

对称 Anderson 晶格基态的局域方法近似

魏 国 柱

(东北工学院物理系)

1986 年 7 月 14 日收到

提 要

本文采用格林函数技术,计算了对称 Anderson 晶格的 H-F 基态能量,然后采用局域方法近似,计算了相关能、相关基态能量、局域磁矩、电荷涨落和自旋涨落. 使用平方态密度,得到了解析表达式. 结果表明,当同一格点的 f-f 库仑相互作用 U 减小或 d-f 杂化强度 V 增大,局域磁矩变小.

一、引 言

近年来,对于铈的高压特性及其化合物中存在的变价现象,在实验和理论方面都做了许多工作. 实验发现,铈的化合物在低温下表现出极不相同的特性. 例如 CeCu_2Si_2 在低温时出现了超导^[1], CeB_6 和 CeAl_2 出现了磁有序, CeCu_6 甚至在 8mK 仍是正常费密液体,而 CeSi_{2-y} 和 $\text{CeNi}_y\text{Pt}_{1-y}$ 则随合金成份 y 变化,表现出非磁或磁有序^[2,3]. 这些有趣而反常的现象,都是与 4f 电子高度相关引起的自旋涨落和密度涨落有关. 从理论上分析这些现象,通常采用周期 Anderson 哈密顿量. 当研究系统的顺磁基态时,可以采用微扰展开的方法,以期得到超出 H-F 近似的结果.

众所周知,基态能量、局域磁矩、电荷涨落和自旋涨落是描述系统性质的重要物理量. 要比较清楚地了解系统的性质,一个重要方面是计算这几个物理量. 所谓相关能,指的是相关基态能量和 H-F 基态能量之差. 计算相关能的方法很多^[4], 例如有集团近似方法, Gutzwiller 变分方法^[5], 位形相互作用方法^[6], 局域方法等. 这些方法中,在保证一定精度下,比较实用的是局域方法^[7,8]. 这是近些年发展起来的一种变分方法. 用局域方法处理过渡性金属的性质时,取得了一定成功^[9-12].

二、H-F 基态能量的计算

描述对称 Anderson 晶格的哈密顿量为^[13]

$$H = H_1 + H_2 + H_3 + H_4,$$

其中

$$H_1 = \sum_{k\sigma} \varepsilon_k d_{k\sigma}^\dagger d_{k\sigma}, \quad H_2 = \varepsilon_{f_0} \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma},$$

$$\begin{aligned}
 H_3 &= \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_{i k \sigma} (e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} f_{i \sigma}^\dagger d_{k \sigma} + \text{h. c.}), \\
 H_4 &= \frac{U}{2} \sum_{i \sigma} f_{i \sigma}^\dagger f_{i \sigma} f_{i-\sigma}^\dagger f_{i-\sigma}.
 \end{aligned} \quad (1)$$

在对称情况下有

$$\varepsilon_{f_0} + \frac{U}{2} = \varepsilon_F \equiv 0, \quad \frac{N_c}{N} = 2. \quad (2)$$

在(1)和(2)式中, ε_{f_0} 是 f 电子的能级, N_c 和 N 分别是电子总数和格点总数. 平均每个格点上 d 电子和 f 电子的数目是 $n_d = n_f = 1$. $d_{k \sigma}^\dagger (d_{k \sigma})$ 是动量为 $\mathbf{k}$ 、自旋为 σ 的 d 电子的产生(湮灭)算符, $f_{i \sigma}^\dagger (f_{i \sigma})$ 是在格点 i 、自旋为 σ 的 f 电子的产生(湮灭)算符, V 是 d-f 电子间杂化强度, U 是同一格点相反自旋的 f 电子间库仑作用. 在这个模型中, d 电子作为传导电子, f 电子则是局域的.

为了计算 H-F 基态能量, 我们采用 Zubarev 发展的格林函数技术^[14,15], 定义如下格林函数:

$$\begin{aligned}
 G_{ij}^{\sigma\sigma'} &= \langle \langle f_{i \sigma}; f_{j \sigma'}^\dagger \rangle \rangle_\omega, \quad F_{ik}^{\sigma\sigma'} = \langle \langle f_{i \sigma}; d_{k \sigma'}^\dagger \rangle \rangle_\omega, \\
 K_{ki}^{\sigma\sigma'} &= \langle \langle d_{k \sigma}; f_{i \sigma'}^\dagger \rangle \rangle_\omega, \quad D_{kk'}^{\sigma\sigma'} = \langle \langle d_{k \sigma}; d_{k' \sigma'}^\dagger \rangle \rangle_\omega.
 \end{aligned} \quad (3)$$

在 H-F 近似下, 很容易得到它们的运动方程

$$\begin{aligned}
 \omega G_{ii}^{\sigma\sigma'} &= \frac{1}{2\pi} \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} K_{ki}^{\sigma\sigma'}, \\
 (\omega - \varepsilon_k) K_{ki}^{\sigma\sigma'} &= \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} G_{ii}^{\sigma\sigma'}, \\
 (\omega - \varepsilon_k) D_{kk'}^{\sigma\sigma'} &= \frac{1}{2\pi} \delta_{ij} \delta_{\sigma\sigma'} + \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_i e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} F_{ik'}^{\sigma\sigma'}, \\
 \omega F_{ik'}^{\sigma\sigma'} &= \frac{V}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} D_{kk'}^{\sigma\sigma'}.
 \end{aligned} \quad (4)$$

在上面推导过程中, 用到了(2)式和 H-F 近似

$$\begin{aligned}
 \langle \langle f_{i-\sigma}^\dagger f_{i-\sigma} f_{i \sigma}; f_{j \sigma'}^\dagger \rangle \rangle &\simeq \langle n_{i-\sigma} \rangle G_{ij}^{\sigma\sigma'}, \\
 \langle \langle f_{i-\sigma}^\dagger f_{i-\sigma} f_{i \sigma}; d_{k' \sigma'}^\dagger \rangle \rangle &\simeq \langle n_{i-\sigma} \rangle F_{ik'}^{\sigma\sigma'}
 \end{aligned}$$

及顺磁相条件

$$\langle n_{i \sigma} \rangle = \langle n_{i-\sigma} \rangle = \frac{1}{2}.$$

为了解出方程组(4), 引入格林函数的傅氏变换

$$\begin{aligned}
 G_{ii}^{\sigma\sigma'} &= \frac{1}{N} \sum_{k k'} e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} e^{-i \mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_i} G_{kk'}^{\sigma\sigma'}, \\
 F_{ik'}^{\sigma\sigma'} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k e^{i \mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} F_{kk'}^{\sigma\sigma'}, \\
 K_{ki}^{\sigma\sigma'} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{k'} e^{-i \mathbf{k}' \cdot \mathbf{R}_i} K_{kk'}^{\sigma\sigma'}.
 \end{aligned} \quad (5)$$

把(5)式代入(4)式,得到

$$\begin{aligned} G_{kk'}^{\sigma\sigma'} &= \frac{\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{kk'}}{2\pi(\omega^+ - \omega^-)} \left[\frac{\omega^+ - \varepsilon_k}{\omega - \omega^+} - \frac{\omega^- - \varepsilon_k}{\omega - \omega^-} \right], \\ K_{kk'}^{\sigma\sigma'} &= F_{kk'}^{\sigma\sigma'} = \frac{V\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{kk'}}{2\pi(\omega^+ - \omega^-)} \left[\frac{1}{\omega - \omega^+} - \frac{1}{\omega - \omega^-} \right], \\ D_{kk'}^{\sigma\sigma'} &= \frac{\delta_{\sigma\sigma'}\delta_{kk'}}{2\pi(\omega^+ - \omega^-)} \left[\frac{\omega^+}{\omega - \omega^+} - \frac{\omega^-}{\omega - \omega^-} \right], \end{aligned} \quad (6)$$

其中

$$\omega^\pm = \frac{1}{2}(\varepsilon_k \pm \sqrt{\varepsilon_k^2 + 4V^2}). \quad (7)$$

$$\langle BA \rangle = i \lim_{\delta \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} f_{(\omega)} [\langle \langle A; B \rangle \rangle_{\omega+i\delta} - \langle \langle A; B \rangle \rangle_{\omega-i\delta}] d\omega. \quad (8)$$

(这里的 $f_{(\omega)}$ 是费密分布函数, $f_{(\omega)} = (e^{\beta\omega} + 1)^{-1}$.) 通过(5)和(6)式求得 $T = 0\text{K}$ 时的相关函数

$$\begin{aligned} \langle d_{k\sigma}^+ d_{k\sigma} \rangle &= \frac{\omega^-}{\omega^- - \omega^+}, \\ \langle d_{k\sigma}^+ f_{i\sigma} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \frac{V}{\omega^- - \omega^+}, \\ \langle f_{i\sigma} d_{k\sigma} \rangle &= \frac{1}{\sqrt{N}} e^{-i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_i} \frac{V}{\omega^- - \omega^+}. \end{aligned} \quad (9)$$

利用(9)式,不难得到平均每个格点的 H-F 基态能量

$$E_{\text{H-F}} = \frac{\langle H \rangle_{\text{H-F}}}{N} = \frac{2}{N} \sum_k \frac{\varepsilon_k \omega^-}{\omega^- - \omega^+} + \frac{4V^2}{N} \sum_k \frac{1}{\omega^- - \omega^+} - \frac{U}{4}. \quad (10)$$

(10)式中包括对 $\mathbf{k}$ 求和,严格计算需要知道 d 电子的能带结构. 为了给出解析结果,在简单立方晶格中,取紧束缚能带和平方态密度^[16]

$$\varepsilon_k = -\frac{w}{6} (\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a), \quad (11)$$

$$\rho_{(\varepsilon)} = \begin{cases} \frac{1}{w} & |\varepsilon| \leq \frac{w}{2}, \\ 0 & \text{其它情况.} \end{cases} \quad (12)$$

这里的 w 是能带宽度, a 是晶格常数. 按通常方法,把对动量 $\mathbf{k}$ 求和变成对能量积分,得到

$$\tilde{E}_{\text{H-F}} = -\sqrt{1 + \tilde{V}^2} - \tilde{V}^2 \text{sh}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}} - \frac{\tilde{U}}{4}. \quad (13)$$

其中带“~”的量已用 $w/4$ 约化,即 $\tilde{A} \equiv A / \frac{1}{4} w$.

三、局域方法近似计算

上面得到了 H-F 基态能量和关联函数(9)式,为了得到超出 H-F 近似的结果,本节

将采用局域方法计算相关能、相关基态能量、局域磁矩、电荷涨落和自旋涨落。

在局域方法中,用 H-F 基态 $|\phi_{H-F}\rangle$ 构造相关基态

$$|\phi_L\rangle = \prod_{i,j,m} (1 - \eta_m O_{ij}^{(m)}) |\phi_{H-F}\rangle, \quad (14)$$

其中算符 $O_{ij}^{(m)}$ 描述了 f 电子的相关作用,它可以是 f 电子在格点 i 和 j 的密度-密度算符乘积,或者是自旋-自旋算符乘积。 η_m 是变分参数, $0 < \eta_m \leq 1$, 它由能量极小条件决定。平均每个格点的相关基态能量为

$$E_L = \frac{1}{N} \frac{\langle \phi_L | H | \phi_L \rangle}{\langle \phi_L | \phi_L \rangle} = E_{H-F} + E_c, \quad (15)$$

E_c 是相关能。把 (15) 式展开到 η_m 的二阶,得到相关能为

$$E_c = -\frac{2}{N} \sum_{i,j,m} \eta_m \langle O_{ij}^{(m)} \tilde{H} \rangle + \frac{1}{N} \sum_{i,j,m} \eta_m \eta_{m'} \langle O_{ij}^{(m)} \tilde{H} O_{ij'}^{(m')} \rangle, \quad (16)$$

$$\tilde{H} = H - \langle H \rangle. \quad (17)$$

这里的 $\langle \dots \rangle$ 是算符乘积对 H-F 基态的期望值。

用维克定理计算期望值时,只需保留相连图形的贡献,并分别限制 H 和 $O_{ij}^{(m)}$ 各自算符的内部收缩,这时可去掉 $\tilde{H}$ 上方的“ $\sim$ ”^[17]。

算符 $O_{ij}^{(m)}$ 的简单选取为

$$O_{ij}^{(m)} = O_{ii} \delta_{ij} = n_i n_j = f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow}^\dagger f_{j\downarrow} f_{j\uparrow}. \quad (18)$$

它描述了 f 电子在同一格点的相关作用。把 (18) 式代入 (16) 式并表作矩阵形式,对 η_m 变分得到

$$\eta = \frac{\langle OH \rangle}{\langle OHO \rangle}, \quad (19)$$

$$E_c = -\frac{\langle OH \rangle^2}{N \langle OHO \rangle}. \quad (20)$$

在下面计算矩阵元 $\langle OH \rangle$ 和 $\langle OHO \rangle$ 时,我们不仅取 $p_{ij} = \langle \phi_{H-F} | f_{i\sigma}^\dagger f_{j\sigma} | \phi_{H-F} \rangle$ 的对角元,而且取 i 和 j 是最近邻的非对角元,文献 [16] 把这一近似称作 $R=0, a$ 近似。

对于简单立方晶格,在 $R=0, a$ 近似下,哈密顿量 (1) 式中各项对 $\langle OH \rangle$, $\langle OHO \rangle$ 的贡献可用图形表示。不同类型的图形如图 1 所示。

图 1(a) 是用来计算 $\langle OH \rangle$, 由于限制 O 内部的算符收缩,因而 $\langle OH \rangle = \langle OH_i \rangle$ 。(b), (c), (d), (e) 分别用来计算 $\langle OH_i O \rangle$, $\langle OH_i O \rangle$, $\langle OH_i O \rangle$, $\langle OH_i O \rangle$ 。利用能带

图 1 计算 $\langle OH \rangle$ 和 $\langle OHO \rangle$ 所需的不同类型图形 $\times$ 表示 $d_{i\uparrow}^\dagger d_{i\downarrow}$; $\bullet$ 表示 $f_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow}$; $\blacklozenge$ 表示 $f_{i\uparrow}^\dagger d_{i\downarrow}$ 或 $d_{i\uparrow}^\dagger f_{i\downarrow}$; $\square$ 表示 $n_{i\uparrow} n_{i\downarrow}$; 实线代表对角元 p_{ii} ; 虚线代表非对角元 p_{ij}

(11) 式,态密度 (12) 式和关联函数 (9) 式,对照图 1,经过计算,可知 (b) 的第一个图形、

(d) 的第三个图形及 (c) 和 (e) 的全部图形贡献为零. 最后得出

$$\frac{\langle OH \rangle}{N} = \frac{11}{128} U, \quad (21)$$

$$\frac{\langle OH O \rangle}{N} = \frac{3V^2}{4w} - \frac{3V^3}{w^2} \operatorname{tg}^{-1} \frac{w}{4V} + \frac{11}{8} \frac{V^2}{w} \operatorname{sh}^{-1} \frac{w}{4V}. \quad (22)$$

把 (21), (22) 式代入 (20) 式, 并用 $w/4$ 约化, 得到相关能

$$\tilde{E}_c = - \frac{\left(\frac{11}{128} \tilde{U}\right)^2}{\frac{3}{16} \tilde{V}^2 - \frac{3}{16} \tilde{V}^3 \operatorname{tg}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}} + \frac{11}{32} \tilde{V}^2 \operatorname{sh}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}}}. \quad (23)$$

相关基态能量

$$\begin{aligned} \tilde{E}_L = \tilde{E}_{H-F} + \tilde{E}_c = & -\sqrt{1 + \tilde{V}^2} - \tilde{V}^2 \operatorname{sh}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}} - \frac{\tilde{U}}{4} \\ & - \frac{\left(\frac{11}{128} \tilde{U}\right)^2}{\frac{3}{16} \tilde{V}^2 - \frac{3}{16} \tilde{V}^3 \operatorname{tg}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}} + \frac{11}{32} \tilde{V}^2 \operatorname{sh}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}}}. \end{aligned} \quad (24)$$

由 $0 < \eta \leq 1$ 得到 (23), (24) 式成立的条件为

$$\tilde{U} \leq \frac{24}{11} \tilde{V}^2 - \frac{24}{11} \tilde{V}^3 \operatorname{tg}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}} + 4 \tilde{V}^2 \operatorname{sh}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}}. \quad (25)$$

下面计算相关基态时 f 电子的局域磁矩、电荷涨落和自旋涨落. 三者定义分别为^[9]

$$\begin{aligned} \langle s_i^z \rangle &= 3 \langle [s_i^z]^2 \rangle = \frac{3}{4} (n_i - 2 \langle n_i n_{i\downarrow} \rangle), \\ \sigma^2(n_i) &= \langle n_i^2 \rangle - \langle n_i \rangle^2 = n_i(n_i - 1) + 2 \langle n_i n_{i\downarrow} \rangle, \\ \sigma^2(s_i^z) &= \langle [s_i^z]^2 \rangle - \langle s_i^z \rangle^2 = \frac{1}{4} (n_i - 2 \langle n_i n_{i\downarrow} \rangle). \end{aligned} \quad (26)$$

这三个量的大小在物理上都反映了 f 电子的局域化程度, 它们都和关联函数 $\langle n_i n_{i\downarrow} \rangle$ 有关. 对于相关基态

$$\langle n_i n_{i\downarrow} \rangle_L = \frac{n_i^2}{4} - \frac{2\eta}{NU} \langle OH_i \rangle + \frac{\eta^2}{NU} \langle OH_i O \rangle. \quad (27)$$

由前面的计算结果 $\eta = \langle OH \rangle / \langle OH O \rangle$, $\langle OH_i \rangle = \langle OH \rangle$, $\langle OH_i O \rangle = 0$ (由于图 1(e) 的贡献为零), 及 $n_i = 1$, 得到

$$\langle s_i^z \rangle = \frac{3}{8} + \frac{3 \times \left(\frac{11}{128}\right)^2 \tilde{U}}{\frac{3}{16} \tilde{V}^2 - \frac{3}{16} \tilde{V}^3 \operatorname{tg}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}} + \frac{11}{32} \tilde{V}^2 \operatorname{sh}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}}}, \quad (28)$$

$$\sigma^2(n_i) = \frac{1}{2} - \frac{4 \times \left(\frac{11}{128}\right)^2 \tilde{U}}{\frac{3}{16} \tilde{V}^2 - \frac{3}{16} \tilde{V}^3 \operatorname{tg}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}} + \frac{11}{32} \tilde{V}^2 \operatorname{sh}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}}}, \quad (29)$$

$$\sigma^2(s_i^z) = \frac{1}{8} + \frac{\left(\frac{11}{128}\right)^2 \tilde{U}}{\frac{3}{16} \tilde{V}^2 - \frac{3}{16} \tilde{V}^3 \operatorname{tg}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}} + \frac{11}{32} \tilde{V}^2 \operatorname{sh}^{-1} \frac{1}{\tilde{V}}}. \quad (30)$$

当然以上三式也是在条件 (25) 式下成立.

四、结果与讨论

上节中分别推导出对称 Anderson 晶格基态的相关能、相关基态能量、局域磁矩、电荷涨落和自旋涨落的计算公式. 这些公式清楚地给出以上几个物理量与 $\tilde{U}$ 和 $\tilde{V}$ 的依赖

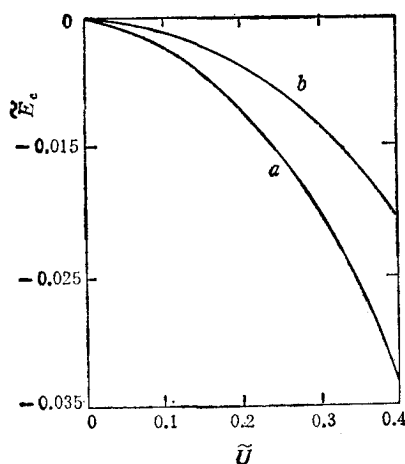


图 2 $\tilde{E}_c$ - $\tilde{U}$ 曲线

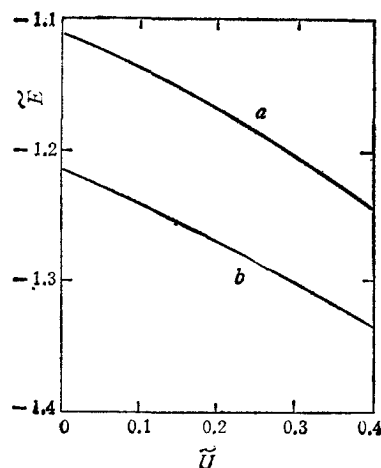


图 3 $\tilde{E}_L$ - $\tilde{U}$ 曲线

关系. 为了便于讨论, 图 2—图 6 给出了数值计算结果. 在这些图中, 曲线 *a* 和 *b* 分别对应 $\tilde{V} = 0.2$ 和 $\tilde{V} = 0.3$ 的情况.

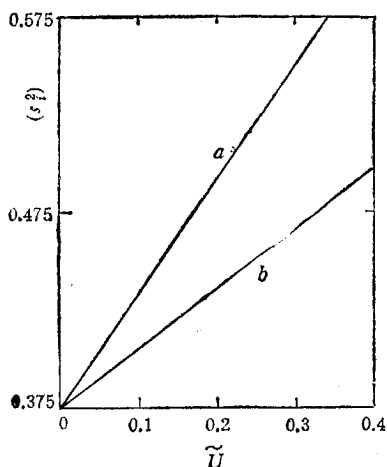
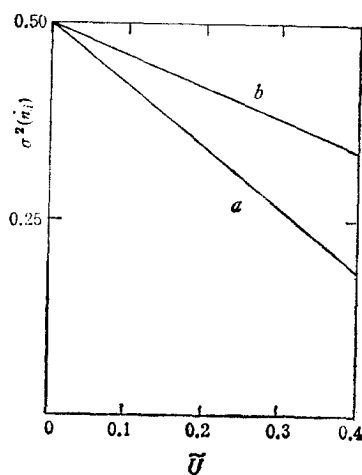
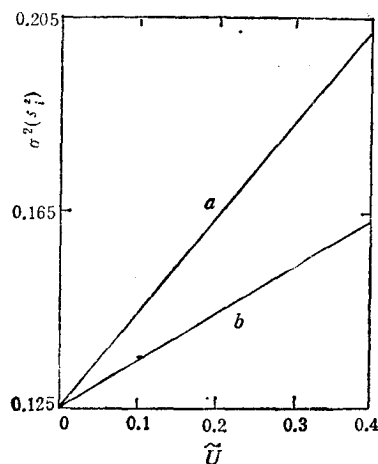


图 4 $\langle s_i^z \rangle$ - $\tilde{U}$ 曲线

图 2 是相关能 $\tilde{E}_c$ - $\tilde{U}$ 曲线. 由图中不难看出, 对一定的 $\tilde{V}$, 相关能随 $\tilde{U}$ 增大而变小; 对一定的 $\tilde{U}$, 相关能随 $\tilde{V}$ 增大而变大. 图 3 是相关基态能量 $\tilde{E}_L$ - $\tilde{U}$ 曲线, 由于曲线 *a* 在曲线 *b* 上方, 因而对一定的 $\tilde{U}$, 相关基态能量随 $\tilde{V}$ 减小而变大. 这说明, 当 $\tilde{U}$ 不变时, 随着 $\tilde{V}$ 减小, 顺磁相变得不稳定. 当 $\tilde{V}$ 减小到某个值以下时, $\tilde{U}$ 和 $\tilde{V}$ 的关系不能满足 (25) 式, 顺磁相的解不再存在, 预期此时系统发生了相变. 当然有关相变的性质, 还需进一步计算相图来确定.

图 4 是局域磁矩 $\langle s_i^z \rangle$ - $\tilde{U}$ 曲线. 由图 4 中可以看到, 对一定的 $\tilde{V}$, 局域磁矩随 $\tilde{U}$ 减小而逐渐变小; 而对一定的 $\tilde{U}$, 局域磁矩随 $\tilde{V}$ 增大也变小. 局域磁矩变小, 反映 f 电子发生了由局域到

图5 $\sigma^2(n_i)-\tilde{U}$ 曲线图6 $\sigma^2(s_i^z)-\tilde{U}$ 曲线

非局域的变化。这一结论和文献 [18] 用不同模型得到的结论相一致。按本文结果, 随着压强增加, $\tilde{U}$ 变小 $\tilde{V}$ 变大, f 电子的局域磁矩变小, 退局域化程度变大, 这和铈的化合物中存在的变价现象相一致。

图 5 和图 6 分别示出电荷涨落 $\sigma^2(n_i)-\tilde{U}$ 曲线和自旋涨落 $\sigma^2(s_i^z)-\tilde{U}$ 曲线。由图中不难看出, 二者受到了 f 电子由局域到非局域变化的强烈影响。

五、结 论

我们用局域方法近似, 得到了对称 Anderson 晶格基态的相关能、相关基态能量、局域磁矩、电荷涨落和自旋涨落。对于简单立方晶格, 使用紧束缚能带和平方态密度, 得到了它们的解析表达式。数值计算结果表明, 当同一格点自旋相反的 f 电子间库仑作用 U 减小, d-f 杂化强度 V 增大时, 局域磁矩变小, 说明 f 电子发生了由局域到非局域的变化, 这一结论和其它文献用不同模型得到的结论相一致。利用本文结果也可定性解释铈的高压特性及其化合物中存在的变价现象。对一定的 U , 当 V 减小时, 相关能变小, 相关基态能量变大, f 电子的局域化程度也变大, 顺磁相变得不稳定。当 V 小到某个值以下时, 预期系统将发生相变。关于相变的性质, 需通过进一步计算相图来确定。

在本文计算中, 仅取了 $O_{ii}^{(m)} = O_{ii}\delta_{ij} = n_{i\uparrow}n_{i\downarrow}$, 比较全面的计算还需进一步取

$$O_{ii}^{(m)} = n_i n_j$$

和 $O_{ii}^{(m)} = \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j$, 这时要计算更多的图形。关于这方面的工作, 准备另文讨论。

本文承蒙北京大学物理系尹道乐教授、东北工学院物理系张开义教授审阅, 瑞典 Linköping 大学 K. A. Chao 教授提供了局域方法的有关文献, 谨此一并致谢。

参 考 文 献

- [1] F. Steglich, J. Aarts, C. D. Bredl *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **43** (1979), 1892.
- [2] H. Yashima and J. Satoh, *Solid State Commun.*, **41** (1982), 723.
- [3] D. Gignoux and J. C. Gomon-Sal, *Phys. Rev.*, **30** (1984), 3967.
- [4] Methods of Electronic Structure Theory, Vol. 3 of Modern Theoretical Chemistry, edited by H. F. Schaefer III, Plenum, New York, (1977).
- [5] M. C. Gutzwiller *Phys. Rev.*, **137** (1965), 1726.
- [6] R. K. Nesbet, *Phys. Rev.*, **175** (1968), 2.
- [7] G. Stollhoff and P. Fulde, *Z. Phys.*, **B26** (1977), 257.
- [8] G. Stollhoff and P. Fulde, *Z. Phys.*, **B29** (1978), 231.
- [9] A. M. Oles and J. Spalek, *Z. Phys.*, **B44** (1981), 177.
- [10] A. M. Oles and K. A. Chao, *Phys. Lett.*, **89A** (1982), 420.
- [11] A. M. Oles, *Phys. Rev.*, **B28** (1983), 327. 231.
- [12] A. M. Oles, R. Micnas *et al.*, *Phys. Lett.*, **102A** (1984), 323.
- [13] H. Kaga, *J. Magn. Magn. Mat.*, **52** (1985), 230.
- [14] D. N. Zubarev, *U. sp. Fiz. Nauk*, **71**(1960), 71.
- [15] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc.*, **A276** (1963), 238.
- [16] A. M. Oles, *J. Phys. C*, **15**(1982), 2745.
- [17] P. Horsch and P. Fulde, *Z. Phys.*, **36** (1979), 23.
- [18] 陈长凤、章立源, 物理学报, **34**(1985), 1442.

LOCAL APPROXIMATION APPROACH TO THE GROUND STATE OF THE SYMMETRIC ANDERSON LATTICE

WEI GUO-ZHU

(Department of Physics, Northeast Institute of Technology, Shenyang)

ABSTRACT

Using the Green function technique, the H-F ground state energy of the symmetric Anderson lattice is calculated. Then the correlation energy, ground state energy, local moments, charge- and Spin-fluctuations of the correlation ground State are calculated with the local approximation. Corresponding analytical formulas are obtained for a rectangular density of state. The result indicates that local moments decrease with decreasing value of the one-site f-f coulomb interaction U and or increasing value of the d-f hybridization strength V .