

重费密子合金的 Slave Boson 平均场理论*

李正中 周青春 邱 扬

南京大学物理系

1989年1月28日收到

本文从 Yoshimori-Kasai 模型出发,在 Slave Boson 平均场范围内采用相干势近似方法,给出一个描述重费密子合金正常态的理论。自治计算了重费密子合金中传导电子和强关联 f 电子的态密度随合金浓度的变化。所得结果不仅明确揭示了态密度中隙隙形成的过程,还对重费密子合金中比热和热电功率的低温相干效应作出了合理的解释。

一、引言

在重费密子系统 (HFS) 的研究中,人们已经认识到绝大多数 HFS 的正常态都可以用 Kondo 晶格模型来描述^[1-4]。在 Kondo 晶格中,各元胞内 Kondo 离子形成了相干态,并且重 (f) 电子的态密度 (DOS) 曲线在费密能级附近出现隙能隙结构 (双峰),不同于单杂质的 Kondo 共振 (单) 峰^[5]。为了揭示 Kondo 离子间的相互影响并探讨相干性的形成,近年来 HFS 合金的研究已成为引人注目的课题。实验上发现,在多种 $4f$ 族 HFS 合金中 ($\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_2\text{Si}_2$, $\text{Ce}_x\text{Y}_{1-x}\text{Cu}_2\text{Si}_2$, $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Al}_3$, $\text{Ce}_x\text{La}_{1-x}\text{Cu}_6$ 等)^[6-9],随着浓度 x 增大,合金系统在低温下的热电功率 (TEP) 系数,霍耳系数以及磁致电阻都将变号,而低温电阻率 $\rho(T)$ 与低温比热系数 $\gamma(T)$ 的极大点,则从零温度向有限温度方向移动,这些现象被称为 HFS 中的相干效应^[2]。在理论上, Yoshimori 和 Kasai^[10] 在 f 电子具有弱色散的周期性 Anderson 模型 (通称 Yoshimori-Kasai 模型) 中引入无序,并首先用相干势近似方法计算了 HFS 合金的电阻率。但由于他们略去了格点间关联对 Kondo 离子自能的修正,其参数插值计算结果的自治性并不良好。并且在计算电阻时,还假定了合金的 Kondo 温度 T_K 是浓度 x 的快速增长函数,这又与近期实验 (HFS 合金的 T_K 不随 x 变化) 的结果^[2,8] 相抵触。问题的关键是他们没有应用处理单杂质和 Kondo 晶格都行之有效的 Slave Boson 方法^[11] 来做 HFS 合金的相干势近似理论。我们曾在 $U = \infty$ Anderson 晶格模型中引入组分无序,并在 Slave Boson 平均场范围内用相干势近似方法自治计算了合金的电子态密度曲线,结果表明: 当合金浓度增大到 f 态密度在费密能级附近开始形成隙隙时, HFS 合金电阻率的 T^2 项系数将从正值变为负值^[12],这正是导致合金的电阻极大向有限温度方向移动的直接原因^[2]。在文献 [12] 中,为了简化计算,我们曾假定导带为半满,这使得合金系统在 Kondo 晶格极限 ($x = 1$ 时) 成为绝缘体。为了保证半满导带情况下 Kondo 晶格也呈现金属性,人们常在 $U = \infty$ Anderson

* 国家自然科学基金资助的课题。

晶格哈密顿量中附加一个 f 电子的弱色散项,此即 Yoshimori-Kasai 模型(或简称 Y-K 模型)^[13]. 在文献 [14] 中,利用 Slave Boson 方法处理 Y-K 模型已取得成功. 本文旨在将 Slave Boson 方法和相干势近似方法用于含组分无序的 Y-K 模型,以期建立一个包括高、低浓度极限在内 ($0 \leq x \leq 1$) 的 HFS 合金理论.

文章的结构为: 首先给出无序 Y-K 模型的 Slave Boson 平均场哈密顿量和决定 Slave Boson 参数的自治方程. 其次将引进 HFS 合金的相干势、有效介质的哈密顿量和相干势近似方程. 然后,对合金的电子态密度进行自治计算. 最后,利用所得态密度曲线求 HFS 合金的低温比热系数 $\gamma(T, x)$ 和热电功率系数 $Q(T, x)$, 并试图对 γ 与 Q 的相干特征作出合理的解释.

二、重费密子合金的无序模型

我们将研究类似于 $(\text{Ce}_x\text{La}_{1-x})\text{Al}$ 的 HFS 合金系统,这类系统中含有 A 与 B 两种稀土族原子, A 为磁性原子(类 Ce, 含 f 电子),而 B 代表非磁性原子(类 La, 不含 f 电子). 系统的无序化可认为是在仅含 A 原子的 Kondo 晶格系统 ($x = 1$) 中通过用 B 取代 A 的掺杂合金化手续完成的. 按照这一方案,将选择 Yoshimori-Kasai 的 f 电子有弱色散的 Anderson 晶格^[13]作为 Kondo 晶格,并引进组分无序. 为此,定义 l 格的无规变量为 ξ_l (当 $l \in A$ 时, $\xi_l = 1$; 当 $l \in B$ 时, $\xi_l = 0$), 并注意到 ξ_l 的无规平均满足等式 $\bar{\xi}_l = \bar{\xi} = x$, 这里 x 代表合金中 A 原子的归一浓度. 将 ξ_l 引进 Y-K 模型,可写出无序系统的出发哈密顿量为

$$H = \sum_{k\sigma} \{ \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + (\alpha \varepsilon_k - E_f) f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} \} + \sum_{l\sigma} (1 - \xi_l) (E_L - E_f) f_{l\sigma}^\dagger f_{l\sigma} \\ + V \sum_{l\sigma} \xi_l (f_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma} + c_{l\sigma}^\dagger f_{l\sigma}) + U \sum_l \xi_l f_{l\uparrow}^\dagger f_{l\uparrow} f_{l\downarrow}^\dagger f_{l\downarrow}, \quad (1)$$

式中 $c_{k\sigma}$ ($c_{l\sigma}$) 和 $f_{k\sigma}$ ($f_{l\sigma}$) 分别代表传导电子和 f 电子在 Bloch (Wannier) 表象中的算符; σ 为自旋指标; ε_k 为导带电子能量; $(-E_f)$ 代表 A 原子上 f 电子的中心能级,它远在费密能级之下; $\alpha \varepsilon_k$ 为 Y-K 模型中(为保证 $x = 1$ 时 Kondo 晶格呈现金属性)所引进的弱色散项; E_L 代表非磁性 B 原子的 f 能级,为确保 B 上无 f 电子占据,在计算中应取 $E_L \rightarrow \infty$; V 代表 Anderson 的 c-f 杂化参数; U 为同一格点上自旋取向相反的 f 电子之间的库仑关联作用,这两项都只出现在被 A 原子占据的格点上. 由于在强关联情况 ($U \rightarrow \infty$) 下, A 原子格点上 f 电子的双占据态将被排除, f 电子占据数只能取 0 或 1, 则 (1) 式等号右边最后一项将不出现. Coleman^[11] 指出,这时强关联效应可以通过在含 V 的杂化项中引入 Slave Boson 场算符 b_l 而严格计入. 在 Slave Boson 平均场近似下, b_l 可用一个 c-数 b 代替^[11,12], 则 (1) 式简化为

$$H_{SB} = \sum_{k\sigma} \{ \varepsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + (\alpha \varepsilon_k + \tilde{E}_f) f_{k\sigma}^\dagger f_{k\sigma} \} + \sum_{l\sigma} (1 - \xi_l) \varepsilon_L f_{l\sigma}^\dagger f_{l\sigma} \\ + \sum_{l\sigma} \xi_l (V b f_{l\sigma}^\dagger c_{l\sigma} + \text{H. c.}) + \lambda |b|^2 \sum_l \xi_l, \quad (2)$$

式中 $\tilde{E}_f = \lambda - E_f$, $\varepsilon_L = E_L - \tilde{E}_f$ 分别为 A, B 原子的 f 电子重整能级. 引进拉氏乘子

λ 是为了满足约束条件

$$n_f + |b|^2 = 1 \quad l \in A. \quad (3)$$

它就是在强关联 ($U \rightarrow \infty$) 时 f 电子的无双占据格点条件。(3) 式中 n_f 代表 A 原子上的平均 f 电子数, 参数 b 由 Slave Boson 的鞍点方程^[11,15]决定,

$$\lambda b = -V \sum_{\sigma} \langle c_{l\sigma}^{\dagger} f_{l\sigma} \rangle \quad l \in A. \quad (4)$$

在半满或近半满导带情况下, Slave Boson 参数 b 为小量, 且满足 $|b| \ll 1$ ^[12]. 这时由约束条件 (3) 式可知 $n_f \lesssim 1$, 对应于近整数价, 即 Kondo 极限情况. 注意到 b 在 H_{SB} 中起着杂化参数 V 的重整因子作用, 可定义 $\tilde{V} \equiv bV$, 并称之为有效杂化参数. (2) 式中的弱色散参数 α 的选取应满足晶格情况 ($x = 1$) 下的金属性条件, 在文献 [14] 中已求出

$$\alpha = \eta^2 |\tilde{V}|^2 / D \quad \eta \geq 1, \quad (5)$$

式中 D 为导带半宽, η 为调节参数, 当选取 $\eta \geq 1$ 时, Kondo 晶格的两支准粒子谱 ω_+ 与 ω_- 之间无能隙隔开, 可保证在半满导带条件下 Kondo 晶格也具有金属性, 从而适用于重费密子金属系统^[14]. 不难看出, 当 $x = 1$ 时系统是有序晶格, 可令无规变量 $\xi_l = 1$, 则 (2) 式简化为金属性 Kondo 晶格的 Slave Boson 哈密顿量^[14]. 因此, 本文在 Y-K 模型基础上, 所引进的 Slave Boson 平均场哈密顿量 (2) 式不仅可用于 Kondo 合金, 同时也适用于金属性 Kondo 晶格的描述. 由此出发, 可望能建立一个在 $0 \leq x \leq 1$ 全浓度范围内适用的重费密子合金理论. 我们将采用相干势近似处理无序的 Slave Boson 平均场哈密顿量 H_{SB} .

三、有效介质

由于感兴趣的是宏观物理量, 而它们只与无序系统的结构平均有关, 因此可以引进相干势近似的有效介质, 用于描述元激发被无序系统散射的平均效果. 对于含 c 和 f 两类电子的杂化系统, 相干势原则上应设为下列 (2×2) 矩阵:

$$\Sigma(\omega, x) = \begin{pmatrix} \Sigma_{cc} & \Sigma_{cf} \\ \Sigma_{fc} & \Sigma_{ff} \end{pmatrix}. \quad (6)$$

在相干势近似的单格点近似下, 类似于文献 [12] 和 [16], 经直接的代数运算不难证明 (6) 式中

$$\Sigma_{cc} = 0, \quad \Sigma_{cf} = (Vb)^* = \tilde{V}^*, \quad \Sigma_{fc} = Vb = \tilde{V}. \quad (7)$$

因此, 需要求解的仅仅是 Σ 的 ff 分量 $\Sigma_{ff} \equiv \Sigma_{ff}(\omega, x)$. 于是 (2) 式所对应的有效介质的哈密顿量简化为在 $c_{k\sigma}$ 与 $f_{k\sigma}$ 所组成的基矢空间中的矩阵

$$\bar{H} = \begin{pmatrix} \varepsilon_k & \tilde{V}^* \\ \tilde{V} & \Sigma_{ff} + \alpha \varepsilon_k \end{pmatrix}, \quad (7)'$$

式中已考虑当导带为半满时可令 $\tilde{E}_f \approx 0$ ^[12], 并略去无关常数项 $\lambda N |b|^2$, 这里 $\lambda \approx E_f$.

根据 (7)' 式, 在 Bloch 表象中的有效介质格林函数

$$\bar{G}(\omega, k) = (\omega - \bar{H})^{-1} = \frac{1}{B} \begin{pmatrix} \omega - \alpha \varepsilon_k - \Sigma_{ff} & \tilde{V}^* \\ \tilde{V} & \omega - \varepsilon_k \end{pmatrix}, \quad (8)$$

式中 $\tilde{V} = Vb$, 而

$$B \equiv (\omega - \varepsilon_k)(\omega - \alpha \varepsilon_k - \Sigma_{ff}) - |\tilde{V}|^2. \quad (9)$$

在 Wannier (或称格点)表象中格林函数可定义为

$$F(\omega) = \frac{1}{N} \sum_k \bar{G}(\omega, k) = \begin{pmatrix} F_{cc}(\omega) & F_{cf}(\omega) \\ F_{fc}(\omega) & F_{ff}(\omega) \end{pmatrix}, \quad (10)$$

其分量的具体表示式如下:

$$F_{cc}(\omega) = \frac{1}{E_+ - E_-} \left\{ \left(\frac{\omega - \Sigma_{ff}}{\alpha} - E_- \right) F_0(E_-) - \left(\frac{\omega - \Sigma_{ff}}{\alpha} - E_+ \right) F_0(E_+) \right\}, \quad (11a)$$

$$F_{ff}(\omega) = \frac{1}{\alpha(E_+ - E_-)} \{ (\omega - E_-) F_0(E_-) - (\omega - E_+) F_0(E_+) \}, \quad (11b)$$

$$F_{cf}(\omega) = \frac{\tilde{V}^*}{\alpha(E_+ - E_-)} \{ F_0(E_-) - F_0(E_+) \}, \quad (11c)$$

$$F_{fc}(\omega) = \frac{\tilde{V}}{\alpha(E_+ - E_-)} \{ F_0(E_-) - F_0(E_+) \}, \quad (11d)$$

式中

$$F_0(\omega) \equiv \int_{-\infty}^{\infty} N_c^{(0)}(E) \frac{1}{\omega - E} dE, \quad (12)$$

$N_c^{(0)}(E)$ 代表导带电子的未微扰态密度。 $E_{\pm}$ 是从格林函数 $\bar{G}(\omega, k)$ 的极点条件 $B = 0$, 所求出的准粒子谱的反解(即 ε_k 的解), 其表示式为

$$E_{\pm}(\omega, \Sigma_{ff}) = \frac{1}{2} \left\{ \left(\omega + \frac{\omega - \Sigma_{ff}}{\alpha} \right) \mp \left[\left(\omega - \frac{\omega - \Sigma_{ff}}{\alpha} \right)^2 + 4|\tilde{V}|^2/\alpha \right]^{1/2} \right\}. \quad (13)$$

如何确定相干势 Σ_{ff} , 涉及相干势近似自洽方程。

四、相干势近似自洽方程

比较(2)与(7)式, 并根据

$$H_{SB} - \bar{H} = \sum_l V_l,$$

可定出在有效介质中 A, B 原子占据格点的散射势

$$V_A = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\Sigma_{ff} \end{pmatrix}, \quad V_B = \begin{pmatrix} 0 & -\tilde{V}^* \\ -\tilde{V} & \varepsilon_L - \Sigma_{ff} \end{pmatrix}, \quad (14)$$

式中 $\varepsilon_L \equiv E_L - \tilde{E}_f$, 因为 $\tilde{E}_f \simeq 0$, 计算过程中可直接取 $\varepsilon_L \rightarrow \infty$, 以保证 B 原子上无 f 电子。根据 Yonezawa^[17], 单格点近似的相干势近似自洽方程为

$$x t_A + (1 - x) t_B = 0, \quad (15)$$

t_A, t_B 分别为 A, B 原子的散射矩阵,

$$t_A = \frac{1}{1 + \Sigma_{ff} F_{ff}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -\Sigma_{ff} \end{pmatrix}, \quad t_B = \frac{1}{F_{ff}} \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (16)$$

其一般表示式为 $t_i = V_i(1 - FV_i)^{-1}$. 由于 t_i 的无规平均 $\bar{t}_i = xt_A + (1-x)t_B$, 自洽方程 (15) 在物理上相当于要求无序系统与有效介质间的平均散射为零, 即 $\bar{t}_i = 0$ 条件. 当此条件满足时, 才可认为有效介质已经良好选择.

将 (16) 式代入 (15) 式, 则相干势近似自洽方程可写成下列更简单的形式:

$$\Sigma_{ff} F_{ff} = x - 1. \quad (17)$$

这只是确定相干势 Σ_{ff} 的一个方程, 上式中的 F_{ff} 应由 (11b) 式求解, 这又涉及到 Slave Boson 参数 b (或 $\tilde{V} = Vb$ 和 α) 的确定. 因此, 相干势近似方程 (17) 必须与 Slave Boson 方程 (4) 联立自洽求解. 由于确定 Slave Boson 参数 b 的鞍点方程只出现在被 A 原子占据的格点上, 对 (4) 式作无规平均并应用格林函数的谱定理可将它改写成

$$x\lambda b = \frac{2V}{\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \text{Im} F_{fc}(\omega + i0^+), \quad (18)$$

式中 $f(\omega) = [\exp(\beta\omega) + 1]^{-1}$ 为费密分布函数, F_{fc} 为有效介质的格林函数. 将 F_{fc} 的表示式 (11d) 代入上式, 就得到在有效介质中 Slave Boson 鞍点方程的最终表示式

$$x = \left(\frac{2J}{\pi} \right) \int_{-\infty}^{\infty} d\omega f(\omega) \text{Im} \left[\frac{F_0(E_-) - F_0(E_+)}{\alpha(E_+ - E_-)} \right]_{\omega+i0^+}, \quad (19)$$

式中 $J \equiv V^2/\lambda \approx V^2/E_f$ 为引进的耦合参数. 上式用于计算 HFS 合金中的有效杂化参数 $|\tilde{V}|^2 (= |Vb|^2)$, 从而可通过 (5) 式确定 Y-K 的唯一参数 α 和低温下 f 电子的有效质量 m^* (因 $\alpha^{-1} \equiv m^*/m^{(4)}$). 但要注意, $|\tilde{V}|^2$ 应与 Σ_{ff} 同时定出, 即 (19) 式必须与 (17), (11b), (12) 和 (13) 式联立进行自洽计算. 图 1 为

$T = 0\text{K}$

时, $(|\tilde{V}|/D)^2$ 与 x 的关系曲线, 计算时取参数值为 $(J/D) = 0.125$ 和 $\eta = 1.01$. 显然, 零温时有效杂化的模平方 $|\tilde{V}(x, T=0)|^2$ 几乎是合金浓度 x 的线性函数.

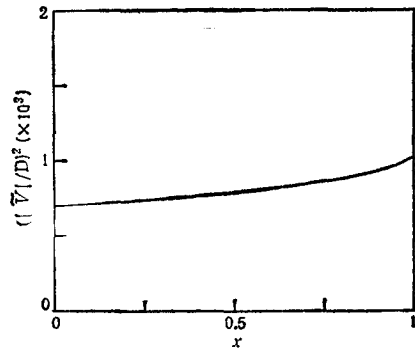


图 1 HFS 合金的 $(|\tilde{V}|/D)^2$ - x 曲线

现在讨论 HFS 合金的 Kondo 温度 T_K 与 x 的关系. 由于 T_K 应根据 $\tilde{V}(x, T=T_K) = 0$ (即 $b=0$) 条件, 从 Slave Boson 鞍点方程 (19) 定出, 可利用 $T=T_K$ 时, $|\tilde{V}|^2=0$ 和 $\alpha=0$, 直接从 (8)-(10) 式导出 $F_{ff}(\omega) = (\omega - \Sigma_{ff})^{-1}$, 再代入相干势近似方程 (17), 求得相干势

$$\Sigma_{ff} = -\omega(1-x)/x,$$

这不难从 (12) 与 (13) 式证明

$$\frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{F_0(E_-) - F_0(E_+)}{\alpha(E_+ - E_-)} \right] = -x N_c^{(0)}(\omega)/\omega \quad (\text{当 } T=T_K \text{ 时}).$$

将它代入 (19) 式, 得到 HFS 合金的 T_K 方程为

$$1 = 2J \int_{-\infty}^{\infty} d\omega N_c^{(0)}(\omega) \frac{\tanh(\beta_K \omega/2)}{\omega}, \quad (20)$$

式中 $\beta_K \equiv (k_B T_K)^{-1}$. 值得注意的是, (20) 式中已不再含浓度因子 x , 由此解出的 T_K 自然与 x 无关, 从而解释了实验的结论: HFS 合金的 Kondo 温度 T_K 不随浓度变化^[2,8]. 在 Yoshimori-Kasai 的工作中^[10], 曾假定合金的 T_K 随 x 快速增大, 这显然是没有根据的.

五、HFS 合金的电子态密度

合金的电子态密度可从有效介质的格林函数 $F(\omega)$ 的虚部决定. 平均每格点的 c 电子态密度和平均每个 A 原子的 f 电子态密度分别定义为

$$N_c(\omega, x) = -\left(\frac{1}{\pi}\right) \text{Im } F_{cc}(\omega + i0^+), \quad (21)$$

$$N_f(\omega, x) = -\left(\frac{1}{x\pi}\right) \text{Im } F_{ff}(\omega + i0^+). \quad (22)$$

在计算时涉及 $F_0(\omega)$, 根据 (12) 式需要给出 c 电子未微扰态密度的具体形式, 取 Hubbard 型态密度作为 $N_c^{(0)}(E)$ 的合理表示式

$$N_c^{(0)}(E) = \begin{cases} (2/\pi D)[1 - (E/D)^2]^{1/2} & |E| < D; \\ 0 & |E| > D, \end{cases} \quad (23)$$

式中 D 为导带半宽度. 这时 $F_0(\omega)$ 可解析表示为^[18]

$$F_0(\omega) = (2/D^2)\{\omega - [\omega^2 - D^2]^{1/2}\}. \quad (24)$$

对于 Kondo 晶格情况 ($x=1$) 和 Kondo 单杂质情况 ($x \rightarrow 0$), 态密度可以解析求出. 以 f 电子为例, 当 $x=1$ 时相干势近似自洽方程 (17) 有简单解 $\Sigma_{ff} = 0$, 这是因为 Kondo 晶格系统具有平移对称性, 故代表无序自能修正的相干势 Σ_{ff} 为零. 这时利用 (11b), (13) 和 (24) 式, 易求得 f 电子的态密度公式

$$N_f(\omega, x=1) = \frac{1}{2} N_c^{(0)}[E_{\pm}(\omega)]\{1 \pm (1-\alpha)\omega/F\} \quad \omega \in \omega_{\pm}, \quad (25)$$

式中 $\omega_{\pm}$ 为 Kondo 晶格的准粒子带, 而 F 定义为

$$F \equiv [(1-\alpha)^2\omega^2 + 4\alpha|\tilde{V}|^2]^{1/2}. \quad (26)$$

所绘出的 $N_f(\omega, x=1)$ 曲线与金属性 Kondo 晶格^[14]中已求得的结果完全一致. 对于单杂质 Kondo 问题, 应讨论 $x \rightarrow 0$ 极限情况. 从 (17) 式可知, 当 $x \rightarrow 0$ 时, 有 $\Sigma_{ff} \rightarrow \infty$, 利用此特征, 并考虑到 $|\tilde{V}|^2$ 与 α 均为小量, 易求得 $F_{ff}(\omega) \approx (\omega - \Sigma_{ff} + i\tilde{\Delta}_0)^{-1}$, 这里 $\tilde{\Delta}_0 \equiv \pi N_c^{(0)}(\omega=0)|\tilde{V}|^2$. 再将此 $F_{ff}(\omega)$ 近似式代入相干势近似方程 (17), 可导出 $x \rightarrow 0$ 时相干势的一个近似公式

$$\lim_{x \rightarrow 0} x \Sigma_{ff}(\omega) = \omega + i\tilde{\Delta}_0. \quad (27)$$

这时 f 态密度为

$$N_f(\omega, x \rightarrow 0) \approx \frac{1}{\pi} \text{Im} \left[\frac{1}{\lim_{x \rightarrow 0} (x \Sigma_{ff})} \right] = \frac{(\tilde{\Delta}_0/\pi)}{\omega^2 + \tilde{\Delta}_0^2}. \quad (28)$$

上式即描述单杂质 Kondo 效应的共振(单)峰^[11]. 因此, 本文所给出的合金电子态密度, 在高 ($x=1$)、低 ($x \rightarrow 0$) 浓度极限下均与已知结果一致. 在 $0 < x < 1$ 区间只能进

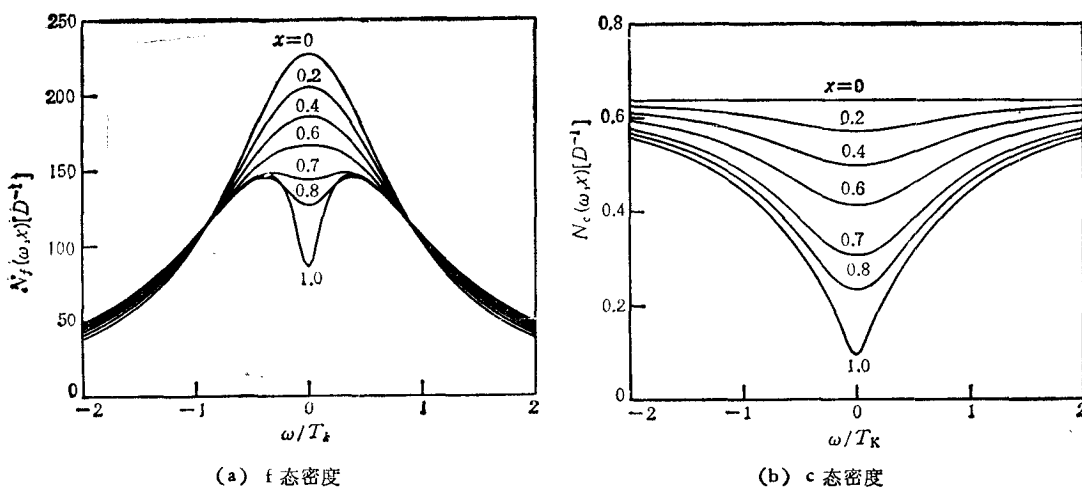


图 2

行数值求解。

在 $0 \leq x \leq 1$ 区自治计算了各种合金浓度之下 f 电子与 c 电子的态密度曲线, 计算时所用参数与图 1 相同, 其零温 ($T = 0$) 结果示于图 2 中。

从图 2 可得如下信息:

1) 重费密子特性 比较图 2 的 (a) 和 (b), 不难看出, 在 f 电子的重整能级 $\tilde{E}_f$ (即 $\omega = 0$) 附近, $N_f(\omega, x)$ 将比 $N_c(\omega, x) (\sim D^{-1})$ 要大 $10^2 - 10^3$ 倍, 即费密面附近 f 电子具有很高的态密度, 表明 f 电子是重费密子。因此, 本文所提供的合金模型能再现系统的重费密子特征。

2) 系统的金属性 在全浓度区 $0 \leq x \leq 1$ 内, $\omega = 0$ 附近的 f 态密度和 c 态密度均取非零的有限值, 即不出现真正的能隙, 从而可保证系统始终为金属。这和重费密子系统的金属性特征相符合。

3) 逐渐形成赭隙 从图 2(a) 可以看出, 当合金浓度 x 增加时, f 态密度曲线将从稀浓度 ($x \ll 1$) 时的 Kondo 共振(单)峰逐渐过渡为金属性 Kondo 晶格 ($x = 1$) 的赭隙(即双峰)结构^[14]。在 $0 < x < 1$ 区间内存在一个临界浓度 x_c , 它大约在 0.6 与 0.7 之间。当合金浓度从 $x < x_c$ 增大到 $x > x_c$ 时, $\omega = 0$ 附近的 f 态密度曲线将从上凸型变为下凹型的曲线, 即在 $x = x_c$ 处 f 态密度从单峰向双峰转变, 说明赭隙已开始形成。与此同时, 图 2(b) 也表明, 随着合金浓度增大, 在 $\omega = 0$ 附近将逐渐形成 c 态密度的“狭谷”, 且当 $x = 1$ 时“谷底”的态密度并不趋向零, 这正是 c 态密度曲线上的赭隙结构^[19]。出现赭隙是高浓度 Kondo 合金系统中磁离子间形成相干态的标志, 它对系统的低温特性将有十分重要的影响。利用本文所求出的这一组合合金电子态密度曲线, 讨论 HFS 合金的相干效应将十分方便。

六、HFS 合金的相干效应

根据上节中合金电子态密度的计算结果可知, 在稀浓度 ($x \ll 1$) 时 f 态密度在费

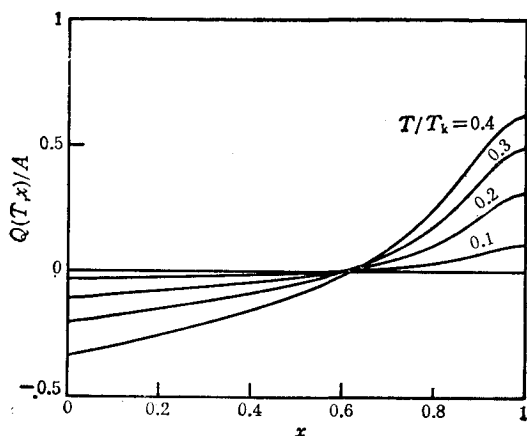


图 3 HFS 合金的热电功率曲线

$$A \equiv \frac{\pi^2 k_B^2}{3}, \text{ 并取 } \mu = -0.3 k_B T_K$$

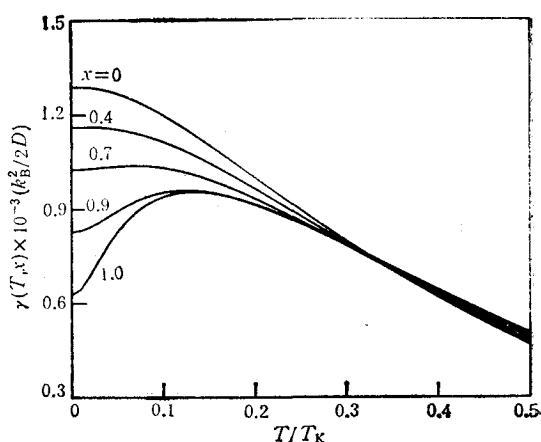


图 4 HFS 合金的比热系数曲线

密面附近出现单峰, 系统具有单杂质 Kondo 效应的特征, 说明这时 HFS 系统是各磁离子格点上 Kondo 单态的独立集合, 这是 HFS 合金的非相干情形。相反, 在高浓度 ($x = 1$) 极限下磁离子将形成 Kondo 晶格, 这时离子中的 f 电子分布在周期性点阵上, 它们对传导电子起着周期势的作用, 这种周期性使得 f-c 间的散射成为相干的, 系统不再是一个个 Kondo 杂质的独立集合, 而是彼此有密切关联的、整体的 Kondo 单态, 称为 Kondo 相干态。在金属性 Kondo 晶格中, 它表现为 f 态密度曲线在费密能级附近出现双峰型的隙结构, 这是 HFS 的相干情形。显然, 在 $0 < x < 1$ 区域内将出现 HFS 从非相干到相干性的过渡。为了讨论这一过渡对 HFS 合金低温物性的影响, 计算了重费密子合金的低温热电功率和电子比热系数 γ , 其结果如下:

1) HFS 合金的热电功率 根据固体物理学的熟知公式, 低温下金属的热电功率 Q 由电子态密度在费密能 μ 上的对数微商决定。对应含有 f 和 c 两类电子的 HFS 合金系统应写成

$$Q(T, x) = - \left(\frac{\pi^2 k_B^2}{3} \right) T \left\{ \frac{d \ln N_c(\omega, x)}{d\omega} + \frac{d \ln N_f(\omega, x)}{d\omega} \right\}_{\omega=\mu}. \quad (29)$$

利用图 2 中 f 态密度与 c 态密度的计算结果, 作出了几条不同温度的 $Q(T, x)/A-x$ 曲线, 如图 3 所示。图 3 十分明确地显示出: 当合金浓度增加时, 出现热电功率从负变正的相干性特征, 而且变号点大致集中在 x_c 处, 它正是 HFS 合金中开始形成隙隙的浓度。这说明形成隙隙是产生相干效应的直接原因。

2) $\gamma(T, x)$ 的相干效应 低温下 HFS 合金的电子比热系数

$$\gamma(T, x) \equiv C_V(T, x)/T,$$

可按通常公式导出,

$$\gamma(T, x) = \frac{1}{2} k_B^2 \beta^3 \int_{-\infty}^{\infty} [N_f(\omega, x) + N_c(\omega, x)] \omega^2 \operatorname{sech}^2(\beta\omega/2) d\omega, \quad (30)$$

式中 $\beta = (k_B T)^{-1}$ 。图 4 是根据图 2 结果计算出的低温 $\gamma(T, x)$ 曲线。当 $x < x_c (\approx 0.6)$

时 γ 随温度下降单调上升, 这正是单杂质 Kondo 效应的特征, 说明系统仍属于非相干情形。当 $x > x_c$ 时 (例如如图 4 中 x 为 0.7—1.0 的 γ 曲线) HFS 合金的比热系数曲线上出现低温极大, 并且极大点随 x 增大向高温方向移动, 与 Bredl 等人^[9]在 Ce 基 HFS 合金中的测量结果定性一致, 这就是相干效应在比热系数上的反映。实际上, $\gamma(T, x)$ 在有限温度出现极大的相干特征也是由于态密度曲线上形成了隙隙所致。

七、结 语

本文从含组分无序的 Y-K 模型出发, 在 Slave Boson 平均场和相干势近似下, 建立了一个描述 HFS 合金正常态的自治理论, 它便于计算 HFS 合金的电子态密度和讨论系统的低温相干效应。本文也可推广于讨论无序对重费密子系统超导电性的影响。

- [1] G. R. Stewart, *Rev. Mod. Phys.*, **56**(1984), 755.
- [2] P. A. Lee *et al.*, *Comments Condens. Matter Phys.*, **12**(1986), 98.
- [3] F. Steglich *et al.*, *J. Appl. Phys.*, **57**(1985), 3054.
- [4] Li Zheng-zhong and Xu Wang, *Commun. Theor. Phys. (Beijing)*, **8**(1987), 303.
- [5] R. M. Martin, *Phys. Rev. Lett.*, **48**(1982), 362.
- [6] F. G. Aliev *et al.*, *J. Low Tem. Phys.*, **57**(1984), 61.
- [7] Y. Onuki *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **53**(1984), 2734; **54**(1985), 1964; **56**(1987), 1454.
- [8] A. Sumiyama *et al.*, *J. Phys. Soc. Jpn.*, **54**(1985), 877; **55**(1986), 1294.
- [9] C. D. Bredl *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **52**(1984), 1982.
- [10] A. Yoshimori and H. Kasai, *Solid State Commun.*, **58**(1986), 259.
- [11] P. Coleman, *Phys. Rev.*, **B34**(1987), 5072.
- [12] Li Zheng-zhong, Qiu Yang & Xu Wang, *Phys. Lett.*, **A131**(1988), 466.
- [13] A. Yoshimori and H. Kasai, *J. Mag. Mag. Mat.*, **31—34**(1983), 475.
- [14] Li Zheng-zhong, Zhou Qing-chun and Qiu Yang, *Commun. Theor. Phys. (Beijing)*, **11**(1989), 1.
- [15] Z. Tسانovic and O. T. Valls, *Phys. Rev.*, **B34**(1986), 1918.
- [16] F. Brouers *et al.*, *Phys. Rev.*, **B5**(1972), 348.
- [17] F. Yonezawa, in: *The Structure and Properties of Matter*, ed. T. Matsubara, Springer, Berlin, (1982), Ch. 11.
- [18] B. Velicky *et al.*, *Phys. Rev.*, **175**(1968), 747.
- [19] Xu Wang and Li Zheng-zhong, *J. Phys. C*, **21**(1988), 4083.

A SLAVE-BOSON MEAN FIELD THEORY FOR THE HEAVY-FERMION ALLOYS

LI ZHENG-ZHONG ZHOU QING-SHUN QIU YANG

Departments of Physics, Nanjing University

(Received 28 January 1989)

ABSTRACT

In this article, a theory describing the normal state of the heavy-fermion alloys has been proposed based on the Yoshimorikasai model in the framework of slave-boson mean field theory by using the CPA method. The density of states (DOS) and its concentration dependences for the conduction electrons and strong correlated f-electrons in the heavy-fermion alloys are calculated self-consistently. The results we obtained not only reveal the process of the pseudo-gap formation in the DOS, but also give a reasonable explanation of the low temperature coherence effects in specific heat and thermoelectric power for the heavy-fermion alloys.