

重费密子系统 CeAl_3 的低温比热随 压力变化的理论解释

冯 世 平

(北京师范大学物理系, 低能核物理研究所)

1986 年 6 月 12 日收到

提 要

我们采用周期性 Anderson 模型哈密顿量解释了在低压下重费密子系统 CeAl_3 的低温比热随压力变化的实验结果。

一、引 言

最近, 实验上已经证实了一大批重费密子系统在低温时显示一系列的反常现象^[1,2]。由于这些重费密子系统都包含有定域性很强的 f 电子, 因而一般人们总是认为重费密子系统的低温反常现象是由这些 f 电子或者是经过 f - s 杂化的准粒子而引起的^[3-6]。对于单杂质的重费密子系统已经有较长时期的研究。这些单杂质重费密子系统可以是 Kondo 系统, 也可以是变价系统, 而且理论上的研究也比较成熟^[7-10]。但是对于杂质周期性排列形成的晶格系统, 现在并没有一个人们可普遍接受的理论。这些系统有的是 Kondo 晶格系统, 有的是变价系统, 有的甚至是重费密子超导系统^[11]。研究这些系统大都采用周期性 Anderson 模型哈密顿量。而周期性 Anderson 模型哈密顿量到现在为止并没有精确解, 因此不同的作者应用这个模型时有不同的近似方法^[11-14]。新近, 实验上发现重费密子系统 CeAl_3 的低温比热显示出 Kondo 行为并且随压力的变化而变化^[2]。这个实验结果引起了我们极大的兴趣。我们认为, 虽然 CeAl_3 的低温比热显示出 Kondo 行为, 但是当对样品施加压力后要增大系统的 f - s 杂化并且使得 f 能级和 Fermi 能级发生相对移动。因此当压力足够大时, CeAl_3 就有可能从 Kondo 系统转变成变价系统, 而变价系统在加压足够大时有显著的 Collapse 效应, 这样我们解释 CeAl_3 的低温比热随压力变化时就要分别讨论低压区 and 高压区。在本文中, 我们将采用周期性 Anderson 模型哈密顿量讨论低压区的实验结果。

二、理 论 方 法

我们已经知道用周期性 Anderson 模型哈密顿量来描述 Kondo 型的重费密子系统是比较合适的^[13-15]。这个哈密顿量为^[13]

$$H = \sum_{k\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} \epsilon_{fk} f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + \sum_{k\sigma} V (c_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} + f_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma}) + \frac{1}{2} U \sum_{i\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} f_{i-\sigma}^\dagger f_{i-\sigma}, \quad (1)$$

$$\epsilon_{fk} = \alpha \epsilon_k \quad \alpha \ll 1. \quad (2)$$

采用运动方程方法,可分别求出导带电子和 f 电子的 Green 函数. 因为重费密子的低温反常现象是由于 f 电子或是经过 f-s 杂化了的 f 电子而引起的. 这样,我们仅仅关心杂化后的 f 电子的 Green 函数,它可写成^[13]

$$G_{fk}(\omega_n) = \frac{1}{2V} \left[\frac{\tilde{\alpha} \epsilon_k - (u - v)}{i\omega_n - (u - v)} - \frac{\tilde{\alpha} \epsilon_k - (u + v)}{i\omega_n - (u + v)} \right], \quad (3)$$

式中

$$\tilde{r} = 1 - \left. \frac{\partial \tilde{\Sigma}(\omega_n)}{\partial (i\omega_n)} \right|_{i\omega_n=0}, \quad (4)$$

$$\tilde{\alpha} = \alpha / \tilde{r}, \quad (5)$$

$$u = \frac{1}{2} (1 + \tilde{\alpha}) \epsilon_k, \quad (6)$$

$$v = \frac{1}{2} [(1 - \tilde{\alpha})^2 \epsilon_k^2 + 4\tilde{v}^2]^{\frac{1}{2}}, \quad (7)$$

$$\tilde{v}^2 = V^2 / \tilde{r}, \quad (8)$$

$\tilde{\Sigma}(\omega_n)$ 为自能. 可见能量的色散关系有两支. 将 $u + v$ 和 $u - v$ 沿着 Fermi 能级展开,可得

$$\epsilon_1(k) = h(\epsilon_k + \epsilon_0) \quad (9)$$

$$\epsilon_2(k) = h(\epsilon_k - \epsilon_0), \quad (10)$$

$$h = 2\tilde{\alpha}/(1 + \tilde{\alpha}), \quad \epsilon_0 = |\tilde{V}|/\sqrt{\tilde{\alpha}}. \quad (11)$$

在 $T = 0$ 时,系统处于基态,此时准粒子的基态能量为

$$E = \frac{2}{N} \sum_i \epsilon_i(k) = 2\rho_0 h \left[\int_0^{E_F} d\epsilon (\epsilon + \epsilon_0) + \int_0^{E_F} d\epsilon (\epsilon - \epsilon_0) \right] = 2\rho_0 h E_F^2, \quad (12)$$

式中 E_F 为系统的 Fermi 能. 定义系统的焓

$$\Phi = E + p\bar{V}, \quad (13)$$

式中 $\bar{V}$ 为比容之差

$$\bar{V} = V - V_0, \quad (14)$$

而 V_0 为压力 $p = 0$ 时的比容, V 为压力为 p 时的比容. 与我们以前的考虑相同^[15], 当对样品施加压力后,我们要考虑 f 电子能级和 Fermi 能级的相对移动和 f-s 电子杂化的增加而引起的效应. 在低压情况下,这两个效应可通过如下方式引入:

$$\alpha = \alpha_0 - \beta \bar{V}, \quad (15)$$

$$E_F = E_F^0 - \gamma \bar{V}, \quad (16)$$

那么由平衡条件

$$\frac{\delta \Phi}{\delta \bar{V}} = 0, \quad (17)$$

可定出 p 与 $\bar{V}$ 的关系为

$$p - 4\rho_0 \left[\frac{\tilde{\beta}(E_F^0 - 2\gamma E_F^0 \bar{V})}{(1 + \tilde{\alpha}_0 - \tilde{\beta} \bar{V})^2} + \frac{2\gamma(\tilde{\alpha}_0 - \tilde{\beta} \bar{V})(E_F^0 - \gamma \bar{V})}{1 + \tilde{\alpha}_0 - \tilde{\beta} \bar{V}} \right] = 0, \quad (18)$$

式中 $\tilde{\beta} = \beta/\bar{r}$. 由于我们仅讨论低压情况, 因此当 p 小时, $\bar{V}$ 也较小, 这样 (18) 式可写成

$$\bar{V} = -Ap + B. \quad (19)$$

这里

$$A = \frac{(1 + \tilde{\alpha}_0)^2}{4\rho_0[2\gamma^2\tilde{\alpha}_0(1 + \tilde{\alpha}_0) + 4\gamma\tilde{\beta}E_F^0 - 2\tilde{\beta}E_F^0(1 + \tilde{\alpha}_0)^{-1}]}, \quad (20)$$

$$B = \frac{\tilde{\beta}^2 E_F^0 + 2\gamma\tilde{\alpha}_0 E_F^0(1 + \tilde{\alpha}_0)}{2\gamma^2\tilde{\alpha}_0(1 + \tilde{\alpha}_0) + 4\gamma\tilde{\beta}E_F^0 - 2\tilde{\beta}E_F^0(1 + \tilde{\alpha}_0)^{-1}}. \quad (21)$$

同时我们可将 h 写成

$$h = h_0(1 + bp - cp^2), \quad (22)$$

$$h_0 = \frac{2}{1 + \tilde{\alpha}_0} \left(\tilde{\alpha}_0 - \frac{\tilde{\beta}B}{1 + \tilde{\alpha}_0} - \frac{\tilde{\beta}^2 B^2}{(1 + \tilde{\alpha}_0)^2} \right), \quad (23)$$

$$b = \frac{\tilde{\beta}A[(1 + \tilde{\alpha}_0) + 2B\tilde{\beta}]}{(1 + \tilde{\alpha}_0)^2 h_0}, \quad (24)$$

$$c = \frac{\tilde{\beta}^2 A^2}{(1 + \tilde{\alpha}_0)^2 h_0}. \quad (25)$$

由 Landau 的 Fermi 液体理论知, 在低温下, 低能准粒子的熵为自由粒子的熵形式^[16], 即是

$$S = -\frac{2k_B}{N} \sum_{k,i=1}^2 w(k) [n_i(k) \ln n_i(k) + (1 - n_i(k)) \ln (1 - n_i(k))], \quad (26)$$

式中 $w(k)$ 为权重因子. 而系统的自由能为

$$F = E - TS = \frac{2}{N} \sum_{k,i} \varepsilon_i(k) n_i(k) + \frac{2k_B T}{N} \sum_{k,i} w(k) [n_i(k) \ln n_i(k) + (1 - n_i(k)) \ln (1 - n_i(k))]. \quad (27)$$

由平衡条件

$$\frac{\delta F}{\delta n_i} = 0 \quad i = 1, 2, \quad (28)$$

可定出

$$n_i(k) = \frac{1}{1 + e^{\varepsilon_i(k)/k_B T w(k)}}. \quad (29)$$

再由定义, 可定出定压比热为

$$c_p(T, p) = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_p.$$

$$= \frac{\rho_0}{2T} \sum_i \int_0^D \varepsilon_i(k) \ln \frac{n_i(k)}{1 - n_i(k)} \cdot \operatorname{sech}^2 \frac{\varepsilon_i(k)}{2k_B T w(k)} d\varepsilon_k, \quad (30)$$

式中 D 为准粒子能谱的带宽。经过直接运算化简, 上式可写成

$$c_p(T, p)/T = \frac{1}{1 + bp - cp^2} \cdot c_0(T^*)/T^*, \quad (31)$$

式中 $c_0(T)$ 为压力 $p = 0$ 时的比热, 而 T^* 为约化温度

$$T^* = \frac{T}{1 + bp - cp^2}. \quad (32)$$

由此可见 $c_p(T, p)$ 与 p 的关系是非线性的。

三、数值结果与讨论

从我们推导出的 $c_p(T, p)$ 形式可以看出, $c_p(T, p)$ 与 $c_0(T)$ 有很大关系, 只要 $c_0(T)$ 的函数形式知道, 那么需要确定的就仅仅是常数 b 和 c 。从 (24) 和 (25) 式知, b 和 c 是一些参数的组合。而这些参数的确定需要做非常仔细的计算, 这在现阶段是不可能的, 因此在本文中我们将把 b 和 c 视为可调参数。而对于 $c_0(T)$, 可类似地采用文献[16]的方法将其拟合得与实验结果相符合。但在本文中, 我们并不这样做, 而是直接采用 $c_0(T)$ 的实验结果来解释压力不为零但是较小时 $c_p(T, p)$ 的实验值。由图 1 可以看出, 在低压区, 我们的数值结果大致与实验相符, 从而定性地解释了低压区域内 CeAl_3 的低温比热随压力变化的实验结果。而对于高压区的实验结果的解释将是我们下一步的工作。

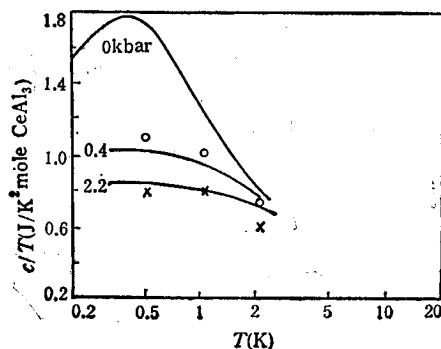


图 1

参数 $b = 1.5$, $c = 0.45$; 实线为实验值; O, X 为理论值

作者感谢黄祖洽教授的指导。

参 考 文 献

- [1] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.*, **56**(1984), 755.
- [2] G. E. Brodale *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **56**(1986), 390.
- [3] H. Razafimandimby *et al.*, *Z. Phys.*, **B54**(1984), 111.

- [4] P. W. Anderson, *Phys. Rev.*, **B30**(1984), 1549.
- [5] F. J. Ohkawa *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **53**(1984), 4344.
- [6] T. Matsuura *et al.*, *Pro. Theor. Phys.*, **72**(1984), 402.
- [7] P. Coleman, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 5255.
- [8] P. Coleman, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 3035.
- [9] F. C. Zhang *et al.*, *Phys. Rev.*, **B28**(1983), 33.
- [10] P. Nozieres, *J. Low. Temp. Phys.*, **17**(1974), 31.
- [11] F. J. Ohkawa, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **53**(1984), 1389.
- [12] R. M. Martin, *Phys. Rev. Lett.*, **48**(1982), 362.
- [13] M. Tachiki *et al.*, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 2497.
- [14] M. Tachiki *et al.*, *Phys. Rev.*, **B31**(1985), 228.
- [15] 冯世平, 物理学报, **35**(1986), 687.
- [16] T. M. Rice *et al.*, *Phys. Rev.*, **B31**(1985), 594.

THEORETICAL EXPLANATION OF THE CHANGE OF LOW TEMPERATURE SPECIFIC HEAT OF HEAVY-FERMION COMPOUND CeAl_3 WITH PRESSURE

FENG SHI-PING

(Departments of Physics and Institute of Low Energy Nuclear Physics, Beijing Normal University)

ABSTRACT

We use periodic Anderson Model Hamiltonian to explain the change of the low-temperature-specific heat of heavy-fermion compound CeAl_3 in low pressure range.