

金属中 f 电子局域磁矩及其退局域化的一个模型 (I)

陈 长 风 章 立 源

(北京大学物理系固体物理研究所)

1984 年 10 月 11 日收到

提 要

本文提出了一个模型, 其中 f 电子束缚在费密面附近的一个窄带内, s-p-d 电子是自由的, 还考虑了它们之间的杂化. 数值计算的结果表明 f 电子在退局域化过程中有一定的稳定性, 温度和杂化对之有明显的影晌. 文中给出了不同参数空间的相图. 最后对稀土变价现象进行了定性讨论.

一、引 言

有关铈的高压特性的实验与理论工作已经做了许多. 较早的工作都是基于“提升模型”(Promotional Model)^[1], 即假定随着压强的增加, 将发生原来较为局域的 4f 电子向导带转移的过程. Coqblin 和 Blandin^[2]以及 Ramirez 和 Falicov^[3]等人都做了这方面的理论工作. 可是, 后来“提升模型”的正确性逐渐引起了人们的怀疑. 尤其是七十年代以来, 一系列实验结果^[4-8]表明, 铈中的 4f 电子向导带转移的过程是不可能发生的, 铈的 γ , α , α' 相具有几乎相同的 4f 电子数. 在此基础上, Johansson^[6]提出了 γ - α 相变的莫特相变模型 (Mott Transition Model), 认为 γ -Ce 相应于莫特相变的低密度一边, 随着压强的增加, 4f 电子将发生局域-退局域变化, 从而呈现出巡游特性, 磁性随之减弱, 这时发生 γ - α 相变. 这一模型得到了正电子湮灭^[4]及非弹性散射^[8]等实验的支持. 许多能带计算的结果^[9-12]也表明, 4f 电子数基本未变.

Johansson 并未进行深入的理论分析, 目前许多理论工作也只限于进行能带计算. 因此, 对 f 电子的性质做一个一般的讨论是很有必要的. 我们认为, 4f 电子的性质对铈的高压特性起决定作用. 以此为背景, 本文提出了一个物理模型, 一般地讨论了 f 电子的磁性随压强、杂化强度和温度的变化情况, 并且对稀土变价现象和化合物的情况做了定性讨论.

以下第二节给出物理模型和系统的哈密顿量并定义格林函数得到相应的解, 第三节进行自洽计算公式的推导, 第四节给出数值计算结果并进行讨论.

二、物理模型与格林函数计算

在本模型下, s-p-d 电子被近似看作自由电子, 而 f 电子则被看作束缚在一个窄带

中, 用紧束缚近似来描述^[13], 同时还考虑了 s-p-d 电子与 f 电子之间的杂化^[14]. 根据 Anderson^[15] 的概念, 我们认为, 同一格位上相反自旋的 f 电子之间较强的库仑关联是造成局域磁矩的根源. 但与 Anderson 讨论的孤立磁性杂质原子不同, 我们处理的是周期性排列的晶格原子系统, 必须考虑原子间的相互作用. 为简便起见, 我们讨论的是简单立方晶格, 且只考虑了最近邻作用. 将计算推广到面心立方晶格是很方便的.

系统的哈密顿量为

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} C_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{i, \sigma} \varepsilon_0 b_{i\sigma}^{\dagger} b_{i\sigma} + \sum_{\substack{i, j \\ (i \neq j)}} T(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) b_{i\sigma}^{\dagger} b_{j\sigma} \\ + \sum_{i, \mathbf{k}, \sigma} (h_{\mathbf{k}i} C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} b_{i\sigma} + h.c.) + U \sum_i b_{i\uparrow}^{\dagger} b_{i\uparrow} b_{i\downarrow}^{\dagger} b_{i\downarrow} \quad (1)$$

其中, $C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger}$, $b_{i\sigma}^{\dagger}$ 分别为自由电子和 f 电子的产生算符, $C_{\mathbf{k}\sigma}$, $b_{i\sigma}$ 为相应的消灭算符, $\mathbf{k}, i, \sigma$ 为其动量、格位、自旋下标. $\varepsilon_{\mathbf{k}}$ 为自由电子的能量, ε_0 为 f 电子的平均带能^[16]. $T(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j) \equiv T_{ij}$ 为相互作用积分:

$$T_{ij} = \int u^*(\mathbf{r} - \mathbf{R}_i) \left[\sum_{\mu \neq i} V(\mathbf{r} - \mathbf{R}_{\mu}) \right] u(\mathbf{r} - \mathbf{R}_j) d^3 r. \quad (2)$$

近似取^[14,17,18]:

$$h_{\mathbf{k}i} = h_{\mathbf{k}} \cdot \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i), \quad (3)$$

$$T_{ij} = T_0 \exp(-\chi|\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j|). \quad (4)$$

略去 $h_{\mathbf{k}}$ 对 $\mathbf{k}$ 的依赖^[19], 可得

$$h_{\mathbf{k}i} = \frac{h}{\sqrt{N}} \exp(-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i), \quad (5)$$

于是, 哈密顿量最后写为

$$H = \sum_{\mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{\mathbf{k}} C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} C_{\mathbf{k}\sigma} + \sum_{i, \sigma} \varepsilon_0 b_{i\sigma}^{\dagger} b_{i\sigma} + \sum_{\substack{i, j \\ (i \neq j)}} T_{ij} b_{i\sigma}^{\dagger} b_{j\sigma} \\ + \frac{h}{\sqrt{N}} \sum_{i, \mathbf{k}, \sigma} (e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} b_{i\sigma} + h.c.) + U \sum_i b_{i\uparrow}^{\dagger} b_{i\uparrow} b_{i\downarrow}^{\dagger} b_{i\downarrow} \quad (6)$$

利用 Zubarev 发展的格林函数技术^[20,21], 定义格林函数:

$$G_{ii}^{\sigma}(E) = \langle\langle b_{i\sigma}; b_{i\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_E; \quad (7a)$$

$$G_{i\mathbf{k}}^{\sigma}(E) = \langle\langle b_{i\sigma}; C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_E; \quad (7b)$$

$$G_{\mathbf{k}i}^{\sigma}(E) = \langle\langle C_{\mathbf{k}\sigma}; b_{i\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_E; \quad (7c)$$

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma}(E) = \langle\langle C_{\mathbf{k}\sigma}; C_{\mathbf{k}'\sigma}^{\dagger} \rangle\rangle_E. \quad (7d)$$

在哈密顿量(6)式下, 利用文献[21]中的公式(27)和(45)式, 再考虑到平均占有数与格位无关(相应于铁磁情形), 则可得

$$(E - E_{\sigma}) G_{ii}^{\sigma}(E) - \sum_{\substack{j' \\ (j' \neq i)}} T_{ij'} G_{j'i}^{\sigma}(E) - \frac{h}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}'} e^{i\mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_i} G_{\mathbf{k}'i}^{\sigma}(E) = \frac{1}{2\pi} \delta_{ii}; \quad (8a)$$

$$(E - \varepsilon_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^{\sigma}(E) - \frac{h}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} G_{i\mathbf{k}'}^{\sigma}(E) = \frac{1}{2\pi} \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}; \quad (8b)$$

$$(E - \varepsilon_{\mathbf{k}}) G_{\mathbf{k}i}^{\sigma}(E) - \frac{h}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} G_{ii}^{\sigma}(E) = 0; \quad (8c)$$

$$(E - E_\sigma)G_{i\mathbf{k}'}^\sigma(E) - \sum_{\substack{j \\ (j \neq i)}} T_{ij}G_{j\mathbf{k}}^\sigma(E) - \frac{\hbar}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\sigma(E) = 0. \quad (8d)$$

其中

$$E_\sigma = \varepsilon_0 + U \langle n_{-\sigma}^i \rangle. \quad (9)$$

由(8c)和(8a)可得

$$\begin{aligned} (E - E_\sigma)G_{ii}^\sigma(E) + T_{ii}G_{ii}^\sigma(E) - \sum_{i'} T_{ii'}G_{i'i}^\sigma(E) \\ - \frac{\hbar^2}{N} \sum_{i', \mathbf{k}} \left\{ \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{k}}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_{i'})} G_{i'i}^\sigma(E) \right\} \\ = \frac{1}{2\pi} \delta_{ii}. \end{aligned} \quad (10)$$

傅氏变换得

$$T_{ii} = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} T_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_i)} \quad (11a)$$

$$G_{ii}^\sigma(E) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} G^\sigma(\mathbf{k}, E) e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_i)} \quad (11b)$$

将此代入(10)式可得

$$(E - E_\sigma^\sigma)G^\sigma(\mathbf{k}, E) - \frac{\hbar^2}{N} \sum_{m, \mathbf{q}} \frac{1}{E - \varepsilon_{\mathbf{q}}} e^{i(\mathbf{k} - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{R}_m} G^\sigma(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{2\pi} \quad (12)$$

其中

$$E_\sigma^\sigma = E_\sigma + T_{\mathbf{k}} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} T_{\mathbf{k}} \quad (13)$$

由此即得

$$G^\sigma(\mathbf{k}, E) = \frac{1}{2\pi} \frac{1}{(E - E_\sigma^\sigma) - \frac{\hbar^2}{E - \varepsilon_{\mathbf{k}}}}. \quad (14)$$

将(14)式代入(11b)式得

$$G_{ii}^\sigma(E) = \frac{1}{2\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{E - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{(E - E_\sigma^\sigma)(E - \varepsilon_{\mathbf{k}}) - \hbar^2} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_i)}. \quad (15)$$

特别地,当 $i = j$ 时有

$$G_{ii}^\sigma(E) = \frac{1}{2\pi N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{E - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{(E - E_\sigma^\sigma)(E - \varepsilon_{\mathbf{k}}) - \hbar^2} \quad (16)$$

这是相应于 f 电子的格林函数。由(8b), (8d)则可求得相应于自由电子的格林函数如下:

$$G_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}^\sigma(E) = \frac{1}{2\pi} \frac{(E - E_\sigma^\sigma)\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}{(E - E_\sigma^\sigma)(E - \varepsilon_{\mathbf{k}}) - \hbar^2} \quad (17)$$

由(16), (17)两式可进行下面自洽计算公式的推导。

三、自洽计算公式的导出

我们从文献[21]的(28)式出发,求电子平均占有数。再利用(16)式及留数定理即得

到 f 电子平均占有数为

$$\begin{aligned}\langle n_{\sigma}^f \rangle &\equiv \frac{1}{N} \sum_i \langle b_{i\sigma}^{\dagger} b_{i\sigma} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{\alpha_{\mathbf{k}}^{\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\alpha_{\mathbf{k}}^{\sigma} - \beta_{\mathbf{k}}^{\sigma}} \frac{1}{e^{\beta(\alpha_{\mathbf{k}}^{\sigma} - \mu)} + 1} - \frac{\beta_{\mathbf{k}}^{\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}}}{\alpha_{\mathbf{k}}^{\sigma} - \beta_{\mathbf{k}}^{\sigma}} \frac{1}{e^{\beta(\beta_{\mathbf{k}}^{\sigma} - \mu)} + 1} \right\}.\end{aligned}\quad (18)$$

其中 μ 是系统的化学势,

$$\alpha_{\mathbf{k}}^{\sigma} = \frac{1}{2} [E_{\mathbf{k}}^{\sigma} + \varepsilon_{\mathbf{k}} + \sqrt{(E_{\mathbf{k}}^{\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 + 4\hbar^2}], \quad (19a)$$

$$\beta_{\mathbf{k}}^{\sigma} = \frac{1}{2} [E_{\mathbf{k}}^{\sigma} + \varepsilon_{\mathbf{k}} - \sqrt{(E_{\mathbf{k}}^{\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}})^2 + 4\hbar^2}]. \quad (19b)$$

同样,由(19)式可求得传导电子的平均占有数为

$$\begin{aligned}\langle n_{\sigma}^{pd} \rangle &\equiv \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle C_{\mathbf{k}\sigma}^{\dagger} C_{\mathbf{k}\sigma} \rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left\{ \frac{\alpha_{\mathbf{k}}^{\sigma} - E_{\mathbf{k}}^{\sigma}}{\alpha_{\mathbf{k}}^{\sigma} - \beta_{\mathbf{k}}^{\sigma}} \frac{1}{e^{\beta(\alpha_{\mathbf{k}}^{\sigma} - \mu)} + 1} - \frac{\beta_{\mathbf{k}}^{\sigma} - E_{\mathbf{k}}^{\sigma}}{\alpha_{\mathbf{k}}^{\sigma} - \beta_{\mathbf{k}}^{\sigma}} \frac{1}{e^{\beta(\beta_{\mathbf{k}}^{\sigma} - \mu)} + 1} \right\}\end{aligned}\quad (20)$$

其中对 $\mathbf{k}$ 求和在第一布里渊区内进行. 如同通常所做的那样,我们将求和化为积分(对简单立方晶格):

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_B d\mathbf{K}$$

这里已做了如下变换:

$$K_i = ak_i \quad (i = 1, 2, 3). \quad (21)$$

a 是晶格常数, B 是 $\mathbf{K}$ 空间中 $K_i = -\pi$ 到 $K_i = \pi$ ($i = 1, 2, 3$) 的区域.

定义一个紧束缚电子的有效质量^[22]:

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2a^2|T|}. \quad (22)$$

其中

$$|T| = |T_0| e^{-\kappa a}$$

f 带宽为

$$W_f = 12|T| = 12 \frac{\hbar^2}{2a^2 m^*} \quad (23)$$

s-p-d 带宽为

$$W_s = \varepsilon_{\mathbf{k}}|_{\mathbf{k}=(\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a})} - \varepsilon_{\mathbf{k}}|_{\mathbf{k}=0} = 3\pi^2 \frac{\hbar^2}{2ma^2} \quad (24)$$

于是得到

$$\frac{\varepsilon_{\mathbf{k}}}{W_f} = \frac{1}{3\pi^2} \frac{W_s}{W_f} \cdot K^2 \quad (25)$$

$$K^2 = K_1^2 + K_2^2 + K_3^2. \quad (26)$$

最后,得到进行自洽计算的公式:

$$\langle n_{\sigma}^f \rangle = \iiint_B d\mathbf{K} g_{\sigma}(\mathbf{K}); \quad (27a)$$

$$\langle n_{\pm}^L \rangle = \iiint_B d\mathbf{K} g_{\pm}(\mathbf{K}). \quad (27b)$$

其中

$$g_{\pm}(\mathbf{K}) = \frac{1}{16\pi^3} \left\{ \left[1 + \frac{F_{1\pm} - F_2}{\sqrt{(F_{1\pm} - F_2)^2 + 4\tilde{h}^2}} \right] \eta(F_{1\pm} + F_2 + \sqrt{(F_{1\pm} - F_2)^2 + 4\tilde{h}^2}) \right. \\ \left. + \left[1 - \frac{F_{1\pm} - F_2}{\sqrt{(F_{1\pm} - F_2)^2 + 4\tilde{h}^2}} \right] \eta(F_{1\pm} + F_2 - \sqrt{(F_{1\pm} - F_2)^2 + 4\tilde{h}^2}) \right\}, \quad (28)$$

$$F_{1\pm} = E_0 \cdot \tilde{U} + \langle n_{\pm}^f \rangle \cdot \tilde{U} - \frac{1}{6} (\cos K_1 + \cos K_2 + \cos K_3), \quad (29)$$

$$F_2 = \frac{1}{3\pi^2} \tilde{W}_f \cdot K^2 - \tilde{\mu}, \quad (30)$$

$$E_0 = \frac{\varepsilon_0 - \mu}{U}. \quad (31)$$

上面带弯道的量都是用 W_f 约化了的:

$$\tilde{A} \equiv \frac{A}{W_f} \quad (32)$$

(28) 式中 $\eta(x)$ 在 $T = 0K$ 时如下取值:

$$\eta(x) = \begin{cases} 1 & x < 0; \\ 0 & x > 0. \end{cases} \quad (33)$$

当 $T > 0K$ 时, $\eta(x)$ 就是费密分布函数。

(27a)和(27b)式是我们进行自洽计算的基本公式。

四、结果与讨论

数值计算结果是在每原子有一个 f 电子和两个传导电子的假设之下得到的, 这相当于取参数为 $E_0 = -0.5$, $\tilde{W}_f = 10.0$, $\tilde{\mu} = 10.0$. 实际上, 在本文提出的模型中, f 电子与传导电子的相互作用已由参数 $\tilde{h}$ 决定, $\tilde{\mu}$ 的取值对 f 电子的性质影响不大. 我们曾取 $\tilde{\mu} = 5.0$ 进行计算, 所得结果与 $\tilde{\mu} = 10.0$ 时的基本相同。

压强的变化通过 $\tilde{U}$ 间接反映, 压强

增大则 $\tilde{U}$ 减小. 图 1 给出了 $D \equiv \langle n_{+}^f \rangle - \langle n_{-}^f \rangle$ 随 $\tilde{U}$ 变化的曲线. 其中 I 区是磁性区,

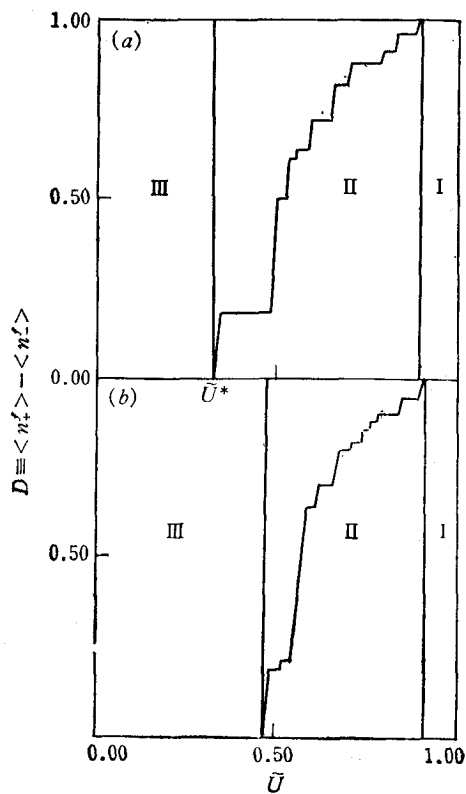


图 1

$T = 0K$. (a) $\tilde{h} = 0.00$, (b) $\tilde{h} = 0.30$.

I 磁 II 退磁 III 非磁

III 区是非磁区, II 区是磁向非磁过渡(退磁)的区域。值得注意的是,当 $\tilde{h} = 0.00$ 时, D 的变化是不连续的, 有一系列小平台, 这反映了 f 电子在退局域化过程中有一定的稳定性($\tilde{h} = 0.10$ 时也有类似结果)。当 $\tilde{h} = 0.30$ 时, 磁性区域明显减小, f 电子的稳定性也大大被减弱了。应当指出, $\tilde{h}$ 的变化可以由压强改变引起的, 也可以由化合物种类或成份的变化(具体见后面的讨论)引起的。一般当压强增加时, 杂化增强; 而化合物的作用可使杂化增加, 也可使之减弱。图 2 给出了 D 随 $\tilde{h}$ 变化的情况, 图 3 是 $\tilde{h}$ - $\tilde{U}$ 参数空间的相图。

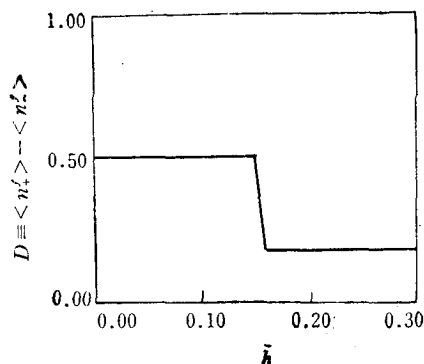


图 2

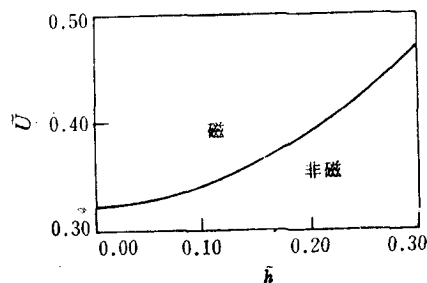
 $T = 0\text{K}; \tilde{U} = 0.50$ 

图 3

 $T = 0\text{K}$

以上讨论的都是 $T = 0\text{K}$ 的情况。我们进一步讨论 $T > 0\text{K}$ 的情况, 看温度对磁性的影响如何, 并取 $\tilde{T}$ 作为参量。温度对磁性(通过 D 间接反映)的影响反映在图 4 中, 其中的参数条件与图 1(a)相比, 除了 $\tilde{T} \neq 0\text{K}$ 外, 其余完全相同。比较两图立刻可见温度使磁稳定性减弱: 台阶基本消失; 非磁性区扩大。图 5 是 $\tilde{U}$ 一定条件下 D 随 $\tilde{T}$ 变化的曲线, 由图 5 可见, $\tilde{U}$ 越小则 D 随 $\tilde{T}$ 下降越快。这说明同一格位上自旋相反的 f 电子之间的库仑关联较弱或压强较大时, 磁性较易被破坏; 反之则在较高的温度磁性才被破坏。

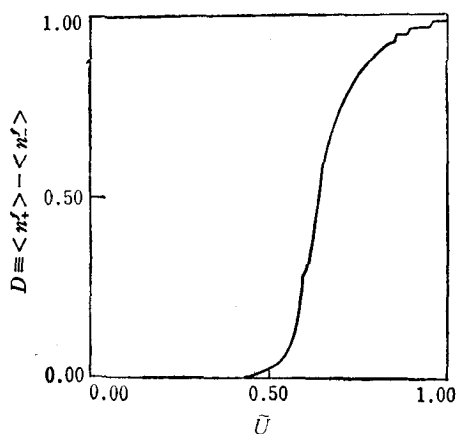
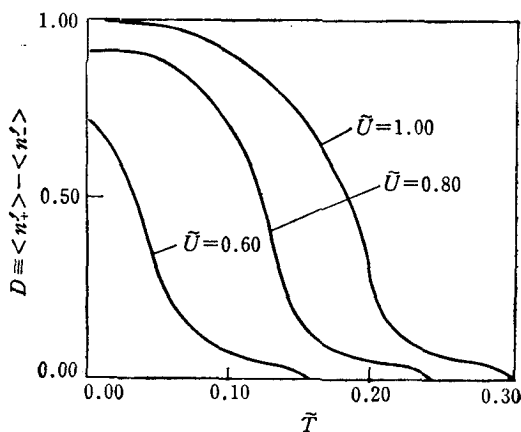
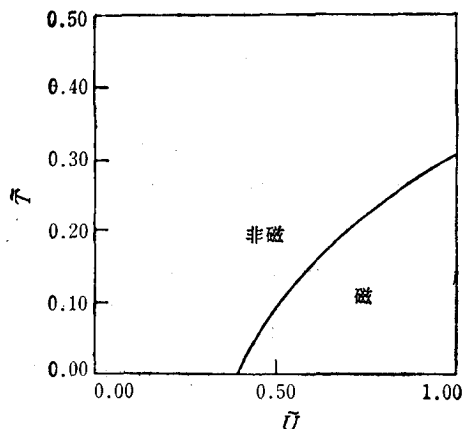
图 4 D 与 $\tilde{U}$ 的关系 $\tilde{T} = 0.05; \tilde{h} = 0.00$ 

图 5

 $\tilde{h} = 0.00$

图 6 是 $\tilde{T}$ - $\tilde{U}$ 参数空间的相图。图 6
 $\tilde{h} = 0.00$

稀土元素及其化合物的变价问题^[23]近年来引起人们很大兴趣,但其物理机制尚未完全弄清楚,以前一般都用“提升模型”来处理。在“提升模型”基本被否定后,对此问题还未有一个很好的解释。我们利用本文提出的模型对这个问题提出一些看法。

从物理上看,化合价反映的是原子外层电子与其它电子或离子键合的能力。f 电子的局域-退局域化模型可以解释变价现象:压强较小时, $\tilde{U}$ 很大,这时 f 带极窄, f 电子处于局域化状态,对化合价没有贡献,与此同时正如本文所指出的 f 电子磁矩也较大;压强增大时 f 带展宽, f 电子发生了由局域到退局域的变化,开始参与同别的电子或离子的键合,使化合价逐渐上升,与此同时, f 电子磁矩也随 f 电子退局域化而下降。由此,一方面看出, f 电子的化合价与 f 电子局域磁矩必有明显关联,这与文献[24]在讨论铈的变价现象时所得到的,铈的化合价与磁矩间的经验公式定性一致;另一方面,前已述及本计算结果表明,随着压强和温度的改变, f 电子磁性有明显变化,这当然要引起价的变化。文献[24]从分析实验数据也经验地得到这一结论,即改变压强及温度可以得到铈的各种价谱。应当强调,我们不是基于“提升模型”得到这些讨论的。

由(13)式可见,自旋为 σ 的 f 子带中心在 $E_{\sigma} = \epsilon_0 + U\langle n_{L\sigma}^{\uparrow} \rangle$ 处(相对费密能)。本文取了 $\epsilon_0 = -\frac{1}{2}U$, 二子带中心分别在 $-U\left(\frac{1}{2} - \langle n_{L\downarrow}^{\uparrow} \rangle\right)$ 和 $U\left(\frac{1}{2} - \langle n_{L\downarrow}^{\uparrow} \rangle\right)$ 处,相对费密面对称分布。若 $\tilde{U} = 1$ (即 $U = W_f$) 则二子带恰好以费密面为界面分开, $\langle n_{L\downarrow}^{\uparrow} \rangle = 1$, 而 $\langle n_{L\downarrow}^{\downarrow} \rangle = 0$ 。若 $\tilde{U} > 1$, 则自旋向上子带中心将下降,自旋向下子带中心将上升,这样总有 $\langle n_{L\downarrow}^{\uparrow} \rangle = 1$, $\langle n_{L\downarrow}^{\downarrow} \rangle = 0$; 若 $\tilde{U} < 1$, 则两子带有交叠,磁性将减小。可见,在基态 ($T = 0K$) 下 $\tilde{U} = 1$ 是磁-非磁转变的一个临界值。这个条件在本文的模型下可具体化为

$$U = 12|T_0|e^{-\kappa a}. \quad (34)$$

相应的临界晶格常数为

$$a_c = \frac{1}{\kappa} \ln \frac{12|T_0|}{U} \quad (35)$$

对不同的化合物, (35)式右端各参量的不同将导致不同的 a_c 值, 这会使某些化合物是类 r -Ce 的, 而另一些是类 α -Ce 的^[25]. a_c 增大或杂化强度增强有利于类 α 相, 反之则有利于类 r 相. 对 $(\text{Ce}_{1-x}\text{RE}_x)_{0.9}\text{Th}_{0.1}$ (RE 是稀土元素) 测量的结果^[23]表明: 当 RE 是四价元素时类 α 相区域增大; 当 RE 是三价元素时类 r 相区域增大. 这里, 不同化合价的 RE 对杂化强度的影响是一个明显的原因. 此外, 化合物成份对系统的性质会有很大影响, 因为这决定了系统的参数在多大程度上被改变了.

关于化合物变价和磁性问题的进一步讨论以及将本模型推广到反铁磁情形的工作我们将另文发表.

参 考 文 献

- [1] L. Pauling, quoted by A. F. Schuch and J. H. Sturdivant, *J. Chem. Phys.*, **18** (1950), 145.
- [2] B. Coqblin and A. Blandin, *Adv. Phys.*, **17**, (1968), 281.
- [3] R. Ramirez and Falicov, *Phys. Rev.*, B3(1971), 1225.
- [4] D. R. Gustafson, J. D. McNutt and L. O. Roelling, *Phys. Rev.*, **183** (1969), 435; R. F. Gempel, D. R. Gustafson and J. D. Willenberg, *Phys. Rev.* B5 (1972), 2082.
- [5] J. Wittig, *Comments on Solid State*, B6(1974) 13.
- [6] U. Kornstädt, R. Lässer and B. Lengler, *Phys. Rev.* B21 (1980), 1898.
- [7] B. Johansson, *Phil. Mag.*, **30** (1974), 469; *J. Phys.*, F7(1977), 877.
- [8] J. Felsteiner, M. Heilper and K. F. Berggren *Solid State Commun.*, **32** (1979), 343.
- [9] E. A. Kmetko and H. H. Hill, in *Plutonium 1970 and Other Actinides*, edited by W. N. Miner (AIME, NEW YORK, 1970), p. 233; E. A. Kmetko, in *Nat. Bur. Stand. Spec. Publ. No. 323*, (1971), p. 67.
- [10] M. B. Maple, J. Wittig and K. S. Kim, *Phys. Rev. Lett.*, **23**(1969), 1375; W. A. Fertig and M. B. Maple, *Solid State Commun.*, **23** (1977), 105.
- [11] D. Glötzl, *J. Phys.*, F8(1978), L163.
- [12] W. E. Pickett, A. J. Freeman and D. D. Koeling, *Phys. Rev.*, B23 (1981), 1266.
- [13] S. Barisic, *Phys. Rev. Lett.*, **25**(1970), 919.
- [14] J. Hubbard, *Proc. Phys. Soc.*, **92**(1967), 921.
- [15] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **124**(1961), 41.
- [16] J. Callaway, in *Quantum Theory of the Solid State* (Student Edition, Academic Press, INC. 1976), p. 295.
- [17] C. 基泰尔, 固体物理导论, (中文本, 科学出版社, 1979), 289 页.
- [18] N. F. Mott and E. A. Davis, in *Electronic Process in Noncystalline Solids* (2d ed., Oxford, Clarendon, 1979), Chap. 1.
- [19] A. Bringer and H. Z. Lustfeld, *Z. Physik*, B28(1977), 213.
- [20] Zubarev, D. N., *Usp. Fiz. Nauk*, **71** (1960), 71.
- [21] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, A276(1963), 238.
- [22] 方俊鑫、陆栋, 固体物理学, (上海科学技术出版社, 1980), 246 页.
- [23] J. M. Lawrence *et al.*, *Rep. Progr. Phys.*, **44**(1981), 1.
- [24] K. A. Gschneidner and R. Smoluchowski, *J. Less-Common Metals*, **5**(1963), 374.
- [25] M. Croft and H. H. Levine, *J. Appl. Phys.*, **53** (1982), 2122.

A MODEL FOR LOCAL MAGNETIC MOMENT AND ITS DELOCALIZATION OF f ELECTRONS IN METALS (I)

CHEN CHANG-FENG ZHANG LI-YUAN

(Department of Physics, Institute of Solid State Physics, Peking University)

ABSTRACT

In this paper we suggest a model in which f electrons are bound in a narrow band near Fermi level, s-p-d electrons are regarded as free, and hybridization between them is considered. Numerical results show that certain stability of f electrons exists under delocalization and is dramatically influenced by temperature and hybridization. Phase diagrams in different parameter spaces are plotted. Finally the case of intermediate valence in RE is discussed qualitatively.