

铁磁石墨烯中的近藤效应

KONDO EFFECT IN FERROMAGNETIC GRAPHENE

李高阳

2020 年 8 月 24 日

兰州大学



目录

1. 研究背景及研究方法

- 1.1 近藤效应
- 1.2 量子点中的近藤效应
- 1.3 石墨烯中的近藤效应
- 1.4 研究动机
- 1.5 研究方法: 全密度矩阵数值重整化群 (FDM-NRG)

2. 铁磁石墨烯中的近藤现象

- 2.1 研究系统
- 2.2 铁磁性诱导的近藤屏蔽
- 2.3 受门电压调控的铁磁性诱导的近藤屏蔽
- 2.4 外磁场对近藤屏蔽的补偿与抑制
- 2.5 小结

3. 机器学习

- 3.1 机器学习
- 3.2 深度学习算法
- 3.3 神经网络的分布式并行训练

4. 机器学习 + 量子多体计算

5. 致谢

1. 研究背景及研究方法

1.1 近藤效应

1.2 量子点中的近藤效应

1.3 石墨烯中的近藤效应

1.4 研究动机

1.5 研究方法: 全密度矩阵数值重整化群 (FDM-NRG)

2. 铁磁石墨烯中的近藤现象

2.1 研究系统

2.2 铁磁性诱导的近藤屏蔽

2.3 受门电压调控的铁磁性诱导的近藤屏蔽

2.4 外磁场对近藤屏蔽的补偿与抑制

2.5 小结

3. 机器学习

3.1 机器学习

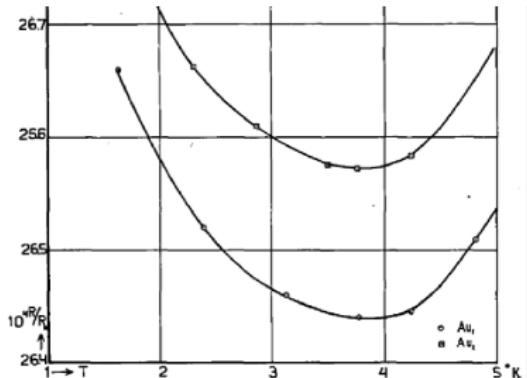
3.2 深度学习算法

3.3 神经网络的分布式并行训练

4. 机器学习 + 量子多体计算

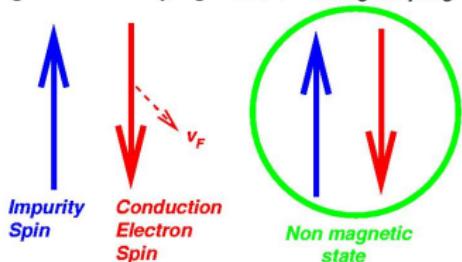
5. 致谢

稀磁合金中的近藤效应



Physica, 1934, 1(7):1115

High T - weak coupling Low T - strong coupling



- ▶ 1934 年, de Haas 在 Fe/Au, 低温电阻极小值
- ▶ 1964 年, Kondo, 三阶微扰论, 考虑高阶过程, 得到电阻的对数贡献, 近藤效应

$$\rho = \alpha T^5 + c\rho_0 - c\rho_1 \log T$$

- ▶ 特征能量尺度: 近藤温度 T_k
- ▶ 物理机制: 当 $T < T_k$ 时, 传导电子屏蔽了杂质磁矩, 共同形成了近藤单态, 改变系统输运性质

出现近藤效应的条件:

1. 杂质形成局域磁矩: 系统参数处于近藤区
2. 费米面上有足够的电子来屏蔽局域磁矩:
 $\rho(E_F) \neq 0$
3. 高阶的量子效应占主导: $T < T_k$

量子点中电极铁磁性对近藤物理影响

单杂质 Anderson 模型 + NRG

金属电极的杂化函数为常数:

$$\begin{aligned}\Gamma_{\uparrow}(\omega) &= \Gamma_{\uparrow} \\ \Gamma_{\downarrow}(\omega) &= \Gamma_{\downarrow}\end{aligned}$$

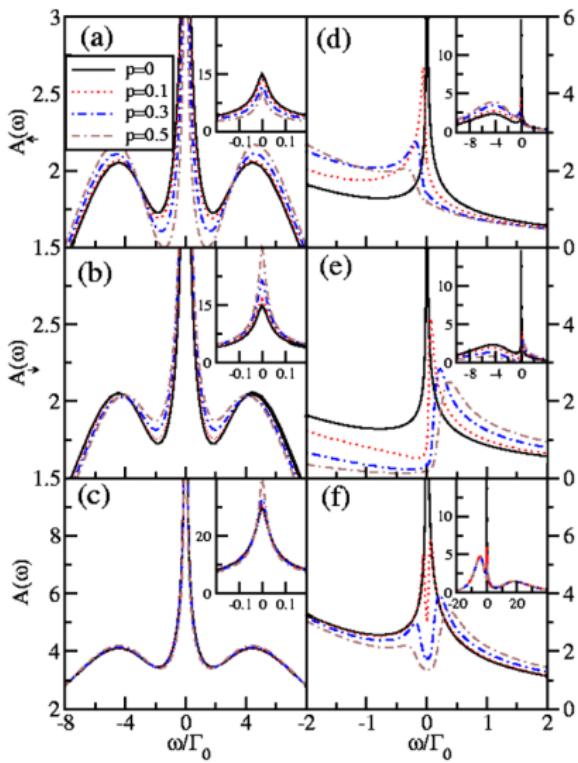
自旋极化参数 P 标志铁磁电极中铁磁性的强弱:

$$P \equiv (\Gamma_{\uparrow} - \Gamma_{\downarrow}) / (\Gamma_{\uparrow} + \Gamma_{\downarrow})$$

$$\Gamma_{\uparrow(\downarrow)} = \frac{1}{2} \Gamma(1 \pm P)$$

- ▶ p-h 对称, 铁磁性 P 不抑制近藤共振 (abc)
- ▶ p-h 非对称, 铁磁性 P 抑制近藤共振 (def)
- ▶ 近藤峰劈裂, 峰高度下降、宽度变宽、位置变远

铁磁性的引入, 抑制了已经形成的近藤共振!



PRL 92, 056601

量子点中外磁场对铁磁近藤的补偿

电极铁磁性 $P \neq 0$, 补偿磁场 $B \neq 0$

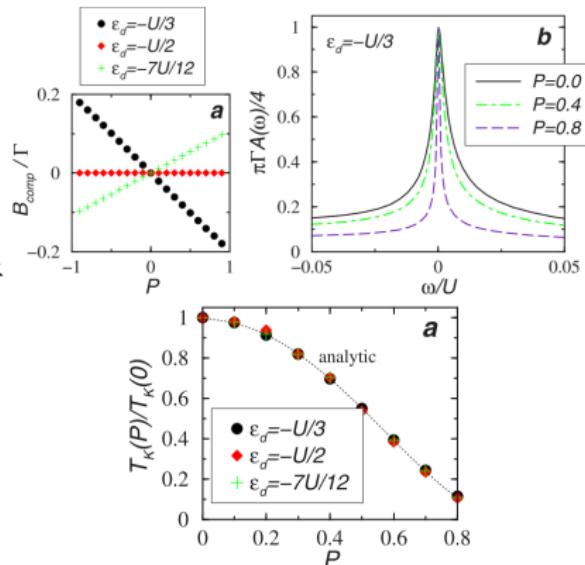
作用在杂质能级上的 Zeeman 场:

$$H_{\text{Zeeman}} = -g\mu_B B S_z$$

定义临界补偿磁场 B_c :

磁场补偿掉电极铁磁性时, $n_\uparrow = n_\downarrow$

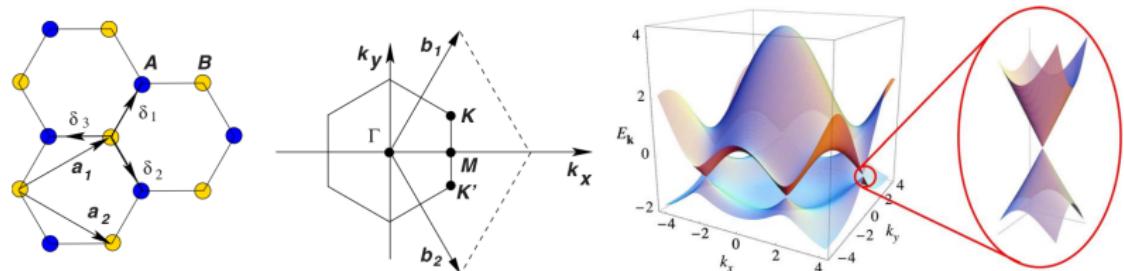
- ▶ 补偿磁场 B_c 随铁磁性 P 的变化曲线对粒子空穴的依赖
- ▶ $B = B_c$ 时, 近藤峰高度回复到么正极限
- ▶ 被补偿后的近藤峰高度相近, 但宽度随 P 增大而减小
- ▶ 近藤温度 T_k 随 P 增大而减小
- ▶ 可以用 $T_k(P=0)$ 标度



PRB 76, 045321

磁场抵消了铁磁电极中的铁磁性, 完全回复到了纯的近藤共振态!

石墨烯的性质



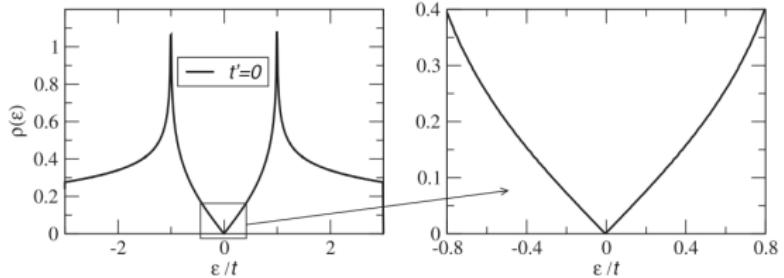
紧束缚近似下最近邻耦合: $H_g = \varepsilon_0 \sum_{i,\sigma} (a_{i\sigma}^\dagger a_{i\sigma} + b_{i\sigma}^\dagger b_{i\sigma}) - t \sum_{\langle ij \rangle, \sigma} (a_{i\sigma}^\dagger b_{j\sigma} + \text{H.c.})$

在狄拉克 K 点附近:

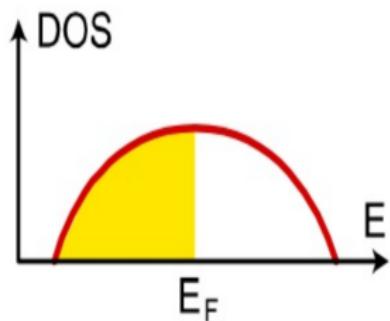
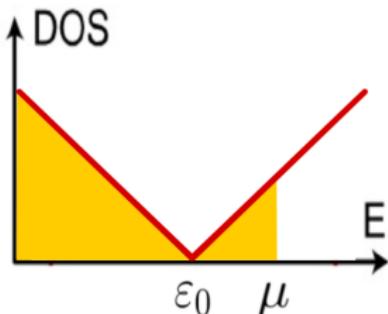
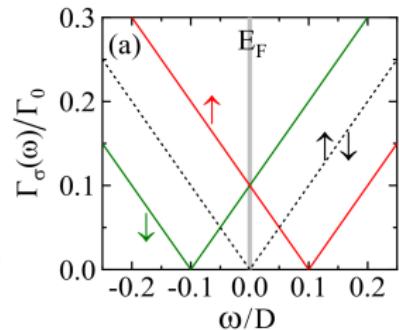
$$\varepsilon_{\pm}(k) \sim \pm v_f |k|$$

态密度:

$$\rho(\varepsilon) = \frac{2A_c}{\pi} \frac{|\varepsilon|}{v_F^2} \propto |\varepsilon|$$



研究动机


 $\rho(\omega) = \text{const}$
 稀磁合金、量子点系统

 $\rho(\omega) = |\omega + \mu|$
 受门电压调节的石墨烯

 $\rho_\sigma(\omega) = |\omega - \sigma h|$
 引入铁磁性 h

1. 在石墨烯中引入铁磁性 h , 能否产生近藤共振?
2. 如果能, 会对近藤共振有什么影响? 抑制? 增强?
3. 门电压调节化学势 μ 与铁磁性 h 的共同作用对近藤物理的影响?
4. 外磁场 B 能不能调节近藤共振?

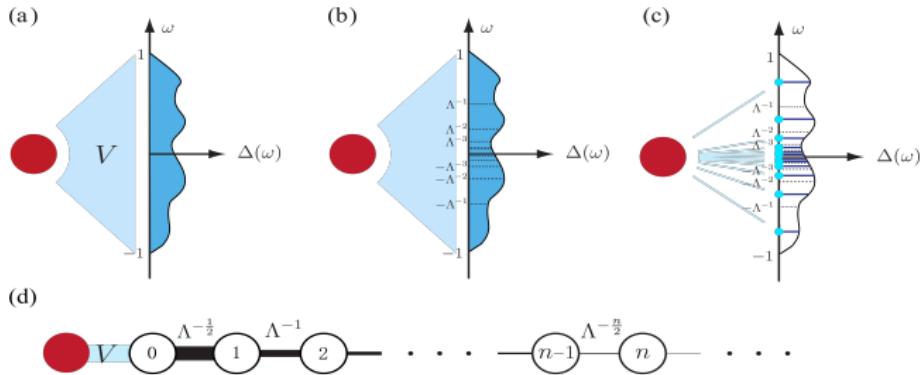
传统数值重整化群 (Wilson's NRG)

1. 1975 K. G. Wilson 为解决近藤问题设计。重整化群操作的数值化:

$$H_{N+1} = R(H_N)$$

$$H_{N+1} = \sqrt{\Lambda} H_N + \Lambda^{N/2} \sum_{\sigma} \varepsilon_{N+1} c_{N+1\sigma}^\dagger c_{N+1\sigma} + \Lambda^{N/2} \sum_{\sigma} t_N (c_{N\sigma}^\dagger c_{N+1\sigma} + c_{N+1\sigma}^\dagger c_{N\sigma})$$

2. 对数离散化 (c)、截断对角化 (d), 截断机制: 保留能量最低的 N_s 个态
3. NRG 实现了能量尺度的分离, 通过迭代进行截断对角化的方式不断地将高能态舍弃, 最终只得到了最低能量尺度的 N_s 个态用以计算我们感兴趣的低能物理



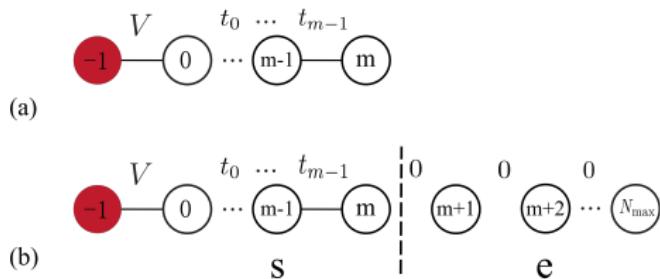
$$|s\rangle_n^X = \sum_{s' \sigma_n} \left[A_{KX}^{[\sigma_n]} \right]_{s' s} |s'\rangle_{n-1}^K \otimes |\sigma_n\rangle, \quad X = \{\text{保留, 舍弃}\}$$

全密度矩阵数值重整化群 (FDM-NRG)

传统 NRG 的缺陷:

1. 只利用了 N_s 个态来计算, 不完备
2. 只利用了最后一个能量尺度的态。当考虑多个能量尺度间的跃迁时, 结果将产生严重偏差

解决方法: 将舍弃的态重新考虑进来, 即完备的 Anders-Schiller 基矢。



长点时自动补齐剩下的简并环境态:

$$|se\rangle_N^X = |s\rangle_N^X \otimes |e_N\rangle$$

Anders-Schiller 基矢: 传统 NRG 中所有舍弃态与简并环境态的直积态的集合,

$$\mathbf{1}^{(d_{\text{imp}} d^{N_{\max}+1})} = \sum_{se}^{X=K,D} |se\rangle_{n_0}^X {}_{n_0}^X \langle se| = \sum_{n \geq n_0} \sum_{se}^{N_{\max}} |se\rangle_n^D {}_n^D \langle se|.$$

1. 研究背景及研究方法

1.1 近藤效应

1.2 量子点中的近藤效应

1.3 石墨烯中的近藤效应

1.4 研究动机

1.5 研究方法: 全密度矩阵数值重整化群 (FDM-NRG)

2. 铁磁石墨烯中的近藤现象

2.1 研究系统

2.2 铁磁性诱导的近藤屏蔽

2.3 受门电压调控的铁磁性诱导的近藤屏蔽

2.4 外磁场对近藤屏蔽的补偿与抑制

2.5 小结

3. 机器学习

3.1 机器学习

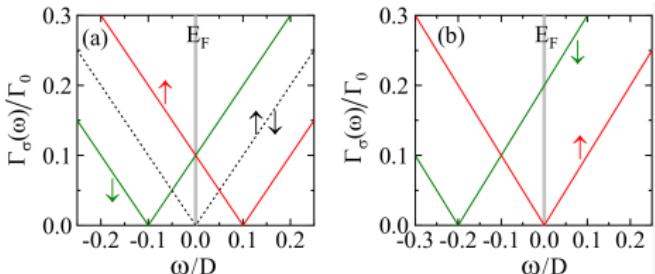
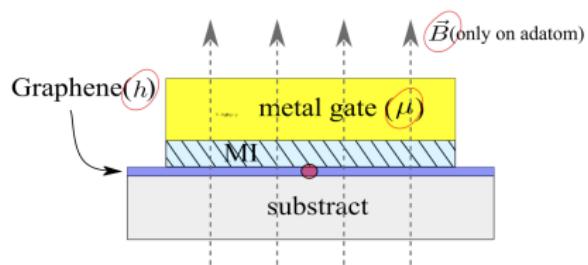
3.2 深度学习算法

3.3 神经网络的分布式并行训练

4. 机器学习 + 量子多体计算

5. 致谢

研究系统



单杂质 Anderson 模型：

$$H = \sum_{k,\sigma,\alpha} \varepsilon_{k\sigma\alpha} c_{k\sigma\alpha}^\dagger c_{k\sigma\alpha} + \sum_{\sigma} \left(\epsilon_{d\sigma} d_{\sigma}^\dagger d_{\sigma} + \frac{U}{2} n_{\sigma}^\dagger n_{\bar{\sigma}} \right) + \sum_{k,\sigma,\alpha} \frac{V}{\sqrt{2N}} (c_{k\sigma\alpha}^\dagger d_{\sigma} + \text{H.c.})$$

石墨烯格点信息及调控通过态密度进入杂化函数：

$$\Gamma_{\sigma}(\omega) = \pi V^2 \rho_{\sigma}(\omega) = \Gamma_0 |\omega - \varepsilon_0 + \mu - \sigma h|$$

固定参数： $U = 0.2, \delta = 0, \Gamma_0 = 0.1, T \ll T_k$

调控参数：

1. 金属门电压调控费米面 μ
2. 通过靠近磁性绝缘体引入石墨烯铁磁性 h
3. 置于外磁场 B 中（磁场只引起杂质能级的 Zeeman 劈裂）

电中性石墨烯的相图

电中性，且未引入铁磁性，无外磁场：

$$\mu = 0, h = 0, B = 0$$

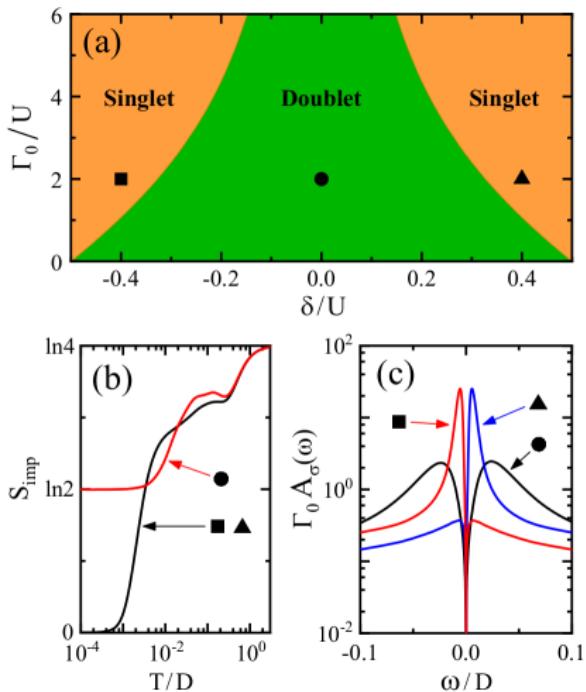
粒子空穴偏移量：

$$\delta = \varepsilon_d + U/2$$

其他参数：

$$U = 0.2, T = 10^{-9}, D = 1$$

- ▶ 杂质熵 S_{imp} 降为零为相边界确定标准
- ▶ 也可以用基态能量的拐点来确定相边界
- ▶ $S_{\text{imp}} = 0$ 单态，有可能形成近藤屏蔽
- ▶ $S_{\text{imp}} = 1$ 双重态，无近藤屏蔽
- ▶ 杂质谱函数 (c) 无明显的近藤共振峰 ($\Gamma_0 \neq \Gamma_c$)



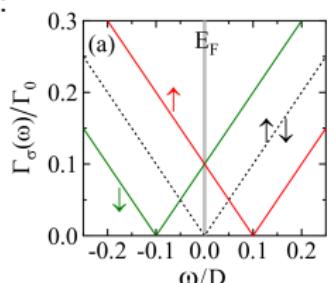
之后的讨论均为粒子空穴对称情形（背景介绍除外）， $\delta = 0$

石墨烯中铁磁性诱导的近藤共振

电中性，引入铁磁性，无外磁场：

$$\mu = 0, h \neq 0, B = 0$$

- $h = 0$ 没有近藤共振
- $h \neq 0$ 有肩膀结构
- 肩膀高度和位置随 h 移动



拟合肩膀位置 $F(\omega) = F_1(\omega) + F_2(\omega)$

$$F_1(\omega) = c_1 \operatorname{Re} \left[\left(\frac{ic_3}{\omega - c_1 + ic_2} \right)^{\frac{1}{2}} \right]$$

$$F_2(\omega) = c = +c_5 |\omega|$$

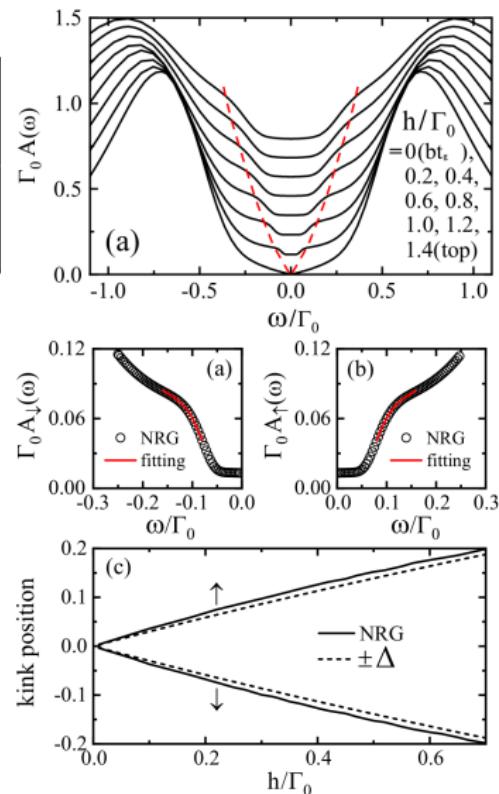
自旋极化的传导电子对杂质能级的有效重整：

$$\tilde{\varepsilon}_{d\sigma} = \varepsilon_d - \frac{1}{\pi} \int d\omega \left\{ \frac{\Gamma_\sigma(\omega)[1 - f(\omega)]}{\omega - \varepsilon_d} + \frac{\Gamma_{\bar{\sigma}}(\omega)f(\omega)}{\varepsilon_d + U - \omega} \right\}$$

近藤劈裂：

$$\Delta = |\tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow}|$$

肩膀结构来源于近藤共振的贡献！



铁磁性诱导出了石墨烯中的近藤共振！

铁磁石墨烯中的近藤补偿效应

石墨烯铁磁性 h , 补偿磁场 B :

$$\mu = 0, h/\Gamma_0 = 0.5, B \neq 0$$

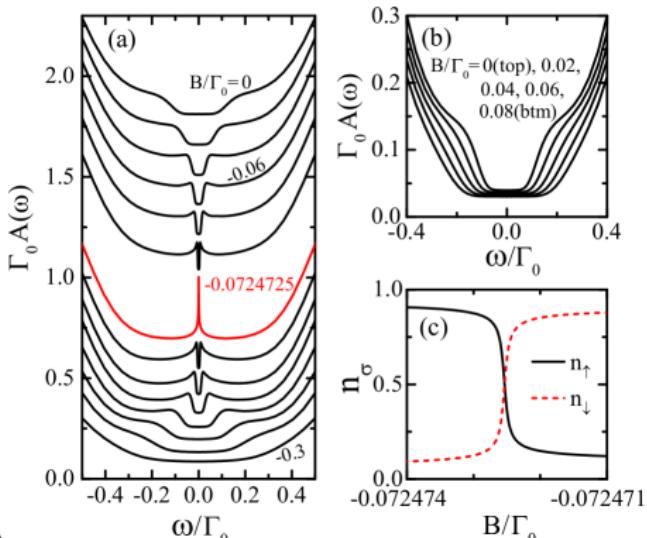
作用在杂质能级上的 Zeeman 场:

$$H_{\text{Zeeman}} = -g\mu_B B S_z$$

定义补偿磁场 B_c :

磁场补偿掉电极铁磁性时, $n_\uparrow = n_\downarrow$

- ▶ 近藤肩膀 \rightarrow 劈裂的近藤峰 \curvearrowleft
近藤峰 (B_c)
- 近藤肩膀 \leftarrow 劈裂的近藤峰 \curvearrowright
- ▶ 不能完全看成是磁场抵消了铁磁性 (在引入铁磁性 h 和磁场 B 前没有近藤共振)
- ▶ 杂质占据数是过渡行为, 没有相变

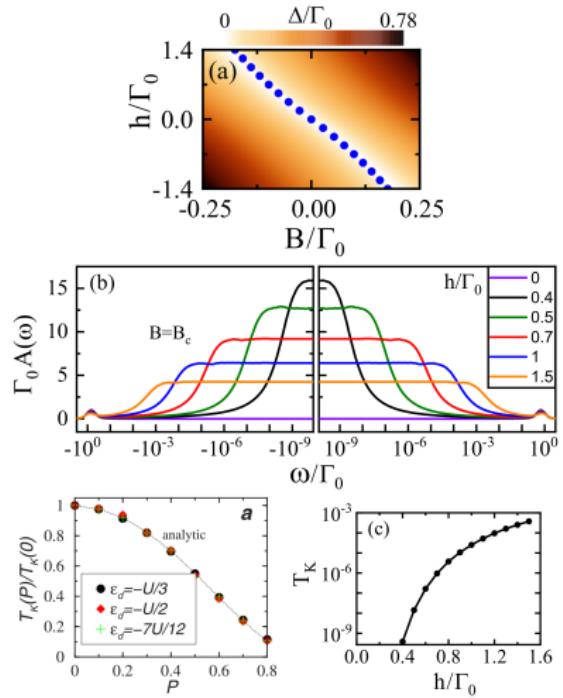


自旋极化与近藤共振共存 \xleftrightarrow{B} 常规的近藤共振态

补偿点 $B_c(h)$ 的性质

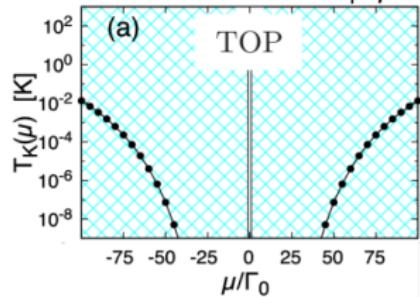
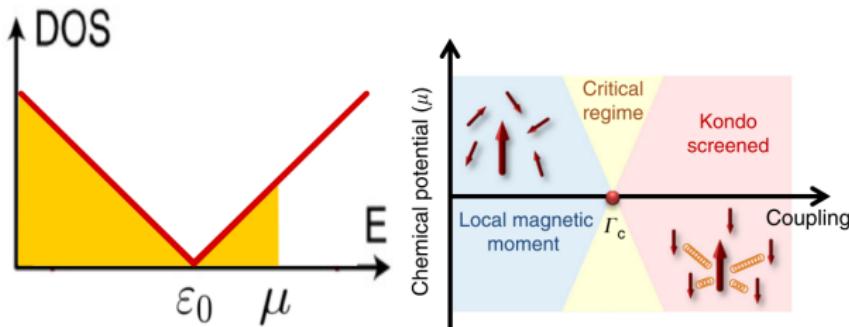
$$\mu = 0, h \neq 0, B = B_c(h)$$

- ▶ 近藤劈裂 $\Delta = |\tilde{\varepsilon}_{d\uparrow} - \tilde{\varepsilon}_{d\downarrow}| = 0 \longleftrightarrow B_c$
- ▶ 劈裂机制与铁磁电极接触的量子点相同：自旋极化的传导电子对杂质能级的有效重整
- ▶ 以态密度的半高宽定义近藤温度 T_k
- ▶ 铁磁性 h 越强，近藤峰越低、越宽，近藤温度 T_k 越高
- ▶ 杂质态密度不能用 T_k 单参数标度



铁磁性增高了近藤温度 T_k ！

受门电压调控的石墨烯近藤效应



PRB 95, 115408

- ▶ 化学势 μ 可以用来调节打开或关闭近藤效应
- ▶ μ 具体对近藤物理的影响，如 $T_K(\mu)$, $\Gamma_c(\mu)$, $n_{\text{imp}}(\mu)$
- ▶ μ 越大, $\rho(\mu)$ 越大, 更有利于近藤屏蔽的形成, 近藤温度越高

门电压与铁磁性对杂质态密度的影响

参数:

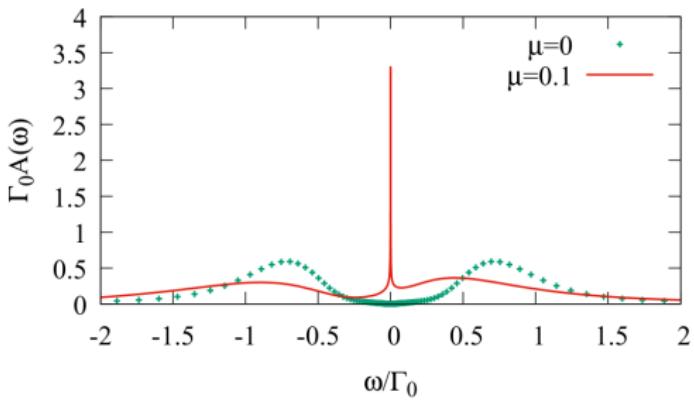
$$U = 0.2, \delta = 0, \Gamma_0 = 0.1$$

$$\mu \neq 0, h \neq 0, B = 0$$

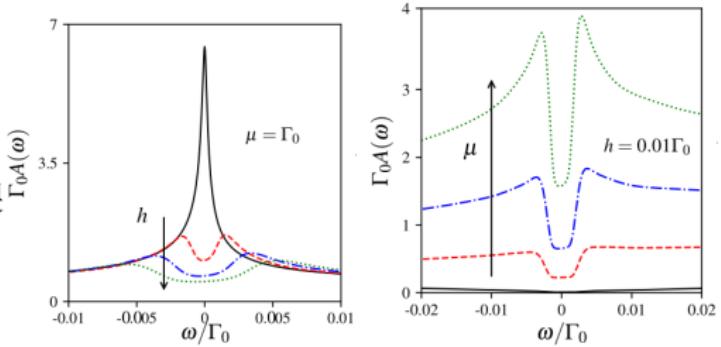
杂化函数:

$$\Gamma_{\uparrow}(\omega) = \Gamma_0 |\omega - \varepsilon_0 + \mu - h|$$

$$\Gamma_{\downarrow}(\omega) = \Gamma_0 |\omega - \varepsilon_0 + \mu + h|$$



- ▶ 调节化学势 μ 后出现了近藤峰
- ▶ 固定 μ , 增大 h , 抑制近藤共振, 与铁磁金属电极相似
- ▶ 固定 h , 增大 μ , 近藤肩膀 \rightarrow 劈裂的近藤峰



门电压与铁磁性对近藤温度的影响

参数:

$$U = 0.2, \Gamma_0 = 0.4$$

$$\delta = \{0, -0.43\}$$

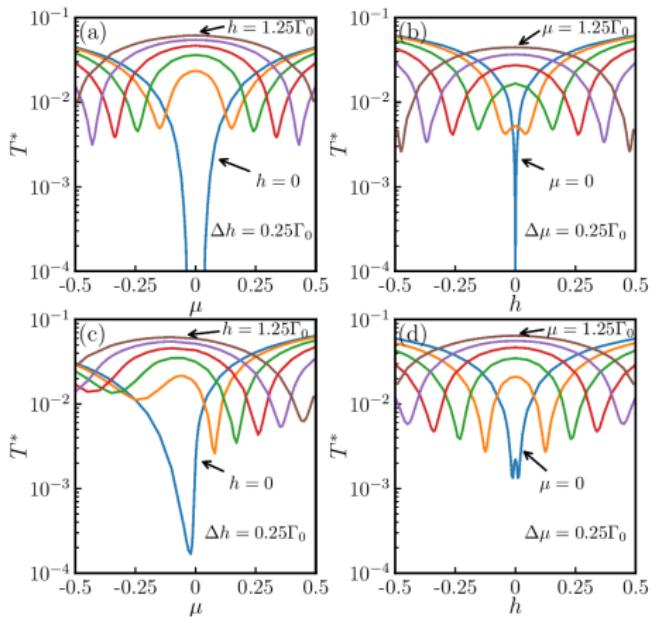
$$\mu \neq 0, h \neq 0, B = 0$$

杂化函数:

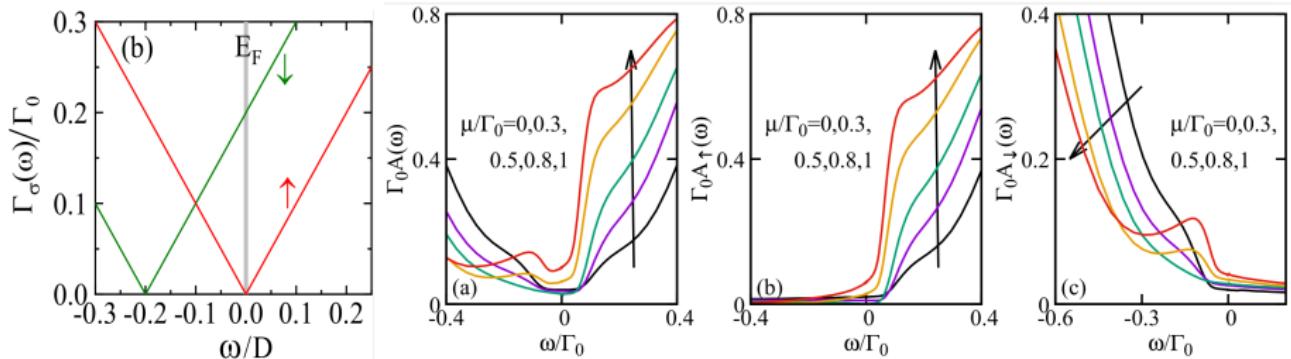
$$\Gamma_{\uparrow}(\omega) = \Gamma_0 |\omega - \varepsilon_0 + \mu - h|$$

$$\Gamma_{\downarrow}(\omega) = \Gamma_0 |\omega - \varepsilon_0 + \mu + h|$$

- ▶ 温度 $T < T^*$ 时, 杂质进入自旋单态 (近藤单态或自旋极化态)
- ▶ 有效能量 T^* 定义: $S_{\text{imp}}(T)$ 降为 $\frac{1}{2}\ln 2$ 处的温度
- ▶ $h = 0$ 时, T^* 即为近藤温度 T_k
- ▶ 曲线在 $\mu \approx \pm h$ 处出现极小值



$\mu \approx h$ 处的态密度：近藤半金属区



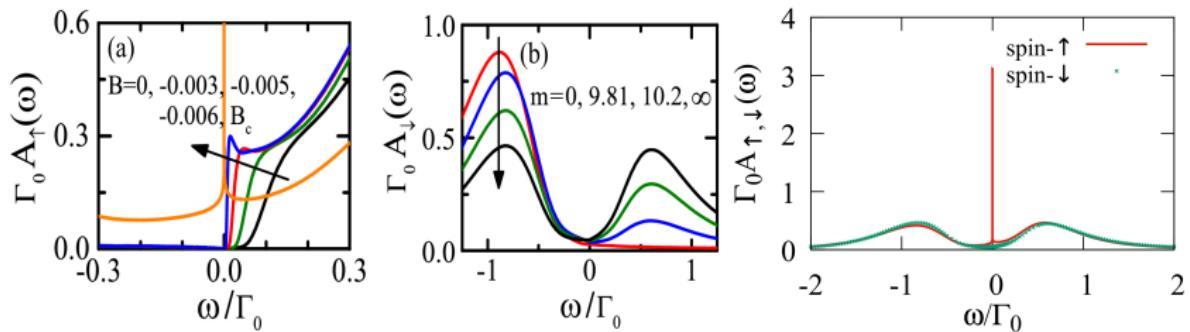
参数：

$$U = 0.2, \delta = 0, \Gamma_0 = 0.1$$

$$\mu \neq 0, \boxed{h/\Gamma_0 = 0.5}, B = 0$$

- ▶ $\mu = h$ 时， $\rho_\uparrow(E_F) = 0$ ，不能形成近藤共振
- ▶ 只有一个自旋分量的态密度有近藤共振
- ▶ 类似于半金属行为，称为近藤半金属区

磁场对石墨烯中近藤半金属的显著调节



参数:

$$\mu/\Gamma_0 = h/\Gamma_0 = 0.5, \quad B = B_c$$

- $B = (1 - 10^{-m})B_c$
- 被磁场增强的态密度，只有一个自旋分量有近藤峰
- 不同自旋的不同输运行为，应用意义



小结

量子杂质问题是凝聚态物理领域倍受关注的问题，量子杂质问题的研究对多体相互作用的理解如介观输运、纳米器件的制备和工业应用都有重要的作用。

我们用 FDM-NRG 研究了石墨烯中的近藤现象，发现了：

- ▶ 在石墨烯中铁磁性可以诱导近藤共振
- ▶ 可以用磁场调节
- ▶ 并发现可以通过调节化学势 μ 和铁磁性 h 使得石墨烯处于一种状态 $\mu = h$
- ▶ 在这种状态下，系统中不同自旋的电子具有不同的输运行为

1. 研究背景及研究方法

1.1 近藤效应

1.2 量子点中的近藤效应

1.3 石墨烯中的近藤效应

1.4 研究动机

1.5 研究方法: 全密度矩阵数值重整化群 (FDM-NRG)

2. 铁磁石墨烯中的近藤现象

2.1 研究系统

2.2 铁磁性诱导的近藤屏蔽

2.3 受门电压调控的铁磁性诱导的近藤屏蔽

2.4 外磁场对近藤屏蔽的补偿与抑制

2.5 小结

3. 机器学习

3.1 机器学习

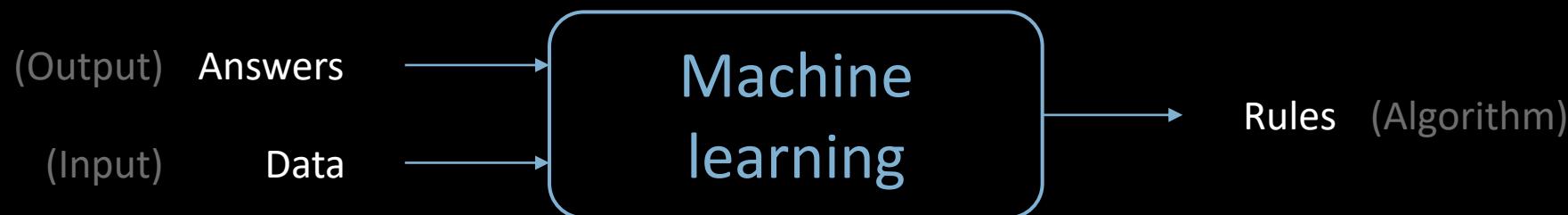
3.2 深度学习算法

3.3 神经网络的分布式并行训练

4. 机器学习 + 量子多体计算

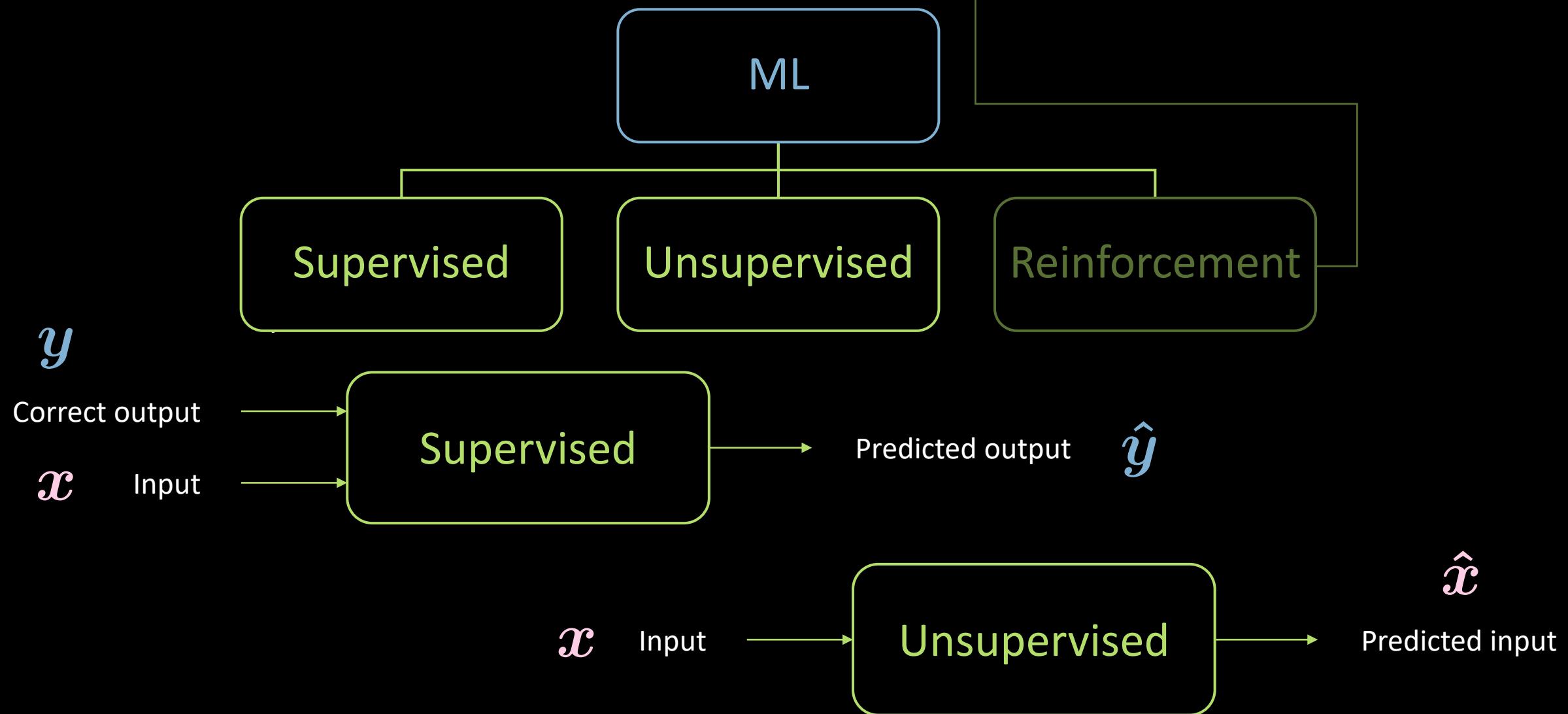
5. 致谢

Machine learning (ML)

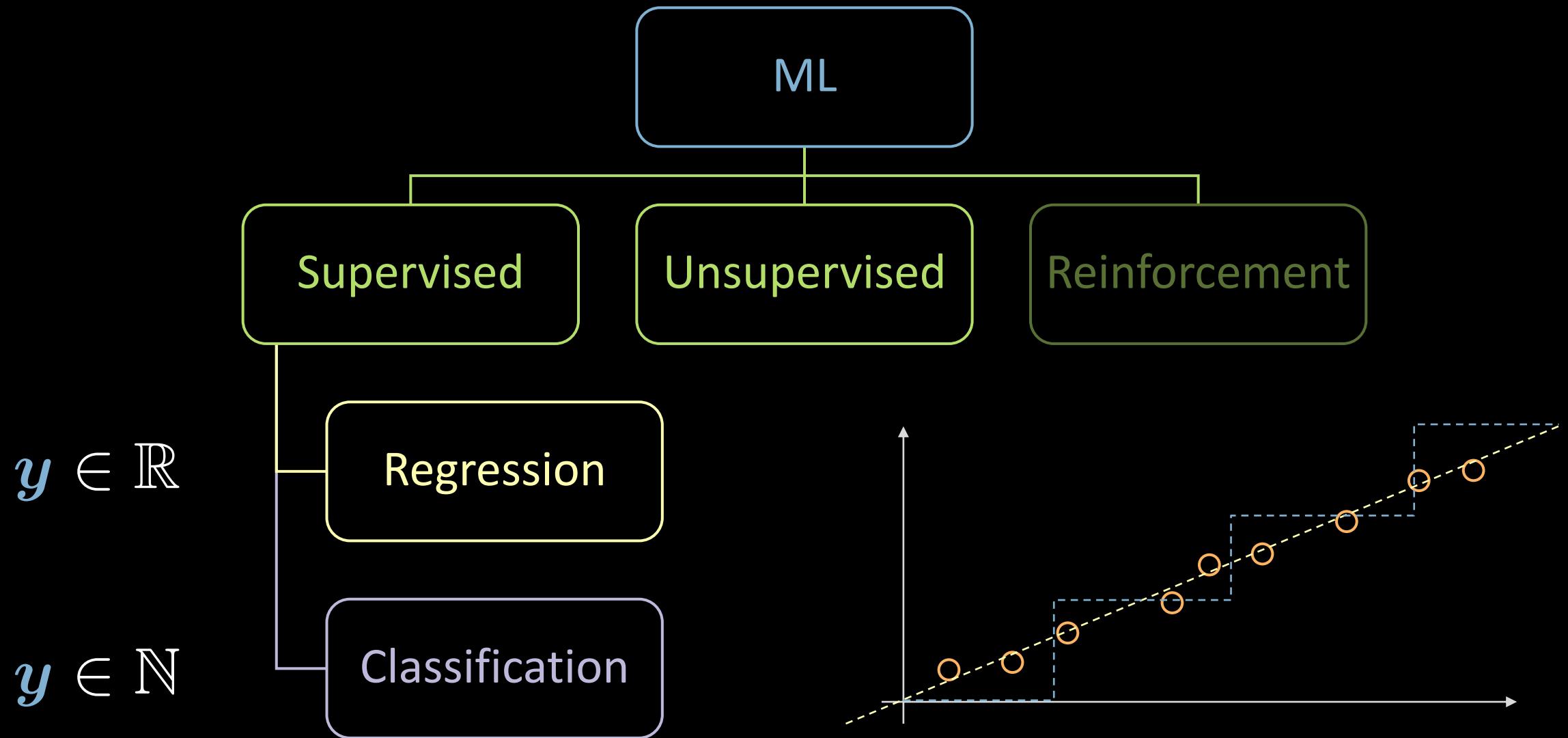


ML paradigms taxonomy

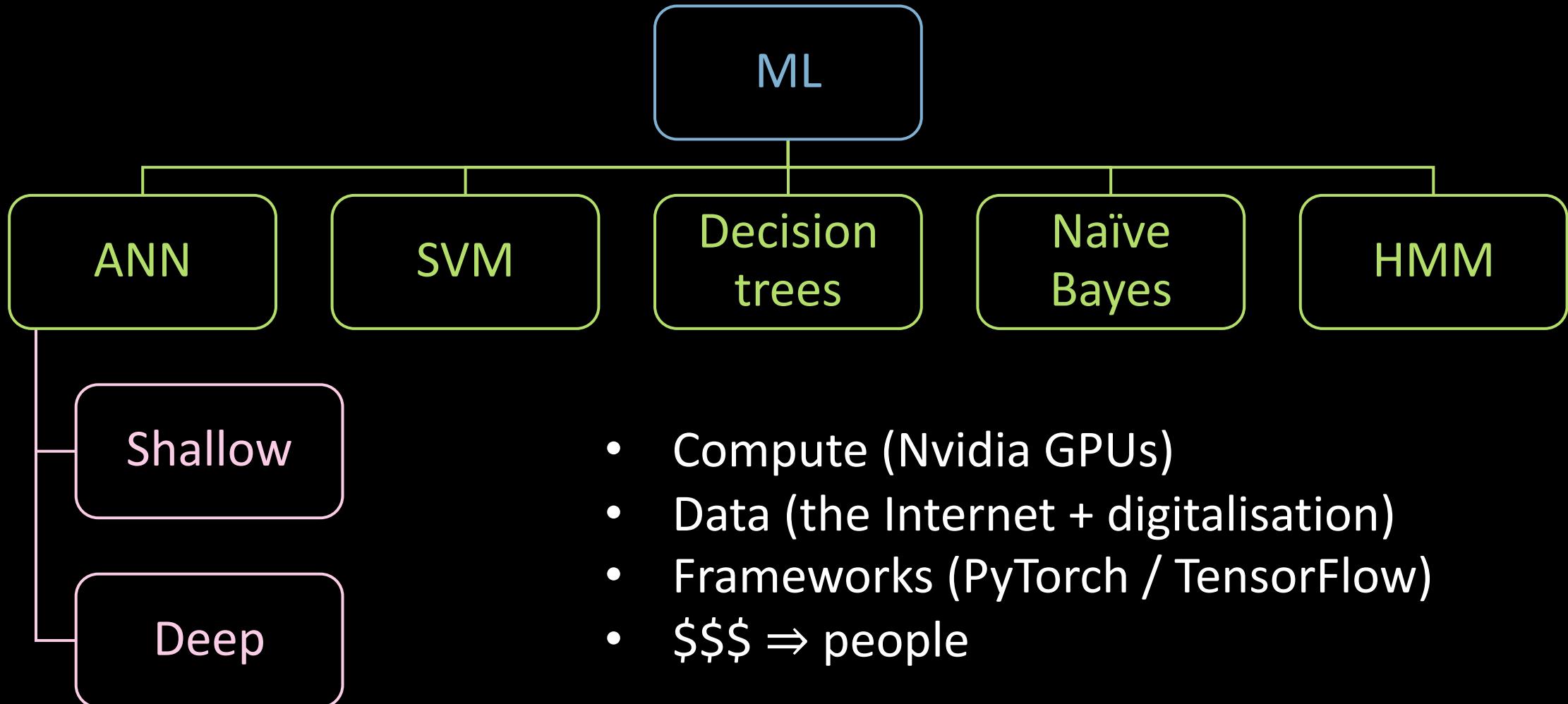
- Non-differentiable \Rightarrow trial and error
- Differentiable \Rightarrow supervised RNN



ML paradigms taxonomy



ML algorithms

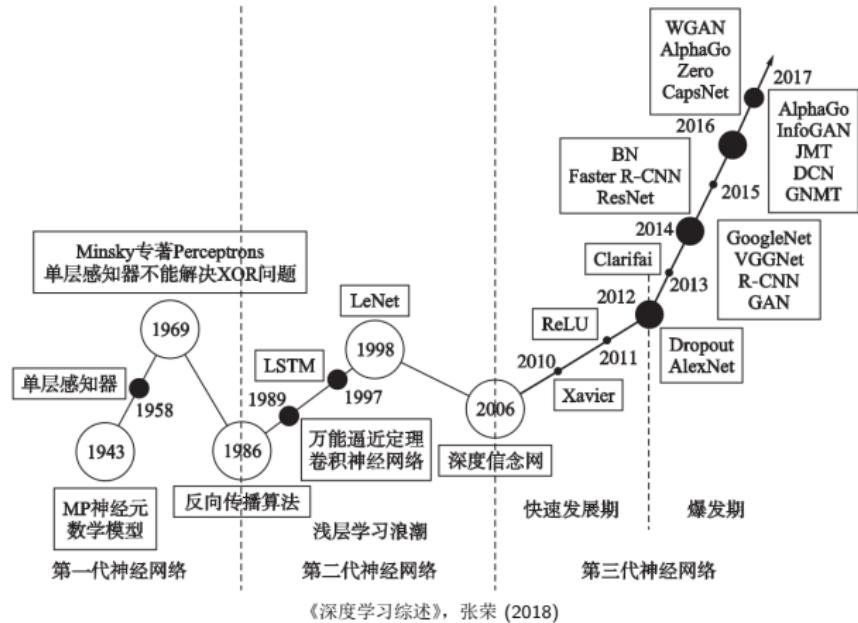


深度学习算法

- ▶ 多层感知器 MLP
- ▶ 卷积神经网络 CNN
 - AlexNet(2012)
 - VGGNet(2014)
 - GoogleNet(2014)
 - ResNet(2015)
- ▶ 循环神经网络 RNN
 - LSTM(1997)
 - GRU(2014)
- ▶ 生成对抗网络 GAN
 - DCGAN

目前存在问题：

- 训练时间长 (分布式训练)
- 超参太多
- 解释性差

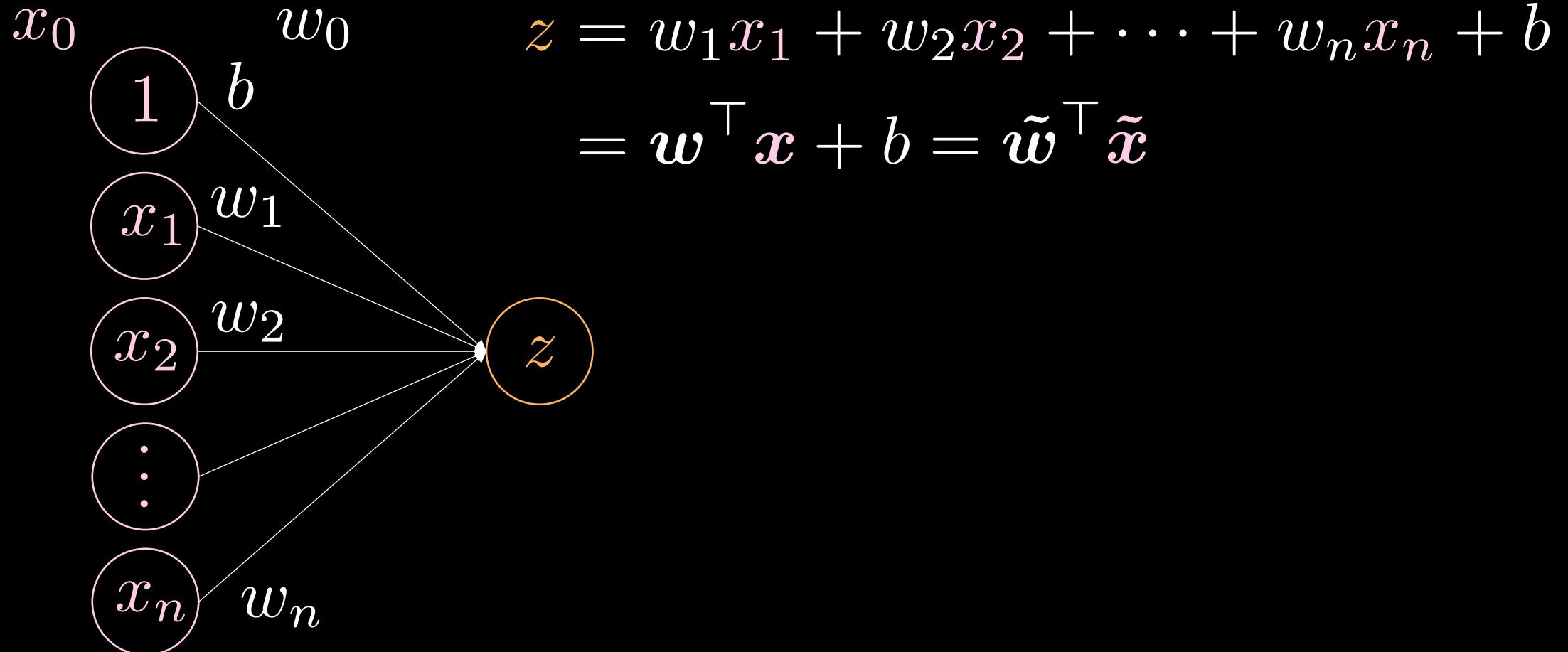


应用：

- 计算机视觉
- 自然语言处理

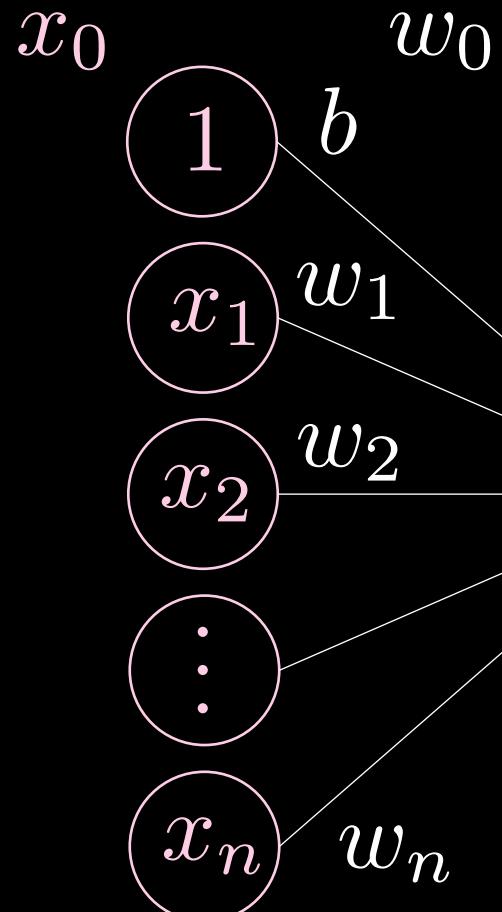
▶ 模型 → 参数 → 最大似然估计 → 最优化

Linear neuron

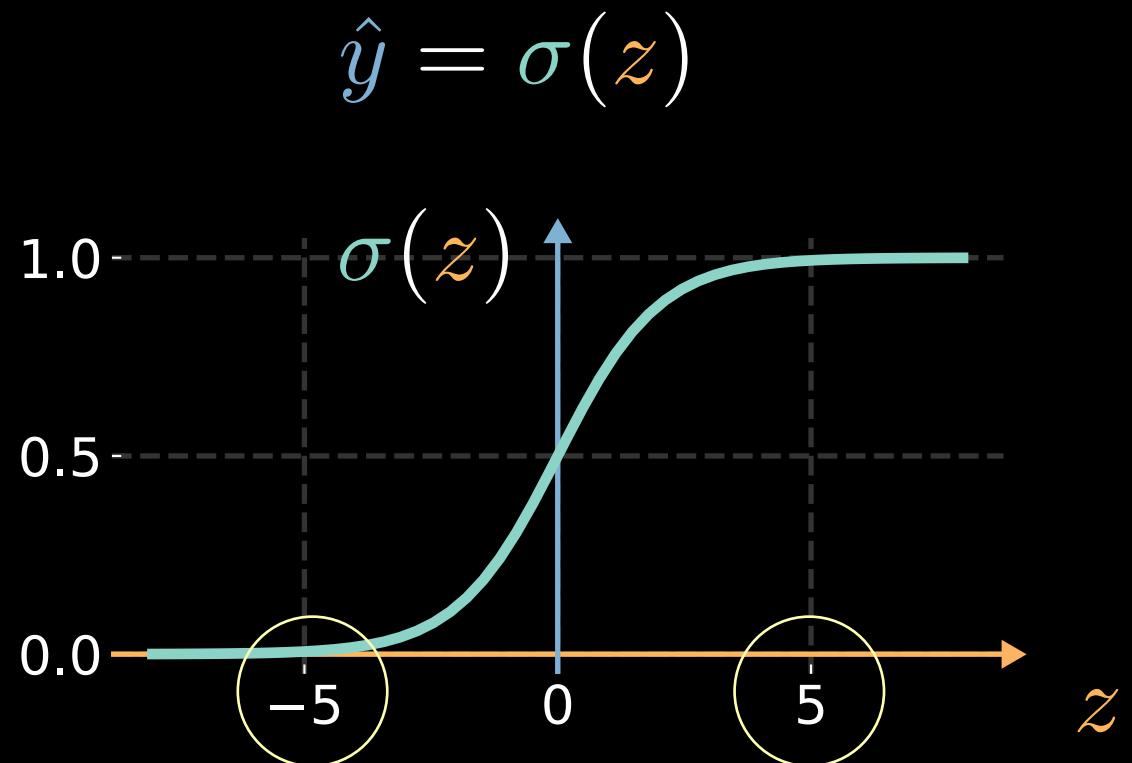


Neuron / perceptron

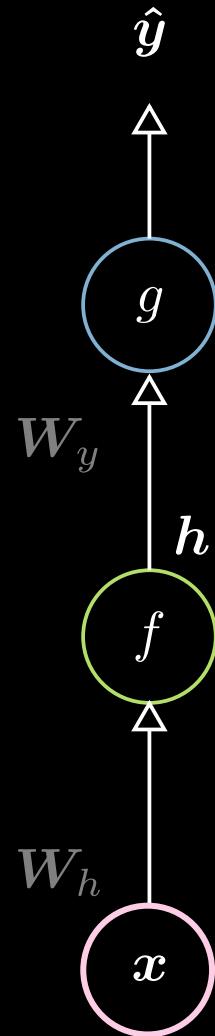
$$\sigma(z) = \frac{1}{1 + \exp(-z)}$$



$$\begin{aligned} z &= w_1 x_1 + w_2 x_2 + \cdots + w_n x_n + b \\ &= \mathbf{w}^\top \mathbf{x} + b = \tilde{\mathbf{w}}^\top \tilde{\mathbf{x}} \end{aligned}$$



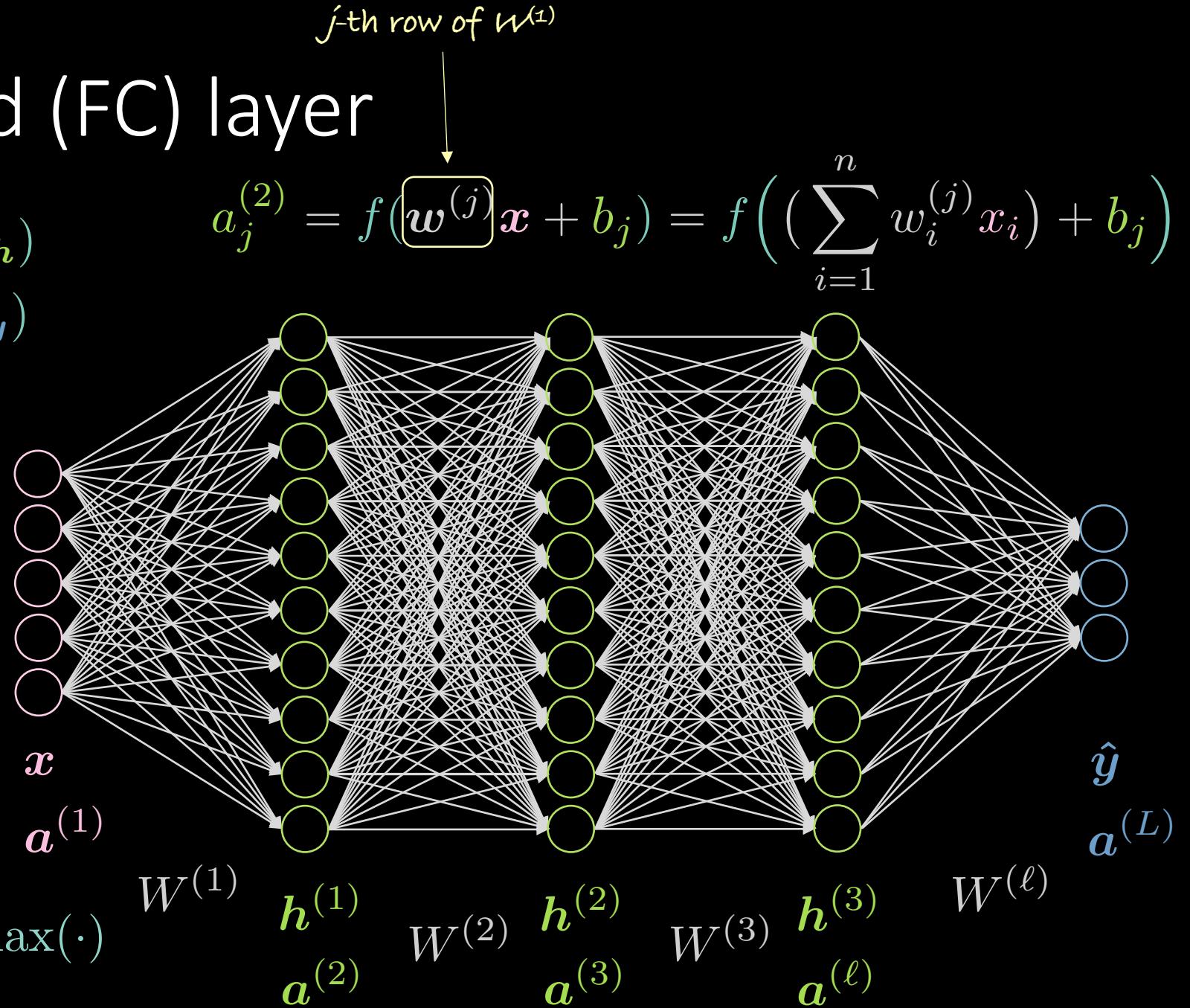
Fully connected (FC) layer



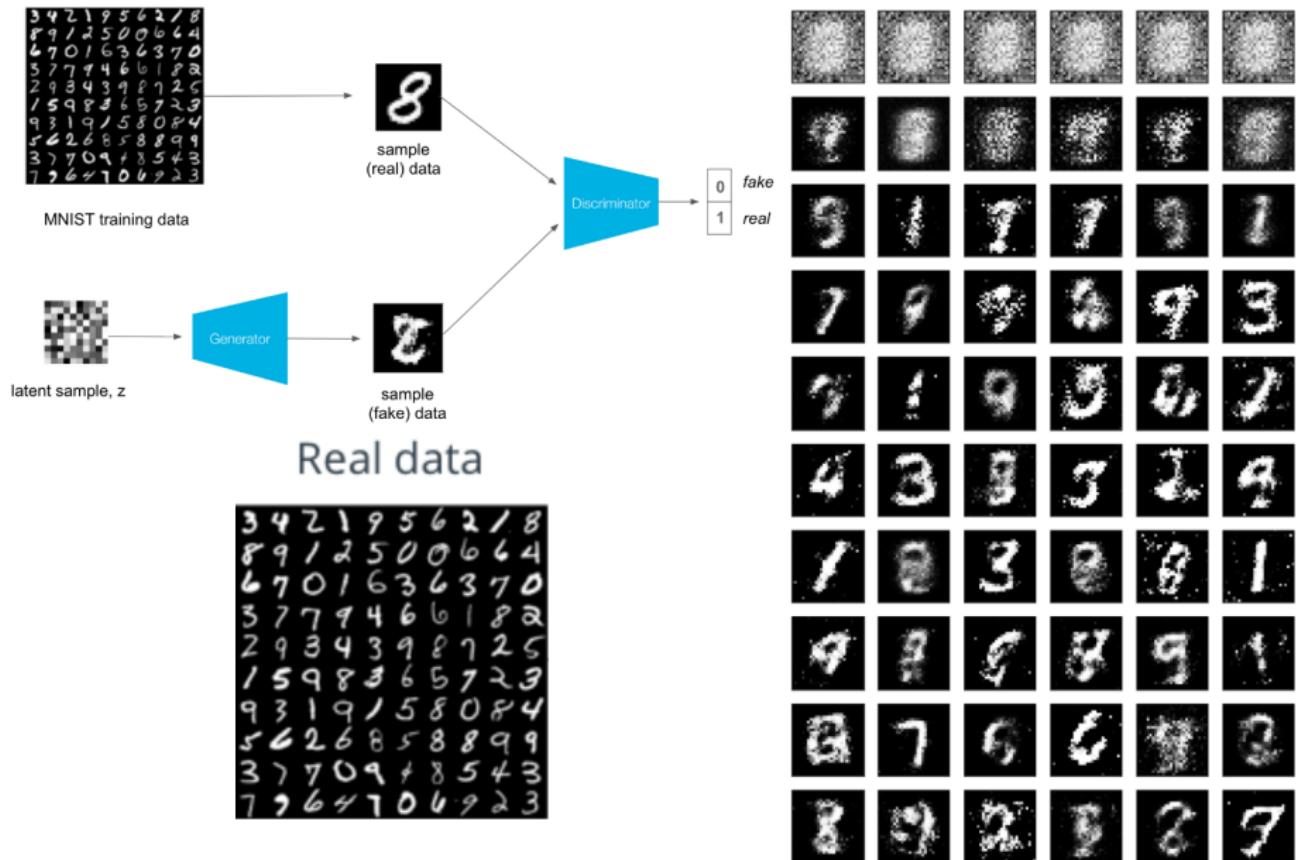
$$h = f(\mathbf{W}_h \mathbf{x} + \mathbf{b}_h)$$

$$\hat{y} = g(\mathbf{W}_y h + \mathbf{b}_y)$$

$f, g = (\cdot)^+, \sigma(\cdot),$
 $\tanh(\cdot), \text{soft(arg)}\max(\cdot)$



案例：用对抗生成网络学习手写数字



神经网络的分布式并行训练

分布并行训练的方式：

- 数据并行
- 模型并行
- 混合并行

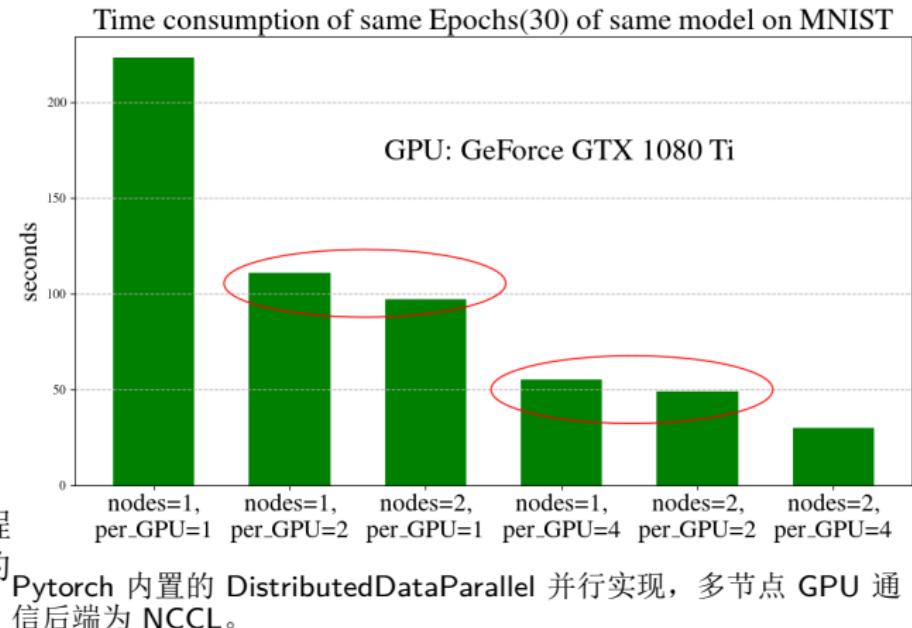
并行加速比：

$$S_p = T_1 / T_p$$

并行加速效率：

$$E_p = S_p / p = T_1 / p T_p$$

p 为 GPU 个数， T_p 为程序在 p 个 GPU 上运行的时间。



结论：无论单节点还是多节点都建议使用 `DistributedDataParallel` 方法，甚至分布式训练的方式比单个节点上多 GPU 的训练方式更高效。

机器学习 + 量子多体计算 = ?