu = 1.$	62
6.6	相位 δ 与近藤耦合 J_K 确定的相图。 $\delta \in (-0.5\pi, 0)$,格点数 $N =$	
	40, $\lambda = 0.5, \mu = 1_{\circ}$	63
A.1	DMRG计算流程中构造四个格点的超块结构。摘自引文 [120]。 ··	67
A.2	DMRG计算流程中更新超块示意图。摘自引文 [120]。	69

第一章 引言

在凝聚态物理中,作为强关联电子领域的典型方向,重费米子体系的研究 虽已有四十余年的历史,现今仍呈现出历久而弥新的发展态势。最近,随着实 验观测和材料生长相关技术的不断进步,与其它分支领域(如超导和拓扑态 等)的交叉结合,重费米子体系涌现出丰富的新奇量子现象,吸引了众多研究 者投身于相关的研究工作中,同时也对重费米子物理的理论发展提出了新的更 高的要求。

1.1 重费米子材料

这一节我们将以实验为主线,介绍重费米子体系的基本特点;同时我们将 简述与当前的热点研究问题相关的两种典型重费米子材料:重费米子超导和拓 扑近藤绝缘体。

1.1.1 基本特点

1975年,美国贝尔实验室的Andres等人测量了极低温情况下的Ce基金属化 合物CeAl₃的比热,在0.015K到0.150K的温度区间内,他们发现了此材料的线 性比热系数达到惊人的γ=1620 mJ/mol K²,比常规金属的比热系数高出两到 三个数量级 [1]。这是实验上发现的第一个重费米子体系。随后人们在YbCuAl、 CeCu₂Si₂和UPt₃等其它稀土或锕系元素的金属化合物中也发现了类似实验现 象 [2]:这类材料低温下表现出很高的比热系数,同时电阻随温度T演化满足费 米液体的T²行为。根据朗道费米液体理论,较高的比热系数表明体系的准粒子 有效质量很大(是裸电子质量的成百上千倍),因而这类材料被称为重费米子 材料。

重费米子材料主要为f电子体系(或少量d电子体系,如LiV₂O₄等 [3]), 这类电子的库仑排斥作用比较强,往往表现为局域磁矩的行为,如高温 下CeCuSi₂测得的有效磁矩为 $\mu_{eff} = 2.68\mu_B$ [2]。重费米子材料的磁化率在高温 下满足Curie-Weiss定律: $\chi \sim (T + \theta)^{-1}$ 。重费米子体系中周期性排列的局域磁 矩会与巡游的导带电子发生集体杂化,使得导带电子能带重整化,其复合粒子 表现出较慢的运动速度,被称为重电子。

作为典型的强关联电子系统,重费米子材料的另一个特点是其能量尺度较低,只有几毫电子伏的量级(低于铜基超导和铁基超导)。体系随外界参数如 化学掺杂、压力、磁场等的变化十分敏感,在低温下表现出丰富的相图,存在 多种多样的有序态和新奇量子现象,如非常规超导 [4,5]、隐藏序 [6]、非费米 液体行为 [7]以及量子临界点 [8,9]等。接下来,我们将具体介绍近些年引起大 量关注的两类重费米子材料:重费米子超导和拓扑近藤绝缘体。

1.1.2 重费米子超导

1979年,德国马普所的物理学家Steglich等首次发现了重费米子超导体CeCu₂Si₂,其超导转变温度为 T_c =0.6K [10]。这一发现极大冲击了人们对超导体的传统认识,主要表现在两方面:1、实验上发现磁性环境不利于超导相的出现[11],理论上磁性的存在对Cooper对的形成也具有破坏作用[12];2、CeCu₂Si₂中声子的Debye温度 $\Theta_D \approx 200$ K,远高于电子的费米温度 $T_F \approx 10$ K,基于电-声耦合的BCS超导理论($\Theta_D < T_F$)[13]无法解释。可见,CeCu₂Si₂作为第一个被发现的非常规超导体,使人们对超导的起源和内涵有了全新的认识,同时对于后续的铜基超导和铁基超导的研究也具有借鉴意义。

虽然处于不同的物理体系,令人惊奇的是许多重费米子超导与铜基、铁基 等非常规超导体具有许多共同的特征 [14]: 1、这些材料的超导都发生在准二 维的含有d或f电子的阳离子层状区间; 2、从相图上看,超导相总是出现在反 铁磁(或者为自旋密度波)附近,二者具有竞争或共存的关系; 3、中子散射 实验在超导相中观察到的自旋共振峰表明,很可能是自旋涨落诱导了非常规 的超导配对。图1.1所示为部分铜基超导和重费米子超导的超导转变温度T_c与 自旋涨落特征温度T₀的函数关系图 [5],二者存在一定的线性相关性。理论上, Davis和Lee提出了一种描述上述超导的具有两组分的统一有效哈密顿量,分为 与具体材料相关的反映费米面拓扑结构的跃迁项,和体现反铁磁关联的相互作 用项(具体见引文 [15]):

$$H_{eff} = \sum_{\mathbf{k}}' \sum_{s} \epsilon(\mathbf{k}) n_s(\mathbf{k}) + \sum_{i,j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j.$$
(1.1)



图 1.1: 部分铜基超导体和重费米子超导体的超导转变温度*T_c*与自旋涨落特征 温度*T₀* 的函数关系图。*T_c*与*T₀*近似表现为线性关系。摘自引文 [5]。

此外,重费米子超导也具有自身的特殊性 [5]。它的超导转变温度T_c一般比较低,最高T_c为在2001年于PuCoGa₅中发现的18.5K [16]。由于重费米子材料能量尺度较低,具有对外界调控的敏感性,再考虑到晶体场效应与自旋轨道耦合的影响,使得重费米子超导的出现伴随着丰富的竞争序 [17]。如,URu₂Si₂在17.5K 以下出现的隐藏序 [6],CeCoIn₅在强磁场下出现的Q-相 [18]等。

重费米子非常规超导系统所体现出来的共性和个性,一方面为寻找新的高 温超导体,并建立非常规的特别是自旋涨落诱导配对的超导统一理论提供了借 鉴和指导;另一方面也丰富了关联电子系统的量子演生现象,促进了极端条件 下相关实验技术的发展。

1.1.3 拓扑近藤绝缘体

近藤绝缘体的研究可以追溯到1969年Menth等人对SmB₆的工作 [19],至 今已发现数十种材料,如U₂Ru₂Sn [20]、Ce₃Bi₄Pt₃ [21]等。虽然近藤绝缘体具 有强的电子相互作用,但是他们的基态可以通过绝热演化与能带绝缘体相联 系 [22]。近藤绝缘体的出现,源于导带电子能带与f电子能带杂化后,被重整化 的两条能带(*E*_和*E*₊)在费米面附近产生了杂化能隙。如图1.2所示,当费米面穿过打开的杂化能隙,能量较低的*E*_能带电子满占据,而较高能量的*E*₊能带为电子空占据时,这类金属化合物成为绝缘体。



图 1.2: 近藤绝缘体杂化图像。巡游导带电子的能带与局域f电子的能带经过杂 化后,形成了两条重整化的重费米子能带。费米面穿过两条重费米子能带的带 隙,体系表现为绝缘体。

2007年,Fu和Kane提出 [23]: 三维情形下,体系所有高对称点 Γ_i 处的占据态字称 δ 之积满足 $Z_2 = \prod_{\Gamma_i} \delta(\Gamma_i) = -1$ 时,则为拓扑绝缘体。显然,当奇字称态能带与偶字称态能带反转一次时,拓扑不变量 Z_2 改变一次符号。2010年,Dzero等人发现 [24],对于合适的近藤绝缘体材料,当具有奇字称的f电子能带与具有偶字称的d电子能带杂化并发生能带反转后,可能出现具有关联电子效应的 Z_2 拓扑绝缘体,即拓扑近藤绝缘体。随后的材料计算和多种实验测量表明(输运、光电子能谱、扫描隧道显微镜等) [25],重费米子材料SmB₆即是一种拓扑近藤绝缘体。

拓扑近藤绝缘体材料的发现,开辟了关联电子拓扑绝缘体的新领域,有助 于人们对新奇量子现象的探索,如拓扑表面态与近藤效应的相互影响、磁性在 拓扑表面态的行为等 [25]。

1.2 重费米子基本物理

这一节我们介绍重费米子体系丰富实验现象背后的基本物理内容,分为近 藤效应、RKKY相互作用与基本模型三个部分。



1.2.1 近藤效应

图 1.3: 低温下,三类典型金属的电阻行为。稀磁合金宿主金属的电阻表现出 随温度降低呈对数增加的行为(红线),贵金属表现出与温度无关的剩余电阻 行为(蓝线),以及简单金属表现出电阻消失的超导现象(绿线)。修改自引 文 [27]。

在上个世纪30年代,人们通过对稀磁合金的研究,发现了低温电阻极小现 象。在扣除声子散射的贡献后,磁性杂质的电阻贡献为*R_{imp}* = *a* - *b*ln*T*,表现 出随温度降低呈对数增加的行为 [26]。如图1.3 所示,这一现象(红线)与贵金 属产生的与温度无关的剩余电阻行为(蓝线),以及简单金属的超导现象(绿 线),表现出截然不同的低温演化趋势,因而引起了人们的广泛关注。1964年, 日本物理学家近藤(Kondo)考虑到稀磁合金中磁性杂质对导带电子的散射效 应,引入近藤单杂质模型 [28]:

$$H = \sum_{\mathbf{k},\sigma=\pm} \epsilon_{\mathbf{k}} c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} c_{\mathbf{k},\sigma} + \frac{J}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{k}'} \sum_{\sigma,\sigma'} \mathbf{S} \cdot c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma} \tau_{\sigma,\sigma'} c_{\mathbf{k}',\sigma'}, \qquad (1.2)$$

其中 $\epsilon_{\mathbf{k}}$ 为导带电子的能级, $c^{\dagger}_{\mathbf{k},\sigma}(c_{\mathbf{k},\sigma})$ 表示在动量k处产生(湮灭)自旋为 σ 的 电子,J为交换积分(也称为近藤耦合),N为原子数, \mathbf{S} 为杂质自旋。当他计 算到自旋散射的二阶微扰过程时,在总散射振幅模方的J(J > 0,一般为反铁 磁交换)的三次方项中出现了-lnT的对数修正 [26]:

$$-J^3\rho \ln\left(\frac{T}{D}\right),\tag{1.3}$$

其中ρ为费米面附近的电子态密度,D为导带电子能带的半带宽。如无特别标明,本论文采用自然单位,玻尔兹曼常数和普朗克常数均设为1。近藤的工作成功地解释了宿主金属中磁性杂质的电阻随温度降低的对数增加行为,因而这 一现象也被称为"近藤效应"。

但是对数项的电阻在温度接近零时,会趋向无穷大,这与相关实验中观测 到电阻随*T*²行为达到饱和不符。后来,人们在近藤工作的基础上考虑了更高阶 的微扰散射,得到了一个重要的特征温度,即近藤温度 [29]:

$$T_K \approx \rho^{-1} e^{-1/\rho J}.\tag{1.4}$$

在近藤温度T_K以下,系统为强耦合状态,参与散射过程的导带电子的量子态相 互关联,导致微扰论的处理不再适用(在T_K之上,近藤的处理方法仍然适用)。 因而在T_K之下,需要新的理论和方法来处理。随后从Anderson等人的标度理 论工作 [30,31],到Wilson提出数值重整化群方法求解单杂质近藤问题 [32],上 述问题才基本解决。人们认识到,近藤温度出现后,在磁性杂质周围有大量导 带电子参与屏蔽其磁矩(近藤屏蔽),它们的基态为稳定的自旋单态 [33]。

1.2.2 RKKY相互作用

如果增加稀磁合金的磁性杂质浓度(如在Ce_xLa_{1-x}Cu₆,增加Ce元素的浓 度x),形成局域磁矩在晶格上的周期排布,会出现一种新的作用:与导带电子 存在近藤耦合的局域磁矩,通过导带电子的传递,在局域磁矩之间形成了间 接的自旋交换作用。这种间接的自旋交换作用由Ruderman、Kittel、Kasuya以 及Yosida等人的理论工作所揭示,因而称为RKKY相互作用 [34–36]。其具体表 达式为 [26]:

$$H_{RKKY} = \sum_{i,j}' \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_m J(|R_n - R_m|), \qquad (1.5)$$

其中相互作用强度:

$$J(|\mathbf{R}|) = \frac{9\pi}{2} \left(\frac{J^2}{E_F}\right) F(2k_F R), \quad F(x) = \frac{x \cos x - \sin x}{x^4}.$$
 (1.6)

从上述公式可以看出,随着距离R增大,RKKY相互作用表现出以2k_F⁻¹为振荡 周期的幂数衰减行为。 在重费米子系统的研究中,必须同时考虑近藤作用



图 1.4: Doniach相图。在近藤耦合较小时,RKKY相互作用占主导,体系处于 磁有序态。在近藤耦合较大时,近藤效应占主导,体系进入费米液体区域。在 二者的临界近藤耦合处,可能存在量子临界点。

和RKKY相互作用。

1977年, Doniach利用平均场方法研究了近藤晶格模型, 指出体系含有两个重要的能量尺度, 近藤温度*T_K*(见公式1.4)和RKKY相互作用能量标度 [37]:

$$T_{RKKY} \propto J^2 \rho.$$
 (1.7)

二者存在竞争的关系,并共同决定了体系的基态性质,这就是著名的Doniach相图。如图1.4所示,当 $J\rho$ 比较小时, T_{RKKY} 占主导作用,体系的基态为反铁磁相;而 $J\rho$ 比较大时, $T_K > T_{RKKY}$,体系基态进入由近藤作用主导的费米液体区。此后,人们意识到,在 $T_K \approx T_{RKKY}$ 时,体系基态还有可能处在从反铁磁区到费米液体区的量子临界点附近(QCP)。Doniach相图为理解重费米子物理提供了简单的图像,同时也定性符合许多实验现象。

1.2.3 基本模型

在重费米子系统的研究中,近藤晶格模型是使用最广的基本模型之一,它 是以近藤单杂质模型(见公式1.2)为基础的磁性杂质的晶格扩展情形,定义如 下:

$$H = -t \sum_{i \neq j,\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + H.c.) + J_K \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i, \qquad (1.8)$$

模型中,第一项为导带电子的动能部分,第二项表示在每一个格点上的局域磁矩 \mathbf{S}_i 和导带电子自旋 $\mathbf{s}_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'} c^{\dagger}_{i,\sigma} \tau_{\sigma,\sigma'} c_{i,\sigma'}$ 之间都存在的近藤耦合 J_K 。在此基础上,为了考虑局域磁矩的最近邻耦合,可以引入一项海森堡交换相互作用 J_H 项:

$$H = -t \sum_{i \neq j,\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + H.c.) + J_K \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i + J_H \sum_{i \neq j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j,$$
(1.9)

此模型称为近藤-海森堡模型,也是在本论文的研究中所采用的主要模型。

另外,在某些重费米子材料中,*f*电子的电荷涨落和轨道效应较显著,需要采用周期性安德森模型:

$$H = -t \sum_{i \neq j,\sigma} (c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{j,\sigma} + H.c.) + \epsilon_f \sum_{i,\sigma} f_{i,\sigma}^{\dagger} f_{i,\sigma}$$
$$+ V \sum_{i,\sigma} (f_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma} + H.c.) + U \sum_i n_i^f n_i^f. \qquad (1.10)$$

模型中第二项为f电子的能级项,V表示f电子和导带电子的杂化,U为f电子的在位库仑排斥作用。在U很大的情况下,f电子电荷涨落被抑制,通过施里弗-沃尔夫变换[38],展开到V的二阶项,周期性安德森模型即可转化为近藤晶格模型:

$$J_K = V^2 \left(\frac{1}{-\epsilon_f} + \frac{1}{\epsilon_f + U} \right). \tag{1.11}$$

对于导带电子半满情形 $\epsilon_f = -U/2$,则 J_K 简化为 $4V^2/U$ 。

1.3 论文结构

本论文将基于重费米子体系的相关实验和理论背景,以导带电子和局域 磁矩的杂化作用为主线,通过一维近藤-海森堡模型的相关计算和分析展开论 述。

第二章我们主要介绍在组织分析了大量的重费米子实验数据后,由Yang和Pines发展起来的基于f电子局域与巡游二重性的重费米子二流体唯象模型。此模型成

功地在一个统一的理论视野及框架下组织和理解了大量复杂的重费米子实验现 象。

第三章我们将介绍本论文的研究方法部分,即密度矩阵重整化群(DMRG) 数值方法。这是一种处理一维强关联问题十分有效的数值方法。

第四章我们主要介绍针对一维近藤-海森堡模型中电子局域与巡游双重行为的研究工作,讨论二流体模型的微观机理,以及f电子退局域化的微观描述。

第五章我们讨论在一维近藤-海森堡模型中引入近藤空穴后,对系统导带 电子电荷密度、局域自旋次关联以及杂化行为的影响。

第六章我们考虑具有拓扑性质的导带电子通过近藤相互作用,与海森堡自 旋链耦合后,拓扑态与近藤效应的相互作用。

第七章将对以上内容做一个总结和展望。

附录中我们介绍了DMRG计算的一个具体例子,以及贝里相位和陈数相关 公式的推导过程。

第二章 重费米子体系的二流体理论

重费米子体系的研究已有四十年的历史,但是如何在一个统一的理论 框架下去组织和理解大量的重费米子实验现象,仍然是一个悬而未决的 问题。类似于超流和超导早期研究中的二流体模型,这一章,我们主要介 绍Yang和Pines针对上述问题所发展起来的重费米子二流体理论,简述其基本 内容,重点讨论二流体理论中的关键物理量或公式:特征温度*T**、近藤液体普 适标度律、杂化效率*f*₀等。最后,我们将介绍二流体理论的微观发展情况,引 出本论文的研究动机。

2.1 概述

早在上个世纪三十年代,人们在对超流和超导的研究中,就提出了二流体的思想和图像。对于氦4超流,超流二流体理论认为体系含有超流组分和正常组分两个部分,它们的共存和转化共同决定了体系的物理性质,如无粘滞的超流性和机械致热效应等。近些年来,在铜基超导 [40,41]和铁基超导 [42-44]的研究中,人们也发现了所谓的二流体现象,其基本物理内容为体系中电子局域和巡游两个独立部分的共存和竞争,可粗略地对应于系统中的反铁磁相和超导相(可参考1.1.2小节)。如多轨道的铁基超导中,研究发现Fe元素3d电子在不同轨道的占据具有不同的局域化程度 [45]。

重费米子体系的原始二流体理论,由Nakasuji、Pines和Fisk于2004年首先 提出 [46],之后主要由Yang和Pines发展和改进,并在唯象层面最终完善起 来 [47,48]。如图2.1所示 [47],重费米子二流体模型,主要讲述了在近藤晶格 系统中:低温下既存在着局域f电子通过自旋耦合而形成的自旋液体(spin liquid);也含有由于f电子与巡游导带电子之间的集体杂化而产生的近藤液体 (Kondo liquid),即巡游重电子。二种流体互相混合并转化,在实验上表现出 可区分的物理行为特征,共同决定了重费米子体系的性质。重费米子二流体行 为的独特性在于其电子的局域和巡游二重性,完全由单一f电子的退局域化行 为决定。并且,通过唯像分析发现,这一退局域化物理过程,可以由普适的特 征温度和标度行为简洁地描述。



图 2.1: 二维近藤晶格模型图示。局域自旋通过自旋交换作用形成自旋液体。导带电子由于受到局域自旋的近藤耦合作用,使得自身运动变得缓慢,表现出重电子行为。摘自引文 [47]。

以下将具体介绍重费米子二流体理论的主要内容:标记了近藤液体出现 (巡游重电子产生)的RKKY特征温度*T**(2.2节);体现在各类实验观测量上 的近藤液体约化态密度的普适标度行为(2.3节);基于巡游重电子性质演变, 由杂化效率描述的重费米子低温相图(2.4节)。

2.2 特征温度T*

在重费米子体系中,局域磁矩和导带电子的耦合会产生两个竞争的特征 能标:近藤温度T_K和RKKY能标。它们分别描述了大量导带电子对单个磁性 杂质的屏蔽效应以及局域磁矩之间通过导带电子传递的非直接交换相互作用。 然而长期以来理论预言的RKKY能标,在实验上却无法普遍地判断和证实, 与RKKY相互作用相关的电子特征行为也难以深入认识。

2008年,Yang等人在整理和提炼了过去三十多年内大量的重费米子材料实验数据后,发现可以引入一个普适的特征温标T* [49],来刻画局域f电子由于集体相干性导致的退局域化行为。实验上,此温标对应了磁化率偏离居里-外斯定律,电阻率出现峰值,以及核磁共振(NMR)实验中奈特位移出现反常

等现象。同时他们发现,大部分重费米子材料的近藤温度 T_K 与特征温度 T^* 相差较大,表现出明显不同。此外Nakatsuji等人对Ce_{1-x}La_xCoIn₅的实验分析表明 [50], T^* 与最近邻格点间的局域磁矩的耦合相关。因此Yang等人猜想特征温标 T^* 和RKKY相互作用存在着内在的联系:假定 $T^* = cJ^2\rho$,可以得到,

$$J\rho = -1/\ln(T_K)\rho = \sqrt{c^{-1}T^*\rho}.$$
 (2.1)

上述公式中费米面处导带电子态密度 ρ 可以通过相关重费米子材料在非磁极限下(如Ce_xLa_{1-x}CoIn₅, 令x = 0)的比热系数测量获得,而近藤耦合J可以依据公式1.4通过近藤温度 T_K 的测量得到。如图2.2所示 [49],当 $c \approx 0.45$ 时,拥有不同晶格结构和基态有序相的一系列重费米子材料,以及在不同压强环境下的CeRhIn₅,他们的特征温度都符合公式2.1。可见,重费米子材料中的特征温度 T^* 、近藤温度 T_K 和导带电子态密度 ρ ,由近藤耦合J而广泛地联系起来,表现为一个简单的普适关系。特征温度 T^* 的普适性和对大量观测量的反常现象的标记,表明其普遍地刻画了重费米子体系中最近邻f电子间的RKKY相互作用以及局域f电子集体相干行为的出现。



图 2.2: Ce基、U基和Yb基等部分重费米子材料的 T^* 、 T_K 与态密度 ρ 的关系。虚 线来自公式2.1,实线是CeRhIn₅在不同压强下(从1GPa到5GPa)的变化。摘 自引文 [49]。

不同于由近藤温度*T_K*刻画的导带电子对单个磁性杂质的屏蔽作用,特征温度*T**体现了导带电子与晶格自旋的集体响应过程。在*T**以下,导带电子受到了

强烈的相干散射,形成了复合重电子态。同时f电子与导带电子发生非局域的 集体杂化,不再表现为独立的自旋自由度,体系整体磁熵受到很强地抑制(偏 离自由局域磁矩的磁熵*R*ln2),出现了退局域化行为。

2.3 近藤液体普适标度律

在特征温度 T^* 之下的广大温度范围内,f电子逐渐地退局域化(不是一个瞬时的变化),系统存在着近藤液体和自旋液体的共存和转化,它们共同决定了系统的物理行为。根据二流体理论,如对于系统的总磁化率 χ ,可以写为近藤液体总磁化率 χ_{KL} 和自旋液体总磁化率 χ_{SL} 之和的形式[51]:

$$\chi = f(T)\chi_{KL} + [1 - f(T)]\chi_{SL}.$$
(2.2)

上述公式中, *f*(*T*)为系统二流体中近藤液体所占权重, 实验数据分析发现其满足以下关系:

$$f(T) = f_0 \left(1 - \frac{T}{T^*}\right)^{3/2},$$
(2.3)

权重*f*(*T*)只决定于与具体材料有关的特征温度*T**与杂化效率*f*₀(将在下一节重点讨论)。

在重费米子众多材料的实验中,存在着低温下的奈特位移反常现象:高温时奈特位移与磁化率表现出与一般金属类似的线性关系: $K = K_0 + A\chi$ (K_0 为常数项),而在某一温度之下这一线性关系出现反常的偏离。考虑到奈特位移来源于核磁共振实验中,由于电子自旋与原子核自旋的超精细相互作用,对产生赛曼劈裂的原子核能级的扰动。Yang等人认为,重费米子材料中,元素的原子核同时与近藤液体和自旋液体产生超精细相互作用,且具有不同的超精细耦合常数A和B,因而对体系的奈特位移K有不同的物理贡献:

$$K = K_0 + K_{KL} + K_{SL}, (2.4)$$

$$K_{KL} = Af(T)\chi_{KL}, \quad K_{SL} = B[1 - f(T)]\chi_{SL}.$$
 (2.5)

上式中 χ_{KL} 为近藤液体摩尔磁化率, χ_{SL} 为自旋液体摩尔磁化率。 T^* 以下 出现近藤液体, χ_{KL} 不为零,导致奈特位移反常,表示为:

$$K_{anom} = K - K_0 - B\chi = (A - B)f(T)\chi_{KL}.$$
 (2.6)

由于近藤液体的额外贡献,奈特位移反常正比于近藤液体部分的总磁化 率*f*(*T*)χ_{*KL*},假设朗道费米液体理论仍然适用,即正比于近藤液体约化态密度:

$$\rho_{KL} = \left(1 - \frac{T}{T^*}\right)^{3/2} \left(1 + \ln\frac{T^*}{T}\right). \tag{2.7}$$

等号右边的第一部分为近藤液体权重f(T),第二部分 $(1 + \ln \frac{T^*}{T})$ 为近藤液体准 粒子的约化有效质量 [51]。



图 2.3: 二十多种重费米子材料的奈特位移反常随温度的变化。实线取自公式2.7,标记了近藤液体的态密度随温度的演化。摘自引文 [51]。

如图2.3所示,大部分重费米子材料的奈特位移反常与近藤液体约化态密度的温度演化行为十分吻合。近藤液体约化态密度的普适标度行为,同时体现在重费米子材料的许多物性测量中,如自旋-晶格弛豫率 [52]、霍尔系数 [53]等。这些实验结果共同验证了二流体理论的合理性和普适性。

2.4 杂化效率 f_0 和二流体相图

在以上两节,我们介绍了二流体模型对正常态重电子的描述,如特征温

度T*标记了近藤液体的出现,近藤液体约化态密度的普适标度律等。最近, Yang等人结合实验发展了二流体唯象理论,把低温有序态和重电子正常态有 机的结合起来,提出了基于重电子演化行为的新的重费米子相图(未考虑铁磁 相)[56]。

如图4.4所示,特征温度T*以下,局域f电子由于与导带电子发生集体杂化,逐渐地退局域化,形成了近藤液体。在较大范围的温度和压强区间内,近藤液体和杂化的自旋液体相互共存。二流体理论认为,当温度趋于零时,近藤液体权重即为杂化效率f₀ (f(T = 0) = f₀),它表征了低温下两种流体在具体材料中的成分大小,可以通过压强、磁场、化学掺杂等手段来调制。



图 2.4: 基于二流体理论中的杂化效率 f₀的重费米子相图。 f₀可由外界参数如压 强和磁场等调制。摘自引文 [56]。

低温下,当杂化比较弱时 ($f_0 < 1$),仍存在未杂化的局域f电子,它们在 有效的磁交换作用下可以形成反铁磁序 (温度低于尼尔温度 T_N)。当杂化比较 强时 ($f_0 > 1$),在有限温度 $T_L = T^*(1 - f_0)^{-2/3}$ 以下,所有的局域f电子完全杂 化形成巡游重电子 (同时伴随着费米面的重构)。 $f_0 = 1$ 时,体系零温时正好处 于f电子局域性完全消失的量子临界点附近,此处不稳定的巡游重电子可能形 成自旋涨落诱导配对的超导相。

由于体系的磁化率主要由杂化的自旋液体贡献,通过合理地假定自旋液体

动力学磁化率的平均场形式:

$$\chi_{SL}(\mathbf{k},\omega) = \frac{1 - f_{SL}}{1 - zJ_q f_{SL} \chi_0 - i\omega/\gamma_{SL}}.$$
(2.8)

并结合实验的相关测量结果,我们可以定性甚至定量地估计杂化效率 f_0 (详细 内容请查阅引文 [56])。

2.5 二流体理论的微观进展

重费米子二流体模型,从简洁的图像出发,辅以关键的实验物理量,指出 了f电子局域磁矩间的近邻耦合在重费米子物理中的重要作用,发现并描述了 近藤液体的普适标度行为,并通过杂化效率f₀把重费米子正常态和低温有序态 自然衔接起来。这一理论在唯象层面的巨大成功,激发了研究者对二流体理论 的微观机理的研究热情。这一节,我们将简述其相关进展,分为解析进展和数 值进展两部分。

2.5.1 解析进展

2006年,在重费米子二流体理论刚提出不久,Barzykin就尝试从平均场理 论出发进行解释 [57]。他采用隶玻色子表象结合大N极限展开的方法,求解周 期性安德森模型,定义近藤液体权重:

$$f(T) = 1 - Nn_f(\epsilon_f), \tag{2.9}$$

其中 ϵ_f 为重整化的f电子能级, $n_f(\epsilon_f)$ 表示其占据数,N为f电子能级的简并度。 他们认为隶玻色子平均占据数标记了巡游重电子的生成,而平坦的f电子能带 对应于近藤单杂质的贡献(即二流体模型中的自旋液体)。但是,其比热和磁 化率的计算结果并未得到二流体理论所揭示的重电子有效质量的 $\ln T$ 依赖关 系。

注意到施温格玻色子(Schwingerboson)表象有效地描述了局域自旋 之间的磁性耦合,以及局域自旋的费米表象对重费米液体相的成功刻画, Coleman等人于2016年尝试引入自旋的超对称表象把二者结合起来 [58]:

$$S_{\alpha,\beta} = f_{\alpha}^{\dagger} f_{\beta} + b_{\alpha}^{\dagger} b_{\beta}, \qquad (2.10)$$

其中 f^{\dagger}_{α} 和 b^{\dagger}_{α} 分别为费米和玻色产生算符。这一表象的波函数可以由Gutzwiller投影得到:

$$\left|\psi\right\rangle = P_G \left|\psi_F\right\rangle \left|\psi_B\right\rangle,\tag{2.11}$$

公式中 $|\psi_F\rangle$ 和 $|\psi_B\rangle$ 分别描述了波函数的费米和玻色部分。他们计算了两杂质和 有阻挫的三杂质情形,得到了费米子和玻色子共存的混合相的解,但是如何推 广到近藤晶格系统,在具体处理方法上仍需进一步的研究。

上述两类理论工作不失为在二流体微观理论上的有益尝试,但一般平均 场方法限于单离子杂化的描述,却忽略了二流体理论中巡游重电子产生的关 键,即集体杂化效应导致的f电子的近邻耦合。Lonzarich等人在最近的一篇综 述文章中指出 [59],为得到合理的二流体微观描述,可以考虑针对块f电子态 (block f states)的Gutzwiller平均场近似来增强非局域的杂化,并引入f电子 间的近邻海森堡自旋交换作用来增强f电子的近邻磁相互作用。

2.5.2 数值进展

在重费米子二流体理论的微观研究中,也有基于数值计算的诸多工作: 如Jian-Xin Zhu小组基于两杂质数值重整化群(NRG)方法对RKKY温标和近 藤温标的研究比较 [60],Scalettar等人通过行列式蒙特卡罗(DQMC)方法对 周期性安德森模型的磁化率进行奈特位移反常部分的二流体分析 [61]等。这 里我们主要介绍的是2007年,Kotliar小组利用局域密度近似与动力学平均场 相结合(LDA+DMFT)的方法,对CeIrIn₅中4*f*电子退局域化行为的谱权重分 析 [62]。

如图2.5(a)所示:在300K时,他们计算发现Ce元素中的f电子完全局域化, f电子态密度主要分布在-2.5eV和3eV的下Hubbard带和上Hubbard带,谱权重 在费米面附近几乎没有分布。而在50K以下时,f电子开始退局域化,具有了 较弱的色散关系,其态密度在费米面处出现了一个尖锐的窄峰。这个窄峰的高 度随着温度的降低持续增加,表明f电子在费米面处的谱权重不断增大,退局 域化行为不断加强。

图2.5(b)中的实线表示f电子在费米面处准粒子峰的高度随温度的变化,反映了f电子退局域化行为的演化规律。在2008年,Yang等人取实验特征温度 $T^* = 31K$,利用二流体约化态密度公式2.7,对其进行了拟合(如图中点标


图 2.5: (a) CeIrIn₅中Ce的4*f*电子态密度在10K和300K时的LDA+DMFT计算 结果,摘自引文 [62]。(b)近藤液体态密度(点标记)与LDA+DMFT计算 的*f*电子态密度准粒子峰高度随温度演化结果(实线)的比较。摘自引文 [51]。

记所示),发现二者表现出几乎一致的行为。两种研究思路下,对f电子退局域 化行为演化规律的判断不谋而合,表明了二者合理地把握了f电子退局域化的 演化规律。

2.6 本章小结

作为传统而又富有新鲜活力的研究领域,重费米子体系的理论研究一直难 以在纷繁的实验现象中组织提炼出一个统一的理论框架,而最近发展起来的二 流体唯象模型不禁使人看到了些许曙光。这一章我们介绍了重费米子二流体模 型,包括重电子退局域化的特征温度、近藤液体的普适标度行为和基于杂化图 像的二流体相图。二流体唯象模型在实验层面的巨大成功,推动了相关领域的 微观层面的解析和数值研究工作,我们对此也做了部分介绍。

第三章 密度矩阵重整化群数值方法

这一章我们将主要介绍本论文的研究方法部分,即密度矩阵重整化群 (DMRG)数值方法 [63,64]。主要有以下内容:与严格对角化方法和数值重 整化群方法相关的背景知识;DMRG方法本身的流程和特点,如环境块和系 统块的划分以及约化密度矩阵的引入等;构造本论文研究涉及到的Kondo-Heisenberg模型,求解基态波函数的Lanczos算法等。

3.1 背景介绍

DMRG方法的数值计算基础即为矩阵对角化求解本征值,同时它的出现也 离不开数值重整化群方法带来的启示和借鉴,下面我们将简要介绍这两种"先 驱"方法。

3.1.1 严格对角化

在量子力学中,物质的量子态由薛定谔方程求解得到的波函数描述,数学 上对应于希尔伯特空间中的一个矢量。而在凝聚态理论物理中,我们可以使量 子晶格模型在一组基矢下展开,把哈密顿量写为矩阵形式,并求解其本征值 (即波函数),进而获取系统的相关物理量。

例如对一个具有*l*个格点的一维量子晶格模型,一种简便的基矢处理方式 是把它在希尔伯特空间的量子态写为如下形式 [65]:

$$|1\rangle \otimes |2\rangle \otimes \ldots \otimes |l-1\rangle \otimes |l\rangle, \qquad (3.1)$$

其中 $|n\rangle$ 描述的是晶格上第n个格点的态,符号 \otimes 表示对不同格点的态的直乘。 对于自旋S = 1/2的系统, $|n\rangle = |\uparrow\rangle$ 或者 $|\downarrow\rangle$ 。显然,一个格点对应希尔伯特空间的维度是2,n个格点即为 2^{n} ,希尔伯特空间的大小随格点增加呈现出指数增长。

我们再考虑一个作用在n格点处的算符 \hat{O}_n ,它的矩阵元可以表示为:

$$\langle l| \dots \langle 1| \hat{O}_n | 1' \rangle \dots | l' \rangle = \delta_{11'} \dots \delta_{n-1,(n-1)'} \delta_{n+1,(n+1)'} \dots \delta_{ll'} O_{nn'}.$$
(3.2)

其中*O_{nn}*,即为算符*Ô_n*在*n*格点的矩阵元。可以发现,上式中的δ函数使得哈密顿量在整个希尔伯特空间表现为稀疏矩阵的形式,即其绝大部分的矩阵元素都为零。考虑到哈密顿量中的算符大多作用在同一个格点和最近邻的两个格点上,其对应矩阵表现为三对角的形式(哈密顿量的厄米性,保证其元素沿矩阵对角线对称分布)。

由于哈密顿量为稀疏矩阵特别是三对角矩阵的特点,在对矩阵求本征值时 可以采用特殊的方法快捷地求解其基态和低激发态,如我们将在第3.3.2节讨论 的Lanczos方法。但是,因为哈密顿量所在希尔伯特空间还具有随晶格尺寸增 加呈现对数增长的特点,单纯利用对角化方法进行本征值求解受到尺寸的严 格限制,所以还需要发展新的物理思路和算法去处理相关量子晶格模型。接下 来,我们介绍的数值重整化群方法,即是在此基础上的成功尝试。

3.1.2 数值重整化群

重整化群的基本思想是利用连续重整化群变换,逐渐地积掉体系不重要的自由度。在处理单杂质近藤问题时,Wilson以一种数值的方式来实现重整化群 [32]:在单杂质哈密顿量的基础上,不断增加体系自由度,同时利用截断变换处理掉体系的高能态空间,保留体系的低能态空间,以生成新的有效哈密顿量。Wilson首先把近藤杂质问题映射到一维量子杂质模型,一维链的第一个



图 3.1: 数值重整化群算法过程图示。参考自引文 [65]。

格点为杂质部分,剩余半无限链为格点动能(随链长降低)呈对数分立化的 导带电子部分,所有格点间仅有最近邻的相互作用。数值重整化群的过程如 下 [65]:

1、选取包含杂质格点的若干格点作为*H*_L,保证其大小可以严格对角化即可。对角化*H*_L,得到其*m*个最低本征值和本征矢。

2、对 H_L 及相关算符 A_L 做相应的截断变换 $\tilde{H}_L = T_L^{\dagger}H_LT_L$ 及 $\tilde{A}_L = T_L^{\dagger}A_LT_L$,使得体系处在由m个最低能量的本征态所构成的态空间中。

3、对 \tilde{H}_L 增加一个格点形成新的哈密顿量 H_{L+1} 。用 H_{L+1} 代替第一步中的 H_L ,重复迭代过程。如图3.1所示。

4、直到迭代过程达到给定链长时结束运算。



图 3.2: 一维无限深势井(宽度为L和2L)的单粒子低能本征态示意图。

Wilson的数值重整化群方法成功地解决了单杂质近藤问题,但在处理有相互作用的量子晶格问题时却不太理想,其原因就在于重整化过程对边界部分的处理不合理。在连续极限情形下,可以把固定边界条件的一维紧束缚模型描述为:运动粒子在两端具有无穷大势垒的一维深势井中的状态问题。如图3.2所示,其波函数可以表示为 $\psi_n \sim \sin nx\pi/L$,则 H_L 的低能态在边界处趋于零。对于 H_{2L} , ψ_0 在L处不为零。但是由两个 H_L 的低能态来构造 H_{2L} 时,其低能态在L处为零!因此需要 H_L 保留大量的在边界处不为零的高能态,用来构造 H_{2L} 时才能避免数值重整化群方法的失效,而这恰恰与其截断高能态空间的核心思想相违背。

3.2 DMRG简介

在上一节中,我们讨论了严格对角化方法和数值重整化群方法,这一节我 们主要讨论在上述方法基础上发展起来的处理一维问题的DMRG方法,主要包 括四部分:超块与约化密度矩阵、DMRG算法、算符和关联函数以及对称性与 好量子数。

3.2.1 超块与约化密度矩阵

针对数值重整化群方法对边界处理的失效,White把体系(超块: superblock) 分为系统块(system block)和环境块(environment block)两部分,既考虑系 统的性质又考虑环境的影响。而对于如何保留最优目标态的问题,采用了约化 密度矩阵投影的方法 [66,67]。



图 3.3: 系统块和环境块构成超块的示意图。参考自引文 [65]。

如图3.3所示:系统块和环境块构成超块,超块的目标状态|ψ⟩可以表示 为 [63,65]:

$$|\psi\rangle = \sum_{i,j} \psi_{i,j} |i\rangle |j\rangle, \qquad (3.3)$$

其中|i>和|j>分别代表系统块和环境块部分。系统块对应的约化密度矩阵为:

$$\hat{\rho} = \operatorname{Tr}_{E} |\psi\rangle \langle\psi|, \ \rho_{i,i'} = \sum_{j} \psi_{i,j} \psi^{*}_{i',j}, \qquad (3.4)$$

设 ρ 有 N^{S} 个本征值,其正交本征态和本征值分别表示为 $|u_{\alpha}\rangle$ 和 w_{α} ,有

$$\hat{\rho} = \sum_{\alpha=1}^{N^S} w_\alpha |u_\alpha\rangle \langle u_\alpha|, \quad \sum_{\alpha=1}^{N^S} w_\alpha = 1.$$
(3.5)

对于系统块的算符Â, 其期望值为:

$$\langle \hat{A} \rangle = \langle \psi | \, \hat{A} \, | \psi \rangle \, / \, \langle \psi | \psi \rangle = \operatorname{Tr}_{S} \hat{\rho} \hat{A} = \sum_{\alpha=1}^{N^{S}} w_{\alpha} \, \langle u_{\alpha} | \, \hat{A} \, | u_{\alpha} \rangle \,. \tag{3.6}$$

我们把体系的态空间压缩到仅保留 M^{S} 个本征值最大的本征态 $|u_{\alpha}\rangle$,则算符Â的近似期望值为:

$$\langle \hat{A} \rangle_{\text{approx}} = \sum_{\alpha=1}^{M^{S}} w_{\alpha} \langle u_{\alpha} | \hat{A} | u_{\alpha} \rangle, \qquad (3.7)$$

误差为:

$$\left| \langle \hat{A} \rangle_{\text{approx}} - \langle \hat{A} \rangle \right| \leqslant \left(\sum_{\alpha > M^S}^{N^S} w_{\alpha} \right) c_A \equiv \epsilon_{\rho} c_A.$$
(3.8)

当 $\epsilon_{\rho} = 1 - \sum_{\alpha=1}^{M^{S}} w_{\alpha}$ 趋于零时,误差可以忽略。可见,我们只要保证保留的 M^{S} 个约化密度矩阵的最大本征值之和接近1即可,此处理方法也避免了由于尺寸增加导致计算量指数增长的问题。

3.2.2 DMRG算法

通过把体系分为系统块和环境块组成的超块,我们可以采用系统块约化密度矩阵投影的方案获得最优目标态。接下来,我们先以无限体系的算法为例, 具体介绍相关的DMRG算法 [63]:

1、初始化。选取l个格点组成系统块S,在M个基矢 $|M_l^S\rangle$ 上写出哈密顿 量 H_l^S 。对环境块E做类似操作。

2、增加格点。如图3.4所示,在系统块S上增加一个格点(态空间大小为N)形成系统块S',S'的基矢与哈密顿量表示为 $|m_l^S\sigma\rangle = |m_l^S\rangle|\sigma\rangle \pi H_{l+1}^s$,其希尔伯特空间的大小为M * N。类似地生成环境块E'。

3、形成超块。把系统块S'和环境块E'结合形成超块,哈密顿量为H_{2l+2}, 其希尔伯特空间的大小为M² * N²。

4、求解超块基态。利用Lanczos或Davidson方法对角化 H_{2l+2} ,得到基态波函数 $|\psi\rangle$ 和基态能量 E_g 。

5、求解截断矩阵T。利用 $|\psi\rangle$ 生成超块的密度矩阵,求解系统块S'的约化 密度矩阵 ρ 。选取 ρ 中的M个最大本征值对应的本征矢 $|u\rangle$ 作为新的基矢。截断 矩阵T的列包含了 ρ 的最高的M个本征矢。

6、更新哈密顿量。在新的M个基矢上,将 H_{l+1} 更新为 $H_{l+1}^{tr} = T^{\dagger}H_{l+1}T$ (对其他算符做类似处理)。



图 3.4: 密度矩阵重整化群无限体系算法过程示意图。

7、重复2过程。当达到设定链长时,停止无限体系算法过程。

如图3.5所示,DMRG有限体系算法与上述过程类似,主要是固定链长后,系统块和环境块的长度要相对地改变,过程如下 [63]:

1、初始化。总链长为L时,完成无限体系的DMRG步骤,并保留每一步骤中的 \hat{H} 和相关算符,以便在有限体系流程中用来构造相关的哈密顿量。此时环境块E哈密顿量为 H_l (2l + 2 = L)。

2、执行无限体系算法的2-6步。得到环境块哈密顿量*H*_{l'=l+1}。

3、形成新的超块。此时系统块链长为l'' = L - l' - 2,超块由系统块哈密顿量 $H_{l''}$ 、中间两个格点、环境块哈密顿量 $H_{l'}$ 共同构成。

4、增长环境块。重复步骤2-3,直到系统块长度为1,环境块长度为L-3。

5、增长系统块。重复步骤2-5,注意系统块和环境块做互换处理。

6、结束DMRG过程。按收敛条件停止计算,求得系统基态能量和波函数。

以上就是DMRG算法的基本流程。当然,为了提高计算效率,可以对标准DMRG算法流程进行修改:如系统块和环境块的连接部分只保留一个格点,减少计算量 [68];把链长分为并列的几部分,分别做DMRG过程,再合并求解,以利于并行计算 [69]等等。



图 3.5: 密度矩阵重整化群有限体系算法过程示意图。

3.2.3 算符与关联函数

在利用DMRG算法得到系统基态后,我们如何求得相关的算符和关联函数,以研究其物理性质呢?接下来这一小节,我们主要讨论DMRG框架下算符和关联函数的求解。

首先考虑作用在格点*i*上的算符 \hat{O}_i ,其矩阵表达为 $\langle \sigma | \hat{O}_i | \tilde{\sigma} \rangle$ 。当格点*i*加入 到链长为*l*-1的块中时 [63,65]:

$$\langle m_l | \hat{O}_i | \tilde{m}_l \rangle = \sum_{m_{l-1}, \sigma, \tilde{\sigma}} \langle m_l | m_{l-1} \sigma \rangle \langle \sigma | \hat{O}_i | \tilde{\sigma} \rangle \langle m_{l-1} \tilde{\sigma} | \tilde{m}_l \rangle, \qquad (3.9)$$

其中 $|m_l\rangle$ 和 $|m_{l-1}\rangle$ 分别为新块(长度为l)和旧块(长度为l-1)的约化基矢, $\langle m_l | m_{l-1} \sigma \rangle$ 可由求得的密度矩阵本征矢给出。

当上述新块继续增加一个格点时,算符 \hat{O}_i 将作用到基矢 $|m_{l+1}\rangle$ 上,此时:

$$\langle m_{l+1} | \hat{O}_i | \tilde{m}_{l+1} \rangle = \sum_{m_l, \tilde{m}_l, \tilde{\sigma}} \langle m_{l+1} | m_l \sigma \rangle \langle m_l | \hat{O}_i | \tilde{m}_l \rangle \langle \tilde{m}_l \sigma | \tilde{m}_{l+1} \rangle, \qquad (3.10)$$

类似的,我们可以通过对应的密度矩阵本征矢求解 $\langle m_{l+1} | m_l \sigma \rangle$ 。

到最后一步DMRG运算时, |ψ⟩为超块的基态波函数, *i*格点位置处在系统 块, 我们有:

$$\langle \psi | \hat{O}_i | \psi \rangle = \sum_{m^S, \tilde{m}^S, m^E} \left\langle \psi | m^S m^E \right\rangle \left\langle m^S | \hat{O}_i | \tilde{m}^S \right\rangle \\ \times \left\langle \tilde{m}^S m^E | \psi \right\rangle.$$

$$(3.11)$$

对于两点关联函数 $\langle \hat{O}_i \hat{O}_j \rangle$ 的情形,需要考虑 $i \pi j$ 处在同一块或不同块两种情况。若 $i \pi j$ 处于不同块,由单格点算符可得:

$$\begin{split} \langle \psi | \, \hat{O}_i \hat{O}_j \, | \psi \rangle &= \sum_{m^S, \tilde{m}^S, m^E, \tilde{m}^E} \left\langle \psi | m^S m^E \right\rangle \left\langle m^S \right| \hat{O}_i \left| \tilde{m}^S \right\rangle \\ &\times \left\langle m^E \right| \hat{O}_j \left| \tilde{m}^E \right\rangle \left\langle \tilde{m}^S \tilde{m}^E | \psi \right\rangle. \end{split}$$
(3.12)

若i和j处于同一块,我们假设i处在l-1个格点内, j在第l个格点,则有:

$$\langle m_{l-1} | \hat{O}_i | \tilde{m}_{l-1} \rangle, \quad \langle \sigma | \hat{O}_j | \tilde{\sigma} \rangle.$$
 (3.13)

此时两点关联函数可以表示为:

$$\langle m_l | \hat{O}_i \hat{O}_j | \tilde{m}_l \rangle = \sum_{\substack{m_{l-1}, \tilde{m}_{l-1}, \sigma, \tilde{\sigma} \\ \times \langle \sigma | \hat{O}_j | \tilde{\sigma} \rangle \langle \tilde{m}_{l-1} \tilde{\sigma} | \tilde{m}_l \rangle} \langle m_{l-1} | \hat{O}_i | \tilde{m}_{l-1} \rangle$$

$$(3.14)$$

如果求解多点关联函数,可以利用类似的方法计算得到。

3.2.4 对称性与好量子数

假设算符 \hat{S} 与系统的哈密顿量 \hat{H} 满足对易关系: $[\hat{S}, \hat{H}] = 0$, 则算符 \hat{S} 刻 画了体系的某种对称性。此时, 若 $\hat{S} |\psi_1\rangle = s_1 |\psi_1\rangle 以 Q \hat{S} |\psi_2\rangle = s_2 |\psi_2\rangle$, 则 当 $\langle \psi_1 | \hat{H} | \psi_2 \rangle = 0$ 时, 有 $s_1 \neq s_2$, 即 \hat{H} 不能联系两个具有不同好量子数的态空 间。可见, 由于物理系统本身所具有的对称性, 因而在处理相关哈密顿量时, 可以分别在由不同好量子数刻画的希尔伯特子空间进行, 以减少数值上的计算 量, 并保证物理结果的可靠性。

为了标记好量子数,在DMRG计算过程中,需要额外引入一组向量,并 且在每次生成新的哈密顿量时,更新向量。一般而言,最常用的好量子数即 为刻画U(1)对称性的总粒子数 N_{tot} 和总自旋的z分量 S_{tot}^z 。等价地,我们也可以 采用自旋向上的总粒子数 N_{\uparrow} 和自旋向下的总粒子数 N_{\downarrow} ,满足 $N_{tot} = N_{\uparrow} + N_{\downarrow}$ 和 $S_{tot}^z = 1/2(N_{\uparrow} - N_{\downarrow})_{\circ}$

在DMRG计算中,另外一种常用的对称性是描述自旋旋转对称性的SU(2)对称性(无外加磁场) [70,72],具体涉及到基矢更新时Clebsh-Gordan(CG)系数的求解,以及对算符的优化可以采用Wigner-Eckart定理 [71]。对于两组基矢做外积,新基矢为 [70]:

$$|jm(j_1j_2\alpha_1\alpha_2)\rangle = \sum_{m_1,m_2} C^{j_1j_2j}_{m_1m_2m} |j_1m_1(\alpha_1)\rangle |j_2m_2(\alpha_2)\rangle, \qquad (3.15)$$

其中 $C_{m_1m_2m}^{j_1j_2j}$ 为CG系数, j和m分别为总自旋量子数和其z分量量子数, 指标 "1"和"2"分别标记系统和环境, α 标记了DMRG计算中给定量子数(j,m)后 的第 α 个基矢。对于系统的密度矩阵表示为:

$$\rho = \sum_{m,\alpha',\alpha} \left| jm(\alpha') \right\rangle \psi_{jm(\alpha')} \psi^*_{jm(\alpha)} \left\langle jm(\alpha) \right|, \qquad (3.16)$$

公式中 $|\Psi\rangle = \sum_{\alpha} \psi_{jm(\alpha)} | jm(\alpha) \rangle$ 为总自旋的本征态。利用公式3.15,把环境块基矢求和掉,可得系统块部分的约化密度矩阵:

$$\rho_{j_1}^S(\alpha_1',\alpha_1) = \sum_{m_1,j_2,m_2,\alpha_2} \psi_{j_1m_1(\alpha_1');j_2m_2(\alpha_2)} \psi_{j_1m_1(\alpha_1);j_2m_2(\alpha_2)}^*.$$
(3.17)

这里,把一般DMRG算法的 $(2j_1 + 1)$ 重简并分别标记,且当 $j_1 = 0$ 时,退化到一般情形。

利用Wigner-Eckart定理,可以把算符指标中的量子数m用CG系数代替:

$$\langle j'm'(\alpha')|\mathbf{T}_{M}^{J}|jm(\alpha)\rangle = C_{mMm'}^{jJj'}\langle j'(\alpha') \parallel \mathbf{T}^{J} \parallel j(\alpha)\rangle, \qquad (3.18)$$

其中 \mathbf{T}_{M}^{J} 为2J + 1阶张量算符 \mathbf{T}^{J} 的第M个分量, $\langle j'(\alpha') \parallel \mathbf{T}^{J} \parallel j(\alpha) \rangle$ 为与量子数m无关的约化矩阵元, $\parallel j(\alpha) \rangle$ 为相应的一组完备的约化基矢。同时, 超块的 波函数可写为:

$$\|\psi\rangle = \sum_{j_1 j_2 \alpha_1 \alpha_2} \|j_1(\alpha_1)\rangle \|j_2(\alpha_2)\rangle, \qquad (3.19)$$

$$|| j_1 \rangle \otimes || j_2 \rangle = || |j_1 - j_2| \rangle \oplus \dots \oplus || j_1 + j_2 \rangle.$$
(3.20)

_ 衣 5.1: 见膝-					
二进制数	十进制数	导带电子态	f电子态		
0010	2	>	$ _{} \uparrow_{-} \rangle$		
0011	3	$ _{}\uparrow\rangle$	$ _{}\uparrow_{-}\rangle$		
0110	6	$ - \downarrow \rangle$	$ _{} \uparrow_{-} \rangle$		
0111	7	$ _ \downarrow _ \uparrow \rangle$	$ _{} \uparrow_{-} \rangle$		
1000	8	>	$ \downarrow\rangle$		
1001	9	$ _{}\uparrow\rangle$	$ \downarrow\rangle$		
1100	12	$ -\downarrow\rangle$	$ \downarrow\rangle$		
1101	13	$ _\downarrow_\uparrow\rangle$	$ \downarrow\rangle$		

表 3.1: 近藤-海森堡模型单格点基矢的表示

相关的约化密度矩阵简写为:

$$\rho_{j_1}^S(\alpha_1'\alpha_1) = \sum_{j_2,\alpha_2} \psi_{j_1\alpha_1';j_2\alpha_2} \psi_{j_1\alpha_1;j_2\alpha_2}^*.$$
(3.21)

作用在不同块的算符的张量积 $\mathbf{T}^{k_1} \otimes \mathbf{U}^{k_2}$ 可以通过Wigner系数表示为:

$$\langle j'(\alpha_1'\alpha_2'j_1'j_2') \parallel [\mathbf{T}^{k_1} \otimes \mathbf{U}^{k_2}]^k \parallel j(\alpha_1\alpha_2j_1j_2) =$$
(3.22)

$$\begin{bmatrix} j_1 & j_2 & j \\ k_1 & k_2 & k \\ j'_1 & j'_2 & j' \end{bmatrix} \langle j'_1(\alpha'_1) \parallel \mathbf{T}^{k_1} \parallel j_1(\alpha_1) \rangle \langle j'_2(\alpha'_2) \parallel \mathbf{U}^{k_2} \parallel j_2(\alpha_2) \rangle.$$
(3.23)

其中[…]为相关的9*j*系数 [71]。通过以上的构造,所有的DMRG步骤都可以通过约化基矢表示。

3.3 哈密顿量的构造和本征值求解

3.3.1 自然基构造近藤-海森堡模型

为了对具体的晶格模型进行计算,需要构造相应哈密顿量所需算符的矩阵 形式,这是基于对角化数值方法的共同步骤。这一小节我们以本论文主要关注 的近藤-海森堡模型为例,讨论如何定义相关基矢和算符。

计算机的基本语言是二进制的"0"和"1",我们采用二进制数为基矢 (即所谓自然基),定义相关模型的单格点的态空间。我们假定一个比特为"0"

	c^{\dagger}_{\uparrow}	c^{\dagger}_{\downarrow}	S_f^+	S_f^z
$ 0010\rangle$	$ 0011\rangle$	$ 0110\rangle$	0	0.5 0010 angle
$ 0011\rangle$	0	$- 0111\rangle$	0	0.5 0011 angle
$ 0110\rangle$	$ 0111\rangle$	0	0	0.5 0110 angle
$ 0111\rangle$	0	0	0	0.5 0111 angle
$ 1000\rangle$	$ 1001\rangle$	$ 1100\rangle$	$ 0010\rangle$	$-0.5 1000\rangle$
$ 1001\rangle$	0	$- 1101\rangle$	$ 0011\rangle$	$-0.5 1001\rangle$
$ 1100\rangle$	$ 1101\rangle$	0	$ 0110\rangle$	$-0.5 1100\rangle$
$ 1101\rangle$	0	0	$ 0111\rangle$	$-0.5 1101\rangle$

表 3.2: 近藤-海森堡模型单格点基矢在算符 c_1^{\dagger} 、 c_1^{\dagger} 、 S_f^+ 和 S_f^z 作用下的变化

表示电子空占据,为"1"表示电子满占据,由于电子具有上下自旋,这样我 们只需要两个比特就可以描述一个单格点上的电子。这里统一规定二进制较低 位数描述自旋向上的电子,较高位数描述自旋向下的电子。对于导带电子(即 为单带Hubbard模型),有四种占据情况:

$$|00\rangle = |__\rangle, \quad |01\rangle = |_\uparrow\rangle, \quad |10\rangle = |\downarrow_\rangle, \quad |11\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle, \quad (3.24)$$

分别对应电子空占据,自旋向上的电子单占据,自旋向下的电子单占据,自旋 向上和自旋向下的电子双占据。

因为近藤-海森堡模型同时具有导带电子和f电子,故其单格点态空间需要 四个比特的二进制描述。同时考虑到f电子作为局域磁矩,只有自旋向上或自 旋向下的电子单占据两种情形,共可以写出八种状态,如表3.1所示。

接下来,我们将算符 c_{\uparrow}^{\dagger} 、 c_{\downarrow}^{\dagger} 、 S_{f}^{+} 、 S_{f}^{z} 作用到这组基矢上,结果如表3.2所 示。以自旋上升算符为例: $S^{+}|\downarrow\rangle = \sqrt{(j-m)(j+m+1)}|\uparrow\rangle$,对于电子态 $|\downarrow\rangle$, j = 1/2, m = -1/2,其对应的系数为1。这样我们就可以顺利的写出四个算符 的矩阵形式,进而构造相应的哈密顿量。需要注意的是,导带电子算符作用后 的基矢系数有为负数的情形,这是由于费米符号的影响。对于电子自旋向下的 产生算符c[†],其矩阵表示为:

对于f电子的自旋z分量 S_f^z ,我们可以得到类似的矩阵表示:

$$S_{f}^{z} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$
 (3.26)

3.3.2 lanzcos算法求解基态波函数

除了物理上的独特处理,DMRG算法本质上是对角化求解本征值。针对哈密顿量矩阵具有稀疏性和厄米性的特点,我们可以采用Lanzcos算法求解哈密顿量基态波函数 [73]。

Lanzcos算法的主要思路是利用变换矩阵V,把维数较大的哈密顿量矩阵H化为等效的、维数较小的三对角矩阵T,三对角矩阵的本征值即为所求哈密顿量矩阵的本征值。即:

$$V^{\dagger}HV = T, \quad V^{\dagger}V = 1, \tag{3.27}$$

$$T = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & & \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \\ & \beta_2 & \alpha_3 & \beta_3 & \\ & & \ddots & \ddots & \\ & & & \ddots & \ddots \end{pmatrix}.$$
(3.28)

我们把变换矩阵写为一系列列向量的形式: $V = (v_1, v_2, v_3, ..., v_N)$ 。由于:

$$HV = VT, (3.29)$$

有:

$$Hv_{1} = \alpha_{1}v_{1} + \beta_{1}v_{2},$$

$$Hv_{2} = \beta_{1}v_{1} + \alpha_{2}v_{2} + \beta_{2}v_{3},$$
...
$$Hv_{N} = \beta_{N-1}v_{N-1} + \alpha_{N}v_{N} + \beta_{N}v_{N+1}.$$
(3.30)

我们选取v1为单位向量, 使得:

$$\alpha_1 = v_1^{\dagger} H v_1, \tag{3.31}$$

由于H的厄米性, α_1 为实数, 接下来利用 $v_2^{\dagger}v_2 = 1$ 并计算:

$$\beta_1 v_2 = H v_1 - \alpha_1 v_1, \tag{3.32}$$

可求得β1和v2。类似地,我们可以计算:

$$\alpha_{i} = v_{i}^{\dagger} H v_{i}, \quad \beta_{i} v_{i+1} = H v_{i} - \beta_{i-1} v_{i-1} - \alpha_{i} v_{i}.$$
(3.33)

通过迭代求解,最后我们可以得到变换矩阵V和三对角矩阵T。这里,显然有:

$$v_1^{\dagger}v_2 = 1/\beta_1[v_1^{\dagger}(Hv_1 - \alpha_1 v_1)] = 1/\beta_1(\alpha_1 - \alpha_1) = 0.$$
(3.34)

通过数学归纳法,可以证明所有的Lanczos向量保持正交: $v_i^{\dagger}v_j = \delta_{ij}$ 。

需要注意的是,初始向量v₁的选择要保证与基态波函数不完全正交。另外, 当计算的Lanczos向量数目足够多时,其正交性可能无法保证,因而需要对一 般的Lanczos算法进行改进。

3.4 本章小结

在本章中,我们首先介绍了DMRG数值方法的背景知识,包括同样是基于 解矩阵本征值问题的严格对角化方法和数值重整化群方法。接着,我们重点讨 论了DMRG方法的基本流程和主要特点,其中超块的构造和基于约化密度矩阵 本征矢的基矢变换是其核心内容。我们还介绍了DMRG方法涉及到的算符和 关联函数的计算,以及利用对称性对哈密顿量矩阵作块对角化处理。最后从 算法实现的角度,我们讨论了如何构造近藤-海森堡模型的相关算符,如何利 用Lanczos方法求解基态波函数。

第四章 一维近藤-海森堡模型局域与巡游的相互作用

作为重费米子体系二流体理论的微观探索之一,这一章我们主要介绍一维 近藤-海森堡模型中的电子局域与巡游双重行为的研究工作。此工作采用了处 理一维问题十分有效的DMRG数值方法,通过动量空间关联函数的分析,提供 了*f*电子退局域化程度的基于谱权重转移的一种微观描述。本章主要分为以下 部分:概述、模型与方法、结果与分析以及讨论等。

4.1 概述

我们在第二章中详细谈到:基于f电子局域性与巡游性共存的想法, Yang和Pines等建立了统一描述重费米子材料多种实验现象的二流体唯象理 论,并发现了巡游重电子遵循的对数温度依赖的普适标度行为 [47-49,51]。该 理论认为:重费米子体系存在着两种既共存又竞争的量子液体,由部分杂化 的f电子构成的自旋液体,以及导带电子与局域自旋磁性涨落通过集体杂化形 成的复合态--近藤液体。二流体理论为理解重费米子物理提供了一个简洁的 理论框架,同时也指出了一个可能的解决近藤晶格问题的途径。

在二流体理论的微观机理发展方面,虽然人们进行了许多尝试(参见2.5节)[57-62],但是需要继续探索和努力的地方仍然很多。如为了处理近藤晶格的集体杂化和f电子近邻耦合行为,必须要超出平均场理论的框架并引入长程关联效应。在这个工作中[74],为了有效地处理电子关联效应,我们拟采用DMRG数值方法[63,66,67]求解一维近藤-海森堡模型[75,76],讨论f电子局域与巡游行为的相互作用。我们认为在一维情况下,系统的磁性涨落得到加强,促进了集体杂化,二流体行为仍然存在。

近藤-海森堡模型包含导带电子和局域自旋两部分,利用DMRG计算不同 近藤耦合下导带电子的动量分布以及局域自旋的自旋关联谱,进而可以获得两 部分的微观演化行为。我们希望,能给出f电子巡游和局域二重性同时存在的 证据以及相关的微观语言和图像,同时引入相关物理量定量描述f电子的巡游 化程度。

4.2 模型与方法

我们采用以下的一维近藤-海森堡模型:

$$H = -t \sum_{n=1}^{N-1} \sum_{\sigma=\pm} \left(c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{n+1,\sigma} + \text{H.}c. \right) + J_K \sum_{n=1}^{N} \mathbf{s}_n \cdot \mathbf{S}_n + J_H \sum_{n=1}^{N-1} \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1}, \qquad (4.1)$$

其中*t*是导带电子的跃迁参数, $J_K > 0$ 是导带电子和局域自旋之间的在位反 铁磁近藤耦合, $J_H > 0$ 是自旋链内的最近邻海森堡交换耦合。S为局域自旋 的自旋算符, $c_{n,\sigma}^{\dagger}(c_{n,\sigma})$ 产生(湮灭)一个在第*n*个格点的自旋为 σ 的导带电子, $\mathbf{s}_n = \sum_{\alpha,\beta} c_{n,\alpha}^{\dagger}(\sigma/2)_{\alpha,\beta} c_{n,\beta}$ 是其自旋算符(σ 为泡利矩阵)。在导带电子偏离半满 且 $J_H = 0$ 时,局域自旋能够产生铁磁关联,所以我们设定 $J_H/t = 0.5$ 来抑制铁 磁关联的产生[77]。

我们利用改进后的DMRG++程序包进行计算 [78],主要计算格点数N = 50的情形,采用了开边界条件,同时每个DMRG块保留500个态(我们保留不同态的数目,确认了结果的稳定性)。针对不同链长(N = 30, 50, 80),我们核对了计算结果的收敛性(详见第4.3.3小节)。我们采用的好量子数为导带电子的平均占据数 $n^c = N^{-1} \sum_{n\sigma} c_{n\sigma}^{\dagger} c_{n\sigma}$,以及总自旋的z分量 $S_{tot}^z = \sum_n (s_n^z + S_n^z)$ (当取 $J_H/t = 0.5$ 时, $S_{tot}^z = 0$)。

4.3 结果与分析

这一节我们将从动量空间的关联函数分析、杂化效率的一种微观定义以及 尺寸效应分析等三方面介绍DMRG的计算结果,重点讨论局域自旋局域与巡游 共存的现象以及其巡游化程度的定量微观描述。

4.3.1 动量空间的关联函数分析

我们首先研究导带电子的动量分布函数:

$$n_k = \frac{1}{N} \sum_{n,m,\sigma} e^{ik(n-m)} \langle c_{n,\sigma}^{\dagger} c_{m,\sigma} \rangle.$$
(4.2)

图4.1(a)显示了 $n^c = 0.72$, $J_H/t = 0.5$ 时, n_k 随 J_K 增大的变化。 J_K 较小时, n_k 从布里渊区中心的满占据突变为边界处的零占据情形; J_K 较大时, n_k 在



图 4.1: (a) 导带电子动量分布 n_k ; (b) n_k 的导数 dn_k/dk 。参数为 $n^c = 0.72 \pi J_H/t = 0.5$ 。图中虚线分别标记了小费米面和大费米面的波矢 $k_F^S = 0.36 \pi \pi k_F^L = 0.86 \pi$ 。摘自引文 [74]。

布里渊区中心的占据变小,且零占据临界处的k位置变大。我们进一步计算 了 n_k 的导数 dn_k/dk ,结果如4.1 (b)所示。在 J_K 较小时,在 $k_F^S = \frac{\pi}{2}n^c = 0.36\pi$ 处出现了明显的峰(对应 n_k 最大变化),对应了导带电子形成的小费米面。 在 $J_K/t = 2.3\pi 2.6$ 时,由于导带电子与局域自旋的耦合,此峰逐渐消失, 在 $J_K/t > 2.6$ 时 $k_F^L = 0.86\pi$ 处又出现了一个新的峰。计算表明 $k_F^L = (1 + n^c)\pi/2$, 恰好对应了所谓的包含了局域磁矩的大费米面。当进一步地增加 J_K 时, n_k 曲线 几乎不再变化,表明体系已进入拥有稳定大费米面的强耦合极限。此现象可做 如下解释:每个局域自旋与一个导带电子形成一个近藤单态,等效的看,系统 每个格点即有 $1 - n^c$ 空穴在近藤单态的背景下运动,因而运动空穴对应的费米 波矢为 $k^h = \pi - \pi(1 - n^c)/2 = k_F^L$ 。在 $J_K/t = 2.6$ 附近的中间区域,导带电子分 布在整个布里渊区,因而没有良好定义的费米面。此时,导带电子和局域自旋 处于较强的非局域集体杂化,但是没有形成自旋单态。



图 4.2: (a) 局域自旋的自旋关联谱。(b) 局域自旋与导带电子的杂化谱。 参数为 $n^c = 0.72\pi J_H/t = 0.5$ 。插图示意 S^{ff} 在 $J_K = 0$ 与有限 J_K 处的面积 差 $A(J_K)$,用于 $f_A(J_K)$ 的计算。摘自引文 [74]。

当*J_K*增大时,伴随着导带电子在布里渊区重新分布,自旋链中的自旋关联 谱*S^{ff}*(*k*)也会改变。定义如下:

$$S^{ff}(k) = \frac{1}{N} \sum_{n,m} e^{ik(n-m)} \langle \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_m \rangle.$$
(4.3)

如图4.2 (a) 所示: 在 $J_K = 0$ 时,局域自旋与导带电子没有耦合,在自旋链内 形成了一个整体的自旋单态;我们在 $k_0 = \pi$ 处发现了一个很强的反铁磁涨落峰, 与一维海森堡模型连续极限情形相符。增大 J_K , k_0 处的峰逐渐被抑制,表明局 域自旋开始与导带电子发生杂化。在 $J_K/t = 2.3$ 时, $k_1 = 0.28\pi n k_2 = 0.72\pi 处$ 出现了两个新的峰。但是,进一步增加 J_K 时, k_2 处的峰被抑制,只有 k_1 逐渐增 长,最终达到饱和。当 $J_K/t > 4$ 时,自旋关联谱分布基本不再改变,体系进入 强耦合极限。 类似的现象也在杂化谱S^{cf}(k)中出现,定义如下:

$$S^{cf}(k) = \frac{1}{N} \sum_{n,m} e^{ik(n-m)} \langle \mathbf{s}_n \cdot \mathbf{S}_m \rangle.$$
(4.4)

如图4.2(b)所示,我们也发现了 $k_2 = 2k_F^S = 0.72\pi$ 处有一个峰,此峰来源于小费米面附近的导带电子产生的有效交换耦合作用,在 $k_1 = 2\pi - 2k_F^L = 0.28\pi$ 处出现的峰则与大费米面的形成有关。

4.3.2 杂化参数的微观定义

结合n_k与S^{ff}(k)的结果,我们发现重电子态是导带电子和局域自旋的复合态。随J_K增加,S^{ff}(k)和S^{cf}(k)曲线的逐渐变化反应了自旋链内反铁磁关联的抑制,以及大费米附近复合重电子态的出现。此外,在J_K/t = 2.3处自旋关联 谱中出现的三个峰意味着重电子产生于部分杂化的局域自旋背景下,它同时与 导带电子以及其它自旋产生纠缠以最大限度的分散他们的磁熵。从宏观来看, 巡游重电子和剩余局域磁矩的共存可以反映到热力学与磁性的测量上,图4.3即 是一个f电子局域与巡游双重性的示意图。



图 4.3: 二流体行为的图像说明。在弱耦合和中间耦合区域, 杂化参数 $f_h < 1$, 局域自旋部分地与导带电子发生纠缠。摘自引文 [74]。

在近藤-海森堡模型中的局域自旋,尽管它们会通过集体杂化参与形成重 电子而表现出巡游的行为,但它们依然是局域着的自旋。它们的自旋关联谱满 足以下求和法则 [79]:

$$\int_{0}^{\pi} \frac{dk}{\pi} S^{ff}(k) = \frac{1}{N} \sum_{n} \langle \mathbf{S}_{n}^{2} \rangle = \frac{3}{4}.$$
 (4.5)

上述公式意味着总的谱权重是与耦合强度无关的守恒量,我们可以考虑利用谱 权重的结构分布去分析局域自旋的局域性或巡游性的比重。可是从图4.2(a) 中可知,二者在动量空间对应的k₀和k₁混合在一起,因而难以区分开来。



图 4.4: (a) 建议的杂化参数 f_A , 平均杂化强度 f_S 以及 $|dn_k/dk|$ 的最大值随 J_K 变化图; (b) f_A 与归一化的反铁磁关联能 f_E 随 J_K 变化的比较。摘自引文 [74]。

我们注意到,局域自旋在 $J_K = 0$ 时形成了自旋液体,但是在大 J_K 区域表现 出完全的巡游性。考虑到求和法则,随着 J_K 增大,自旋液体态到重电子态的转 变过程,可以看作是自旋关联谱曲线的形变联系了这两个极限情况。因而我们 定义如下:

$$f_A(J_K) = \frac{A(J_K)}{A(J_K/t=6)},$$
(4.6)

其中 $A(J_K)$ 代表某 J_K 处的自旋关联谱相对 $J_K/t = 0$ 处的谱权重相对转移,近似 对应于曲线 $S^{ff}(k)$ 在某 J_K 处与 $J_K/t = 0$ 处的包围面积(如图4.2(a)所示)。尽 管 f_A 不是真实的演生重电子的谱权重,我们把它作为一个近似合理的出发点。

作为比较,我们计算了局域杂化 $\langle \mathbf{s}_n \cdot \mathbf{S}_n \rangle$,定义如下:

$$f_S(J_K) = \frac{N^{-1} \sum_n \langle \mathbf{s}_n \cdot \mathbf{S}_n \rangle_{J_K}}{-3n^c/4}, \qquad (4.7)$$

其中 $-3n^c/4$ 为强耦合极限下的平均局域杂化。 $f_A = f_S$ 的结果如图4.4 (a),二



图 4.5: (a) 动量分布 n_k ; (b) 局域自旋的关联谱 $S^{ff}(k)$; (c) 杂化参数 f_A 、 $f_E 以 及 | dn_k/dk |$ 的最大值随 J_K 的变化。参数设定为 $J_H/t = 0.5$, N = 50以 $D_R^c = 0.2 \pi 0.4$ 。(d) 动量分布; (e) 自旋关联谱; 以及 (f) 参数 f_A 、 f_E 以 $D_k | dn_k/dk |$ 最大值随 J_K 的变化。对应参数为 $N = 30,50 \pi 80$, $J_H/t = 0.5$, $n^c = 0.72$ 。修改自引文 [74]。

者随 J_K 增加而增大,显示出定性的符合。他们的区别可以由 $S^{cf}(k)$ 对k的较强 依赖来理解。如图4.2 (b),当 J_K 增大时,从 $k_0 = \pi \Im k_1 = 0.28\pi$ 体系的杂化会 发生改变,表现出非局域的集体行为。因此, f_S 不是一个很好的测量局域自旋 巡游性权重的物理量。如图4.4 (a)所示,当 $S^{ff} \xrightarrow{c} J_K/t > 2.6$ 时已达到饱和, f_A 也趋近于1,但是平均局域杂化 f_S 仍然随着 J_K 增大。

我们现在关注*f*_A的行为,并思考它是否是一个描述集体杂化的好的参数,并且能够给我们提供杂化系统的哪些信息。在二流体理论中,杂化参数*f*_h描述了*f*电子中巡游性的权重,同时在决定系统基态性质和正常态热力学和磁性行

为中扮演了核心角色。当 $f_h < 1$ 时,f电子会保留部分的局域性直到零温,进 而形成长程磁序;而当 $f_h = 1$ 时,所有的f电子完全巡游化,系统基态可能为 费米液体态。在退局域化的量子临界点,导带电子的费米面会出现突变以形成 包含局域f电子的大费米面,同时还可能产生超导。如果 f_A 是对杂化参数 f_h 的 良好近似,它应该也与反铁磁以及费米面的改变相关。

考虑到由于一维近藤-海森堡模型中强的量子涨落,反铁磁长程序被抑制, 我们研究反铁磁关联能:

$$E_H(J_K) = J_H \sum_n \langle \mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_{n+1} \rangle.$$
(4.8)

我们也发现了 $E_H(J_K)$ 在 $J_K/t \ge 4$ 时,趋于饱和。作为比较,我们把 $J_K/t = 6$ 作为非磁性基态的一个参照,并定义:

$$f_E(J_K) = \frac{E_H(J_K) - E_H(0)}{E_H(J_K/t = 6) - E_H(0)}.$$
(4.9)

图4.4(b)比较了具有不同 n^c 和 J_H 时系统的 f_E 和 f_A ,对于所有情况,我们发现 二者十分吻合。这表明, f_A 很好地描述了自旋链中反铁磁关联随杂化增强时的 抑制程度。这一结论同时在自旋链具有次近邻耦合的阻挫情形下仍然成立。

在重费米子材料中,在反铁磁序的量子临界点附近已经观测到了费米面的 突变 [80,81]。但是在一维系统中,精确的转变位置仍存在争议。某些理论分析 表明费米面的变化发生在 $J_K = 0$ 处 [82],而DMRG的数值结果显示转变位于有 限 J_K 处 [77,95]。此处我们不试图去解决这一问题,仅仅想指出我们的结果显 示 f_A 和导带电子在布里渊区的重新分布密切相关。正如图4.4(a)所示,在临 界耦合 $J_K/t = 2.8$ 处, f_A 接近1,同时与 n_k 斜率被抑制到几乎为零的位置相符合 (如图4.1(b)所示,对应 k_F^S 到 k_F^L 的突变)。

4.3.3 补充计算

如图4.5(a)所示,对于 $n^c = 0.2 \pi n^c = 0.4$ 的情形,取 $J_K/t = 0,2,6$,尽管 n^c 较小时导带电子对局域自旋的屏蔽作用会降低,但仍然出现了导带电子费米面随 J_K 增大而体积增加的行为。在图4.5(c)中,我们画出了上文推断的杂化参数 $f_{A/E}$ 随 J_K 的变化。他们表现出几乎一致的行为:在费米面突变的磁性临界点处趋近饱和。这些结果表明:伴随着大费米面出现的重电子的生成,具有

导带电子和局域自旋涨落的复合性质;而近藤晶格的集体杂化行为也超出了局 域近藤耦合的图像。

我们还补充计算了不同链长下的相关结果。图4.5(d)、(e)和(f)比较 了晶格尺寸为N = 30, 50, 80的三种结果(仍设 $J_H = 0.5, n^c = 0.72$)。我们发现 在不同尺寸情形下, $n_k n S^{ff}(k)$ 几乎不变, $f_A = f_E$ 也十分吻合,表明了我们的 数值结果对不同尺寸的收敛性。对于 $|dn_k/dk|$ 在N = 30, 50和80表现出的不一 致,来源于在费米面附近动量分布的奇异点斜率($J_K = 0$ 时)随尺寸增加而增 大的行为。然而, $f_{A/E}$ 的饱和值处仍然与 $|dn_k/dk|$ 的最大值处表现出一致的对 应关系。

4.4 讨论

由于还没有满意的理论和数值计算能够定量地解释相关实验现象,二流体 模型从直观和唯象的角度十分成功地提供了一种组织各种复杂实验数据的方 案。本章相关结果的分析和对比表明,*f*_A体现了二流体模型中杂化参数的诸多 性质,可以作为其良好近似。基于此,我们的工作首次对二流体唯像模型提供 了可能的微观描述。在较小*J*_K值时,我们观察到反铁磁自旋关联增强了集体杂 化的行为,突破了前人对二者只存在简单竞争关系的认识,对相关微观理论的 探索具有积极意义。实验上,上述动量依赖的增强的退局域化行为可以通过扫 描隧道谱和角分辨光电能谱来观测检验 [84,85]。

应该指出,在动量空间,电子巡游与局域两组分对自旋关联谱表现出的 纠缠行为,使得精确地确定它们的谱权重转移变得困难(特别是图4.4 (b)所 示n^c = 0.92的情形)。当磁性浓度较小时,大部分的局域自旋被移除,反铁磁 自旋关联因而被抑制,二流体的分离现象可能消失。不管怎样,我们相信我 们的工作是研究f电子退局域化行为微观起源的一个良好出发点。我们的结果 表明二流体行为起源于局域自旋与导带电子的集体杂化和部分的纠缠,基于 大N展开的平均场近似已不再是描述巡游重电子的好的图像。这里要强调的 是,重电子的生成不是一个相变过程,与Mermin-Wagner定理 [86] 亦相符合。 我们的结果也可以延生到与实际材料更相关的高维和有限温度情形,由于方法 的限制,本论文不再做相关问题的讨论。

一个更好的研究二流体行为的方式是,针对动力学自旋关联函数的计算。 最近,中子散射实验在铁基超导中也发现了类似的局域与巡游共存的二流体现 象,二者在能量尺度上表现出较明显的分离分布。我们建议可以通过重费米子 材料的中子散射实验直接探测体系的二流体行为。

4.5 本章小结

本章主要讨论了DMRG方法针对一维近藤-海森堡模型中局域与巡游行为 相互作用的研究。我们观察到了局域自旋巡游与局域共存的双重属性,正如自 旋关联谱的多峰结构所显示的,它起源于局域自旋与自旋链内的其他自旋以及 巡游的导带电子之间的共同纠缠。我们建议此自旋关联谱的谱权重转移f_A作为 测量二流体唯象模型杂化参数的候选物理量,并确认了f_A与费米面的改变与反 铁磁的抑制相联系。我们的结果提供了一种关于f电子局域与巡游二重性的微 观理解,对二流体物理相关实验和理论的进一步探索具有借鉴意义。

第五章 一维近藤-海森堡模型中近藤空穴诱导的杂化振荡

在这一章中,我们考虑在一维近藤-海森堡模型中引入一个近藤空穴 (Kondo hole,去掉链中央的局域磁矩),考察在关联电子背景下,单个局 域f电子对整个体系的导带电子电荷密度分布、导带电子与局域自旋的杂化以 及局域自旋反铁磁关联的影响。本章主要分为以下内容:概述、模型与方法、 导带电子非半满情形以及半满情形,最后是讨论部分。

5.1 概述

在一个能量尺度较低的范围内(低于几十开尔文),通过改变压强、化学 掺杂以及外加磁场等外界参量,重费米子体系基态能够演生出许多新奇的量子 现象,如量子临界点[8,9]、非常规超导[4,5]和巡游重电子[49,56]等。近些年 来,通过在重费米子体系中引入杂质或缺陷,提供了一个新的方式和角度去理 解重费米子基态的关联电子杂化行为。特别是最近在近藤空穴系统杂化波的研 究中,实验和理论上都有许多进展[87-91]。

在2011年的基于平均场理论的研究论文中 [87],作者指出近藤空穴导致了 导带电子密度分布和局域杂化的波类型的空间振荡衰减行为。研究还发现,相 关振荡波的特征波长唯一决定于未杂化的导带电子费米波矢。这一发现被随后 的针对U_{0.99}Th_{0.01}RuSi₂材料的谱成像扫描隧道显微镜(spectroscopic imaging scanning tunneling microscopy,即SI-STM)实验所证实 [88]。然而,为了充分 考虑近藤空穴系统中局域磁矩的磁关联效应,以及局域磁矩与导带电子的集体 杂化行为,需要超出平均场框架的研究方法。

在这个工作中,我们采用DMRG数值方法 [63,66,67]研究一维近藤-海森堡 模型中的近藤空穴问题。与早期DMRG相关工作侧重系统的磁和输运行为不 同 [92,93],我们主要关注近藤空穴导致的相关物理量的空间振荡行为,尤其是 杂化振荡的特点。利用处理一维强关联问题十分有效的DMRG方法,我们研究 了不同近藤耦合强度*J_K*和导带电子平均占据数*n^c*下,杂化波的长程振荡衰减行 为,考察局域*f*电子和导带电子各自对重费米子体系杂化过程的影响。

5.2 模型和方法

我们采用的哈密顿量为近藤-海森堡模型:

$$H = -t \sum_{i=1}^{N-1} \sum_{\sigma=\pm} \left(c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i+1,\sigma} + \text{H.}c. \right) + J_K \sum_{i=1}^{N} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{S}_i + J_H \sum_{i=1}^{N-1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1},$$
(5.1)

公式中求和符号 \sum '包括近藤空穴外的所有晶格格点。我们去除链中心的两个局域自旋($i_h = N/2, N/2 + 1$)作为近藤空穴。在我们的DMRG计算中[78],考虑开放边界条件,格点数取N = 100的情况,每个DMRG块保留态的数目为800,并检验了不同链长和态数目下计算结果的收敛性。

我们引入导带电子电荷密度 n_i^c 、局域杂化 \mathcal{V}_i 和局域自旋最近邻自旋关联函数 χ_i 等物理量:

$$n_i^c = \sum_{\sigma} \langle c_{i,\sigma}^{\dagger} c_{i,\sigma} \rangle, \qquad \mathcal{V}_i = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \rangle, \qquad \chi_i = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1} \rangle. \tag{5.2}$$

其中局域杂化*V_i*反映了局域自旋与导带电子的杂化行为,其在实空间的振荡衰 减行为即称之为杂化波。为了研究近藤空穴产生的净效应,同时消除开边界条 件带来的影响,我们仅仅考虑系统掺入近藤空穴后和掺入前,导带电子密度、 局域杂化和局域自旋最近邻自旋关联函数的相对变化值δ*n^c_i*、δ*V_i*和δχ_i。

5.3 导带电子非半满情形

在导带电子浓度非半满 $(n^c \neq 1)$ 与半满 $(n^c = 1)$ 时,近藤空穴导致的 物理行为有很大不同,我们将分别论述,最后统一讨论。

5.3.1 实空间分析

首先我们以 $n^c = 0.2$ 为例。如图5.1 (a)和 (b)所示, $\delta n_i^c \pi \delta \mathcal{V}_i$ 表现出类 似的空间振荡波行为,振幅从近藤空穴位置到链的边界逐渐衰减。由于近藤 空穴的存在,使得相同格点处的导带电子倾向于屏蔽周围的局域自旋,因而 近藤空穴处 $\delta n_i^c < 0$ ($i = N/2\pi N + 1/2$)。在弱耦合区 ($J_K/t = 0.8$),由于近 藤耦合较弱,仅在 δn_i^c 中发现微小的振荡行为, $\delta \mathcal{V}_i$ 几乎没有振荡。在强耦合



图 5.1: 不同近藤耦合强度下,系统掺杂近藤空穴后与掺杂前若干物理量的相对变化。(a)与(d)导带电子密度相对变化值 δn_i^c ;(b)与(e)局域杂化相对变化值 $\delta \mathcal{V}_i$;(c)与(f)局域自旋自旋关联函数相对变化值 $\delta \chi_i$ 。导带电子平均占据数为 $n^c = 0.2$ 或0.8,链长N = 100。

区 $(J_K/t = 4)$, $\delta n_i^c n \delta v_i$ 的振荡明显, 它们具有同样的波长和相反的振荡方向。与在弱耦合区与强耦合区的行为不同,在中间耦合区域 $(J_K/t = 1.6, 2.4)$, $\delta n_i^c n \delta v_i$ 的振幅更大, 而且表现出比较杂乱的空间振荡行为。这些现象表明体系处于弱耦合与强耦合之间的"临界区域"。

对于局域自旋磁关联 $\delta\chi_i$,从图5.1 (c)可以看出,在 $J_K/t = 0.8$ 的弱耦合区,为典型的反铁磁关联行为。在中间耦合区域,与 $\delta n_i^c \pi \delta \mathcal{V}_i$ 的结果类似,振荡行为变得杂乱无章。在强耦合区, $\delta\chi_i$ 表现出与 $\delta n_i^c \pi \delta \mathcal{V}_i$ 相同波长的振荡波。可见,随着近藤耦合的增强, $\delta\chi_i$ 逐渐从自旋链内的反铁磁关联行为转变为受导带电子杂化影响的振荡波行为。

接下来,我们讨论 $n^c = 0.8$ 情形,如图5.1 (d)、(e)和(f)所示。总体上看, $n^c = 0.8 = 0.2$ 在三个耦合区的振荡行为十分相似。只是在 $J_K/t = 1.6$ 的中间耦合区域, $\delta n_i^c \pi \delta \mathcal{V}_i$ 表现出具有明显波长的振荡波行为。整体看来,近藤空穴引起的空间振荡衰减行为具有一定的普遍性($n^c = 1$ 的情形将在5.4节讨论)。

5.3.2 动量空间分析

为了进一步的研究 δn_i^c 、 $\delta \mathcal{V}_i 和 \delta \chi_i$ 的性质,我们在图5.2 中画出了它们在 动量空间的分布,这里主要给出 $n^c = 0.2$ 的结果。如图5.2 (a),弱耦合时, $\delta n_i^c \alpha k = 0.2\pi \psi$ 出现了一个小峰,分析发现即为 $k = 2k_F^S = 2*(\pi n^c)/2 = 0.2\pi$, 其中 k_F^S 对应未杂化的导带电子费米波矢(即小费米面)。上述特征峰与前人 理论和实验结论一致 [87,88],对应实空间波长 $\lambda_1 = 2\pi/2k_F^S = 2/n^c = 10$ (晶 格常数设为1)与图5.1所示也相吻合。由于耦合较弱,我们并未在 $\delta \mathcal{V}(k)$ 中发 现 $k = 2k_F^S \psi$ 的峰。

在强耦合区, $\delta n(k)$ 和 $\delta \mathcal{V}(k)$ 的特征峰为 $k = 4k_F^S = 0.4\pi$, 实空间波长 $\lambda_2 = 2\pi/4k_F^S = 1/n^c = 0.5\lambda_1 = 5$ 。 $4k_F^S$ 的特征峰来源于一维系统的自旋电荷分离 (spin-charge separation)效应 [94]: 导带电子与局域自旋间形成了近藤单态, 使得导带电子自旋自由度被抑制, 而电荷部分表现为无自旋的费米子, 进而导致了费米波矢扩大一倍(自旋简并解除)。由于波矢 $4k_F^S = 4\pi n^c/2 = 2\pi n^c = 0.4\pi$ 和波矢 $4k_F^L - 2\pi = 4\pi (1 + n^c)/2 - 2\pi = 2\pi n^c = 0.4\pi$ 相等(其中 k_F^L 为常见于强耦合区的大费米面波矢 [77,95]),我们并不能区分这是来自于小费米面还是大费米面的相关效应。

在中间耦合区域:我们发现当 $J_K/t = 1.6$ 时,在 $k = 2\pi - 2k_F^L = 2\pi - 2\pi(1 + n^c)/2 = 0.8\pi$ 处出现了强烈的散射峰。与 $2k_F^L$ 相关的特征峰的出现,反映了随着近藤耦合的增强,局域自旋逐渐参与到大费米面的形成。在 $J_K/t = 2.4$ 时, $k = 2\pi - 2k_F^L = 0.8\pi$ 处的峰更加明显,但是同时在 $k = 4k_F^L - 2\pi$ 处出现了



图 5.2: 图5.1中 $n^c = 0.2$ 情形下对应的傅里叶分量(Fourier component)。(a) $\delta n^c(k)$;(b) $\delta \mathcal{V}(k)$;以及(c) $\delta \chi(k)$ 。图中垂直虚线为与 $2k_F^S$ 、 $2k_F^L$ ($2\pi - 2k_F^L$) 和 $4k_F^L$ ($4k_F^L - 2\pi$)相关的散射峰。

一个新的特征峰。在进入强耦合区时,与 $2k_F^L$ 相关的峰已经被完全抑制,只 在 $4k_F^L - 2\pi$ 处保留一个散射峰。由上述变化可知,强耦合区的散射峰显然与大 费米面波矢有关,而与小费米面波矢无关。从中间耦合到强耦合区域的过程中,在出现了大费米面的背景下,自旋电荷分离逐渐主导了 $\delta n^{c}(k)$ 和 $\delta \mathcal{V}(k)$,相应的特征峰从 $k = 2\pi - 2k_{F}^{L}$ 变为 $k = 4k_{F}^{L} - 2\pi$ 。

现在,我们讨论 $\delta\chi(k)$ 。如图5.2 (c), $J_K/t = 0.8$ 时,在 $k = \pi$ 处出现了一个明显的反铁磁散射峰,同时在 $\delta n^c(k)$ 和 $\delta \mathcal{V}(k)$ 中 $k = \pi$ 也对应地出现了一个较小的峰。随着近藤耦合的增强,散射峰转移到 $k = 0.8\pi$,并在强耦合极限下出现在 $k = 0.4\pi$ 处并趋于饱和。

综合上述分析:在弱耦合时, $\delta n^{c}(k)$ 和 $\delta \mathcal{V}(k)$ 受到 $\delta \chi(k)$ 反铁磁关联的影响, 在 $k = \pi$ 处同时出现散射峰;在中间耦合与强耦合区时, $\delta \chi(k)$ 与 $\delta \mathcal{V}(k)$ 的行为 与 $\delta n^{c}(k)$ 几乎一致,体现出大费米面和自旋电荷分离的特征(散射峰分别位 于 $k = 0.8\pi$ 与 $k = 0.4\pi$)。可见,系统的杂化同时受到局域磁矩磁关联与导带电 子电荷密度的影响,它们共同决定了重费米子的杂化过程。



图 5.3: 公式5.4的拟合图示。(a) $\delta n_i^c 与$ (b) $\delta \mathcal{V}_i$, $n^c = 0.8, J_K/t = 1.6$ 。(c) $\delta n_i^c 与$ (d) $\delta \mathcal{V}_i$, $n^c = 0.2, J_K/t = 4$ 。图中实线为公式拟合曲线。

5.3.3 指数衰减拟合

接下来我们对振荡波随其与近藤空穴距离*x*的变化行为进行拟合分析,主要考察中间耦合区与强耦合区的δ*n*^c_i和δ*V*_i:

$$\delta n_i^c \sim C_n \cos(kx + \delta_n) e^{-x/\xi_n}, \tag{5.3}$$

$$\delta \mathcal{V}_i \sim C_{\mathcal{V}} \cos(kx + \delta_{\mathcal{V}}) e^{-x/\xi_{\mathcal{V}}},$$
(5.4)

公式中x = i - L/2 - 1(i > L/2 + 1), k为动量空间特征波矢, $\delta_{\nu/n}$ 为相位部分, $e^{-x/\xi_{\nu/n}}$ 为指数衰减部分。我们这里给出 $n^c = 0.8$, $J_K/t = 1.6 = n^c = 0.2$, $J_K/t =$ 4)的拟合结果。如图5.3所示,点标记为计算所得,实线为拟合曲线,二者 十分符合。进一步分析发现,在 $n^c = 0.2$ 的强耦合区,振幅C随着近藤耦合的 增强而降低,并趋于饱和。对于衰减长度 ξ ,我们发现对于固定的导带电子浓 度 n^c 和近藤耦合 J_K ,导带电子电荷密度 δn_i^c 和局域杂化 $\delta \nu_i$ 的衰减长度十分相近 (与磁关联 δ_{χ_i} 的衰减长度明显不同)。衰减长度的相关性表明,在非半满情形 下,导带电子电荷密度对体系的杂化行为起主导作用。



图 5.4: 对数坐标下, $\delta \chi_i = \delta \mathcal{V}_i$ 随i = 51的变化, $J_K/t = 0.8, 1.6$ 。插图为 $J_K/t = 0.8$ 时, $\delta \chi_i = \delta \mathcal{V}_i$ 的实空间振荡分布。参数取 $n^c = 1$,链长N = 100。

5.4 导带电子半满情形

在导带电子半满情形下 $(n^c = 1)$, 与非半满情形不同,由于导带电子粒 子空穴对称性,对于任意的近藤耦合强度, $\delta n_i^c = 0$ 。所以我们主要考察物理 量局域杂化和局域自旋最近邻自旋关联函数的相对变化值 $\delta v_i = \delta \chi_i$ 。如图5.4插 图所示,我们画出了 $\delta v_i = \delta \chi_i = 0.8$ 下的变化,可以发现它的振荡空间 范围主要集中在离近藤空穴十个晶格常数范围内。相比于非半满情形的结果, $\delta v_i = \delta \chi_i$ 在远离边界处就表现出快速衰减的行为,这可能源于 $\delta n_i^c = 0$ 削弱了 杂化振荡行为,使得 δv_i 的衰减长度减小。

接下来,我们讨论 $\delta V_i n \delta \chi_i$ 的衰减行为。如图5.4,纵坐标为对数坐标, 对于 $J_K/t = 0.8 = J_K/t = 1.6$, $\delta V_i n \delta \chi_i$ 随距离变化表现出线性关系,即 δV_i $n \delta \chi_i$ 完全符合指数衰减行为。随近藤耦合从 $J_K/t = 0.8$ 增加到 $J_K/t = 1.6$,斜 率变小,表明指数衰减长度迅速降低。同时对于相同的近藤耦合,它们的斜率 几乎完全一致,表明 $\delta V_i n \delta \chi_i$ 具有近似相同的衰减长度。可见,在 $n^c = 1$,局 域磁矩最近邻的磁关联行为完全决定了体系的杂化过程。

5.5 讨论

通过对导带电子浓度半满与非半满情形的计算结果的分析和对比,我们 发现杂化振荡 \mathcal{V}_i 同时受到了导带电子电荷密度分布与局域自旋磁关联的影响, 表明重费米子系统的杂化过程要同时考虑电荷与自旋两种自由度的影响,具有 非局域的特征,是导带电子与局域f电子协同作用的结果。在 $n^c \neq 1$ 时,导带 电子电荷分布对体系的杂化起主导作用;而当 $n^c = 1$ 时,局域自旋磁关联决定 了系统的杂化行为。

在重费米子体系中,由于巡游导带电子与局域f电子的纠缠,意味着杂化来源于电子的集体行为。它不单单受到同一格点的导带电子近藤屏蔽作用的影响,同时还与局域f电子的格点间磁关联效应相关。正如Nakatsuji在Ce_{1-x}La_xCoIn₅体系的研究中所揭示的 [50],Ce元素间的磁关联效应有促进集体杂化的作用。为了在实验上观测近藤空穴系统中的实空间振荡行为,我们建议通过SI-STM与共振弹性X射线散射(resonant elastic X-ray scattering)技术探测杂化波与导带电子密度分布。

5.6 本章小结

这一章我们主要介绍了利用DMRG方法研究的一维近藤-海森堡模型中的 近藤空穴问题。我们发现随着近藤耦合强度的增加,近藤空穴引起的空间振荡 行为有三个特征波长,分别与导带电子单独构成的小费米面、局域磁矩参与形 成的大费米面以及自旋电荷分离效应相联系。此外,对衰减长度的分析表明, 导带电子的电荷分布与局域磁矩的磁关联共同影响了体系的杂化行为。
第六章 一维系统拓扑边缘态与近藤耦合的相互作用

这一章的研究工作仍然是基于DMRG方法对一维近藤-海森堡模型的求解。 这里,我们设定导带电子部分具有两套子格子,并对其化学式项和动能项的参 数引入周期调制,使其具有非平庸的拓扑性质。我们进一步考虑具有拓扑性质 的导带电子通过近藤相互作用,与海森堡自旋链耦合后,拓扑态与近藤效应如 何作用。本章主要分为以下部分:概述、导带电子的拓扑态、拓扑边缘态与近 藤作用以及相图等。

6.1 概述

近些年来,作为一个全新的量子物态,拓扑绝缘体吸引了当代凝聚态领域 众多研究者的关注 [98,99]。拓扑绝缘体的体态是绝缘态,但是却具有自旋-动量 锁定的新奇金属表面态 [100,101]。这个特殊的表面态来源于系统波函数在参数 空间表现出的非平庸拓扑结构,并且不受弱的无序和杂质散射的干扰。然而, 在拓扑绝缘体中引入较强的电子关联后,可能出现一些新的量子态 [102–105]。 一个有趣的领域即是拓扑态与近藤物理的相互作用 [24,106–108]:一些研究 表明在拓扑近藤绝缘体SmB₆表面可能存在着近藤崩塌(Kondo Breakdown) [109,110];另外有平均场的理论研究指出,近藤屏蔽情形下的近藤晶格模型 (六角晶格)中可能出现一个新的拓扑绝缘相 [111]。

在一维准周期光晶格系统里,通过引入一个周期调制参数作为动量 之外的另一个维度后,人们也发现了非平庸的拓扑相以及相应的边缘态 [112,113]。这个一维的拓扑相来源于体系与具有量子霍尔效应的二维霍夫施塔 特(Hofstadter)模型 [114]的内在对应关系,实验上可以通过电子的密度分布 观测得到。因此,我们具有了一个新的实验和理论平台,即在易调控的一维光 晶格系统中去研究和模拟相关的拓扑态。

在这个工作中,我们将考虑具有非平庸拓扑性质的一维半满受限费米子光 晶格,与海森堡自旋链产生近藤耦合后的物理行为。为了考虑超越平均场理论 的关联电子效应,我们采用密度矩阵重整化群数值方法 [63,64,66] 进行研究。 模型上,我们考虑一维周期调制的导带电子气与具有反铁磁关联的自旋链发生 近藤耦合:

$$H = H_c + H_I, \tag{6.1}$$

其中H_c为导带电子部分,H_I为相互作用部分。

6.2 导带电子的拓扑态

6.2.1 模型的设计

首先我们考虑上述哈密顿量的导带电子部分*H_c*(此处暂不引入导带电子自旋指标):

$$H_{c} = \sum_{i}^{N-1} t_{i} (c_{i}^{\dagger} c_{i+1} + H.c.) + \sum_{i}^{N} \mu_{i} c_{i}^{\dagger} c_{i}, \qquad (6.2)$$

上述公式中, N为总格点数, 跃迁项为 $t_i = [1 + (-1)^i \lambda \cos \delta]$, 化学式项为 $\mu_i = (-1)^i \mu \sin \delta$, δ 为范围在0到2 π 的一个相位调制参数。实际上, 这个模型可以表示为每个元胞含有两套子格子(记为A和B)的情形, 我们改写为以下形式:

$$H_{c} = \sum_{i} (t_{1}c_{A,i}^{\dagger}c_{B,i} + t_{2}c_{A,i+1}^{\dagger}c_{B,i} + H.c.) + \sum_{i,\alpha=A,B} \mu_{\alpha}c_{\alpha,i}^{\dagger}c_{\alpha,i}.$$
 (6.3)

其中跃迁项 $t_1 = 1 - \lambda \cos \delta, t_2 = 1 + \lambda \cos \delta,$ 化学势项 $\mu_A = -\mu \sin \delta, \mu_B = \mu \sin \delta$ 。 当 $\delta = \omega t$ 时,即为Rice-Mele模型 [115]。当化学势 $\mu = 0$ 时,退化为SSH(Su-Schrieffer-Heeger)模型 [116]。在周期性边界条件下,有 $c_{\alpha,j} = 1/\sqrt{N'} \sum_k e^{ikj} c_{\alpha,k},$ N' = N/2为元胞数, α 为A或B。此时,哈密顿量可以改写为以下形式:

$$H = \psi_k^{\dagger} h(k) \psi_k, \tag{6.4}$$

其中 $\psi_k^{\dagger} = (c_{A,k}^{\dagger}, c_{B,k}^{\dagger})$ 。我们有:

$$h(k) = \begin{pmatrix} \mu_A & t_1 + t_2 \exp(-ik) \\ t_1 + t_2 \exp(ik) & \mu_B \end{pmatrix}.$$
 (6.5)

把h(k)写为如下分量形式:

$$\mathbf{h}(k) = \mathbf{h}_I(k)\mathbf{I} + \mathbf{d}(k) \cdot \sigma, \tag{6.6}$$



图 6.1: 公式6.6中矢量 $\mathbf{d}(k)$ 的三维空间图示。(a)参数取为 $\lambda = 0, \mu = 1$; (b) 参数取为 $\lambda = 0.5, \mu = 1$ 。格点数N = 100。

上式中, \mathbf{h}_I 为单位矩阵, $\sigma = (\sigma_x, \sigma_y, \sigma_z)$ 为泡利算符。 $h_I(k) = (\mu_A + \mu_B)/2$, $d_x = t_1 + t_2 \cos k$, $d_y = t_2 \sin k$, $d_z = (\mu_A - \mu_B)/2$ 。

哈密顿量h(k)的本征值为h_I ± |d|。在二能级系统中,标记系统拓扑属性的贝里相位(Berry phase)可以由d(k)旋转得到闭合曲面对应的一半立体角获得 [117]。如图6.1所示,对于 $\mu = 1$ 和 $\lambda = 0$ 和0.5,我们分别画出了d(k)的三维空间结构。显然,当 $\lambda = 0.5$ 时,d(k)的闭合曲面包围了原点,可以贡献一个有限的立体角,可能具有非平庸的拓扑结构。而对于 $\lambda = 0$,原点正好落在非闭合的圆柱曲面上,因而立体角为零,拓扑结构平庸。因而我们推断 $\lambda = 0.5$ 时,体系可能具有非平庸的拓扑态。

6.2.2 拓扑态的计算

为了进一步确认体系的拓扑性质,我们在参数空间 (k, δ) 计算陈数(Chern number) [118]:

$$c_n = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\delta \int_0^{2\pi} dk (\partial_\delta A_k - \partial_k A_\delta), \qquad (6.7)$$

其中,贝里联络表示为(Berry connection) $A_{k/\delta} = i \langle \phi_n(k,\delta) | \partial_{k/\delta} | \phi_n(k,\delta) \rangle$, $|\phi_n(k,\delta) \rangle$ 为第n个能带的布洛赫占据态(相关细节参见附录B)。对于 $\lambda = 0.5, \mu = 1$,我们得到第一个能带的陈数 $c_1 = 1$,第二个能带的陈数 $c_2 = -1$ 。对于 $\lambda = 0, \mu = 1, c_{1/2} = 0$ 。由此,我们可以确认当 $\lambda = 0.5, \mu = 1$ 时,体系具有非平庸的拓扑态。



图 6.2: 随相位 δ 变化的系统能谱。(a)参数取为 $\lambda = 0, \mu = 1$; (b)参数取 为 $\lambda = 0.5, \mu = 1$ 。格点数N = 100。

我们假设 H_c 中的第n个本征态 $|\psi_n\rangle = \sum_i u_{i,n} c_i^{\dagger} |0\rangle$ 的本征值方程为 $H |\psi_n\rangle = E_n |\psi_n\rangle$,我们可以写出开边界条件下此方程在福克空间的形式:

$$t_i u_{i+1,n} + t_{i-1} u_{i-1,n} + \mu_i u_{i,n} = E_n u_{i,n}.$$
(6.8)

如图6.2所示,取 $\mu = 1$,解方程我们可以求得 $\lambda = 0$ 和 $\lambda = 0.5$ 的能谱(取格 点数为100)。对于 $\lambda = 0$,能隙在 $\delta = \pm \pi$,0处关闭。而对于 $\lambda = 0.5$,在 $\delta \in$ [-0.5π ,0.5 π]时,有两条能带连接了价带和导带,并在 $\delta = 0$ 处相交,此即为 开边界条件下拓扑边缘态对应的能带。实际上,当 $\mu = 0$ 时,哈密顿量退化 到SSH模型[116],且在 $\delta \in [-0.5\pi, 0.5\pi]$ 具有由粒子空穴对称性和反射对称性保 护的二重简并的零模[119]。反过来,如果在SSH模型基础上引入交错分布的化 学势 μ ,零模劈裂为两个非简并的并在 $\delta = 0$ 处相交的边缘态能带。

此外,我们也可以通过DMRG对链端导带电子密度分布的计算验证边缘态 是否存在,进而推断体系的非平庸拓扑属性是否改变。由于边缘态表现为,填 充在半满处能带的导带电子的波函数聚集在一维链某一端,即链端的反常密集 几率分布,因而边缘态的观测可以通过计算相应的导带电子密度分布得到。定 义填充在半满处能带的导带电子的密度分布ρ_i为:

$$\rho_i = [n_i^c(N^c = N) - n_i^c(N^c = N - 2)]/2, \tag{6.9}$$

上式中 N^c 代表导带电子的总粒子数, $n_i^c = \langle c_i^{\dagger} c_i \rangle$,除以二是因为DMRG计算考虑了导带电子自旋简并。如图6.3所示,点标记为DMRG通过公式6.9的计算结果,实线为公式6.8 计算所得,二者十分吻合。对于 $\delta = \pm 0.25\pi$,导带电子密

度分布主要位于一维链的左端和右端,并向链中心迅速衰减,此即对应了图6.2 (b)中的连接导带和价带部分的边缘态。而对于 $\delta = \pm 0.75\pi$,在链的两端没有 发现导带电子的密集密度分布,一维链整体仅有由两套子格子产生的交错锯齿 形密度分布,对应了图6.2 (b)中能带结构中存在能隙的相位区域。



图 6.3: 系统导带电子密度分布图。点标记为来源于DMRG对公式6.9的计算结果,实线为来源于公式6.8计算的半满能带处填充电子密度分布,二者十分吻合。格点数N = 40, $\lambda = 0.5$, $\mu = 1$ 。相位 $\delta = -0.75\pi$, -0.25π , 0.25π 和0.75 π 。

6.3 拓扑边缘态与近藤作用

在上一节的基础上(主要考虑 $\lambda = 0.5, \mu = 1$),接下来我们引入哈密顿量中的 H_I 部分(考虑导带电子自旋):

$$H_I = J_K \sum_i^N \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i + J_H \sum_i^{N-1} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_{i+1}.$$
 (6.10)

为了抑制自旋链产生铁磁相,这里我们仍然设定 $J_H = 0.5$ [77]。同时我们 主要计算了N = 40的情形,每个DMRG块保留400个态。其他算符的说明以 及DMRG的数值细节,参见4.2,兹不赘述。我们考虑一维拓扑导带电子气通 过近藤耦合与反铁磁关联的自旋链产生作用,主要通过DMRG对导带电子密度 分布、局域杂化和自旋能隙等物理量的计算,来判断导带电子拓扑态与近藤作 用的相互影响。 在导带电子非半满情形时,引入的近藤耦合会使导带电子产生强烈的电 荷涨落,对相关电子密度分布的结果分析造成干扰,因此这一节我们只考 虑导带电子半满情形的DMRG计算。此时,我们可以比较相位 $\delta_1 \in [-0.5\pi, 0]$ (具有拓扑边缘态)和相位 $\delta_2 = \pi + \delta_1$ (不具有拓扑边缘态)的结果。对 于 δ_1 和 δ_2 ,系统奇数格点与偶数格点的跃迁系数 ($t_i = 1 + (-1)^i \lambda \cos \delta$)和化学 势($\mu_i = (-1)^i \mu \sin \delta$)刚好互相对换,在物理量的空间分布上具有反射对称性。 在互相对称的链端,二者的区别仅仅来自于 δ_1 系统具有拓扑边缘态,而 δ_2 系统 没有。通过比较二者相应链端的导带电子密度分布是否相同,我们就可以判 断 δ_1 参数系统的拓扑边缘态在近藤相互作用下是否仍然存在。

6.3.1 导带电子密度分布

我们首先考虑对称分布的参数($\delta = -0.25\pi$, i = N)和参数($\delta = 0.75\pi$, i = 1)情形下的导带电子密度分布。如图6.4 (a)所示,当近藤耦合 $J_K = 0$ 时,对于 $\delta = -0.25\pi$ 和 $\delta = 0.75\pi$,它们在i = N和i = 1处的导带电子密度分别为1.9和1.5左右,相差0.4,表现出显著不同。考虑到两组参数具有空间分布的反射对称性,这一差异恰恰反映了 $\delta = -0.25\pi$ 时,由于边缘态的出现,半满填充的导带电子在i = N处的聚集分布。

为了进一步验证以上判断,我们还选取参数为 $\delta = -0.25\pi$,i = N/2的导带电子密度分布。从图6.4 (a)可以发现,它和($\delta = 0.75\pi$,i = 1)在整个 J_K 区间几乎完全一致,其细微差别仅仅来自于边界效应对后者的影响。而与参数($\delta = -0.25\pi$,i = N)对比,它们在 $J_K = 0$ 处的 n_i^c 分布差异显著,反映了 $\delta = -0.25\pi$ 时边界处拓扑边缘态的存在,与图6.2 (b)的能谱结果保持一致。

当 J_K 较小时,随着 J_K 的增加, $\delta = -0.25$ 的导带电子密度 $n_{i=N}^c$ 几乎不变, 直到达到临界值 J_K^c 。在 J_K^c 处, $n_{i=N}^c$ 曲线突然降低,之后随 J_K 增加达到强耦合 极限的饱和值1。然而,对于 $\delta = 0.75\pi$,当 $J_K > 0$ 时, $n_{i=1}^c$ 随着近藤耦合的增加 连续降低,平缓地趋向强耦合极限。对比二者,我们推断, $\delta = -0.25$ 时出现的 临界值 J_K^c ,很可能对应着近藤耦合导致导带电子边缘态(拓扑相)消失的相变 处,因而使得电子密度 $n_{i=N}^c$ 出现突变。再考察 $\delta = -0.25\pi$ 的 $n_{i=N/2}^c$ 值,此处没 有边缘态的存在,与 $\delta = 0.75\pi$ 时 $n_{i=1}^c$ 的变化相类似,也表现出随近藤耦合 J_K 增 大而光滑下降的行为。



图 6.4: 系统特殊相位和格点位置的 (a) 导带电子密度分布 n_i^c 和 (b) 局域杂 化 \mathcal{V}_i 随近藤耦合的变化。格点数N = 40, $\lambda = 0.5$, $\mu = 1$ 。

在图6.4(a)中,我们还画出了 $\delta = -0.1\pi \pi \delta = -0.4\pi \epsilon i = N$ 处的导带电子密度 $n_{i=N}^c$ 。与 $\delta = -0.25\pi$ 的结果类似, $n_{i=N}^c$ 也在某个临界的近藤耦合 J_K^c 处出现了急剧下降,这一变化也佐证了近藤耦合破坏了拓扑边缘态的推断。在小于 J_K^c 的区域,由于化学势 $\mu_i = (-1)^i \mu \sin \delta$ 的调制,对比处于拓扑边缘态的三个不同相位 δ 的 $n_{i=N}^c$ 值,它们表现出随 δ 增加而降低的行为。在强耦合极限下, n_i^c 都趋于导带电子平均占据数1。而在上述两个区域之间, n_i^c 随 δ 增大而增加。

6.3.2 局域杂化

接下来,我们考察局域杂化: $\mathcal{V}_i = \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i \rangle$ 。如图6.4 (b)所示:在整个近

藤耦合区域, $\mathcal{V}_i = n_i^c$ 的变化行为十分类似。 $\delta = -0.4\pi, -0.25\pi\pi - 0.1\pi$ 时, \mathcal{V}_i 曲 线也出现了一个急剧下降的临界点 J_K^c ,此临界点与 n_i^c 曲线判断所得完全一致。 而在弱耦合区域, \mathcal{V}_i 几乎为零,明显高于其它不具有拓扑边缘态的相关参数结 果(图中紫线和红线),表现出较明显的对近藤相互作用的退耦合效应。结合 图6.4 (a)和(b)可知,这个破坏了近藤相互作用的退耦合效应,来源于拓扑 态导致的导带电子在链端的近似双占据状态,它抑制了有限近藤耦合作用(小 于 J_K^c)下近藤单态的形成。在大于 J_K^c 的区域,由于边缘态被破坏,近藤作用 恢复,局域杂化随 J_K 增加趋于强耦合极限值-0.75。



6.3.3 自旋能隙

图 6.5: 不同相位下系统自旋能隙随近藤耦合的变化。格点数N = 40, $\lambda = 0.5$, $\mu = 1$ 。

为了进一步地研究边缘态对形成近藤单态的抑制作用,我们引入自旋能隙的计算,定义如下:

$$\Delta_s = E_0(S=1) - E_0(S=0), \tag{6.11}$$

其中 E_0 为体系的基态能量,S为体系的总自旋。如图6.6所示,对于 $\delta = 0.6\pi$ 、 0.75 π 和0.9 π 时系统没有边缘态的情形,自旋能隙在 $J_K = 0$ 时几乎为零,并 随着近藤耦合 J_K 的增加(每个格点逐渐形成近藤单态),自旋能隙连续而 缓慢地增大。在 $J_K > 1.5$ 时,形成较稳定的近藤单态, Δ_s 随 J_K 表现出线性 关系。对于 $\delta = -0.4\pi, -0.25\pi\pi - 0.1\pi$ 时系统有边缘态的情形,在 J_K 比较小 时自旋能隙保持 $\Delta_s \approx 0$,直到达到临界值 J_K^c 。在临界值 J_K^c 处, Δ_s 发生突 变,并随着 J_K 增大迅速与对应相位(满足 $\delta_2 = \pi + \delta_1$)的结果保持一致。对 于 $\delta = -0.4\pi, -0.25\pi\pi - 0.1\pi$,正是由于边缘态的退耦合作用抑制了近藤单 态的形成,使得在小于 J_K^c 的整个耦合区域自旋能隙都保持 $\Delta_s \approx 0$,而在大 于 J_K^c 的耦合区域,由于边缘态被破坏,含参数 δ 的系统(具有边缘态的相位参 数)与含参数 $\pi + \delta$ 的系统(具有边缘态的相位参数)表现一致。对比导带电子 密度分布 $n_{i=N}^c$ 、局域杂化 $\mathcal{V}_{i=N}$ 以及自旋能隙 Δ_s ,三者的近藤耦合临界值 J_K^c 完 全一致,进一步确认了系统存在着拓扑边缘态到近藤单态的相变。





图 6.6: 相位 δ 与近藤耦合 J_K 确定的相图。 $\delta \in (-0.5\pi, 0)$,格点数N = 40, $\lambda = 0.5, \mu = 1$ 。

最后,我们可以得到一个关于临界近藤耦合 J_K^c 与调制相位 δ (在(-0.5 π ,0)区 间)的相图。如图6.6 所示, J_K^c 随 δ 增加而降低,并表现出近似线性的关系。这 是因为更小的相位 δ 使得链端的化学势($\mu = (-1)^i \mu \sin \delta$, i = 40)变得更低, 对双占据的拓扑边缘态具有增强占据的效果,导致相关的临界近藤耦合值 J_K^c 增加。

6.5 本章小结

我们在本章研究了具有非平庸拓扑性质的一维半满受限费米子光晶格与海森堡自旋链产生近藤耦合后,体系拓扑边缘态与近藤效应的相互作用。通过体系导带电子密度分布、局域杂化和自旋能隙等物理量的分析,我们确认了在临界近藤耦合*J^c_K*处,有一个拓扑态到近藤绝缘态的相变发生。我们还发现了近似双占据的导带电子边缘态抑制了近藤单态的形成,具有退耦合的效应。

第七章 总结和展望

针对重费米子体系导带电子和局域自旋相互作用的杂化行为,本文主利要用DMRG数值方法对一维近藤-海森堡模型进行了相关问题的研究。

论文第一章引言部分,我们主要介绍了重费米子系统的典型特点、热点材 料和基本物理,并提问:如何把丰富而复杂的重费米子实验现象组织起来,在 一个统一的物理观点和理论框架下理解重费米子系统的物理行为。

基于第一章的提问,论文第二章介绍了为此做出有益尝试的重费米子体系的二流体理论,主要包括以下基本内容:如标记f电子巡游化或近藤液体出现的RKKY相互作用特征温度T*;由多种实验观测量验证的近藤液体约化态密度普适标度律;基于重电子演化行为并由杂化效率f₀描述的二流体低温相图。同时我们还讨论了二流体理论在微观层面的相关解析和数值进展。我们希望利用较严格的强关联数值方法,在考虑体系集体杂化作用后,对二流体理论的微观研究做出进一步尝试。

第三章中,我们介绍了本论文的主要研究方法,即DMRG数值方法。在 关联电子系统中,这是一种研究一维模型的严格数值方法。我们主要讲解 了DMRG的产生背景、基本流程和主要算法,并在附录A中给出了一个具体的 计算例子。借助此方法,有利于我们理解一维近藤-海森堡模型中局域磁矩与 导带电子的杂化行为,以及由此导致的局域磁矩的退局域化过程。

第四章中,从重费米子相图的二流体理论的杂化效率解释出发,利 用DMRG数值方法对一维近藤-海森堡模型局域磁矩与导带电子的相互作用 进行了研究。我们发现了自旋关联谱中与反铁磁关联涨落、小费米面和大费米 面相关的三个散射峰,验证了局域自旋局域性与巡游性的共存。通过对自旋关 联谱的谱权重转移分析,结合局域自旋反铁磁关联能的相对变化以及费米面的 演化行为,我们首次在微观上定义了一个描述局域磁矩巡游化程度的物理量: 自旋关联谱谱权重的相对转移。

第五章中,我们研究了一维近藤-海森堡模型的近藤空穴系统。我们发现 引入近藤空穴后,从近藤空穴到边界,会导致系统的杂化以波的形式振荡并呈 指数衰减的行为。我们还发现了在非半满情形下,随近藤耦合增加分别出现了 与小费米面、大费米面以及自旋电荷分离相关的三个散射峰,同时导带电子密度与局域杂化具有相近的指数衰减长度。在半满情形下,导带电子密度相对变化为零,局域自旋磁关联函数与局域杂化表现出一致的指数衰减长度。我们发现,导带电子密度分布和局域磁矩的磁关联对系统的杂化过程都存在重要影响。

第六章中,我们考虑具有非平庸拓扑性质的一维半满受限费米子光晶格通 过近藤相互作用与海森堡自旋链耦合,研究近藤耦合与拓扑态的相互作用。我 们发现随着近藤耦合的增强,表现为电子近似双占据的拓扑边缘态在某个临界 值处突然消失,相应格点的局域杂化与系统的自旋能隙也发生突变,表明近藤 作用使体系发生了拓扑态到非拓扑态的相变。同时相变处局域杂化的明显增 大,以及自旋能隙的打开,表明电子近似双占据的拓扑边缘态对近藤作用具有 退耦合的效应。

我们的研究工作主要是基于一维近藤-海森堡模型的DMRG方法数值求解。 一方面,为了全面而深入的理解局域自旋通过集体杂化后的退局域化过程,需 要研究频率空间的相关动力学行为,作为本论文动量空间谱分析的重要补充。 另一方面,实际重费米子体系主要是二维和三维系统,如何把我们相关一维问 题的结果推广到高维,也是后续工作的一个重点。

诚然,在强关联电子体系中,至今缺乏一个完整的统一理论框架,也没有 同时适用多数物理问题的普适研究方法。具体到本文在重费米子体系的相关工 作,从f电子局域与巡游双重属性的思路出发,更迫切的需要是发展超出平均 场框架的能够同时处理高维局域自旋磁关联和集体杂化行为的理论工具,进而 在微观层面上加深对重费米子物理的理解,同时为其它强关联电子领域的研究 (如铜基超导和铁基超导)提供借鉴和思考。

附录 A DMRG计算举例

此附录中我们讨论利用DMRG算法计算海森堡*S* = 1/2链的一个简单例子。 如图A.1,首先我们构造包含四个格点的超块。对于单个格点的单粒子基矢 为[120]:

图 A.1: DMRG计算流程中构造四个格点的超块结构。摘自引文 [120]。

$$|1\rangle \equiv |\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1\\ 0 \end{pmatrix}, |2\rangle \equiv |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0\\ 1 \end{pmatrix}, \tag{A.1}$$

其中|1>和|2>分别代表自旋向上和向下。同时我们可以写出单粒子算符的矩阵形式:

$$S^{z} = \begin{bmatrix} 1/2 & 0\\ 0 & -1/2 \end{bmatrix}; S^{+} = \begin{bmatrix} 0 & 1\\ 0 & 0 \end{bmatrix}; S^{-} = \begin{bmatrix} 0 & 0\\ 1 & 0 \end{bmatrix},$$
(A.2)

考虑两个格点的AB块,把系统基矢写为单格点基矢的直乘形式:

$$|1\rangle \equiv |\uparrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle, |2\rangle \equiv |\uparrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle = |\uparrow\downarrow\rangle, \tag{A.3}$$

$$|3\rangle \equiv |\downarrow\rangle \otimes |\uparrow\rangle = |\downarrow\uparrow\rangle, |4\rangle \equiv |\downarrow\rangle \otimes |\downarrow\rangle = |\downarrow\downarrow\rangle. \tag{A.4}$$

(A.5)

对于两自旋海森堡模型(海森堡交换作用设为1)的AB系统,哈密顿量写为:

$$H_{12} = S_1^z \otimes S_2^z + \frac{1}{2} (S_1^+ \otimes S_2^- + S_1^- \otimes S_2^+).$$
(A.6)

写成矩阵形式,我们有:

由于AB块的第2格点和CD块的第3格点也存在相互作用,我们把第2格点的算符在AB块的基矢下写出来:

$$[S_2^z]_{AB} = [\delta_1]_A \otimes [S_2^z]_B. \tag{A.9}$$

类似的处理第3个格点的算符,我们可以写出超块ABCD的整体哈密顿量:

$$H_{ABCD} = H_{12} \otimes \delta_{34} + \delta_{12} \otimes H_{34} + [S_2^z]_{AB} \otimes [S_3^z]_{CD}$$
(A.10)

$$+\frac{1}{2}([S_2^+]_{AB}\otimes [S_3^-]_{CD} + [S_2^-]_{AB}\otimes [S_3^+]_{CD}).$$
(A.11)

我们可以利用关系 $S_i^+ = (S_i^-)^\dagger$,简化计算。

显然,超块ABCD的哈密顿量为16×16的矩阵,通过对角化我们可以得到基态波函数 $|\Psi\rangle$ 以及相应的基态能量 $E_0 \approx -1.616...$ 。利用约化密度矩阵公式把CD块求和掉:

$$\rho_{i_1 i_2 i'_1 i'_2} = \sum_{i_3 i_4} \Psi^*_{i_1 i_2 i_3 i_4} \Psi_{i'_1 i'_2 i_3 i_4}, \tag{A.12}$$

可得:

$$\rho \approx \begin{bmatrix}
0.0223 & 0 & 0 & 0 \\
0 & 0.4777 & -0.4553 & 0 \\
0 & -0.4553 & 0.4777 & 0 \\
0 & 0 & 0 & 0.0223
\end{bmatrix}.$$
(A.13)

我们对角化约化密度矩阵 ρ ,并保留其最大的三个本征值 ω_{α} 对应的本征矢 $|u^{\alpha}\rangle$:



图 A.2: DMRG计算流程中更新超块示意图。摘自引文 [120]。

$$|u^{1}\rangle \approx \begin{pmatrix} 0\\ -0.7071\\ 0.7071\\ 0 \end{pmatrix}, |u^{2}\rangle \approx \begin{pmatrix} 0\\ -0.7071\\ -0.7071\\ 0 \end{pmatrix}, |u^{3}\rangle \approx \begin{pmatrix} 0\\ 0\\ 0\\ 1 \end{pmatrix},$$
(A.14)

相应的本征值为:

$$\omega_1 \approx 0.9330, \ \omega_2 \approx 0.0224, \ \omega_3 \approx 0.0223.$$
 (A.15)

接下来我们构造截断矩阵O,O的每一行由本征矢 ω^{α} 构成:

$$O \approx \begin{bmatrix} 0 & -0.7071 & 0.7071 & 0 \\ 0 & -0.7071 & -0.7071 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}.$$
 (A.16)

获得截断矩阵O后,我们更新AB块的相关算符。并标记更新后的AB块为A',代替A,流程如图A.2所示。哈密顿量可更新为:

$$H_{A'} = OH_{AB}O^{\dagger} \approx \begin{bmatrix} -0.7500 & 0 & 0\\ 0 & 0.2500 & 0\\ 0 & 0 & 0.2500 \end{bmatrix}.$$
 (A.17)

附录 B 贝里相位和陈数

B.1 贝里相位、贝里联络与贝里曲率

考虑一个物理系统,它由依赖于一系列随时间演化的参数的哈密顿量所描述,如: $H = H(\mathbf{R})$, $\mathbf{R} = \mathbf{R}(t)$,其中 $\mathbf{R} = (\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \mathbf{R}_3, ...)$ 。假设系统做绝热演化, $\mathbf{R}(t)$ 在参数空间的某个路径C缓慢移动。在这个过程中,系统的一个初始本征态 $|n(\mathbf{R}(0))\rangle$ 仍然作为系统哈密顿量的瞬时本征态而存在,因而我们额外获得的自由度即为相关量子态的相位,系统波函数可以写为 [117]:

$$|\psi_n(t)\rangle = e^{i\gamma_n(t)} \exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \epsilon_n(\boldsymbol{R}(t'))\right] |n(\boldsymbol{R}(t))\rangle.$$
(B.1)

在上式中插入时间依赖的薛定谔方程:

$$i\hbar \frac{\partial |\psi_n(t)\rangle}{\partial t} = H(\mathbf{R}(t)) |\psi_n(t)\rangle, \qquad (B.2)$$

左乘 $\langle n(\mathbf{R}(t)) |$ 可得:

$$\langle n(\boldsymbol{R}(t)) | H(\boldsymbol{R}(t)) | \psi_n(t) \rangle$$

$$= \langle n(\boldsymbol{R}(t)) | H(\boldsymbol{R}(t)) e^{i\gamma_n(t)} exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \epsilon_n(\boldsymbol{R}(t')) \right] | n(\boldsymbol{R}(t)) \rangle$$

$$= \epsilon_n \langle n(\boldsymbol{R}(t)) | \psi_n(t) \rangle,$$
(B.3)

和

$$\langle n(\boldsymbol{R}(t)) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} | \psi_n(t) \rangle$$

$$= \langle n(\boldsymbol{R}(t)) | i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \left\{ e^{i\gamma_n(t)} exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \epsilon_n(\boldsymbol{R}(t')) \right] | n(\boldsymbol{R}(t)) \rangle \right\}$$

$$= \langle n(\boldsymbol{R}(t)) | i\hbar \times i \frac{\partial\gamma_n}{\partial \boldsymbol{R}} \frac{\partial \boldsymbol{R}}{\partial t} | \psi_n(t) \rangle$$

$$+ \epsilon_n \langle n(\boldsymbol{R}(t)) | \psi_n(t) \rangle$$

$$+ \langle n(\boldsymbol{R}(t)) | i\hbar e^{i\gamma_n(t)} exp \left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \epsilon_n(\boldsymbol{R}(t')) \right] \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} | n(\boldsymbol{R}(t)) \rangle \frac{\partial \boldsymbol{R}}{\partial t}.$$

$$(B.4)$$

结合公式B.3和B.4, 可得:

$$\langle n(\boldsymbol{R}(t)) | \frac{\partial \gamma_n}{\partial R} \frac{\partial R}{\partial t} e^{i\gamma_n(t)} exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \epsilon_n(\boldsymbol{R}(t')) \right] |n(\boldsymbol{R}(t)) \rangle$$

$$= \langle n(\boldsymbol{R}(t)) | i e^{i\gamma_n(t)} exp\left[-\frac{i}{\hbar} \int_0^t dt' \epsilon_n(\boldsymbol{R}(t')) \right] \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} |n(\boldsymbol{R}(t)) \rangle \frac{\partial \boldsymbol{R}}{\partial t}.$$
(B.5)

进而有:

$$\frac{\partial \gamma_n}{\partial \boldsymbol{R}} = i \left\langle n(\boldsymbol{R}(t)) \right| \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} \left| n(\boldsymbol{R}(t)) \right\rangle.$$
(B.6)

因而 γ_n 可以表达为参数空间的积分形式:

$$\gamma_n = \int_C d\boldsymbol{R} \cdot i \langle n(\boldsymbol{R}(t)) | \frac{\partial}{\partial \boldsymbol{R}} | n(\boldsymbol{R}(t)) \rangle = \int_C d\boldsymbol{R} \cdot A_n(\boldsymbol{R}). \quad (B.7)$$

显然, A_n(**R**)与选取的规范有关。我们做一个规范变换:

$$|n(\mathbf{R})\rangle \to e^{i\xi(\mathbf{R})} |n(\mathbf{R})\rangle,$$
 (B.8)

其中 $\xi(\mathbf{R})$ 为任意的光滑函数, $A_n(\mathbf{R})$ 可变换为:

$$A_n(\mathbf{R}) \to A_n(\mathbf{R}) - \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} \xi(\mathbf{R}).$$
 (B.9)

最终,公式B.7中的相位 γ_n 在经过规范变换后,改变为 $\xi(\mathbf{R}(0)) - \xi(\mathbf{R}(T))$,其中 $\mathbf{R}(0)$ 和 $\mathbf{R}(T)$ 为路径C的初始点和终点。所以我们可以选择一个合适的 $\xi(\mathbf{R})$,使得 γ_n 在经过对路径C的积分后抵消掉。

但是对于具有周期的演化, $\mathbf{R}(T) = \mathbf{R}(0)$ 。相位的选择要求 $e^{i\xi(\mathbf{R})}$ 在规范 变换下为单值,即有 $\xi(\mathbf{R}(0)) - \xi(\mathbf{R}(T)) = 2\pi \times integer$ 。所以对于一个闭合的 积分回路, γ_n 为一个规范不变的物理量,即为贝里相位(Berry phase),此时 有:

$$\gamma_n = \oint_C d\boldsymbol{R} \cdot A_n\left(\boldsymbol{R}\right), \qquad (B.10)$$

其中 $A_n(\mathbf{R})$ 为矢量函数,称为贝里联络(Berry connection):

$$A_n(\mathbf{R}) = i \langle n(\mathbf{R}) | \frac{\partial}{\partial \mathbf{R}} | n(\mathbf{R}) \rangle.$$
 (B.11)

对于一个回路积分, γ_n 不能通过规范变换移除掉。利用斯托克斯定理 (Stokes' theorem),我们有:

$$\gamma_n = \oint_C d\boldsymbol{R} \cdot A_n(\boldsymbol{R}) = \int_S d\boldsymbol{S} \cdot \Omega_n(\boldsymbol{R}), \qquad (B.12)$$

上式中 $\Omega_n(\mathbf{R}) = \nabla_{\mathbf{R}} \times A_n(\mathbf{R})$ 为贝里曲率 (Berry curvature), 写为张量形 式为:

$$\Omega_{\mu\nu}^{n}(\boldsymbol{R}) = \frac{\partial}{\partial R^{\mu}} A_{\nu}^{n}(\boldsymbol{R}) - \frac{\partial}{\partial R^{\nu}} A_{\mu}^{n}(\boldsymbol{R}) \\
= \frac{\partial}{\partial R^{\mu}} \left[i \langle n(\boldsymbol{R}) | \frac{\partial}{\partial R^{\nu}} | n(\boldsymbol{R}) \rangle \right] - \frac{\partial}{\partial R^{\nu}} \left[i \langle n(\boldsymbol{R}) | \frac{\partial}{\partial R^{\mu}} | n(\boldsymbol{R}) \rangle \right] \\
= i \left\langle \frac{\partial n(\boldsymbol{R})}{\partial R^{\mu}} \left| \frac{\partial n(\boldsymbol{R})}{\partial R^{\nu}} \right\rangle + i \langle n(\boldsymbol{R}) | \frac{\partial^{2}}{\partial R^{\mu} \partial R^{\nu}} | n(\boldsymbol{R}) \rangle \\
- i \left\langle \frac{\partial n(\boldsymbol{R})}{\partial R^{\nu}} \left| \frac{\partial n(\boldsymbol{R})}{\partial R^{\mu}} \right\rangle - i \langle n(\boldsymbol{R}) | \frac{\partial^{2}}{\partial R^{\nu} \partial R^{\mu}} | n(\boldsymbol{R}) \rangle \\
= i \left[\left\langle \frac{\partial n(\boldsymbol{R})}{\partial R^{\mu}} \left| \frac{\partial n(\boldsymbol{R})}{\partial R^{\nu}} \right\rangle - (\nu \leftrightarrow \mu) \right].$$
(B.13)

B.2 陈数的计算

我们考虑一维系统哈密顿量H(q,t),其中参数q为动量,参数t为其他参量,二者都具有周期性。经过一个周期演化后,系统第n个能带的陈数(Chern number)定义如下 [117]:

$$c_n = \int_0^T dt \int_{BZ} \frac{dq}{2\pi} \Omega_{qt}^n, \tag{B.14}$$

其中 Ω_{qt}^n 为贝里曲率。由于参数q和t具有周期性, H(q,t)的参数空间可以看做 是一个圆环面 (torus), 如图B.1 (a) 所示。 $2\pi c_n$ 即是整个圆环面上的贝里相 位。为了利用斯托克斯定理, 我们把圆环面切开, 并把它展开为一个矩形, 如 图B.1 (b) 所示。我们引入x = t/T和 $y = q/2\pi$ 。根据公式B.12, 贝里相位可以 写为贝里联络的回路积分得到:

$$c = \frac{1}{2\pi} \left\{ \int_{A}^{B} dx A_{x}(x,0) + \int_{B}^{C} dy A_{y}(1,y) + \int_{C}^{D} dx A_{x}(x,1) + \int_{D}^{A} A_{y}(0,y) \right\}$$

= $\frac{1}{2\pi} \left\{ \int_{0}^{1} dx [A_{x}(x,0) - A_{x}(x,1)] - \int_{0}^{1} dy [A_{y}(0,y) - A_{y}(1,y)] \right\},$
(B.15)

为简单起见,上式中去掉了能带指标*n*。现在考虑对*x*的积分,定义 $A_x(x,y) = \langle u(x,y) | i \bigtriangledown_x | u(x,y) \rangle$ 。由于 $| u(x,0) \rangle$ 和 $| u(x,1) \rangle$ 描述的是等价的物理状态,它们



图 B.1: 圆环面结构的布里渊区图示。(a) 由参数(q,t)确定的三维闭合圆环面。 其中 $\mathbf{R}(t)$ 为以t为周期的函数。(b) 闭合圆环面的二维矩形表示。其中边界处 满足周期性条件AB = DC和AD = BC。摘自引文 [117]。

的区别仅为一个相因子: $e^{i\theta_x(x)}|u(x,1)\rangle = |u(x,0)\rangle$ 。因此我们有:

$$\begin{split} &\int_{0}^{1} dx [A_{x}(x,0) - A_{x}(x,1)] = \int_{0}^{1} dx [\langle u(x,0) | i \bigtriangledown_{x} | u(x,0) \rangle - \langle u(x,1) | i \bigtriangledown_{x} | u(x,1) \rangle] \\ &= \int_{0}^{1} dx \{\langle u(x,0) | i \bigtriangledown_{x} [e^{i\theta_{x}(x)} | u(x,1) \rangle] - \langle u(x,1) | i \bigtriangledown_{x} | u(x,1) \rangle\} \\ &= \int_{0}^{1} dx [i \bigtriangledown_{x} i\theta_{x}(x) \langle u(x,0) | e^{i\theta_{x}(x)} | u(x,1) \rangle + \langle u(x,0) | e^{i\theta_{x}(x)} i \bigtriangledown_{x} | u(x,1) \rangle \\ &- \langle u(x,1) | i \bigtriangledown_{x} | u(x,1) \rangle] \\ &= \int_{0}^{1} dx [i \bigtriangledown_{x} i\theta_{x}(x) \langle u(x,1) | u(x,1) \rangle + \langle u(x,1) | i \bigtriangledown_{x} | u(x,1) \rangle \\ &- \langle u(x,1) | i \bigtriangledown_{x} | u(x,1) \rangle] \\ &= \theta_{x}(0) - \theta_{x}(1). \end{split}$$
(B.16)

类似地:

$$\int_0^1 dy [A_y(0,y) - A_y(1,y)] = \theta_y(0) - \theta_y(1), \qquad (B.17)$$

其中 $e^{i\theta_y(y)}|u(y,1)\rangle = |u(y,0)\rangle$ 。总的积分为:

$$c = \frac{1}{2\pi} [\theta_x(0) - \theta_x(1) + \theta_y(1) - \theta_y(0)].$$
 (B.18)

另外,利用四个端点A,B,C和D处的相位关系:

$$e^{i\theta_x(0)} |u(0,1)\rangle = |u(0,0)\rangle, \quad e^{i\theta_x(1)} |u(1,1)\rangle = |u(1,0)\rangle, e^{i\theta_y(0)} |u(1,0)\rangle = |u(0,0)\rangle, \quad e^{i\theta_y(1)} |u(1,1)\rangle = |u(0,1)\rangle.$$
(B.19)

我们可以得到;

$$|u(0,0)\rangle = e^{i\theta_{x}(0)} |u(0,1)\rangle$$

= $e^{i\theta_{x}(0)} e^{i\theta_{y}(1)} |u(1,1)\rangle$
= $e^{i\theta_{x}(0)} e^{i\theta_{y}(1)} e^{-i\theta_{x}(1)} |u(1,0)\rangle$ (B.20)
= $e^{i\theta_{x}(0)} e^{i\theta_{y}(1)} e^{-i\theta_{x}(1)} e^{-i\theta_{y}(0)} |u(0,0)\rangle$
= $e^{i[\theta_{x}(0)-\theta_{x}(1)+\theta_{y}(1)-\theta_{y}(0)]} |u(0,0)\rangle$.

为了保证|*u*〉取值的唯一性,上述公式的相位必须为2π的整数倍。因而陈数*c*必须为分立的整数。

参考文献

- K. Andres, J. E. Graebner, and H. R. Ott, 4f-Virtual-Bound-State formation in CeAl₃ at low temperatures, Phys. Rev. Lett. 35, 1779 (1975).
- [2] G. R. Stewart, *Heavy-fermion systems*, Rev. Mod. Phys. 56, 755 (1984).
- [3] S. Kondo, D. C. Johnston, C. A. Swenson, F. Borsa, A. V. Mahajan, L. L. Miller, T. Gu, A. I. Goldman, M. B. Maple, D. A. Gajewski, E. J. Freeman, N. R. Dilley, R. P. Dickey, J. Merrin, K. Kojima, G. M. Luke, Y. J. Uemura, O. Chmaissem, and J. D. Jorgensen, *LiV₂O₄: A heavy fermion transition metal oxide*, Phys. Rev. Lett. **78**, 3729 (1997).
- [4] C. Pfleiderer, Superconducting phases of f-electron compounds, Rev. Mod. Phys. 81, 1551 (2009).
- [5] B. D. White, J. D. Thompson, and M. B. Maple, Unconventional superconductivity in heavy-fermion compounds, Physica C 514, 246 (2015).
- [6] J. A. Mydosh, and P. M. Oppeneer, Hidden order, superconductivity, and magnetism. The unsolved case of URu₂Si₂, Rev. Mod. Phys. 83, 1301 (2011).
- [7] G. R. Stewart, Non-Fermi-liquid behavior in d- and f-electron metals, Rev. Mod. Phys. 73, 797 (2011).
- [8] P. Coleman, C. Pépin, Q. Si, and R. Ramazashvili, How do Fermi liquids get heavy and die? J. Phys. Condens. Matt. 13, 723 (2001).
- [9] O. Stockert, and F. Steglich, Unconventional quantum criticality in heavyfermion compounds, Annu. Rev. 2, 79 (2011).
- [10] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl, W. Lieke, D. Meschede, W. Franz, and H. Schäfer, Superconductivity in the presence of strong Pauli paramagnetism CeCu₂Si₂, Phys. Rev. Lett. 43, 1892 (1979).

- [11] B. T. Matthias, H. Suhl, and E. Corenzwit, Superconductivity and ferromagnetism in isomorphous compounds, Phys. Rev. Lett. 1, 92 (1958).
- [12] A. A. Abrikosov, and L. P Gor'kov, Contribution to the theory of superconducting alloys with paramagnetic impurities, Sov. Phys. JETP 12, 1243 (1961).
- [13] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, Theory of superconductivity, Phys. Rev. 108, 1175 (1957).
- [14] D. J. Scalapino, A common thread: The pairing interaction for unconventional superconductors, Rev. Mod. Phys. 84, 1383 (2012).
- [15] J. C. Séamus Davis, and D. H. Lee, Concepts relating magnetic interactions, intertwined electronic orders, and strongly correlated superconductivity, Proc. Nal. Acad. Sci. USA 110, 17623 (2013).
- [16] J. L. Sarrao, J. A. Morales, J. D. Thompson, B. L. Scott, G. R. Stewart, F. Wastin, J. Rebizant, P. Boulet, E. Colineau, and G. H. Lander, *Plutonium-based superconductivity with a transition temperature above 18* K, Nature **420**, 297 (2002).
- [17] 杨义峰,李宇,重费米子超导与竞争序,物理学报 65,217401 (2015).
- [18] M. Kenzelmann, T. Strässle, C. Niedermayer, M. Sigrist, B. Padmanabhan, M. Zolliker, A. D. Bianchi, R. Movshovich, E. D. Bauer, J. L. Sarrao, and J. D. Thompson, *Coupled superconducting and magnetic order* in *CeCoIn₅*, Science **321**, 1652 (2008).
- [19] A. Menth, E. Buehler, and T. H. Geballe, Magnetic and semiconducting properties of SmB₆, Phys. Rev. Lett. 22, 295 (1969).
- [20] G. Aeppli, and Z. Fisk, Comment. Cond. Mat. Phys. 16, 155 (1992).
- [21] M. Jaime, R. Movshovich, G. R. Stewart, W. P. Beyermann, M. G. Berisso, and P. C. Canfield, Specific heat of Ce₃Bi₄Pt₃ at 60 T, Physics B 294, 240 (2001).

- [22] R. Martin, and J. Allen, Theory of mixed valence: Metals or small gap insulators, J. Appl. Phys. 50, 7561 (1979).
- [23] L. Fu, and C. Kane, *Topological insulators with inversion symmetry*, Phys. Rev. B 76, 45302 (2007).
- [24] M. Dzero, K. Sun, V. Galitski, and P. Coleman, *Topological Kondo insu*lators, Phys. Rev. Lett. **104**, 106408 (2010).
- [25] M. Dzero, J. Xia, V. Galitski, and P. Coleman, *Topological Kondo insu*lators, Annu. Rev. Conden. Ma. P. 7, 249 (2016).
- [26] 李正中, 固体理论, 科学出版社, (2002).
- [27] L. Kouwenhoven, and L. Glazman, Revival of the Kondo effect, Phys. world Jan., 33 (2001).
- [28] J. Kondo, Resistance minimum in dilute magnetic alloys, J. Prog. Theor. Phys. 32, 37 (1964).
- [29] A. C. Hewson, The Kondo problem to heavy fermions, Cambridge Univ. Press, (1993).
- [30] P. W. Anderson, G. Yuval, and D. R. Hamann, Exact results in the Kondo problem. II. Scaling theory, qualitatively correct solution, and some new results on one-dimensional classical statistical models, Phys. Rev. B 1, 4464 (1970).
- [31] P. W. Anderson, A poor man's derivation of scaling laws for the Kondo problem, J. Phys. C 3, 2439 (1970).
- [32] K. G. Wilson, The renormalization group: Critical phenomena and the Kodno problem, Rev. Mod. Phys. 47, 773 (1975).
- [33] 张广铭,于渌,近藤共振现象及其在低维电子系统中的实现,物理 36, 435 (2007).

- [34] M. A. Rudrman, and C. Kittle, Indirect exchange coupling of nuclear magnetic moments by conduction electrons, Phys. Rev. B 96, 99 (1954).
- [35] T. Kasuya, Electrical resistance of ferromagnetic metals, Prog. Theor. Phys. 16, 58 (1956).
- [36] K. Yosida, Magnetic properties of Cu-Mn alloys, Phys. Rev. 106, 893 (1969).
- [37] S. Doniach, The Kondo lattice and weak antiferromagnetism, Physica B 91B, 231 (1977).
- [38] J. R. Schrieffer, and P. A. Wolff, Relation between the Anderson and Kondo Hamiltonians, Phys. Rev. 149, 491 (1966).
- [39] L. D. Landau, and E. M. Lifshitz, *Statistical Physics I*, Oxford: Pergomon Press, (1980).
- [40] V. Barzykin, and D. Pines, Two-fluid behavior of the Kondo lattice in the 1/N slave boson approach, Phys. Rev. Lett. 96, 247002 (2006).
- [41] V. Barzykin, and D. Pines, Universal behaviour and the two-component character of magnetically underdoped cuprate superconductors, Adv. Phys. 58, 1 (2009).
- [42] L. Ma, G. F. Ji, J. Dai, J. B. He, D. M. Wang, G. F. Chen, B. Normand, and W. Q. Yu, Local spin fluctuations in iron-based superconductors: ⁷⁷Se and ⁸⁷Rb NMR measurements on Tl_{0.47}Rb_{0.34}Fe_{1.63}Se₂, Phys. Rev. B 84, 220505(R) (2011).
- [43] P. C. Dai, J. P. Hu, and E. Dagotto, Magnetism and its microscopic origin in iron-based high-temperature superconductors, Nat. Phys. 8, 709 (2012).
- [44] Y. Z. You, and Z. Y. Weng, Two-fluid description for iron-based superconductors, New J. Phys. 16, 023001 (2014).
- [45] L. de' Medici, G. Giovannetti, and M. Capone, Selective Mott physics as a key to iron superconductors, Phys. Rev. Lett. 112, 177001 (2014).

- [46] S. Nakatsuji, D. Pines, and Z. Fisk, Two fluid description of the Kondo Lattice, Phys. Rev. Lett. 92, 016401 (2004).
- [47] 杨义峰, 谢能, 李宇, 重费米子二流体理论, 物理学进展 35, 191 (2015).
- [48] Y.-F. Yang, Two-Fluid model in heavy electron physics, arXiv:1601.06050 (2016).
- [49] Y.-F. Yang, Z. Fisk, H. O. Lee, J. D. Thompson, and D. Pines, Scaling the Kondo lattice, Nature (London) 454, 611 (2008).
- [50] S. Nakatsuji, S. Yeo, L. Balicas, Z. Fisk, P. Schlottmann, P. G. Pagliuso, and N. O. Moreno, *Intersite coupling effects in a Kondo lattice*, Phys. Rev. Lett. 89, 106402 (2002).
- [51] Y.-F. Yang, and D. Pines, Universal behavior in heavy-electron materials, Phys. Rev. Lett. 100, 096404 (2008).
- [52] Y.-F. Yang, R. Urbano, N. J. Curro, D. Pines, and E. D. Bauer, Magnetic excitations in Kondo liquid: Superconductivity and hidden magnetic quantum critical fluctuations, Phys. Rev. Lett. 103, 197004 (2009).
- [53] Y.-F. Yang, Anomalous Hall effect in heavy electron materials, Phys. Rev. B 87, 045102 (2013).
- [54] N. J. Curro, Nuclear magnetic resonance in the heavy fermion superconductors, Rep. Pro. Phys. 72, 026502 (2009).
- [55] N. J. Curro, B. L. Young, J. Schmalian, and D. Pines, Scaling in the emergent behavior of heavy-electron materials, Phys. Rev. B 70, 235117 (2004).
- [56] Y. F. Yang, and D. Pines, Emergent states in heavy-electron materials, Proc. Nal. Acad. Sci. USA 109, E3060 (2012).
- [57] V. Barzykin, Two-fluid behavior of the Kondo lattice in the 1/N slave boson approach, Phys. Rev. B, 73, 094455 (2006).

- [58] A. Ramires, and P. Coleman, Supersymmetric approach to heavy fermion systems, Phys. Rev. B 93, 035120 (2016).
- [59] G. Lonzarich, D. Pines, and Y.-F. Yang, Toward a new microscopic framework for Kondo lattice materials, arXiv:1601.06050 (2016).
- [60] L. J. Zhu, and J. X. Zhu, Coherence scale of coupled Anderson impurities, Phys. Rev. B 83, 195103 (2011).
- [61] M. Jiang, N. J. Curro, and R. T. Scalettar, Universal Knight shift anomaly in the periodic Anderson model, Phys. Rev. B 90, 241109(R) (2014).
- [62] J. H. Shim, K. Haule, and G. Kotliar, Modeling the localized-to-itinerant electronic transition in the heavy fermion system CeIrIn₅, Science **318**, 1615 (2007).
- [63] U. Schollwöck, The density-matrix renormalization group, Rev. Mod. Phys. 77, 259 (2005).
- [64] K. Hallberg, New trends in density matrix renormalization, Adv. Phys. 55, 477 (2006).
- [65] R. M. Noack, and S. R. White, Density-matrix renormalization: A new numerical method in physics, Charpter 2, Springer, Berlin Heidelberg, (1999).
- [66] S. R. White, Density matrix formulation for quantum renormalization groups, Phys. Rev. Lett. 69, 2863 (1992).
- [67] S. R. White, Density-matrix algorithms for quantum renormalization groups, Phys. Rev. B 48, 10345 (1993).
- [68] S. R. White, Density matrix renormalization group algorithms with a single center site, Phys. Rev. B 72, 180403(R) (2005).
- [69] E. M. Stoudenmire, and S. R. White, *Real-space parallel density matrix renormalization group*, Phys. Rev. B 87, 155137 (2013).

- [70] I. P. McCulloch, and M. Gulácsi, The non-Abelian density matrix renormalization group algorithm, Europhys. Lett. 57, 852 (2002).
- [71] L. C. Biedenharn, and J. D. Louk, Angular momentum in quantum physics, Addison-Wesley, Massachusetts, (1981).
- [72] G. Alvarez, Implementation of the SU(2) Hamiltonian symmetry for the DMRG Algorithm, Comput. Phys. Commun. 183, 226 (2012).
- [73] E. Dagotto, Correlated electrons in high-temperature superconductors, Rev. Mod. Phys. 66, 763 (1994).
- [74] N. Xie, and Y.-F. Yang, Interplay of localized and itinerant behavior in the one-dimensional Kondo-Heisenberg model, Phys. Rev. B 91, 195116 (2015).
- [75] H. Tsunetsugu, M. Sigrist, and K. Ueda, The ground-state phase diagram of the one-dimensional Kondo lattice model, Rev. Mod. Phys. 69, 809 (1997).
- [76] M. Gulàcsi, The one-dimensional Kondo lattice model at partial band filling, Adv. Phys. 53, 769 (2004).
- [77] S. Moukouri, and L. G. Caron, Fermi surface of the one-dimensional Kondo-lattice model, Phys. Rev. B 54, 12212 (1996).
- [78] G. Alvarez, The density matrix renormalization group for strongly correlated electron systems: A generic implementation, Comput. Phys. Commun. 180, 1572 (2009).
- [79] H.-J. Mikeska and A. K. Kolezhuk, One-dimensional magnetism, Lect. Notes Phys. 645, 1 (2004).
- [80] H. Shishido, R. Settai, H. Harima, and Y. Onuki, A change of the Fermi surface in CeRhIn5 under pressure, Fermi-surface collapse and dynamical scaling near a quantum-critical point, Physica B 378-380, 92 (2006).

- [81] S. Friedemann, N. Oeschler, S. Wirth, C. Krellner, C. Geibel, F. Steglich, S. Paschen, S. Kirchner, and Q. Si, *Fermi-surface collapse and dynamical scaling near a quantum-critical point*, Proc. Natl. Acad. Sci. USA **107**, 14547 (2010).
- [82] M. Yamanaka, M. Oshikawa, and I. Affleck, Nonperturbative approach to Luttinger's theorem in one dimension, Phys. Rev. Lett. 79, 1110 (1997).
- [83] E. Eidelstein, S. Moukouri, and A. Schiller, Quantum phase transitions, frustration, and the Fermi surface in the Kondo lattice model, Phys. Rev. B 84, 014413 (2011).
- [84] P. Aynajian, E. H. da Silva Neto, A. Gyenis, R. E. Baumbach, J. D. Thompson, Z. Fisk, E. D. Bauer and A. Yazdani, Visualizing heavy fermions emerging in a quantum critical Kondo lattice, Nature (London) 486, 201 (2012).
- [85] S.-K. Mo, W. S. Lee, F. Schmitt, Y. L. Chen, D. H. Lu, C. Capan, D. J. Kim, Z. Fisk, C.-Q. Zhang, Z. Hussain, and Z.-X. Shen, *Emerging coherence with unified energy, temperature, and lifetime scale in heavy fermion YbRh₂Si₂*, Phys. Rev. B 85, 241103(R) (2012).
- [86] N. D. Mermin, and H. Wagner, Absence of ferromagnetism or antiferromagnetism in one- or two-dimensional isotropic Heisenberg models, Phys. Rev. Lett. 17, 1133 (1966).
- [87] J. Figgins and D. K. Morr, Defects in heavy-fermion materials unveiling strong correlations in real space, Phys. Rev. Lett. 107, 066401 (2011).
- [88] M. H. Hamidian, A. R. Schmidt, I. A. Firmo, M. P. Allan, P. Bradley, J. D. Garrett, T. J. Williams, G. M. Luke, Y. Dubi, A. V. Balatsky, and J. C. Davis, *How Kondo-holes create intense nanoscale heavy-fermion hybridization disorder*, Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A. **108**, 18233 (2011).

- [89] J. X. Zhu, J.-P. Julien, Y. Dubi, and A. V. Balatsky, Local electronic structure and Fano interference in tunneling into a Kondo hole system, Phys. Rev. Lett. 108, 186401 (2012).
- [90] P. P. Baruselli, and M. Vojta, Kondo holes in topological Kondo insulators spectral properties and surface quasiparticle interference, Phys. Rev. B 89, 205105 (2014).
- [91] P. Kumar and N. S. Vidhyadhiraja, Kondo-hole substitution in heavy fermions dynamics and transport, Phys. Rev. B 90, 235133 (2014).
- [92] I. Maruyama, N. Shibata, and K. Ueda, Kondo hole in one-dimensional Kondo insulators, Phys. Rev. B 65, 174421 (2002).
- [93] S. Costamagna, and J. A. Riera, Magnetic and transport properties of the one-dimensional ferromagnetic Kondo lattice model with an impurity, Phys. Rev. B 77, 045302 (2008).
- [94] N. Shibata, K. Ueda, T. Nishino, and C. Ishii, Friedel oscillations in the one-dimensional Kondo lattice model, Phys. Rev. B 54, 13495 (1996).
- [95] E. Eidelstein, S. Moukouri, and A. Schiller, Quantum phase transitions, frustration, and the Fermi surface in the Kondo lattice model, Phys. Rev. B 84, 014413 (2011).
- [96] J. C. Xavier, E. Novais, and E. Mirada, Small Fermi surface in the onedimensional Kondo lattice model, Phys. Rev. B 65, 214406 (2002).
- [97] E. G. D. Torre, D. Benjamin, Y. He, D. Dentelski, and E. Demler, Friedel Oscillations as a Probe of Fermionic Quasiparticles, arXiv:1507.04345.
- [98] M. Z. Hasan, and C. L. Kane, Colloquium: Topological insulators, Rev. Mod. Phys. 82, 3045 (2010).
- [99] X.-L. Qi and S.-C. Zhang, Topological insulators and superconductors, Rev. Mod. Phys. 83, 1057 (2011).

- [100] C. L. Kane and E. J. Mele, Quantum spin hall effect in graphene, Phys. Rev. Lett. 95, 226801 (2005).
- [101] C. Wu, B. A. Bernevig, and S.-C. Zhang, *Helical Liquid and the edge of quantum spin Hall systems*, Phys. Rev. Lett. **96**, 106401 (2006).
- [102] S. Raghu, X.-L. Qi, C. Honerkamp, and S.-C. Zhang, Topological Mott insulators, Phys. Rev. Lett. 100, 156401 (2008).
- [103] M. Levin, and A. Stern, Fractional topological insulators, Phys. Rev. Lett. 103, 196803 (2009).
- [104] D. A. Pesin and L. Balents, Mott physics and band topology in materials with strong spin-orbit interaction, Nat. Phys. 6, 376 (2010).
- [105] M. Hohenadler, and F. F. Assaad, Correlation effects in two-dimensional topological insulators, J. Phys. Condens. Matter. 25, 143201 (2013).
- [106] F. Lu, J. Z. Zhao, H. M. Weng, Z. Fang, and X. Dai, Correlated topological insulators with mixed valence, Phys. Rev. Lett. 110, 096401 (2013).
- [107] S. Wolgast, C. Kurdak, K. Sun, J. W. Allen, D.-J. Kim, and Z. Fisk, Low-temperature surface conduction in the Kondo insulator SmB₆, Phys. Rev. B 88, 180405 (2013).
- [108] D. J. Kim, S. Thomas, T. Grant, J. Botimer, Z. Fisk, and J. Xia, Surface Hall effect and nonlocal transport in SmB₆: Evidence for surface conduction, Sci. Rep. 3, 3150 (2013).
- [109] V. Alexandrov, P. Coleman, and O. Erten, Kondo breakdown in topological Kondo insulators, Phys. Rev. Lett. 114, 177202 (2015).
- [110] O. Erten, P. Ghaemi, and P. Coleman, Kondo breakdown and quantum oscillations in SmB₆, Phys. Rev. Lett. **116**, 046403 (2016).
- [111] X.-Y. Feng, J. H. Dai, C.-H. Chung, and Q. Si, Competing topological and Kondo insulator phases on a Honeycomb lattice, Phys. Rev. Lett. 111, 016402 (2013).

- [112] L.-J. Lang, X. M. Cai, and S. Chen, Edge states and topological phases in one-dimensional optical superlattices, Phys. Rev. Lett. 108, 220401 (2012).
- [113] Y. E. Kraus, Y. Lahini, Z. Ringel, M. Verbin, and O. Zilberberg, Topological states and adiabatic pumping in quasicrystals, Phys. Rev. Lett. 109, 106402 (2012)
- [114] D. R. Hofstadter, Energy levels and wave functions of Bloch electrons in rational and irrational magnetic fields, Phys. Rev. B 14, 2239 (1976).
- [115] M. J. Rice, and E. J. Mele, Elementary excitations of a linearly conjugated diatomic polymer, Phys. Rev. Lett. 49, 1455 (1982).
- [116] W. P. Su, J. R. Schrieffer, and A. J. Heeger, Solitons in polyacetylene, Phys. Rev. Lett. 42, 1698 (1979).
- [117] D. Xiao, M.-C. Chang, and Q. Niu, Berry phase effects on electronic properties, Rev. Mod. Phys. 82, 1959 (2010).
- [118] T. Fukui, Y. Hatsugai, and H. Suzuki, Chern numbers in discretized Brillouin zone: Efficient Method of Computing (Spin) Hall Conductance, J. Phys. Soc. Jpn. 74, 1674 (2005).
- [119] S. Ryu, and Y. Hatsugai, Topological origin of zero-energy edge states in particle-hole symmetric systems, Phys. Rev. Lett. 89, 077002 (2002).
- [120] E. J. Bergholtz, Density matrix renormalization group analysis of spin chains and quantum Hall systems, Master's Thesis, Stockholm University, Stockholm, (2002).

简 历

基本情况

谢能,男,湖南省常德市人,1989年9月出生,未婚,中国科学院物理研 究所在读博士研究生。

教育状况

- 2007 年 9 月至 2011 年 7 月,湖南大学物理与微电子科学学院,本科,专业:应用物理学。
- 2011 年 9 月至 2016 年 7 月,中国科学院物理研究所,硕博连读研究生,专业:理论物理。

工作经历

无。

研究兴趣

重费米子体系f电子局域与巡游的二重性,一维系统的新奇量子现象等。

联系方式

E-mail: xieneng@iphy.ac.cn
发表文章目录

- Neng Xie, and Yi-feng Yang, Interplay of localized and itinerant behavior in the one-dimensional Kondo-Heisenberg model, Phys. Rev. B 91, 195116 (2015).
- [2] 杨义峰, 谢能, 李宇, 重费米子二流体理论, 物理学进展 35, 191 (2015).
- [3] **Neng Xie**, and Yi-feng Yang, Kondo hole induced hybridization oscillation in the one-dimensional Kondo-Heisenberg model, to be submitted.
- [4] **Neng Xie**, Shu Chen, and Yi-feng Yang, *The interplay of topological end* state and Kondo physics in one dimension, in preparation.

致 谢

事谢于往,法相续今。弹指间,又到了杨絮纷飞,各自寻门的毕业时节。

这篇论文的完成,既是自己五年读博生涯学习和工作的总结,也是导师杨 义峰研究员无私关怀与细心指导的结果。杨老师物理图像清晰,眼光敏锐,总 是能快速抓住问题的核心,和老师的讨论使我受益匪浅;对待工作,杨老师一 丝不苟,认真负责,言传身教间极大的改正了我浮躁的科研习惯;杨老师注重 学生独立学习和自主研究的能力培养,这让我克服了依赖他人的思想惰性,增 强了自我实践的品格。感谢杨老师在读博期间对我的悉心教导!

感谢北京理工大学姚裕贵教授在研一时对我的照顾和支持,使我较顺利地 开始了研究生阶段的学习。

同时我要感谢课题组付召明师兄,张树峰、魏兰英、林赫羽、宋士儒,以 及李宇、刘敏、徐远骥、胡丹青、杜光乐、俞楠、何馨、韩儒磊、黄东宸等师 弟师妹。感谢他们在科研和生活上对我的帮助,和他们一起工作、一起讨论、 一起游玩使我的研究生阶段充实而丰富。

感谢曾在M楼848室一起学习的张健敏、刘铖铖、周金健、李欣等,感谢物理所刘瑜、崔帅、胡海平、黄瑞珍等的有益讨论;感谢物理所2011届301班的 老乡刘利书、莲友符培源,以及室友曾昱、廉朝胜和王栋;感谢理论室的球友 吴贤新、王义林、刘阳、聂思敏、许霄琰、徐远锋和曾进峰。

最后感谢我的父母在我读博期间的支持和鼓励!

学位论文原创性声明和使用授权说明

原创性声明

本人郑重声明:所呈交的学位论文,是本人在导师指导下,独立进行研究 工作所取得的成果。本论文所参考的其他个人或集体已经发表或撰写的成果、 数据和观点等,均已在文中明确注明出处。除此之外,尽我所知,本论文不包 含任何他人享有著作权的内容。对本论文研究成果做出贡献的个人和集体,本 人已在文中作了明确的说明并表示谢意。

本人愿意承担由此声明而产生的一切法律责任。

学位论文作者签名: 日期: 年 月 日

关于学位论文使用授权的声明

本人声明:本人在毕业后发表、使用与本论文直接相关的学术论文或成果时,本人的第一署名单位仍然为中国科学院物理研究所(以下简称为物理所); 本人同意物理所保留并向国家有关部门或机构提交本学位论文的纸质版和电子版,允许论文被查阅和借阅;本人授权物理所将本学位论文的全部或部分内容 编入有关数据库进行检索,并可以采用复印、缩印或其它手段保存和汇编本学 位论文。

学位论文作者签名: 日其	期: 年	月 E
--------------	------	-----

导师签名: 日期: 年月日