

《物理学报》创刊 90 周年

莫特物理——量子材料的主旋律之一^{*}封东来[†]

(中国科学技术大学核科学技术学院, 国家同步辐射实验室, 新基石实验室, 合肥 230027)

(2023 年 9 月 17 日收到; 2023 年 10 月 17 日收到修改稿)

关联量子材料中电子的巡游性与局域化两种行为的竞争与合作, 即莫特物理, 是许多量子材料体系多样物态背后的主要物理机制. 本文回顾了莫特物理在多种量子材料体系中的体现, 论述了其作为量子材料的主旋律之一的各种表现. 因此寻找和理解其千变万化的演生方式, 是实验凝聚态物理研究的中心任务之一.

关键词: 莫特相变, 哈伯德模型, 近藤晶格, 演生现象**PACS:** 71.10.-w, 71.20.-b**DOI:** 10.7498/aps.72.20231508

1 引言

游牧民族和农耕民族之间的战争贯穿了人类社会的历史. 迁徙与定居两种不同社会形态的竞争和融合, 产生了丰富的社会形态和历史文化. 量子材料具有非常丰富的现象, 著名凝聚态物理学家 P. W. Anderson 的宣言“More is different”便指出了量子材料的复杂性来自于多粒子体系的演生现象 (emergent phenomena). 与人类迁徙与定居两种社会形态类似, 量子材料中电子巡游性 (itinerancy) 与局域性 (localization) 之间的竞争, 又被称作莫特物理 (Mott physics), 是很多演生现象背后的机制. 两个极端的情况是巡游性主导的金属与局域性主导的莫特绝缘体. 莫特相变就是一种金属-绝缘体相变, 描述这一物理现象的哈伯德模型 (Hubbard model) 或者 t - J 模型, 就是由描述电子巡游性的 t (动能项), 和描述局域相互作用 (势能项) 的 U 构成的.

动能和势能本就是描述量子体系的薛定谔方程中的主要两项, 如图 1(a) 所示. 动能项是对电子波函数在空间上的二阶导数, 于是在基态中, 如果

希望这一项的能量尽可能小, 就要求波函数更延展, 即电子更巡游. 而在深势阱中, 势能最小化则要求电子波函数局域在势阱内, 因为势阱外部势能大 (图 1(b)). 这样两项的竞争就导致了电子既不可能无限延展, 也不可能很局域.

巡游和局域, 或者动能与势能, 这两者之间的竞争与合作无论是对于简单的量子体系还是复杂的量子材料都是最根本的机制. 本文的主要观点就是众多量子材料复杂表象下的本质 (How is more different?), 大多可归结为电子巡游性与局域性之争, 这也是量子材料微观机制的主旋律 (main theme) 之一. 特别是在 d 和 f 轨道电子主导的体系中, 巡游或局域各自都无法主导另一方, 因而体系表现出丰富的物性. 下面将分六小节来阐述这一观点, 其中部分例子来自我们课题组的一些工作.

2 莫特物理及其两条相变路径

在莫特的思想实验中, 一个氢原子链上, 每个原子有一个电子, 如图 2(a) 所示. 根据能带理论, 这会形成半占据的能带, 基态是金属. 但是莫特考虑当原子间距越来越大时, 电子在原子间跳跃

^{*} 国家自然科学基金 (批准号: 11888101) 和腾讯新基石基金资助的课题.

[†] 通信作者. E-mail: dlfeng@ustc.edu.cn

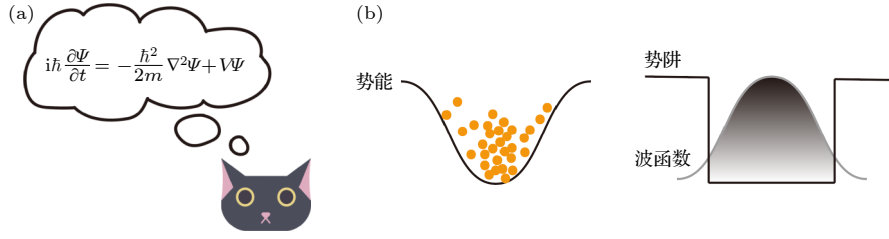


图 1 (a) 薛定谔的猫和方程; (b) 一维势阱模型

Fig. 1. (a) Schrödinger's cat and equation; (b) the model of one-dimensional potential well.

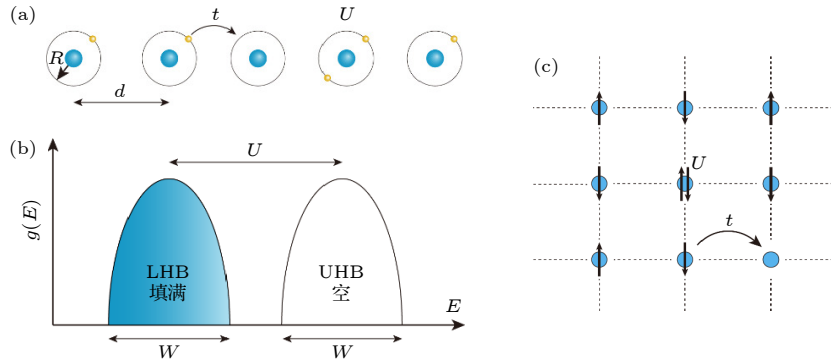


图 2 (a) 一维氢原子链模型; (b) 哈伯德能带示意图, 下哈伯德带 (lower Hubbard band, LHB) 是填满的, 上哈伯德带 (upper Hubbard band, UHB) 是空带; (c) 二维哈伯德模型

Fig. 2. (a) One dimensional hydrogen atom chain model; (b) the schematic illustration of Hubbard bands, where the lower Hubbard band (LHB) is filled, and the upper Hubbard band (UHB) is empty; (c) two-dimensional Hubbard model.

(t , 动能) 总归要小到可以忽略, 该体系最终要成为绝缘体, 在这种极限下, 当两个电子处在同一个原子时, 它们之间的库仑排斥引起的势能 U 要远大于 t 引起的动能降低 (参考量子阱的例子). 在理论上人们可用哈伯德模型来描述这个思想实验, 其哈密顿量是:

$$H_{\text{Hubbard}} = -t \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i \hat{n}_{i\uparrow} \cdot \hat{n}_{i\downarrow}, \quad (1)$$

其中 $\sigma = \uparrow, \downarrow$ 是电子自旋; \hat{n}_i 是第 i 个位置的占据态电子数算符. 当 U 大于能带宽度 W 时, 该体系的能带由上下哈伯德带构成, 下哈伯德带填满, 上哈伯德带为空, 体系成为了绝缘体 (图 2(b)). 二维体系的哈伯德模型如图 2(c) 所示, 其物理图像和一维情形类似.

调控莫特相变的途径有两种, 如图 3(a) 所示. 随着 U/t 参数的改变, 体系发生了金属-绝缘体相变 (MIT), 此类相变被称作带宽调控的莫特相变 (bandwidth control, BC-MIT). 还有一种占据调控途径 (filling control, FC-MIT), 即通过掺杂来引入载流子, 这样能带也可成为部分占据, 从而使得绝缘体变成了金属. 当然, 载流子掺杂还使得电

子在格点间跃迁更加容易, 即有效的动能项 (t) 增加, 电子之间的关联减弱, 进一步产生了部分带宽的改变^[1].

动力学平均场 (dynamical mean field theory, DMFT) 的计算结果很好地描述了 BC-MIT 的过程, 如图 3(b) 所示. 从莫特绝缘体出发, 随着 U 逐步减小, 在带隙中出现了准粒子, 其谱权重逐步增加, 准粒子带的带宽逐步变宽, 最终连接上下哈伯德能带, 此时体系变成普通的半满金属. 而 Brinkman-Rice 则反过来从金属出发, 逐步地增加 U , 随着电子关联增强, 准粒子带宽减小, 换言之, 准粒子的有效质量越来越大, 最终重到准粒子再也动弹不得, 相干的准粒子谱重小到忽略不计, 体系就进入了莫特绝缘体状态. 莫特图像和 Brinkman-Rice 图像是等价的.

3 占据调控莫特相变示例

载流子掺杂形成的铜氧化物高温超导就是典型的 FC-MIT, 其母体是反铁磁绝缘体, 随着少量的电子或空穴掺杂, 体系就进入了超导态. 虽然铜氧化物高温超导的机理仍然有争议, 人们一般认为

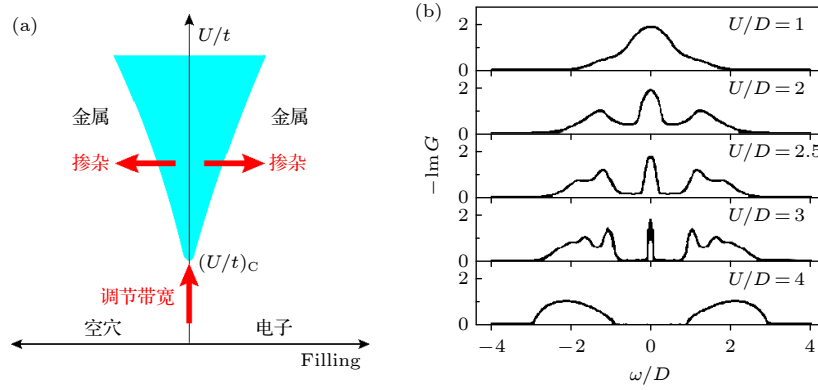


图 3 (a) 莫特相变的两种途径. 考虑杂质局域势场影响以及有限体系尺寸, 相图中的绝缘态随着掺杂的相转变边界是位于有限的掺杂浓度下的. (b) 动力学平均场计算模拟出的 Hubbard 模型, 在 $T = 0$ 时, 不同强度 U 下的局域谱函数展示了带宽调控莫特相变的过程 ($D = W/2$, W 是能带宽度)^[1]

Fig. 3. (a) Two routes of Mott phase transition. Considering the influence of impurity local potential and the finite system size, the phase boundary is located at a finite doping concentration. (b) The spectral functions of the Hubbard model calculated by dynamic mean field theory at different U ($T = 0$), demonstrating the process of bandwidth-control Mott phase transition ($D = W/2$, W being the bandwidth)^[1].

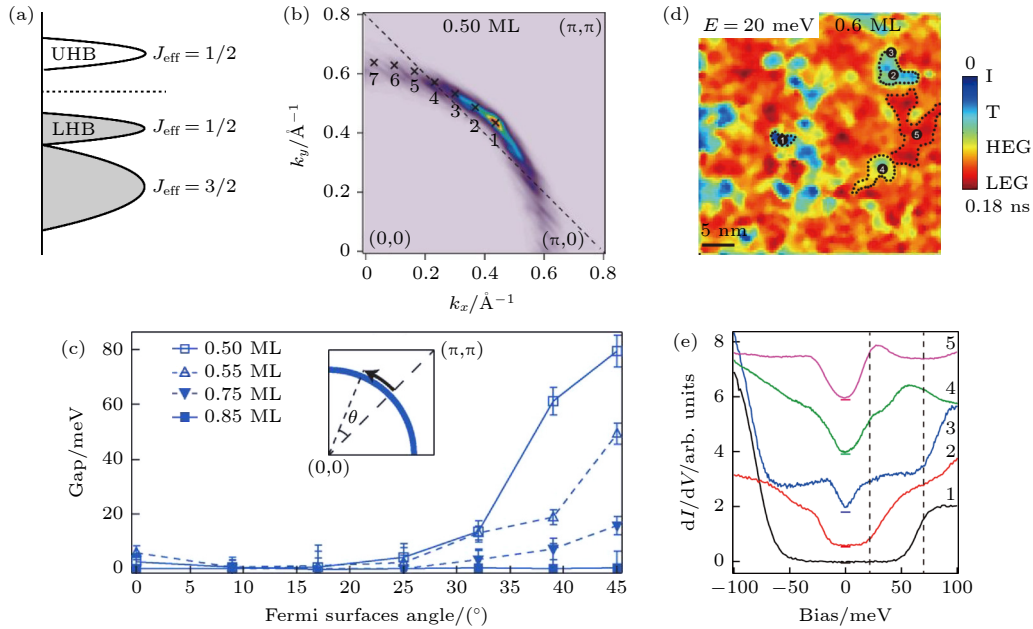


图 4 (a) 考虑自旋轨道耦合和 Hubbard U 情况下, $5d^5$ 态的能级示意图, 展示了总角动量 $J_{\text{eff}} = 1/2$ 的莫特绝缘体基态; (b) 0.5 ML (monolayer) 钾原子覆盖下的 Sr_2IrO_4 的费米面结构 ($T = 70$ K)^[5]; (c) 不同掺杂量的钾原子覆盖下的 Sr_2IrO_4 的能隙随动量 (费米面角) 的依赖关系^[5]; (d) 0.6 ML 钾原子覆盖下的 Sr_2IrO_4 表面的电子态在 $E = 20$ meV 下的分布图 ($T = 20$ K), 展示了不均匀的能隙分布情况^[4]; (e) 图 (d) 中不同区域的典型隧道谱^[4]

Fig. 4. (a) Schematic diagram of the $5d^5$ states, considering spin orbit coupling and Hubbard U , where the ground state is a Mott insulator with a total angular momentum of $J_{\text{eff}} = 1/2$; (b) the Fermi surface of Sr_2IrO_4 covered by 0.5 ML (monolayer) potassium atoms ($T = 70$ K)^[5]; (c) the energy gap as a function momentum (Fermi surface angle) for K-dosed Sr_2IrO_4 with different potassium coverages^[5]; (d) the local electronic density-of-states map at $E = 20$ meV for the Sr_2IrO_4 surface covered by 0.6 ML potassium atoms shows an uneven distribution of energy gaps ($T = 20$ K)^[4]; (e) typical tunnelling spectra in different regions in Figure (d)^[4].

反铁磁涨落引起了 d 波超导配对. 而随着载流子浓度的进一步提高, 电子关联逐步减弱, 超导配对逐步减弱, 直至成为费米液体金属.

铱氧化物 Sr_2IrO_4 是个绝缘体, 晶体结构和 La_2CuO_4 相似, 由于存在较强的自旋轨道耦合, 其

反铁磁基态可以等效地用总角动量 $J = 1/2$ 的哈伯德模型描述 (图 4(a))^[2], 且 t 和 U 等参数大约是铜氧化物的一半, 因此人们预言掺杂的 Sr_2IrO_4 是一个转变温度 (T_c) 约为铜氧化物一半 (40 K 左右) 的 d 波超导^[3].

最近, 通过在 Sr_2IrO_4 表面蒸镀钾原子或插层的方法引入电子掺杂, 人们利用扫描隧道显微镜 (scanning tunneling microscopy, STM)^[4] 和角分辨光电子能谱仪 (angle-resolved photoemission spectroscopy, ARPES)^[5] 都观察到了表面层中发生了绝缘体-金属转变. 如图 4(b) 所示, 其费米面和单层铜氧化物的费米面形状相似, 只不过它是电子型的. 低温下, ARPES 也观察到了能隙在对角线方向有节点, 随着偏离对角线方向, 能隙逐步变大, 显示出类似 d 波的行为, 如图 4(c) 所示. 在 STM 的研究中, 人们发现其电子态的微观不均匀性与铜氧化物也非常类似. 比如在不同区域看到了 V 型类超导能隙、赝能隙、绝缘体能隙等现象, 如图 4(d) 和图 4(e) 所示, 这些都表明了 d 波超导的迹象. 但是, 由于这些迹象都发生在掺杂的样品表面层中, 输运测量非常困难, 所以人们至今尚未证实体系是否真的处在超导态. 从这些研究中可以看

出, 这个体系的确展现了占据调控的莫特相变, 乃至可能引发超导配对等现象.

4 带宽调控的莫特相变示例之一: $\text{NiS}_{2-x}\text{Se}_x$

$\text{NiS}_{2-x}\text{Se}_x$ 是一个典型的带宽调控的莫特相变体系, Se 取代 S 是同价掺杂, 只提供了化学压力, 其相图与加物理压力的相图几乎一致^[6]. 随着 Se 的含量逐步增加, 在 x 约为 0.4 附近有一个从反铁磁绝缘体到反铁磁金属的莫特相变. 在图 5(a) 的 ARPES 数据中^[7] 可以看到, x 从 1.67 下降到 0.43 的范围内, 费米面尺寸 (对应于载流子浓度) 没有变化, 但是跨过相变点之后费米面消失, 体系进入了绝缘态. 同时在色散上可以看到 (图 5(b) 和图 5(c)), 准粒子能带宽度逐步变小, 费米速度减小 (图 5(d)), 到相变之前能带已经非常窄. 这说明准粒子有效质量已很大, 最终局域化而进入绝缘态. 在这个过程中,

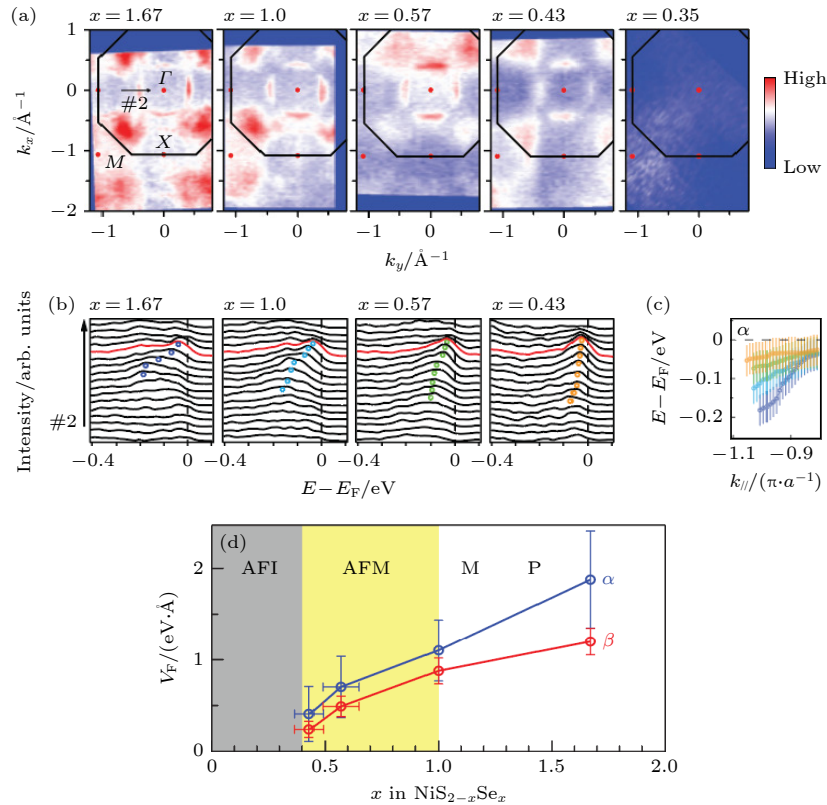


图 5 (a) ARPES 测得 $\text{NiS}_{2-x}\text{Se}_x$ 的费米面随着 Se 掺杂的演化^[7]; (b) ARPES 能谱展示能带色散随着 Se 掺杂的演化^[7]; (c) 图 (b) 中的 α 能带宽度随掺杂演化的对比^[7]; (d) $\text{NiS}_{2-x}\text{Se}_x$ 两个能带的费米速度在掺杂相图中的演化, 在接近莫特绝缘相过程中呈现带宽变窄、有效质量发散的行为^[7]

Fig. 5. (a) ARPES data of the Fermi surface of $\text{NiS}_{2-x}\text{Se}_x$ as Se doping is varied^[7]; (b) ARPES spectra show that the band dispersion changes with Se doping^[7]; (c) summary of the band width evolution with doping in figure (b)^[7]; (d) the evolution of the Fermi velocities of two bands of $\text{NiS}_{2-x}\text{Se}_x$ in the phase diagram as a function of doping, showing a narrowing bandwidth and effective mass divergence near the Mott insulating phase^[7].

相干的准粒子谱权重也是逐步降低的. 这些实验观察与 DMFT 计算 [8], 或 Brinkman-Rice 图像完全一致 [9].

5 带宽调控的莫特相变示例之二: 铁基超导

在铁基超导发现之初, 因铁砷类超导同时具有空穴型和电子型费米面, 且母体是反铁磁的金属, 基于巡游费米面的弱关联 (weak coupling) 超导理论一时成为主流, 而不是掺杂的莫特绝缘体这样的局域图像 (也称为强关联图像, strong coupling), 铁基和铜基两类高温超导机理似乎迥异 [10–12]. 但是随着研究的深入, 人们发现弱关联的超导理论无法统一描述铁基超导体, 反而是基于强关联局域图像的 t - J - J' 模型可以更好地统一描述各类铁基超导体 [13]. 这一发现表明铜氧化物高温超导和铁基高温超导两者的机理事实上异曲同工.

具体来说, 弱关联理论曾把铁基超导的相图演化归结于掺杂改变了费米面, 从而改变了费米面间的电子散射和配对行为. 但是对 FeAs 类的铁基超导来说, 其调控形式很丰富 (有电子或空穴异价掺杂引入载流子的, 也有调节化学或物理压力而不引入载流子的), 但它们定性的相图相似 [14], 并不能单纯用改变载流子浓度来解释 (见图 6(a)). 通过系统地研究各种掺杂下的不同类型的铁基超导体体系的电子结构的演化, 人们发现超导和费米面演化并无直接关联, 而多种掺杂实质上改变的是能带宽

度 [15]. 比如随着压力的增加或引入更多电子等, 体系的带宽逐步增加, 电子动能增大, 关联逐步减弱, 这样体系的磁性逐步减弱, 在关联适中时进入了超导态, 而随着关联进一步减弱, 超导消失, 进入了金属态. 这就把铁基超导的多个相图统一到带宽调控的框架中.

再拿另一类基于 FeSe 面的重电子掺杂的铁基超导体来说, 其可以通过 Te, S 等取代 Se 来改变化学压力, 从而改变其能带宽度 [16]. 已知的大多数这类材料都可以被归纳入同一个相图中 (图 6(b)), 它和铜氧化物高温超导的相图很类似, 只不过现在的横坐标是反映动能的能带宽度. 当带宽很窄时, 关联很强, 其母体也是莫特绝缘体, 随着带宽增加, 逐步进入超导基态、金属基态. 这表明, 带宽调控的莫特物理在这类铁基超导中依然成立, 其超导配对机制可以用强关联的局域图像来描述, 与铜氧化物高温超导异曲同工.

6 碳基材料中的带宽调控与占据调控的莫特相变

虽然很多碳基材料 (包括有机材料) 不包含具有较为局域的 3d 或 4f 电子的元素, 在格点上的相互作用势能 (如库仑相互作用能 U) 也比较小, 但因为其分子较大, 格点之间波函数交叠程度或电子跃迁的动能 t 较小, U/t 也处于关联体系的参数区间. 因此, 碳基材料也可能表现出有趣的关联行为.

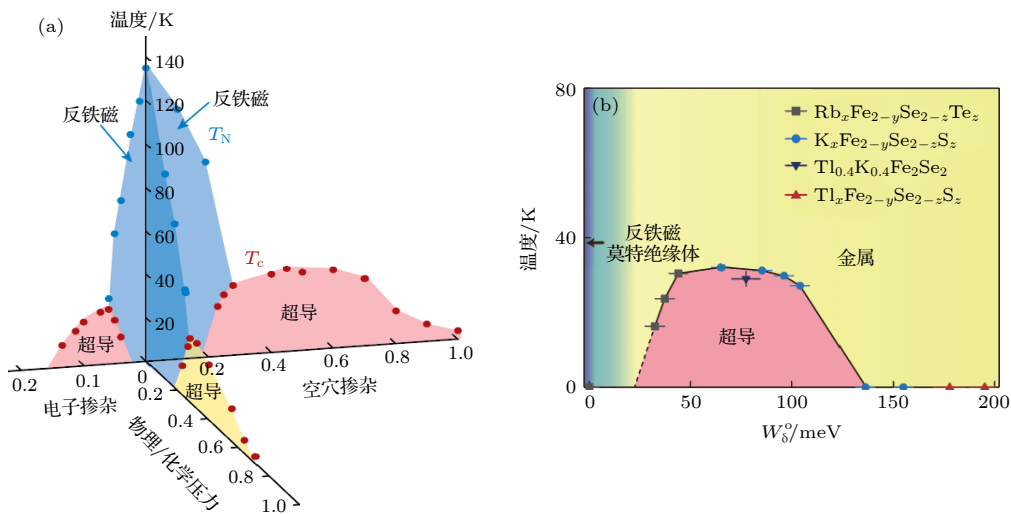


图 6 (a) 基于 FeAs 面的铁基超导的相图示意图 [14]; (b) 重电子掺杂的多种铁硒类超导体体系符合统一的相图 [16]

Fig. 6. (a) Schematic phase diagram of FeAs-based superconductor [14]; (b) many heavily electron-doped iron-selenide superconductors conform to a unified phase diagram [16].

其中一个典型的带宽调控的例子是 A15 结构的 Cs_3C_{60} (结构如图 7(a) 所示, 阳离子为碱金属 Cs^+ , C_{60}^{3-} 阴离子按照体心立方的结构堆叠), 其随着压力的相图如图 7(b) 所示. 当元胞体积较大, 即两个 C_{60} 分子距离较远, 带宽比较窄, 该体系处于反铁磁绝缘体态. 而随着元胞变小, t 增大, 逐步进入反铁磁和超导共存态、超导态, 随后超导转变温度降低^[17]. 该相图和上述的铜氧化物超导与铁基超导相图有相似之处.

当然目前还不能完全确定其超导的机理是来自反铁涨落还是电声子相互作用, 比如随着 t 的增

大, 态密度减小, 基于 BCS 电声子配对机理, 也能解释该相图中高压区超导转变温度的下降行为. 然而 BCS 图像不能解释在低压区的行为, 随着元胞变小, 理论计算也确认了态密度会减小, 但超导却逐渐出现, 并且超导转变温度增加, 这部分的超导演化不同于 BCS 图像^[17].

近年来, 人们在转角双层石墨烯中也发现了占据调控的莫特物理的相图 (图 8). 虽然石墨烯本身 U 不大, 但是转角后的能带非常窄^[18], U/t 处在强关联的区间, 因此随着通过门电压调控载流子浓度, 观察到由莫特绝缘体进入超导和金属态的行为^[19].

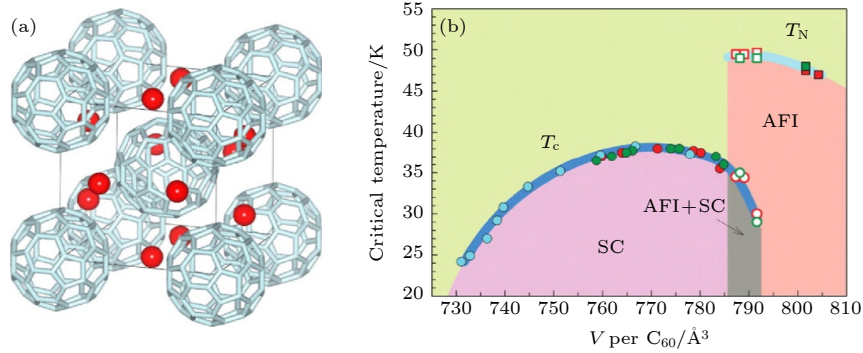


图 7 (a) A15 Cs_3C_{60} (晶体群 $Pm\bar{3}n$) 的晶体结构, 其中取向有序的 C_{60}^{3-} 阴离子按照体心立方的结构堆叠, 红色为 Cs^+ 阳离子^[17]; (b) A15 Cs_3C_{60} 加压后的相图, 显示了反铁磁与超导相变温度随着富勒烯阴离子体积的演化^[17]

Fig. 7. (a) The crystal structure of A15 Cs_3C_{60} (crystal group $Pm\bar{3}n$), where C_{60}^{3-} anions with an ordered orientation are stacked in a body centered cubic structure, and Cs^+ cations are shown in red^[17]; (b) the phase diagram of A15 Cs_3C_{60} under pressure shows the evolution of antiferromagnetic and superconducting phase transition temperature with the volume of fullerene anions^[17].

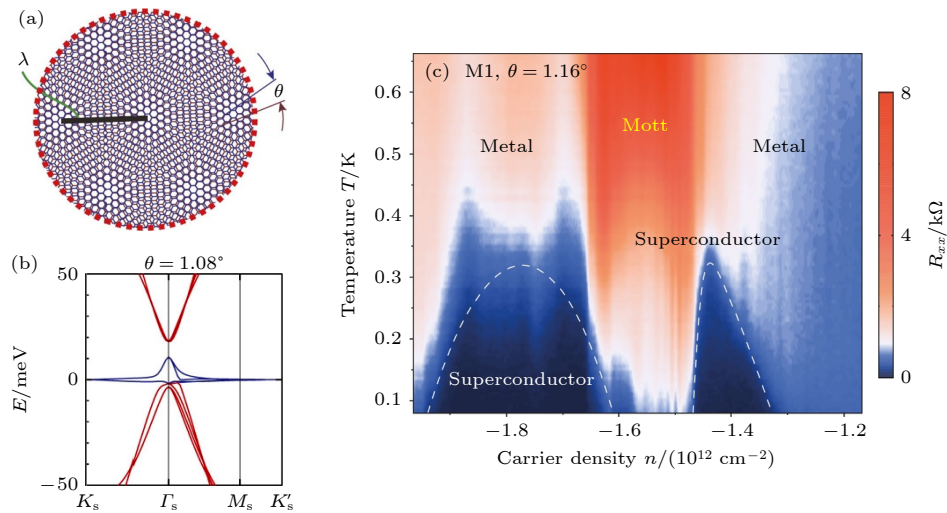


图 8 (a) 转角双层石墨烯中的莫尔超晶格^[18]; (b) 在转角为“魔角”($\theta = 1.08^\circ$) 时双层石墨烯的能带结构, 在费米能附近看到平带 (蓝色曲线)^[18]; (c) “魔角”双层石墨烯中调控电荷浓度得到的相图, 在半填充的莫特绝缘相附近存在两个超导的拱形区域^[19]

Fig. 8. (a) Moiré superlattice in twisted-angle bilayer graphene^[18]; (b) the calculated band structure of the twisted bilayer graphene at the magic twisted angle ($\theta = 1.08^\circ$), exhibiting a flat band (blue curve) near the Fermi energy^[18]; (c) the phase diagram of “magic angle” twisted bilayer graphene as a function of charge concentration, there are two superconducting domes near the half-filled Mott insulator phase^[19].

7 重费米子体系中的巡游与局域之争

重费米子体系中的复杂现象常常源于导带电子在局域自旋晶格的背景下运动. 其中的 f 电子波函数在高温下和巡游电子波函数交叠 (常被称为 c-f 杂化), 但因为其局域性和无序性, 这样的杂化在不同的格点之间没有相干性. 在低温下, 这个过程逐步变得相干, 从而 f 电子的平带与巡游电子能带杂化, 使得巡游电子能带的有效质量越来越大, 甚至是几个量级的提升. f 电子通过这个过程, 也参与到费米海中, 使得费米面的体积逐步增大, 这就是所谓的从小费米面到大费米面的转化^[20]. 这个过程可以用周期性 Anderson 模型来描述, 其中的近藤相互作用项 (J_K) 描述了导带电子与 f 电子局域晶格自旋的相互作用.

在 CeCoIn₅ 中, 人们观察到了 4f 电子随温度降低所发生的局域-巡游转变, 即重费米子如何变重的过程. 在温度 170 K 时只能观察到非 4f 电子形成的导带, c-f 杂化的过程在高于 100 K 的较高温度就逐步发生了, 到了近藤温度 (~ 50 K) 以下时, 局部的 c-f 杂化演化成为相干的能带杂化, 可以清晰地观察到 f 能带及其因为杂化而被弯曲的行为,

其能带的有效质量也以 $A-B\ln T$ 的形式发散, 如图 9 所示. 值得注意的是, 低温下的费米面确实比高温时大了, 但是在所测量的最低温度 17 K 时, 只是部分 4f 电子 ($\sim 5\%$) 参与到了费米面中^[21].

由于巡游电子的媒介, 两个局域自旋可以发生 RKKY (Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida) 磁性相互作用, 可以导致磁有序. 而近藤相互作用则是让巡游电子屏蔽 f 电子的局域磁矩, 使得体系进入费米液体或近藤绝缘体等状态. 这两个效应相互竞争的哈密顿量是

$$H_{\text{KLM}} = \sum_{k\sigma} c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + J_K \sum_i S_i \cdot s_i + J_{\text{RKKY}} \sum_{\langle ij \rangle} S_i \cdot S_j. \quad (2)$$

本质也是局域自由度与巡游自由度相互作用, 从而产生不同基态, 可见于 Doniach 相图 (图 10(a))^[22]. 在该相图中, 当 J_K 较小时, $T_K < T_{\text{RKKY}}$, 局域自旋 RKKY 相互作用主导, 因此有可能表现为反铁磁这样的磁有序态; 当 J_K 超过阈值 J_c , $T_K > T_{\text{RKKY}}$, 局域磁矩被屏蔽, 体系进入费米液体状态. 而在 J_c 附近, 由于量子临界现象, 有较强的量子涨落, 就有可能出现一些新的物态, 比如超导态.

重费米子体系的基态敏感地依赖于巡游电子与局域自旋的相互作用程度, J_K . 这与 c-f 杂化程

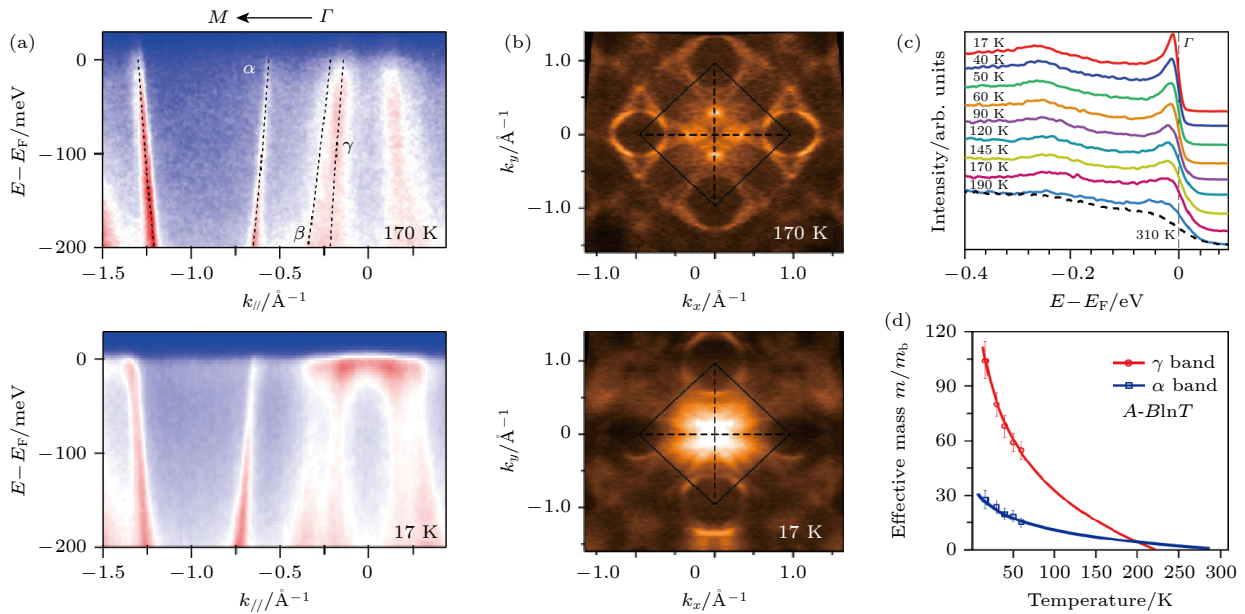


图 9 (a) CeCoIn₅ 高低温的能带结构对比图, 上图测量温度为 170 K, 下图测量温度为 17 K^[21]; (b) CeCoIn₅ 高低温的费米面对比图, 上图测量温度为 170 K, 下图测量温度为 17 K^[21]; (c) CeCoIn₅ 中 Γ 点附近 4f 电子谱重随温度的演化^[21]; (d) CeCoIn₅ 中 α 和 γ 能带的有效质量与温度的依赖关系^[21]

Fig. 9. (a) The band structures of CeCoIn₅ at 170 and 17 K, respectively^[21]; (b) the Fermi surface maps of CeCoIn₅ at 170 and 17 K, respectively^[21]; (c) the evolution of 4f electron spectral weight near the Γ point as a function of temperature in CeCoIn₅^[21]; (d) the effective masses of the α and γ bands of CeCoIn₅ as a function of temperature^[21].

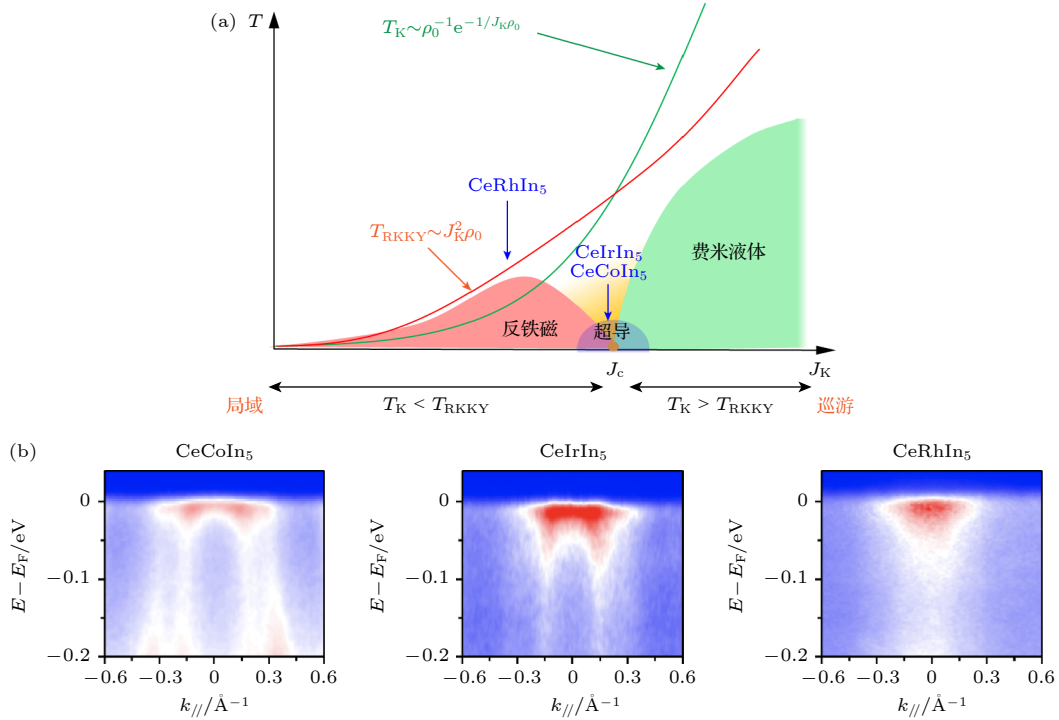


图 10 (a) Doniach 相图, 图中箭头标出了 CeCoIn₅, CeIrIn₅ 和 CeRhIn₅ 在该相图中的大致位置^[23]; (b) CeCoIn₅, CeIrIn₅ 和 CeRhIn₅ 中费米能附近能带杂化行为的对比^[23]

Fig. 10. (a) Doniach phase diagram, with arrows indicating the schematic positions of CeCoIn₅, CeIrIn₅, and CeRhIn₅ in the diagram^[23]; (b) comparison of the hybridization behavior of the bands near the Fermi energy in CeCoIn₅, CeIrIn₅, and CeRhIn₅^[23].

度密切相关. 比如 CeCoIn₅, CeRhIn₅, CeIrIn₅ 这三个 Ce115 家族材料中, CeCoIn₅ 和 CeIrIn₅ 的 c-f 杂化较强, 巡游电子屏蔽局域磁矩的效应强, 体系表现为费米液体行为和超导基态; 而 CeRhIn₅ 则是其中 c-f 杂化最弱的, 基态是反铁磁的磁有序态, 如图 10(b) 所示.

另一个典型的例子是方钴矿结构的 4f² 近藤晶格体系 PrOs₄Sb₁₂(POS) 和它的 4f¹ 兄弟体系 CeOs₄Sb₁₂(COS). 这两种材料具有相同的晶格常数, 相似的导带费米面, 但是在低温下, COS 中的 c-f 杂化过强, 打开了杂化能隙, 而该体系的化学势正好在此能隙中, 因此 COS 成为了近藤绝缘体. 而 POS 的 2 个 f 电子在有限温度下, 有一定的自旋三态分量, 可以被巡游电子屏蔽, 具有一定的 c-f 杂化^[24]. 在极低温时, 其 4f² 基态是个自旋单态, 不与外界巡游电子发生作用, 巡游电子有效质量在极低温下反而变小, 其基态可能是由普通导带电子引起的超导态.

8 结 语

在上述例子中可以看到, 大量的关联体系的基态和演化过程都可以从莫特物理的角度来分析, 带

宽调控和占据调控从不同路径调控了电子动能和势能的强弱对比, 从而使得物态发生了相转变. 巡游与局域之争是一个根本性的竞争关系, 因此在研究关联体系的过程中需要特别关注. 更广义地来看这个问题, 我们可以借助老子的《道德经》第一章来进行一个比拟:

道可道, 非常道; (The fundamental laws (or Hamiltonians) are abstract, not easy to describe.)

名可名, 非常名; (The manifestations of the laws are everywhere, and very diversified.)

无名天地之始; (The universe starts from the vacuum when nothing has been manifested.)

有名万物之母. (The manifestations of the laws generate everything in the universe.)

对这四句深奥经文的理解可以有很多种, 括号中是我“凝聚态物理版的英文翻译”, 以避开古文的多意和含糊. 在凝聚态物理中, “道”是哈密顿量, “名”即是对哈密顿量的表达, 在不同材料中的表达给出了千变万化的量子材料世界. “The manifestation of laws” (道的表达或者“名”) 就是“emergence” (演生). 凝聚态物理的目标既是要发现新的材料 (发现 more is different), 更是要研究清楚复杂量

子材料中的奇妙物性是如何演生出来的 (回答 how is more different?). 在本文上述例子中看到, 虽然描述不同关联体系中的电子巡游性与局域性竞争的哈密顿量很简单, 但是它的表达是很奇妙的, 需要抽丝剥茧才能找到万物背后“名”的过程.

感谢胡江平、闫亚军、徐海超、陈秋云、彭瑞、沈大伟、张童、杜增义帮助做图或润色.

参考文献

- [1] Kotliar G, Savrasov S Y, Haule K, Oudovenko V S, Parcollet O, Marianetti C A 2006 *Rev. Mod. Phys.* **78** 865
- [2] Kim B J, Jin H, Moon S J, Kim J Y, Park B G, Leem C S, Yu J, Noh T W, Kim C, Oh S J, Park J H, Durairaj V, Cao G, Rotenberg E 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 076402
- [3] Wang F, Senthil T 2011 *Phys. Rev. Lett.* **106** 136402
- [4] Yan Y J, Ren M Q, Xu H C, Xie B P, Tao R, Choi H Y, Lee N, Choi Y J, Zhang T 2015 *Phys. Rev. X* **5** 041018
- [5] Kim Y K, Krupin O, Denlinger J D, Bostwick A, Rotenberg E, Zhao Q, Mitchell J F, Allen J W, Kim B J 2014 *Science* **345** 187
- [6] Yao X, Honig J M, Hogan T, Kannewurf C, Spalek J 1996 *Phys. Rev. B* **54** 17469
- [7] Xu H C, Zhang Y, Xu M, Peng R, Shen X P, Strocov V N, Shi M, Kobayashi M, Schmitt T, Xie B P, Feng D L 2014 *Phys. Rev. Lett.* **112** 087603
- [8] Zhang X Y, Rozenberg M J, Kotliar G 1993 *Phys. Rev. Lett.* **70** 1666
- [9] Brinkman W F, Rice T M 1970 *Phys. Rev. B* **2** 4302
- [10] Mazin I I, Schmalian J 2009 *Physica C* **469** 614
- [11] Kuroki K, Onari S, Arita R, Usui H, Tanaka Y, Kontani H, Aoki H 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 087004
- [12] Scalapino D J 2012 *Rev. Mod. Phys.* **84** 1383
- [13] Seo K J, Bernevig A, Hu J P 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 206404
- [14] Shibauchi T, Carrington A, Matsuda Y, Langer J S 2014 *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **5** 113
- [15] Ye Z R, Zhang Y, Chen F, Xu M, Jiang J, Niu X H, Wen C H P, Xing L Y, Wang X C, Jin C Q, Xie B P, Feng D L 2014 *Phys. Rev. X* **4** 031041
- [16] Niu X H, Chen S D, Jiang J, Ye Z R, Yu T L, Xu D F, Xu M, Feng Y, Yan Y J, Xie B P, Zhao J, Gu D C, Sun L L, Mao Q, Wang H, Fang M, Zhang C J, Hu J P, Sun Z, Feng D L 2016 *Phys. Rev. B* **93** 054516
- [17] Takabayashi Y, Ganin A Y, Jeglic P, Arcon D, Takano T, Iwasa Y, Ohishi Y, Takata M, Takeshita N, Prassides K, Rosseinsky M J 2009 *Science* **323** 1585
- [18] Cao Y, Fatemi V, Demir A, Fang S, Tomarken S L, Luo J Y, Sanchez-Yamagishi J D, Watanabe K, Taniguchi T, Kaxiras E, Ashoori R C, Jarillo-Herrero P 2018 *Nature* **556** 80
- [19] Cao Y, Fatemi V, Fang S, Watanabe K, Taniguchi T, Kaxiras E, Jarillo-Herrero P 2018 *Nature* **556** 43
- [20] Shim J H, Haule K, Kotliar G 2007 *Science* **318** 1615
- [21] Chen Q Y, Xu D F, Niu X H, Jiang J, Peng R, Xu H C, Wen C H P, Ding Z F, Huang K, Shu L, Zhang Y J, Lee H, Strocov V N, Shi M, Bisti F, Schmitt T, Huang Y B, Dudin P, Lai X C, Kirchner S, Yuan H Q, Feng D L 2017 *Phys. Rev. B* **96** 045107
- [22] Doniach S 1977 *Physica B+C* **91** 231
- [23] Chen Q Y, Xu D F, Niu X H, Peng R, Xu H C, Wen C H P, Liu X, Shu L, Tan S Y, Lai X C, Zhang Y J, Lee H, Strocov V N, Bisti F, Dudin P, Zhu J X, Yuan H Q, Kirchner S, Feng D L 2018 *Phys. Rev. Lett.* **120** 066403
- [24] Lou X, Yu T L, Song Y H, Wen C H P, Wei W Z, Leithe-Jasper A, Ding Z F, Shu L, Kirchner S, Xu H C, Peng R, Feng D L 2021 *Phys. Rev. Lett.* **126** 136402

The 90th Anniversary of *Acta Physica Sinica***Mott physics: One of main themes in quantum materials***Feng Dong-Lai[†](New Cornerstone Laboratory, National Synchrotron Radiation Laboratory, School of Nuclear Science and Technology,
University of Science and Technology of China, Hefei 230027, China)

(Received 17 September 2023; revised manuscript received 17 October 2023)

Abstract

The competition and cooperation between the itinerancy behavior and localization behavior of electrons in correlated quantum materials, known as Mott physics, is the physical mechanism behind the diverse states of many quantum materials. This article reviews the manifestation of Mott physics in various quantum materials and establishes it as one of the main themes of quantum materials. Finding and understanding its ever-changing ways of manifestation is one of the central tasks of experimental research on condensed matter physics.

Specifically, the filling-control route of Mott transition is illustrated by exemplifying the surface K-doped Sr_2IrO_4 , which exhibits d-wave gap, pseudogap behavior in underdoped regime, and phase separation with inhomogeneous electronic state distribution. All of these show strong resemblances to the doped cuprate superconductors, another prototypical filling-control type of Mott transition case. On the other hand, the bandwidth-control route of Mott transition could be found in $\text{NiS}_{2-x}\text{Se}_x$, where its bandwidth continuously decreases with decreasing Se concentration, until it becomes an insulator. In addition, the essence of various ways of doping in iron-based superconductors is to change their bandwidths. The superconductivity shows up at intermediate bandwidth with moderate correlations, and it diminishes when the bandwidth is large and the electron correlations are weak. For heavily electron-doped iron-selenides, there is even a Mott insulator phase with strong correlations.

For carbon based materials, the phase transition between the antiferromagnetic insulator and superconducting state of A15 Cs_3C_{60} as the volume of fullerene anions decreases could be understood in terms of a bandwidth-control Mott transition; the insulator-superconductor transition discovered in electrically gated “magic angle” twisted-angle bilayer graphene could be understood as a filling-control Mott transition.

For f electron systems, the interplay between itinerancy and localization dominates the heavy fermion behavior and their ground states. The behaviors of the f electrons are demonstrated by using the angle-resolved photoemission data of CeCoIn_5 , whose f electron band becomes more coherent with decreasing temperature, and the c-f hybridization is thus enhanced and the band mass of conduction band continuously increases. The c-f hybridization behaviors of CeCoIn_5 , CeIrIn_5 , and CeRhIn_5 are compared with each other, and the differences in hybridization strength put their ground states into different regimes of the Doniach phase diagram. Similarly, the Skutterudites $4f^2$ Kondo lattice system $\text{PrOs}_4\text{Sb}_{12}$ and its sibling $4f^1$ system $\text{CeOs}_4\text{Sb}_{12}$ also have different ground states due to a slight difference in their c-f hybridization strengths.

Keywords: Mott transition, Hubbard model, Kondo lattice, emergent phenomena**PACS:** 71.10.-w, 71.20.-b**DOI:** 10.7498/aps.72.20231508

* Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant No. 11888101) and the New Cornerstone Science Foundation, China.

[†] Corresponding author. E-mail: dlfeng@ustc.edu.cn

莫特物理——量子材料的主旋律之一

封东来

Mott physics: One of main themes in quantum materials

Feng Dong-Lai

引用信息 Citation: *Acta Physica Sinica*, 72, 237101 (2023) DOI: 10.7498/aps.72.20231508

在线阅读 View online: <https://doi.org/10.7498/aps.72.20231508>

当期内容 View table of contents: <http://wulixb.iphy.ac.cn>

您可能感兴趣的其他文章

Articles you may be interested in

各向异性ruby晶格中费米子体系的Mott相变

Mott transition of fermions in anisotropic ruby lattice

物理学报. 2021, 70(23): 230305 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210963>

光学腔中一维玻色-哈伯德模型的奇异超固相

Exotic supersolid phase of one-dimensional Bose-Hubbard model inside an optical cavity

物理学报. 2021, 70(19): 193701 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20210778>

Jaynes-Cummings晶格模型和Rabi晶格模型的量子相变

The quantum phase transition in the Jaynes-Cummings lattice model and the Rabi lattice model

物理学报. 2021, 70(10): 100201 <https://doi.org/10.7498/aps.70.20202066>

超冷 ^{87}Rb 原子在二维光晶格中Mott绝缘态的实验实现

Experimental realization of Mott insulator of ultracold ^{87}Rb atoms in two-dimensional optical lattice

物理学报. 2020, 69(19): 193201 <https://doi.org/10.7498/aps.69.20200513>

非晶材料与物理近期研究进展

Recent progress of the glassy materials and physics

物理学报. 2018, 67(12): 126101 <https://doi.org/10.7498/aps.67.20180681>

双轨道Hubbard模型的动力学平均场理论研究

Dynamical mean-field theory of two-orbital Hubbard model

物理学报. 2022, 71(14): 147103 <https://doi.org/10.7498/aps.71.20220286>