

Magnetic Transition in Non-Symmetric Anderson Lattice Model

Huan Li

Guilin University of Technology, Guilin Guangxi
Email: lihuan@glut.edu.cn

Received: Feb. 7th, 2019; accepted: Feb. 20th, 2019; published: Feb. 27th, 2019

Abstract

Anderson lattice model, which can be solved by the widely used slave-boson method, is a standard model to describe the heavy-fermion systems. However, the normal Kotliar-Ruckenstein slave-boson method is limited to the case with particle-hole symmetry, particular in investigating the magnetic phase in Anderson lattice model. In this paper, the Kotliar-Ruckenstein method is generalized to include the non-symmetric case which violates the particle-hole symmetry. Then, the magnetic phase boundary in Anderson lattice model is studied as a function of lattice dimension, electron-hopping amplitudes, Coulomb correlation, electron hybridization and local energy level.

Keywords

Heavy-Fermion, Magnetic Transition, Phase Diagram

非对称性Anderson晶格模型中的磁性相变研究

黎欢

桂林理工大学, 广西 桂林
Email: lihuan@glut.edu.cn

收稿日期: 2019年2月7日; 录用日期: 2019年2月20日; 发布日期: 2019年2月27日

摘要

Anderson晶格模型是描述重费米子系统的重要理论模型, 而隶玻色子方法是求解该模型的常用方法。然而, 通常的Kotliar-Ruckenstein隶玻色子方法只能处理该模型的粒子-空穴对称情形。本文将Kotliar-Ruckenstein方法加以推广, 使之能够处理偏离粒子-空穴对称的非对称情形, 并用之研究了非对称性Anderson晶格模型中的磁性相变, 展示了晶格维度、电子跳迁系数、库仑关联强度、电子杂化强

度、局域电子能级等多种参数对磁性相变边界的影响。

关键词

重费米子, 磁性相变, 相图

Copyright © 2019 by author(s) and Hans Publishers Inc.

This work is licensed under the Creative Commons Attribution International License (CC BY).

<http://creativecommons.org/licenses/by/4.0/>



Open Access

1. 引言

二十世纪七十年代以来, 实验发现许多稀土和镧系元素的化合物在低温下的电子比热系数高达普通金属的上千倍[1], 此类材料中传导电子与局域电子发生近藤耦合, 形成有效质量很高的准粒子, 故被称为重费米子化合物[2]。由于内部多种机制的竞争, 使重费米子化合物呈现出丰富物相, 如磁有序相[3]、近藤顺磁相[4]、重费米子超导相[5]等, 因此多年以来成为凝聚态物理的重要研究对象。近年以来, 由于拓扑性近藤绝缘体[6]、非中心对称性重费米子超导体[7]、Weyl 近藤半金属[8]等奇异物相和拓扑物相的发现, 重费米子系统成为当前凝聚态物理的研究热点之一。

重费米子系统通常由 Anderson 晶格模型描述[9], 模型中局域电子间的在位库仑排斥作用导致较强的磁性关联, 通常为反铁磁关联, 而磁性关联在磁有序和超导等的形成中均起重要作用, 在一定条件下可使体系发生磁性相变, 甚至发生磁有序 - 近藤屏蔽或者磁有序 - 超导相的共存[3] [10]。因此, 对 Anderson 晶格模型中的磁性和磁性相变的研究具有重要意义。文献中对 Anderson 晶格模型的磁性相变的研究主要采用蒙特卡洛模拟[11]和 Kotliar-Ruckenstein 赝玻色子平均场近似等方法[12], 两种方法得到的磁性相变点颇为接近, 但都局限于研究模型中粒子 - 空穴对称的情形。然而, 实际的重费米子系统难以满足这种粒子 - 空穴对称性, 因为库仑关联能、电子跳迁系数、局域电子能级等参数都是可以变化的。因此, 发展一种适用性更强的赝玻色子方法, 以研究 Anderson 晶格模型在偏离粒子 - 空穴对称性时的磁有序相和磁性相变是很有必要的。特别是, 对近年来的热点研究对象——拓扑性近藤绝缘体如 SmB6 和 Weyl 近藤半金属中可能发生的磁性相变[8] [13], 都需要发展这种方法。

本文将 Anderson 晶格模型的传统 Kotliar-Ruckenstein 赝玻色子平均场方法推广到偏离粒子 - 空穴对称性(即非对称)的情况, 并研究了二维和三维的非对称性 Anderson 晶格模型的磁性相变边界与电子跳迁系数、电子杂化常数、局域电子能级、库仑关联强度等参数的关系。本文的方法可应用于对重费米子系统中磁性相变的进一步研究。

2. 模型与计算方法

我们采用标准的 Anderson 晶格模型来描述重费米子系统, 所在晶格为二维正方晶格或三维立方晶格, 模型哈密顿量为[9]:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{i,j,\sigma} (t_{ij}^d d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + t_{ij}^f f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma}) + \epsilon_f \sum_{i,\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \\
 & + U \sum_i n_{i\uparrow}^f n_{i\downarrow}^f + V \sum_{i,\sigma} (d_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + h.c.) \\
 & - \mu \sum_{i,\sigma} (d_{i\sigma}^\dagger d_{i\sigma} + f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma})
 \end{aligned} \quad (1)$$

其中 $d_{i\sigma}^\dagger$ 、 $f_{i\sigma}^\dagger$ 分别为 i 格点处自旋为 σ 的传导型 d 电子和局域型 f 电子的产生算符。我们将 d 电子和 f 电子的跳迁系数 t_{ij}^d 、 t_{ij}^f 都考虑到次近邻，其中最近邻的跳迁系数记为 t_d 、 t_f ，次近邻跳迁系数记为 t'_d 、 t'_f ，并将 t_d 作为能量单位，即 $t_d = 1$ ，这样，模型中其余的相互作用，包括 f 电子能级 ϵ_f 、 f 电子间的库仑排斥能 U 、 d - f 杂化强度 V 、化学势 μ (用以调整电子总数) 都以 t_d 为单位。本文研究 Anderson 晶格模型的半满情形(每个格点上 d 电子和 f 电子总数为 $n_i = 2$)，对应于近藤绝缘体，但本文的方法同样可以应用于偏离半满时的导电情形。

采用 Kotliar-Ruckenstein 赝玻色子表象[12]，将 f 电子的 Hilbert 空间分为双占据、单占据和空占据，分别用玻色子算符 D_i^\dagger 、 $P_{i\sigma}^\dagger$ 、 e_i^\dagger 来产生这些态，要求 $\sum_{\sigma} P_{i\sigma}^\dagger P_{i\sigma} + D_i^\dagger D_i + e_i^\dagger e_i = 1$ 和 $f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} = P_{i\sigma}^\dagger P_{i\sigma} + D_i^\dagger D_i$ ，并通过在哈密顿量中添加两个拉格朗日项来实现此两个限制条件，它们分别具有拉格朗日乘子 $\lambda_i^{(1)}$ 和 $\lambda_{i\sigma}^{(2)}$ 。另外，为了产生正确的 f 电子数目，在 d - f 杂化项和跳迁项中的 f 电子算符需要乘上因子 $Z_{i\sigma}$ [12]。量子蒙特卡罗模拟和理论计算均发现，Anderson 晶格模型在半满时，随着 V 的增加，发生从反铁磁相到顺磁性的近藤屏蔽相的相变[11]。对反铁磁相，定义 $P_{i\uparrow}^2 + P_{i\downarrow}^2 + 2D_i^2 = n_i^f$ ， $P_{i\uparrow}^2 - P_{i\downarrow}^2 = m_i^f$ ， $(\lambda_{i\uparrow}^{(2)} + \lambda_{i\downarrow}^{(2)})/2 = \eta_i$ ， $(\lambda_{i\uparrow}^{(2)} - \lambda_{i\downarrow}^{(2)})/2 = -h_i$ ，其中 m_i^f 和 h_i 为随格点交错变化的反铁磁序参数， n_i^f 为 i 格点上的 f 电子数目， η_i 为 f 电子能级的重整化参数。在这样的赝玻色子表象下，模型哈密顿量变为：

$$H = \sum_i (U\delta_i + h_i m_i^f - \eta_i n_i^f) + \sum_{i,j,\sigma} (t_{ij}^d - \mu\delta_{ij}) d_{i\sigma}^\dagger d_{j\sigma} + \sum_{i,\sigma} (\epsilon_f + \eta_i - \sigma h_i - \mu) f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + \sum_{i,j,\sigma} t_{ij}^f Z_{i\sigma} Z_{j\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + V \sum_{i,\sigma} (Z_{i\sigma} d_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} + h.c.) \quad (2)$$

其中 $\delta_i = D_i^2$ 为 i 格点上 f 电子的双占据几率。对各参数采用平均场近似： $\delta_i = \delta$ ， $n_i^f = n_f$ ， $m_i^f = (-1)^i m_f$ ， $h_i = (-1)^i h$ ，则有 $Z_{i\in A,\uparrow} = Z_{i\in B,\downarrow} = Z_1$ ， $Z_{i\in A,\downarrow} = Z_{i\in B,\uparrow} = Z_2$ ，其中A和B为根据磁矩朝向分成的两个子格，并有

$$Z_1 = \frac{\sqrt{2} \left(\sqrt{(n_f - 2\delta + m_f)(1 - n_f + \delta)} + \sqrt{\delta(n_f - 2\delta - m_f)} \right)}{\sqrt{(n_f + m_f)(2 - n_f - m_f)}}, \quad (3)$$

$$Z_2 = \frac{\sqrt{2} \left(\sqrt{(n_f - 2\delta - m_f)(1 - n_f + \delta)} + \sqrt{\delta(n_f - 2\delta + m_f)} \right)}{\sqrt{(n_f - m_f)(2 - n_f + m_f)}}$$

做此种平均场近似后，可对哈密顿量(2)式做傅里叶变换，在波矢空间将其表示为：

$$H = N(U\delta + hm_f - \eta n_f) + \sum_{\mathbf{k} \in \text{MBZ}} \Psi_{\mathbf{k}}^\dagger \mathbf{H}_{\mathbf{k}} \Psi_{\mathbf{k}}, \quad (4)$$

其中对波矢 \mathbf{k} 的求和局限于磁布里渊区，为晶格布里渊区的一半大小。上式中算符定义为：

$\Psi_{\mathbf{k}} = (d_{\mathbf{k}A\uparrow}, d_{\mathbf{k}A\downarrow}, d_{\mathbf{k}B\uparrow}, d_{\mathbf{k}B\downarrow}, f_{\mathbf{k}A\uparrow}, f_{\mathbf{k}A\downarrow}, f_{\mathbf{k}B\uparrow}, f_{\mathbf{k}B\downarrow})^T$ ，哈密顿矩阵为

$$\mathbf{H}_{\mathbf{k}} = \begin{pmatrix} \mathbf{H}_{\mathbf{k}}^d & \mathbf{V}_{\mathbf{k}} \\ \mathbf{V}_{\mathbf{k}}^\dagger & \mathbf{H}_{\mathbf{k}}^f \end{pmatrix}, \quad (5)$$

其中 $\mathbf{H}_{\mathbf{k}}^d = \begin{pmatrix} (t'_d \gamma_{\mathbf{k}} - \mu) I_2 & t_d \lambda_{\mathbf{k}} I_2 \\ t_d \lambda_{\mathbf{k}} I_2 & (t'_d \gamma_{\mathbf{k}} - \mu) I_2 \end{pmatrix}$ ，

$$\mathbf{V}_{\mathbf{k}} = V \begin{pmatrix} Z_1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & Z_2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & Z_2 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & Z_1 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H}_k^f = \begin{pmatrix} e_{1k} & 0 & Z_1 Z_2 t_f \lambda_k & 0 \\ 0 & e_{2k} & 0 & Z_1 Z_2 t_f \lambda_k \\ Z_1 Z_2 t_f \lambda_k & 0 & e_{2k} & 0 \\ 0 & Z_1 Z_2 t_f \lambda_k & 0 & e_{1k} \end{pmatrix},$$

其中 I_2 是 2×2 单位矩阵, $e_{1k} = \epsilon_f + \eta - \mu - h + t'_f Z_1^2 \gamma_k$, $e_{2k} = \epsilon_f + \eta - \mu + h + t'_f Z_2^2 \gamma_k$ 。对二维正方晶格有 $\lambda_k = -2(\cos k_x + \cos k_y)$, $\gamma_k = -4 \cos k_x \cos k_y$, 而对三维立方晶格有 $\gamma_k = -4(\cos k_x \cos k_y + \cos k_x \cos k_z + \cos k_y \cos k_z)$, $\lambda_k = -2(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)$ 。

反铁磁相的准粒子能谱由(5)式中矩阵 \mathbf{H}_k 的本征值决定, 并可进一步自洽确定平均场参数 δ , n_f , m_f , h , η , μ , 从而最终求解反铁磁相。这样, 我们将 Kotliar-Ruckenstein 的理论推广到了非对称情形, 得到了一般参数情况下 Anderson 晶格模型中反铁磁相的哈密顿量(4)式, 下面分情况详细说明对此哈密顿量的求解过程。

3. 粒子 - 空穴对称情况

为了讨论完整起见, 首先我们分析粒子 - 空穴对称情况下的 Anderson 晶格模型(以下简称为对称性 Anderson 晶格模型)。对哈密顿量(1)式进行粒子 - 空穴变换 $d_{i\sigma} \rightarrow (-1)^i d_{i\sigma}^\dagger$, $f_{i\sigma} \rightarrow (-1)^{i+1} f_{i\sigma}^\dagger$, 发现哈密顿量不发生改变(即具备粒子 - 空穴对称性)的条件是 $\epsilon_f = -U/2$, $\mu = 0$, 且只含最近邻跃迁即 $t'_d = 0$, $t'_f = 0$, 并且此时有 $n_f = 1$, $\eta = U/2$ 。因此, 从(2)式出发, 对称性 Anderson 晶格模型的赝玻色子近似大大简化, 此时其平均场哈密顿量为

$$H = N(U\delta + hm_f - U/2) + \sum_{k \in \text{MBZ}, \sigma} \Psi_{k\sigma}^\dagger \mathbf{H}_{k\sigma} \Psi_{k\sigma}, \quad (6)$$

其中 $\Psi_{k\sigma} = (d_{k\sigma}, d_{k+\mathbf{Q}\sigma}, f_{k\sigma}, f_{k+\mathbf{Q}\sigma})^\top$, 反铁磁矢量为

$\mathbf{Q} = (\pi, \pi, \pi)$ (三维)或 $\mathbf{Q} = (\pi, \pi)$ (二维), 哈密顿量矩阵为

$$\mathbf{H}_{k\sigma} = \begin{pmatrix} \epsilon_k & 0 & VZ & 0 \\ 0 & -\epsilon_k & 0 & VZ \\ VZ & 0 & \alpha Z^2 \epsilon_k & 0 \\ 0 & VZ & 0 & -\alpha Z^2 \epsilon_k \end{pmatrix}, \quad (7)$$

其中 $\alpha = t_f/t_d$, $\epsilon_k = -2t_d(\cos k_x + \cos k_y)$ (二维)或 $\epsilon_k = -2t_d(\cos k_x + \cos k_y + \cos k_z)$ (三维)为紧束缚型的 d 电子能带, $Z = \sqrt{2\delta}(\sqrt{1-2\delta+m_f} + \sqrt{1-2\delta-m_f})/\sqrt{1-m_f^2}$, 对式(7)中 $\mathbf{H}_{k\sigma}$ 对角化得到准粒子能谱为

$$\begin{aligned} E_k^\pm &= \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{E_{1k} \pm \sqrt{E_{1k}^2 - E_{2k}^2}}, \\ E_{1k} &= (1 + \alpha^2 Z^4) \epsilon_k^2 + h^2 + 2V^2 Z^2, \\ E_{2k} &= \sqrt{4\epsilon_k^2 h^2 + 4Z^4 (V^2 - \alpha \epsilon_k^2)^2} \end{aligned} \quad (8)$$

从而得到对称性 Anderson 晶格模型中反铁磁相的基态能量为 $E_g = N \left(U\delta + hm_f - \frac{U}{2} \right) - \sum_{k \in \text{BZ}} \sqrt{E_{1k} + E_{2k}}$ 。由 E_g 对平均场参数 δ , m_f , h 求极值即可得到自洽方程组

$$\begin{aligned}
U - \frac{1}{N} \sum_{k \in \text{BZ}} \frac{2Z}{\sqrt{E_{1k} + E_{2k}}} \left[V^2 + t_f^2 Z^2 \varepsilon_k^2 + \frac{2Z^2 (V^2 - t_f \varepsilon_k^2)^2}{E_{2k}} \right] \frac{\partial Z}{\partial \delta} &= 0, \\
m_f - \frac{1}{N} \sum_{k \in \text{BZ}} \frac{h}{\sqrt{E_{1k} + E_{2k}}} \left(1 + \frac{2\varepsilon_k^2}{E_{2k}} \right) &= 0, \\
h &= U \cdot \frac{\partial Z}{\partial m_f} / \frac{\partial Z}{\partial \delta}
\end{aligned} \tag{9}$$

在选定的 U , t_f , V 下, 迭代求解自洽方程组(9)即可确定平均场参数 δ , m_f , h 。

在图 1 中, 我们展示了立方晶格中对称性 Anderson 晶格模型的反铁磁交错磁矩 m_f 随 d - f 杂化常数 V 的变化关系, 发现随着 V 的增大, m_f 逐渐下降, 在临界值 V_c 处降为零, 显示出明显的二级相变特征。这是由于, V 的增加会增强传导电子自旋对局域磁矩的近藤屏蔽效应, 从而压制了反铁磁序; 而在 V 较弱时, 由于 f 电子间的库仑关联导致强烈的反铁磁关联, 从而产生反铁磁序。这种反铁磁关联和近藤屏蔽效应之间的竞争在重费米子系统中普遍存在[3]。在图 2 中, 我们给出了正方晶格和立方晶格中的对称性 Anderson 晶格模型的反铁磁相变点 V_c 随 U 或 t_f 的变化关系。可以看出, 随 U 的增大, V_c 增大, 这是由于 U 的增加会提升反铁磁关联, 使反铁磁序更加稳定。另外立方晶格的 V_c 比正方晶格要大, 这是由于维度的增加有利于增强反铁磁关联, 所以需要更强的 d - f 杂化作用才能破坏反铁磁序。正方晶格中的对称性 Anderson 晶格模型的磁性相变点随 U 的变化已经由量子蒙特卡洛模拟和 Kotliar-Ruckenstein 赝玻色子方法给出[11][12], 但文献未能考虑 t_f 的影响。从图 2 可看出, V_c 受 t_f 影响很大, 这种行为与拓扑性近藤绝缘体的磁性相变点的行为类似[13]。

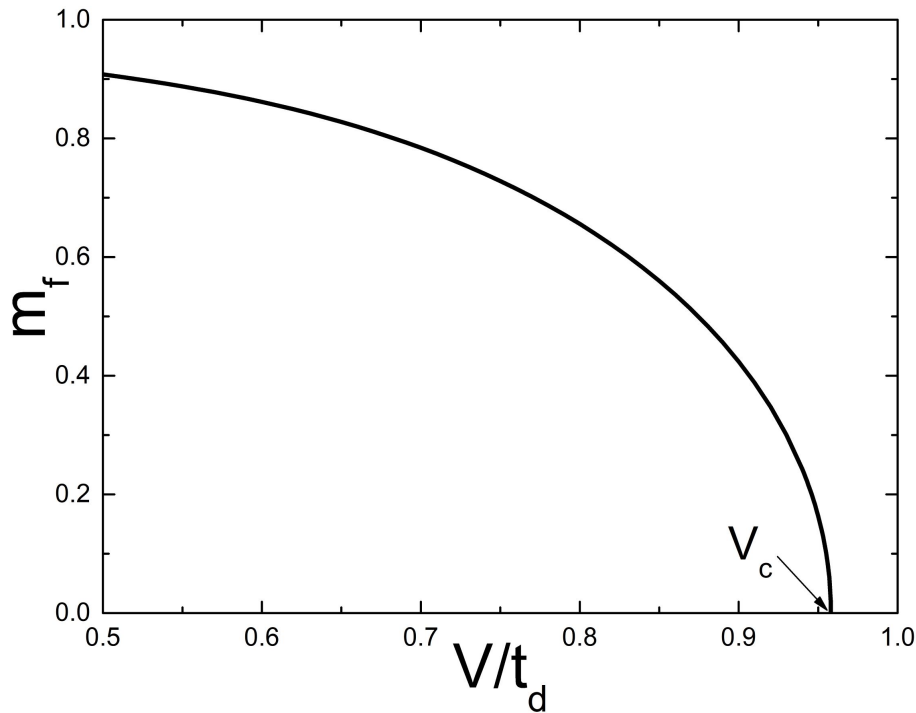


Figure 1. The staggered magnetization m_f of the symmetric Anderson lattice model vs d - f hybridization V in the cubic lattice. At critical V_c , an antiferromagnetic transition takes place. Model parameters: $t_f = -0.2$, $U = 4$

图 1. 立方晶格中, 对称性 Anderson 晶格模型的反铁磁磁矩 m_f 随 d - f 杂化强度 V 的变化, 在 V_c 处发生反铁磁相变。参数: $t_f = -0.2$, $U = 4$

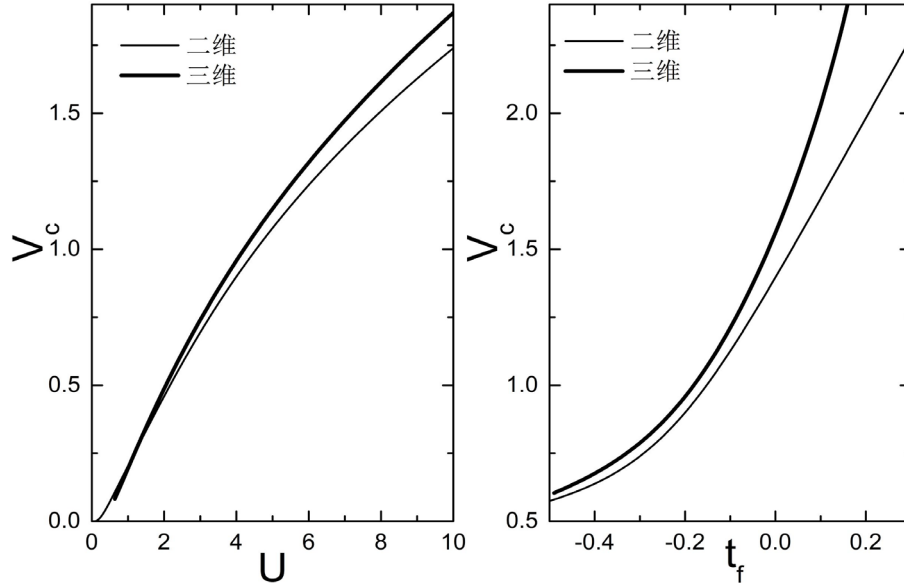


Figure 2. Antiferromagnetic transition point of the symmetric Anderson lattice model vs Coulomb correlation energy U (left) or t_f (right) in square (thin lines) and cubic lattice (thick lines). Parameters: $t_f = -0.2$ for left and $U = 4$ for right

图 2. 二维正方晶格和三维立方晶格中, 对称性 Anderson 晶格模型中反铁磁相变点 V_c 随库仑关联能 U (左图) 和 t_f (右图) 的变化。左图: $t_f = -0.2$, 右图: $U = 4$

4. 非粒子 - 空穴对称情况

当存在电子的次近邻跳迁即 $t'_d \neq 0$, $t'_f \neq 0$, 或 $\varepsilon_f \neq -U/2$ 时, Anderson 晶格模型不再具备粒子 - 空穴对称性(下文称之为非对称性 Anderson 晶格模型)。此时, 平均场参数 δ , n_f , m_f , h , η , μ 都需要自洽求解。从平均场哈密顿量(4)式出发, 由于其哈密顿量矩阵 \mathbf{H}_k 不再具有解析形式的本征值, 因此无法得出反铁磁相基态能量的解析表达式。为了得出确定六个平均场参数的自洽方程组, 把基态能量表示为哈密顿量(4)式的平均值:

$$E_g = N(U\delta + hm_f - \eta n_f + \mu n_t) + \sum_{k \in \text{MBZ}} (\mathbf{H}_k)_{nm} \langle nm \rangle_k, \quad (10)$$

再通过 E_g 关于 δ , n_f , m_f , h , η , μ 的极值得到六个自洽方程, 例如由 $\partial E_g / \partial \delta = 0$ 得到

$$U + \frac{1}{N} \sum_{n,m,k \in \text{MBZ}} \frac{\partial (\mathbf{H}_k)_{nm}}{\partial \delta} \langle nm \rangle_k = 0, \quad (11)$$

其中 $\langle nm \rangle_k \equiv \langle (\Psi_k^\dagger)_n (\Psi_k)_m \rangle$, 而 $\frac{\partial (\mathbf{H}_k)_{nm}}{\partial \delta}$ 由(5)式中 \mathbf{H}_k 的矩阵元 $(\mathbf{H}_k)_{nm}$ 算出。为了求出 $\langle nm \rangle_k$, 首先将 \mathbf{H}_k 数值对角化, 得到其本征值 $E_k^{(i)}$ ($i=1, \dots, 8$) 以及幺正变换矩阵 \mathbf{U}_k , 使得 $\mathbf{U}_k^\dagger \mathbf{H}_k \mathbf{U}_k = \mathbf{\Lambda}_k$, 其中 $\mathbf{\Lambda}_k$ 是由八个本征值构成的对角矩阵。这样, 有 $\Psi_k^\dagger \mathbf{H}_k \Psi_k = \Phi_k^\dagger \mathbf{\Lambda}_k \Phi_k$, 其中 Φ_k^\dagger 是准粒子产生算符。从而

$$\begin{aligned} \langle nm \rangle_k &\equiv \langle (\Psi_k^\dagger)_n (\Psi_k)_m \rangle \\ &= \left\langle \sum_i (\Phi_k^\dagger)_i (\mathbf{U}_k)_{ni}^* \sum_j (\mathbf{U}_k)_{mj} (\Phi_k)_j \right\rangle \\ &= \sum_{i=1}^8 (\mathbf{U}_k)_{ni}^* (\mathbf{U}_k)_{mi} \Theta(-E_k^{(i)}) \end{aligned} \quad (12)$$

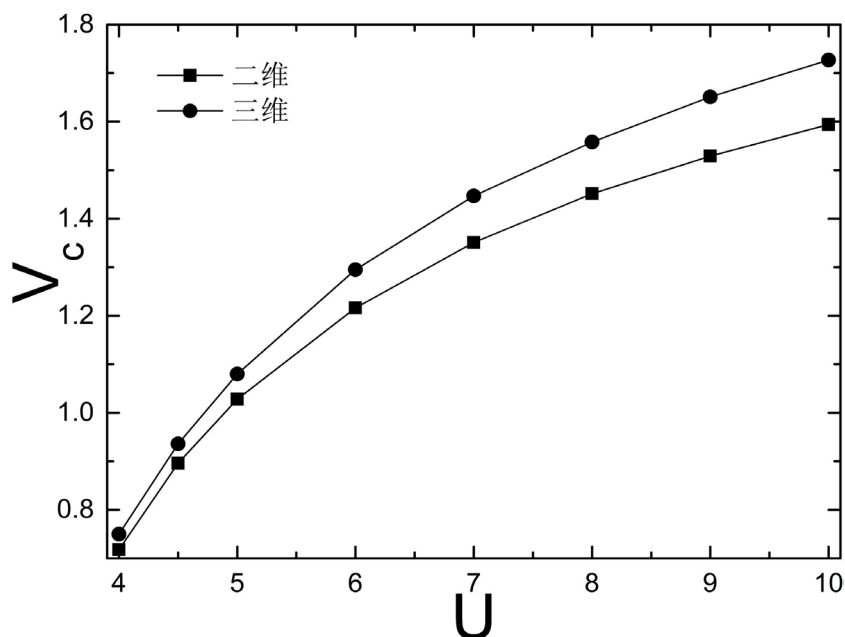


Figure 3. The antiferromagnetic transition point V_c of the non-symmetric Anderson lattice model vs Coulomb correlation energy U in the square (square dots) and cubic lattice (circle dots). Parameters: $\varepsilon_f = -3$, $t_d = 0.15$, $t_f = -0.2$, $t'_f = -0.02$

图 3. 正方和立方晶格中, 非对称性 Anderson 晶格模型的反铁磁相变点 V_c 随库仑关联强度 U 的变化。参数: $\varepsilon_f = -3$, $t_d = 0.15$, $t_f = -0.2$, $t'_f = -0.02$

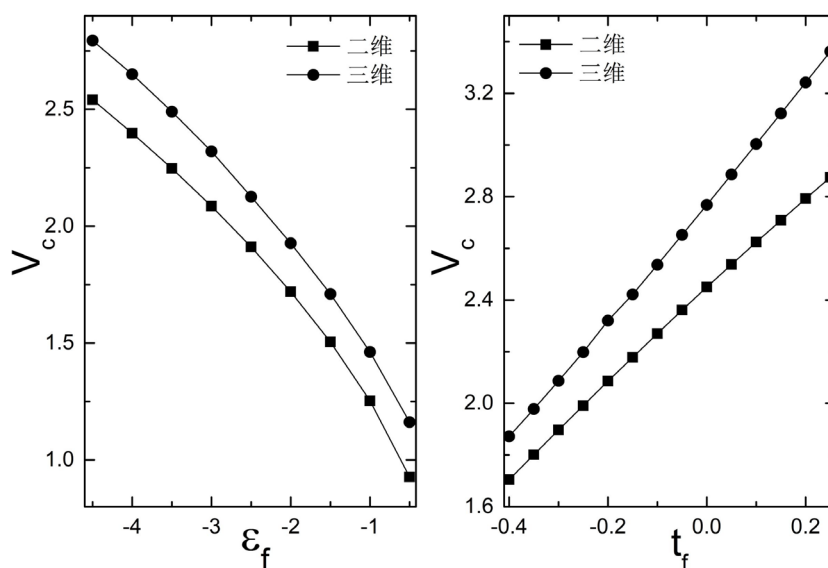


Figure 4. The antiferromagnetic transition point V_c of the non-symmetric Anderson lattice model in large U limit vs f level ε_f (left) or t_f (right) in the square lattice (square dots) and cubic lattice (circle dots). Parameters: $t_d = 0.15$, $t_f = -0.2$, $t'_f = -0.02$ for left; $\varepsilon_f = -3$, $t_d = 0.15$, $t'_f = 0.1t_f$ for right

图 4. 正方和立方晶格中, 强关联极限 ($U \rightarrow \infty$) 下的非对称性 Anderson 晶格模型的反铁磁相变点 V_c 随 f 电子能级 ε_f (左图) 和 t_f (右图) 的变化。左图: $t_d = 0.15$, $t_f = -0.2$, $t'_f = -0.02$ 。右图: $\varepsilon_f = -3$, $t_d = 0.15$, $t'_f = 0.1t_f$

这样, 六个自洽方程得以给出, 并由其自洽确定各平均场参数, 根据解出的 m_f 随 V 变化的临界点即可得到 V_c 。图 3 给出了正方和立方晶格中的非对称性 Anderson 晶格模型的反铁磁相变点 V_c 随库仑关联强度 U 的变化。可以看出, 与对称性 Anderson 晶格模型类似(对比图 2), V_c 都随 U 的增加而增大, 这是因为 U 的增大会显著增大反铁磁关联, 因此需要更大的 d - f 杂化作用才能破坏反铁磁序。

实际的重费米子材料中库仑关联能 U 往往很大, 因此, 文献中常取 Anderson 晶格模型的强关联极限即 $U \rightarrow \infty$ [9]。在强关联极限下, f 电子不存在双占据, 因此反铁磁相的平均场哈密顿量由(3)和(4)式中取 $\delta \rightarrow 0$ 得到。仿照上述方法得出自洽方程组并计算自洽参数 n_f , m_f , h , η , μ , 并由 $m_f \rightarrow 0$ 确定 V_c 。图 4 中给出了 V_c 随 f 电子能级 ϵ_f 和 f 电子跳迁常数 t_f 的变化关系, 可见随着 ϵ_f 的升高, V_c 迅速下降, 这是因为 ϵ_f 的升高将增强电荷涨落, 从而压制反铁磁关联。另外, V_c 随 t_f 的变化关系与对称性 Anderson 晶格模型类似(对比图 2), 都是正的 t_f 产生更大的 V_c 。

5. 结论

本文将 Anderson 晶格模型的 Kotliar-Ruckenstein 赝玻色子方法从粒子 - 空穴对称情况推广到了更一般的非粒子 - 空穴对称情况, 并用之计算了非对称 Anderson 晶格模型的反铁磁相变, 得到了相变点与库仑关联能、电子跳迁系数、电子杂化强度、局域电子能级等多种参数的关系。本文发展的方法可进一步用于研究多种重费米子体系的磁性相变和相图。

基金项目

国家自然科学基金(批准号: 11764010)及广西自然科学基金(批准号: 2017GXNSFAA198169)资助的课题。

参考文献

- [1] Andres, K., Graebner, J.E. and Ott, H.R. (1975) $4f$ -Virtual-Bound-State Formation in CeAl_3 at Low Temperatures. *Physical Review Letters*, **35**, 1779. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.35.1779>
- [2] Hewson, A.C. (1997) *The Kondo Problem to Heavy Fermions*. Cambridge University Press, Cambridge.
- [3] Li, H., Liu, Y., Zhang, G.-M. and Yu, L. (2015) Phase Evolution of the Two-Dimensional Kondo Lattice Model near Half-Filling. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **27**, Article ID: 425601. <https://doi.org/10.1088/0953-8984/27/42/425601>
- [4] Nemkovski, K.S., Mignot, J.M., Alekseev, P.A., Ivanov, A.S., Nefeodova, E.V., Rybina, A.V., Regnault, L.P., Iga, F. and Takabatake, T. (2007) Polarized-Neutron Study of Spin Dynamics in the Kondo Insulator YbB_{12} . *Physical Review Letters*, **99**, Article ID: 137204. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.99.137204>
- [5] Liu, Y., Li, H., Zhang, G.-M. and Yu, L. (2012) d -Wave Superconductivity Induced by Short-Range Antiferromagnetic Correlations in the Two-Dimensional Kondo Lattice Model. *Physical Review B*, **86**, Article ID: 024526. <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.86.024526>
- [6] Xu, N., Biswas, P.K., Dil, J.H., Dhaka, R.S., Landolt, G., Muff, S., Matt, C.E., Shi, X., Plumb, N.C., Radovic, M., Pomjakushina, E., Conder, K., Amato, A., Borisenko, S.V., Yu, R., Weng, H.-M., Fang, Z., Dai, X., Mesot, J., Ding, H. and Shi, M. (2014) Article | Published: 30 July 2014 Direct Observation of the Spin Texture in SmB_6 as Evidence of the Topological Kondo Insulator. *Nature Communications*, **5**, Article Number: 4566. <https://doi.org/10.1038/ncomms5566>
- [7] Schnyder, A.P. and Ryu, S. (2011) Topological Phases and Surface Flat Bands in Superconductors without Inversion Symmetry. *Physical Review B*, **84**, Article ID: 060504(R). <https://doi.org/10.1103/PhysRevB.84.060504>
- [8] Laia, H.-H., Grefea, S.E., Paschenc, S. and Si, Q.M. (2018) Weyl-Kondo Semimetal in Heavy-Fermion Systems. *Proceedings of the National Academy of Sciences*, **115**, 93-97. <https://doi.org/10.1073/pnas.1715851115>
- [9] 李正中. 固体理论[M]. 第二版. 北京: 高等教育出版社, 2002.
- [10] Bauer, E., Hilscher, G., Michor, H., Paul, Ch., Scheidt, E.W., Gribanov, A., Seropegin, Y., Noël, H., Sigrist, M. and Rogl, P. (2004) Heavy Fermion Superconductivity and Magnetic Order in Noncentrosymmetric CePt_3Si . *Physical Re-*

view Letters, **92**, Article ID: 027003. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.92.027003>

- [11] Vekic, M., Cannon, J.W., Scalapino, D.J., Scalettar, R.T. and Sugar, R.L. (1995) Competition between Antiferromagnetic Order and Spin-Liquid Behavior in the Two-Dimensional Periodic Anderson Model at Half Filling. *Physical Review Letters*, **74**, 2367. <https://doi.org/10.1103/PhysRevLett.74.2367>
- [12] Sun, S.-J., Hong, T.-M. and Yang, M.F. (1995) Phase Diagram of the Two-Dimensional Periodic Anderson Model at Half-Filling. *Physica B: Condensed Matter*, **216**, 111. [https://doi.org/10.1016/0921-4526\(95\)00429-7](https://doi.org/10.1016/0921-4526(95)00429-7)
- [13] Li, H., Zhong, Y., Liu, Y., Luo, H.-G. and Song, H.-F. (2018) z_2 Classification for a Novel Antiferromagnetic Topological Insulating Phase in Three-Dimensional Topological Kondo Insulator. *Journal of Physics: Condensed Matter*, **30**, Article ID: 435601. <https://doi.org/10.1088/1361-648X/aae17b>

知网检索的两种方式:

1. 打开知网页面 <http://kns.cnki.net/kns/brief/result.aspx?dbPrefix=WWJD>
下拉列表框选择: [ISSN], 输入期刊 ISSN: 2326-3512, 即可查询
2. 打开知网首页 <http://cnki.net/>
左侧“国际文献总库”进入, 输入文章标题, 即可查询

投稿请点击: <http://www.hanspub.org/Submission.aspx>

期刊邮箱: cmp@hanspub.org