

苏州大学

# 本科毕业设计(论文)

学院(部)	物理科学与技术学院		
题 目	重费米子物理的实验和理论研究进展		
年 级	2018 级	专业	物理学
班 级	物理学中文班	学号	1822401002
姓 名	朱墨		
指导老师	蒋密	职称	教授
论文提交日期	2021. 5		

# 重费米子物理的实验和理论研究进展

## 摘要

重费米子材料是一种特殊的过渡金属化合物属于强关联电子系统。电子是一种费米子，在这种材料中被认为是重电子“重费米子”这个名字来自于费米子的行为，即它的有效质量好像大于其静止质量。以电子为例，低于特征温度时（通常为 10 K），这些金属化合物中的传导电子表现为它们的有效质量好像是自由粒子质量的 1000 倍。重费米子材料在当前的科学研究中发挥着重要的作用，但是作为研究非常规超导、非费米液体行为和量子临界行为的原型材料。

我们发现 $\text{Ce}_3\text{PdIn}_{11}$ 在一定温度下，出现了超导相和反铁磁相共存的现象，这是因为 $\text{Ce}_3\text{PdIn}_{11}$ 中存在两种不同 Ce 的不等位点。我们将通过量子蒙特卡罗方法对此进行模拟。

**关键词：**重费米子；强关联系统；量子蒙特卡罗计算；反铁磁性；超导态；共存

# Advances in Experimental and Physical Research of Heavy Fermion Physics

## Abstract

Heavy fermion materials are a special kind of transition metal compounds belonging to strongly correlated electron systems. Electrons are a kind of fermions. The "heavy fermions" that are considered heavy electrons in this material get the name from the fermion's behavior that its effective mass appears to be greater than its rest mass. In the case of electrons, below a characteristic temperature (usually 10 K), conduction electrons in these metal compounds behave as if their effective mass is 100 times the mass of the free particle. Heavy fermion materials in it plays an important role in current scientific research, but as a prototype material for studying unconventional superconductivity, non-Fermi liquid behavior and quantum critical behavior.

We found that  $\text{Ce}_3\text{PdIn}_{11}$  coexisted superconducting phase and antiferromagnetic phase at a certain temperature, This is because there are two kinds of unequal sites of Ce in  $\text{Ce}_3\text{PdIn}_{11}$ . We will simulate this by a quantum Monte Carlo method.

**keywords:** Heavy Fermion particle; Strong connection system; quantum Monte Carlo; antiferromagnetic; superconductive;

# 目录

第 1 章	绪论	1
1.1	研究背景	1
1.2	背景理论	1
1.2.1	量子蒙特卡洛	1
1.2.2	周期安德森模型	2
1.2.3	Hubbard 模型	3
1.2.4	RKKY 相互作用	4
1.2.5	Kondo 效应	4
第 2 章	$\text{Ce}_3(\text{Pt/Pd})\text{In}_{11}$ 重费米子物理体系	5
2.1	超导与反铁磁共存	5
2.2	特性介绍	5
2.2.1	电阻率随温度变化	5
2.2.2	磁化系数	6
2.2.3	反铁磁和非常规超导	6
第 3 章	反铁磁性和非常规超导共存和竞争机制	7
3.1	非常规超导简介	7
3.1.1	超导与反铁磁的竞争与共存	8
第 4 章	利用多体计算方法模拟安德森模型的初步结果	9
4.1	模拟结果数据处理程序的编写	9
4.1.1	运行所需环境	9
4.1.2	程序编写思路	9
4.2	反铁磁结构因子	12
4.3	超导计算结果	13
第 5 章	总结与展望	16
5.1	总结	16
5.2	未来展望	16
参考文献		17
致谢		18
附录		19

# 第 1 章 绪论

## 1.1 研究背景

在固体物理中，重费米子材料是一种特殊的过渡金属化合物属于强关联电子系统，其中未充满电子带中包含了 4f 和 5f 电子。电子是一种费米子，在这种材料中被认为是重电子。重费米子化合物的性质通常来自稀土或镧系元素离子的部分填充的 f 轨道，其行为类似于局域磁矩。“重费米子”这个名字来自于费米子的行为，即它的有效质量好像大于其静止质量。以电子为例，低于特征温度时（通常为 10K），这些金属化合物中的传导电子表现为它们的有效质量好像是自由粒子质量的 1000 倍。

重费米子行为由 K.Andres, J.E.Graebner 和 H.R.Ott 在 1975 年发现，他们观察到 CeAl<sub>3</sub> 中线性比热容变化很大。在对掺杂超导体的研究中得出结论，一种材料中存在局域磁矩和超导态是不相容的，但是在 1979 年，Frank Steglich 等人在 CeCu<sub>2</sub>Si<sub>2</sub> 中发现了重费米子的超导性。H.von Löhneysen 等人于 1994 年在重费米子化合物的相图中发现了量子临界点和非费米液体行为，导致人们对这些化合物的研究产生了新的兴趣。另一个实验突破是（由 Gil Lonzarich 小组证明）重费米子中的量子临界性可能是非常规超导性的原因。

重费米子材料在当前的科学研究中发挥着重要作用，但是作为研究非常规超导、非费米液体行为和量子临界性的原型材料，重费米子化合物中局域磁矩和传导电子之间的实际相互作用仍未完全了解，并且是正在进行的研究主题。我们利用 dqmc(Determinant Quantum Monte Carlo)，对 Ce<sub>3</sub>(Pd/Pt)In<sub>11</sub> 材料中发现的超导与反铁磁共存的现象进行模拟。

## 1.2 背景理论

### 1.2.1 量子蒙特卡洛

DQMC 非常适合高温下对强关联系统的模拟。强关联系统意味着量子粒子(例如电子)无法用独立电子近似描述(类似于密度泛函理论和能带结构计算)。一个著名的例子就是高温超导  $T_C$  的计算。

DQMC 主要用来计算有限温度的费米子系统。在实际运作过程中，其中只有二费米子部分。DQMC 将求 Trace 转化为了求矩阵的行列式。例如：

$$Tr[e^{-\sum_{i,j} \hat{c}_i^\dagger A_{i,j} \hat{c}_j}] = Det[\mathbf{1} + e^{-\mathbf{A}}]$$

其中  $A_{i,j}$  为矩阵  $\mathbf{A}$  的元素，可以看到将求 Trace 转为求一个单位矩阵  $\mathbf{1}$  加上矩阵  $e^{-\mathbf{A}}$ 。对于此证明，将  $e$  指数上的部分进行对角化，Trace 即为对于  $n_i = 0, 1$  的可能性求和：

$$Tr \left[ e^{-\sum_{i,j} \hat{c}_i^\dagger A_{i,j} \hat{c}_j} \right] = Tr \left[ e^{-\sum_k \epsilon(k) \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k} \right] = \prod_k Tr \left[ e^{-\epsilon(k) \hat{c}_k^\dagger \hat{c}_k} \right] = \prod_k [1 + e^{-\epsilon(k)}]$$

上述等式显然成立。对于上式推广：

$$e^{-\sum_{i,j} c_i^\dagger A_{i,j} c_j} e^{-\sum_{i,j} c_i^\dagger B_{i,j} c_j} = e^{-\sum_{\nu} c_\nu^\dagger l_\nu c_\nu}$$

从单粒子态开始： $e^{-A}e^{-B}$  的作用在  $|\psi\rangle = c_v^\dagger|0\rangle$ ：

$$e^{-\sum_{i,j} c_i^\dagger A_{i,j} c_j} e^{-\sum_{i,j} c_i^\dagger B_{i,j} c_j} |\psi\rangle = (e^{-A}e^{-B})_{\nu\nu} c_\nu^\dagger|0\rangle = e^{-l_\nu} c_\nu^\dagger|0\rangle$$

考虑一个多粒子态比如二粒子态  $|\phi\rangle = c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger|0\rangle$ ，有：

$$\begin{aligned} e^{-c_i^\dagger B_{ij} c_j} |\phi\rangle &= \prod_{\mu} [1 + (e^{-B_\mu} - 1) c_\mu^\dagger c_\mu] c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger|0\rangle \\ &= e^{-B_{\mu_1}} e^{-B_{\mu_2}} c_{\mu_1}^\dagger c_{\mu_2}^\dagger|0\rangle \end{aligned}$$

因此有：

$$\text{Tr} \left[ e^{-\sum_{i,j} c_i^\dagger A_{i,j} c_j} e^{-\sum_{i,j} c_i^\dagger B_{i,j} c_j} \right] = \text{Det} (1 + e^{-A} e^{-B})$$

### 1.2.2 周期安德森模型

周期安德森模型是 Philip Warren Anderson 提出用哈密顿量解决金属中的磁性杂志。现用于描述近藤效应的问题，例如重费米子系统以及近藤绝缘体。对于单个杂志，哈密顿量为

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{\sigma} \epsilon_d d_\sigma^\dagger d_\sigma + U d_\uparrow^\dagger d_\uparrow d_\downarrow^\dagger d_\downarrow + \sum_{k,\sigma} V_k (d_\sigma^\dagger c_{k\sigma} + c_{k\sigma}^\dagger d_\sigma)$$

其中  $c$  是传导电子的湮灭算符， $d$  是杂质的湮灭算符， $k$  是传导电子波矢量， $\sigma$  标记自旋， $U$  是库伦排斥， $V$  表示杂化。

对于重费米子系统，周期安德森模型 (PAM) 描述了杂质晶格，其中一维模型哈密顿量为

$$H = \sum_{k,\sigma} \epsilon_k c_{k\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + \sum_{j,\sigma} \epsilon_f f_{j\sigma}^\dagger f_{j\sigma} + U \sum_j f_{j\uparrow}^\dagger f_{j\uparrow} f_{j\downarrow}^\dagger f_{j\downarrow} + \sum_{j,k,\sigma} V_{jk} (e^{ikx_j} f_{j\sigma}^\dagger c_{k\sigma} + e^{-ikx_j} c_{k\sigma}^\dagger f_{j\sigma})$$

其中  $x_j$  是杂质位点  $j$  的位置， $f$  是杂质产生算符 (在重费米子系统中按照惯例用  $d$  代替)，杂化项允许重费米子系统中的  $f$  轨道的电子相互作用，即使电子之间最大距离超过了 Hill 极限。

### 1.2.3 Hubbard 模型

在一般的固体理论中，一般是将电子与电子之间的相互作用忽略，只考虑泡利不相容原理，故系统哈密顿量不存在电子相互作用。但是在实际中，尤其是窄能带晶体中，电子之间的相互作用无法忽略，如过渡金属氧化物和镧系氧化物，前者  $3d$  轨道

之间交叠很大，d 轨道上的电子相互作用无法忽略，把这部分相互作用写入哈密顿量就得到了强关联模型即 Hubbard 模型。

接下来介绍一下 Hubbard 模型的哈密顿量，多体系统的总哈密顿量为

$$H = \sum_i h(\mathbf{r}_i) + \frac{1}{2} \sum_{i,j} v_{ij}$$

$$v_{ij} = \frac{e^2}{|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|}$$

只考虑单个未填满的能带，如孤立的 s 带，在布洛赫表象中考虑互相作用哈密顿量二次量化表示式可写成

$$H = \sum_{k,\sigma} E_k C_{k\sigma}^+ C_{k\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{k_1,k_2,k'_1,k'_2} \sum_{\sigma,\sigma'} \langle k_1, k_2 | v | k'_1, k'_2 \rangle C_{k_1\sigma}^+ C_{k_2\sigma'}^+ C_{k'_2\sigma'} C_{k'_1\sigma} \quad (1.1)$$

其中  $E_k$  是能带电子的能量， $C_{k\sigma}^+$  和  $C_{k\sigma}$  代表布洛赫轨道上  $\sigma$  自旋电子的产生及消灭算符。

我们采用 Wannier 表象

$$\psi_k(\mathbf{r}) = N^{-\frac{1}{2}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} a(\mathbf{k} - \mathbf{R}_i)$$

$$C_{i\sigma}^+ = N^{-\frac{1}{2}} \sum_k e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} C_{k\sigma}^+$$

$$C_{i\sigma} = N^{-\frac{1}{2}} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_i} C_{k\sigma}$$

将1.1式变换为

$$H = \sum_{i,j} \sum_{\sigma} T_{ij} C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} + \frac{1}{2} \sum_{i,j,l,m} \sum_{\sigma,\sigma'} \langle ij | v | lm \rangle C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma'}^+ C_{m\sigma'} C_{l\sigma}$$

其中

$$T_{ij} = N^{-1} \sum_k e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{R}_i - \mathbf{R}_j)} \mathbf{E}_k$$

对于窄带单中心积分

$$\langle ii | v | ii \rangle \equiv U = e^2 \int \frac{a^*(r - R_i) a^*(r' - R_i) a(r - R_i) a(r' - R_i)}{|r - r'|} d\mathbf{r} d\mathbf{r}'$$

是最重要的，代表同一格点周围能带电子之间的库伦作用。作为一个简单的模型，可以略去相互作用项中所有的多中心积分，只取单中心积分项。可以得到 Hubbard 哈密顿量

$$H = \sum_{i,j} \sum_{\sigma} T_{ij} C_{i\sigma}^+ C_{j\sigma} + \frac{U}{2} \sum_i \sum_{\sigma} n_{i\sigma} n_{i\sigma}^-$$

### 1.2.4 RKKY 相互作用

RKKY 由 Ruderman-Kittel-Kasuya-Yosida 这四位提出。RKKY interaction 指的是通过传导电子的相互作用，金属中的核磁矩或局域内部 d 或 f 壳层电子自旋的耦合机制。

RKKY 相互作用最初由加州大学伯克利分校的马尔文·鲁德曼 (Malvin Ruderman) 和查尔斯·基特尔 (Charles Kittel) 提出，作为一种解释在天然金属银中观察到的异常宽的核自旋共振线的方法。该理论使用二阶微扰理论来描述间接交换耦合，其中一个原子的核自旋通过超精细相互作用与传导电子相互作用，然后该传导电子与另一个核自旋相互作用，从而在两个核自旋之间产生关联能。(与核自旋通过超精细相互作用耦合到传导自旋不同，另一种情况是内部电子自旋通过交换相互作用耦合到传导自旋。) 该理论基于布洛赫波函数，因此仅适用于晶体系统。派生的相互作用采用以下形式：

$$H(\mathbf{R}_{ij}) = \frac{\mathbf{I}_i \cdot \mathbf{I}_j}{4} \frac{|\Delta_{k_m k_m}|^2 m^*}{(2\pi)^3 R_{ij}^4 \hbar^2} [2k_m R_{ij} \cos(2k_m R_{ij}) - \sin(2k_m R_{ij})]$$

其中  $H$  代表了哈密顿量， $R_{i,j}$  代表了  $i$  和  $j$  两原子核之间的距离， $\mathbf{I}_i$  为原子  $i$  的核自旋， $\Delta_{k_m k_m}$  表示超精细相互作用强度的矩阵元， $m^*$  表示晶格中的电子的有效质量， $k_m$  是费米动量。

### 1.2.5 Kondo 效应

近藤效应描述了金属中传导电子由于磁性杂质的散射，从而导致特性变化，即电阻率随温度变化的最小值 (如图1)。近藤俊彦首先解释了这种影响的原因，他将三阶微扰理论应用于该问题，以解释 s 轨道传导电子对杂质处 d 轨道电子的散射 (近藤模型)。电阻率  $\rho$  在考虑了近藤效应后对温度  $T$  的依赖关系，如下

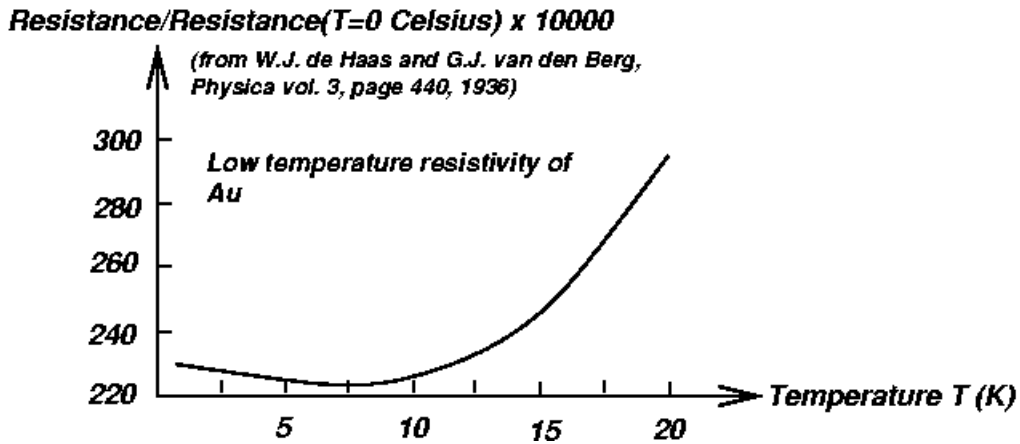


图 1: 含有少量铁杂质的金在低温下的行为

$$\rho(T) = \rho_0 + aT^2 + c_m \ln \frac{\mu}{T} + bT^5$$

其中  $\rho_0$  表示剩余电阻率,  $aT^2$  表示费米液体性质的贡献,  $bT^5$  表示晶格振动:  $a, b, c_m$  和  $\mu$  是与温度无关的量。近藤俊彦导出了第三项, 该项与温度和实验观察到的呈对数关系。

## 第 2 章 $\text{Ce}_3(\text{Pt/Pd})\text{In}_{11}$ 重费米子物理体系

### 2.1 超导与反铁磁共存

迄今为止研究的大多数铈重费米子化合物都有一个 Ce 离子的晶体学位点。在两个或者更多不等位点的化合物中, 相应 Ce 离子的不同的局部环境导致 Ce 的 4f 轨道态与周围的配合基和传导态的不同相互作用。这反过来导致不同的近藤耦合强度。因此, 在这些多位点铈化合物中, 可能会出现各种新的和复杂的现象, 其中基态的特征在于不同电子和磁性状态在微观尺度上的共存。如图2,  $\text{Ce}_3\text{PdIn}_{11}$  拥有两个 Ce 不等位点, 其中一个 Ce 位点表示出顺磁性 ( $T_N \approx 0.3\text{K}$ ) 而另一个 Ce 位点展现反铁磁性 ( $T_Q \approx 0.5\text{K}$ )。

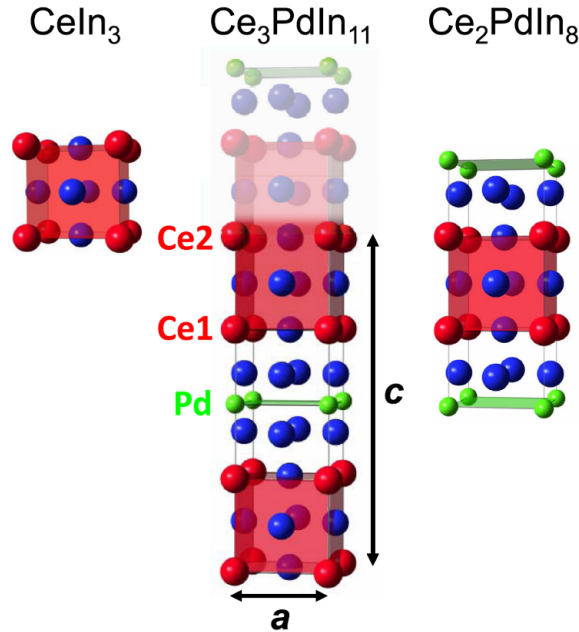


图 2: 图为  $\text{Ce}_3\text{PdIn}_{11}$  的晶格结构 (中间), 指出了 Ce 两个不等位点 Ce1 和 Ce2

$\text{Ce}_3\text{PdIn}_{11}$  和  $\text{Ce}_3\text{PtIn}_{11}$  都属于  $\text{Ce}_n\text{T}_m\text{In}_{3n+2m}$  类材料。包括了  $\text{CeCoIn}_5$ 、 $\text{CeRhIn}_8$  和  $\text{Ce}_2\text{RhIn}_8$  等一系列化合物。当 Pd 被 Pt 代替  $\text{Ce}_3\text{PdIn}_{11}$  和  $\text{Ce}_3\text{PtIn}_{11}$  晶体结构相似。在室温下的晶格常数分别是  $a = 4.687(4)\text{\AA}$  和  $c = 16.8422(12)\text{\AA}$ 。

同样  $\text{Ce}_3\text{PtIn}_{11}$  也拥有两个不等位点, 晶胞中的三个 Ce 离子分布在晶体学上不等价的位点内。两个 Ce 离子位于 Ce1 的位置, 其被类似于  $\text{Ce}_2\text{PtIn}_8$  中的 Ce 离子的配

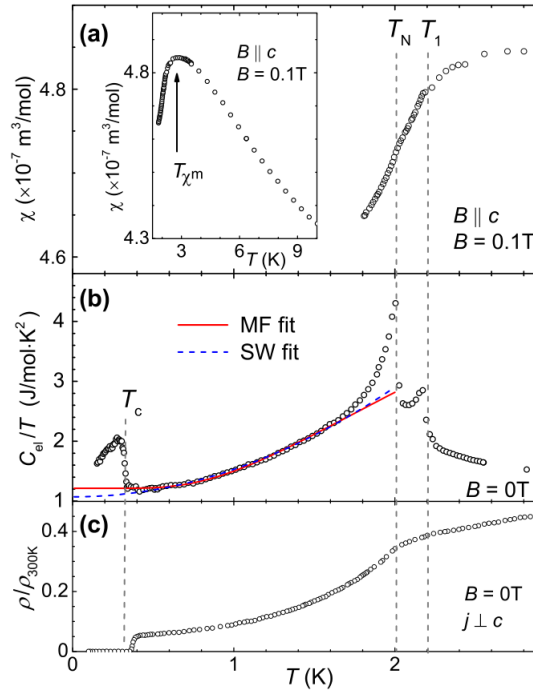


体包围。Ce2 的位置被一个 Ce 离子占据，离子拥有类似CeIn<sub>3</sub> 的环境。在无磁场的情况下，Ce<sub>3</sub>PtIn<sub>11</sub> 在  $T_1 \simeq 2.2K$  和  $T_N \simeq 2K$  处经历两次连续的变化，进入反铁磁状态 (AFM)，并在  $T_c \simeq 0.32K$  以下变为超导。

## 2.2 特性介绍

### 2.2.1 电阻率随温度变化

如图3在 300K 时，c 轴电阻率等于  $600\Omega cm$ ，大约是基平面  $\rho$  的 1.5 倍。随着温度降低  $\rho$  表现出随温度  $d\rho/dt > 0$  的弱相关性。低于 30K 电阻率下降很快标志着高温下的不连续近藤散射向低温下的重电子布洛赫态的变化的交叉点。



**图 3:** 概述了Ce<sub>3</sub>PtIn<sub>11</sub> 在  $T < 3K$  时的低温特性。(a) 在施加于 c 轴  $B = 0.1T$  的磁场中  $\chi$  与  $T$  的相关性。插入的部分显示了温度数据最大是 10K。箭头指出了  $\chi T$  的最大值。(b) 电子部分的比热  $C_{el}/T$  作为  $T$  的函数在零场中。红色的实线和蓝色的虚线分别是  $T < 0.8T_N$  到  $T = 0$  的一个均值场和自旋波的拟合。(c) 电阻归一化到其室温的值在  $B=0T$  和  $j \perp c$ 。

### 2.2.2 磁化系数

磁化系数作为温度的函数， $\chi(T)$  沿晶格 c 轴和垂直于晶格 c 轴的磁场中测量到具有弱各向异性，在温度为 3K 时  $\chi^{\parallel c}/\chi^{\perp c} \approx 1.25$ 。在超过 150K 时  $\chi(T)$  遵循 Curie-Weiss 定律两个方向的有效磁矩为  $\mu_{eff} = 2.60\mu_B/Ce$ ，与洪特规则对自由Ce<sup>3+</sup> 离子符合很好。Weiss 温度由对  $\theta_p^{\perp c} = -64K$  和  $\theta_p^{\parallel c} = -42K$  的曲线拟合到。图3显示了Ce<sub>3</sub>PtIn<sub>11</sub>

在低温下的环境压力热力学和传输特性。在图3(a) 插入显示了在一个大的温度范围低温下磁化率  $\chi^{\parallel c}$ 。

### 2.2.3 反铁磁和非常规超导

图3a 在更低温度下  $\chi(T)$  在  $T_1$  时急剧下降，第二个 AFM 转变在  $T \simeq 2.0K$  表现为 0.1T 数据中显示为弱凸状结构。

将  $C_{el}/T$  跳跃的重点定义为过渡温度，分别得到  $T_1 \simeq 2.2K$  和  $T_N \simeq 2K$ ，这些值与  $\chi(T)$  和  $\rho(T)$  的特征符合的很好 (图3中的虚线)。当  $T = 0.35K$  时  $C_{el}/T$  发生了明显的变化，这表示了电阻率数据证实了材料向超导相的转变。将这个跳跃中点定义为  $T_c \simeq 0.32K$ 。

为了估算通常比热系数  $\gamma_n$  外推 AFM 低温向  $T = 0$  变化的尾部 [图3b 红色虚线部分] 采用二阶平均场类型表达式， $C_{el}/T = \gamma_n + Ae^{-\Delta_{AFM}/T}$ 。拟合结果是  $\gamma_n = 1.21J/(molK^2)$ ， $A = 8.97J/(molK^2)$  和  $\Delta_{AFM} = 3.44K$  (拟合区间是  $0.44 < T < 1.6K$ )。拟合  $C_{el}/T \propto T^2$  (AFM 自旋波) 描述了相同区间的数据，具有相似的质量，但是  $\gamma_n$  减小了大约 10%。使用上述参数可以计算参数  $\Delta C/(\gamma T_c) \approx 0.7$ ，大约是 BCS 理论预期值的一半。我们可以在这里假设，参与超导的导带中的电子等量得来自两个 Ce 位点。

## 第 3 章 反铁磁性和非常规超导共存和竞争机制

### 3.1 非常规超导简介

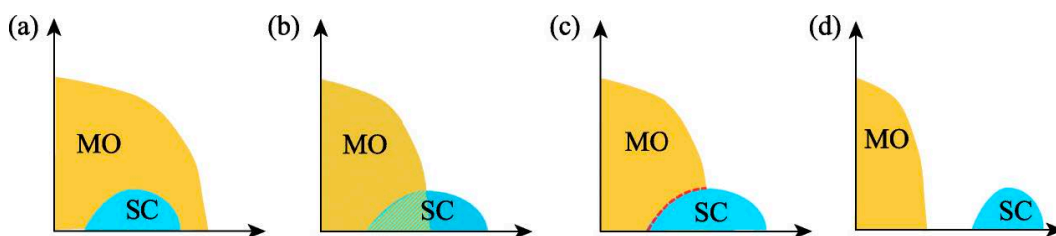
在极低温下一些材料表现出完全抗磁性以及零电阻情况，常规超导可以用 BCS (Bardeen-Cooper-Schrieffer) 理论解释其中的微观图像，电子形成库伯对，配对电子可以凝聚，形成一个相位相干的宏观量子态。由此我们可以得到超导的共性：(1) 常规材料的电子声子耦合较弱，转变温度  $T_c$  比较低；(2) 超导态的序参量 (超导电流密度) 的对称性和晶格保持一致。超导态有广泛的应用前景，但是受限于较低转变温度  $T_c$ ，难以大范围应用。

但是要提高  $T_c$  就得改变电子配对方式，对非常规超导尤其是重费米子超导体的研究表明，电子确实可以通过多种关联效应引起的临界涨落配对，比如自旋涨落、电荷密度涨落、价态涨落等，这些涨落足够强时，可以像声子一样在电子对之间产生净吸引效应，而克服电子之间的库伦排斥力并产生超导现象。并且大量的实验数据证实，无论是从能量尺度还是对称性角度，非常规超导和量子相变往往是一起的。

### 3.1.1 超导与反铁磁的竞争与共存

重费米子超导的一个重要研究价值在其丰富的相图，如图4所示，大部分材料的低温相图与铜氧化物、铁基高温超导体又非常类似，如图4c所示。但是最早发现Ce基超导的 $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  仍然存在争议，从其相图看，材料中的超导和反铁磁序是竞争关系而非共存。可以简单理解为Ce原子的仅有的一个f电子很难同时参与反铁磁长程有序和超导序，但是并不妨碍反铁磁涨落与超导的共存关系。

2011年O.Stockert等人通过非弹性中子散射实验给出了反铁磁涨落驱动 $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  超导的明确证据。在超导态，自旋激发能谱中看到了清晰的能隙，这由于磁交换能部分转变成了库伯对的凝聚能。同时在 $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$ 、 $\text{CePd}_2\text{Si}_2$ 、 $\text{CeAu}_2\text{Si}_2$ 等材料都在高压下、反铁磁消失的边界区域出现超导相，暗示了超导与反铁磁相的竞争关系。



**图 4:** 重费米子超导体中超导相 (SC) 与磁有序相 (MO) 的竞争/共存相图，横坐标为化学掺杂/替代、压力、偏压等调控手段，纵坐标为温度。(a) 代表超导态完全处于磁有序相内部，如  $\text{UGe}_2$ 、 $\text{YbRh}_2\text{Si}_2$  等；(b) 和 (c) 代表超导相从磁有序区域延伸到无磁性区域，但是 (b) 中超导与磁性可以在微观共存，如  $\text{CeRhIn}_5$ 、 $\text{CePt}_3\text{Si}$ 、 $\text{URhGe}$ 、 $\text{UCoGe}$ 、 $(\text{Ba},\text{K})\text{Fe}_2\text{As}_2$ 、 $\text{Ba}(\text{Fe},\text{Co})_2\text{As}_2$  等，而很多的 Ce 基、铜氧化物、铁基超导体的相图与 (c) 一致；(d) 代表远离磁有序相以后材料才会出现超导态，比如 Pu-基超导体、 $\text{CeCu}_2\text{Si}_2$  的高压超导相、 $\beta\text{-YbAlB}_4$  等，价态涨落可能与这些材料的超导有关

在 2000 年前后，发现的  $\text{CeMIn}_5$  ( $\text{M}=\text{Co}, \text{Rh}, \text{Ir}$ ) 极大的拓展了我们对重费米子超导以及反铁磁量子临界行为的认识。它们化学性质的特点在于 Co、Rh、Ir 这三种元素可以互相替代，获得连续可调的反铁磁态和超导态，同时超导和反铁磁相可以在微观共存。在  $\text{CeRhIn}_5$  中，电子的自旋和电荷自由度通过 Kondo 效应和 RKKY 相互作用紧密联系在一起，在图5中可以明显看到温度-压力-磁场相图中很好的反应出来。

## 第 4 章 利用多体计算方法模拟安德森模型的初步结果

### 4.1 模拟结果数据处理程序的编写

由于我们计算结果都存放在远程服务器上，所以我们在本地编写数据处理程序来帮助我们处理数据。

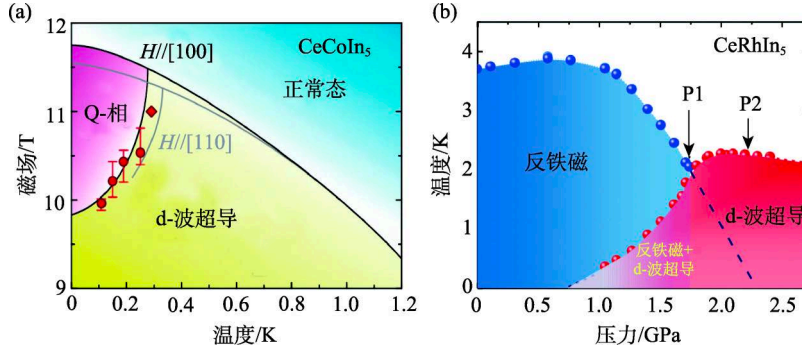


图 5: (a)CeCoIn<sub>5</sub> 磁场温度相图，高磁场下粉红色区域为 Q-相；(b)CeCoIn<sub>5</sub> 的压力-温度相图，中间粉色区域为超导与反铁磁共存的相

#### 4.1.1 运行所需环境

我们的编写环境在 MacOS 以及 Linux 下，程序语言是 python，如下是需要的运行 python 库，其中 pexpect 库无法在 Windows 环境下运行，需要安装 WSL2。

```
import pexpect
from pathlib import Path
import os
import matplotlib.pyplot as plt
import re
```

#### 4.1.2 程序编写思路

我们将数据从服务器下载到本地处理，利用 pexpect 库向终端提交 scp 命令将数据打包下载到本地处理。

```
cmdline = 'scp -r %s %s0%s:%s' % (filename, user, ip, dst_path)
```

接着我们定义了四个函数利用字符串格式化匹配数据文件名

```
def filename_U4(self, V1_value, V2s_value, Nsite, seed, T, mus):
    return "U4_V{}_tp{}_N{}_be{}_{}_mu{}.out".format(V1_value, V2s_value,
        Nsite, T, seed, mus)

def filename_local_orb(self, V1_value, V2s_value, Nsite, seed, T, mus):
    return "local_orb_U4_V{}_tp{}_N{}_be{}_{}_mu{}".format(V1_value,
        V2s_value, Nsite, T, seed, mus)

def filename_U4_tdm(self, V1_value, V2s_value, Nsite, seed, T, mus):
```

---

```

        return "U4_V{}_tp{}_N{}_be{}_{}_mu{}.tdm.out".format(V1_value,
            V2s_value, Nsite,T,seed, mus)

def filename_geom(self,V1_value,V2s_value,Nsite):
    return "geomU4_V{}_tp{}_N{}".format(V1_value,V2s_value,Nsite)

```

---

在获取文件名后利用 python 读取文件数据，进行字符串匹配，例如输出对.out 文件的数据输出如下，返回数据存放在列表中。

---

```

def data_out(self, path,filename, strs, numstart, numend):#输出结果
    data_list=[]
    a=[]
    b=[]
    with open(filename, 'r') as f:
        for i in f.readlines():
            data_list.append(i)
    for i in range(numstart,numend):
        k =data_list[i]
        result = "".join(k.split())
        a.append(result)
    for j in range(len(a)):
        if strs in a[j]:
            data_analysis.data_write(self,path,'result',data_list[j+numstart])
            b.append(data_list[j+numstart])
    return b

```

---

最后如下所示代码通过 matplotlib 库以及通过正则表达式对数据进行整合输出成图表，并且由于是面对对象的编程，本程序完成编写后可以为其他的程序调用，减轻了数据处理的负担。

---

```

def data_temperature(self,path,ls,dtaus,V1_value,V2s_value,Nstie,\\
    seed,mus,file):
    b=[]
    x=[]
    l=[]
    y=[]
    y0=[]
    err=[]
    y0err=[]

```

---

```

for i in range(len(ls)):
    b.append(ls[i]*dtaus[i])
    x.append(1/(ls[i]*dtaus[i]))
path1 = data_analysis.mkdir(self, path, V1_value, V2s_value, Nsite,mus)
    # 创建文件夹返回路径
path3 = path1 + '/' + file
for k in b:
    filename_tdm=data_analysis.filename_U4_tdm(self,V1_value,V2s_value,\\
        Nsite,seed,k,mus)
    if data_analysis.exit(self,path3,filename_tdm)==True:
        print('exit',filename_tdm)
    else:
        print("don't exit:",filename_tdm)
        data_analysis.download(self, '10.10.8.74', 'zhumo',
            '/home/zhumo/run_Ce3PtIn11/test', path1)
    l.append(data_analysis.data_tdm_out(self,path3,path3+'/'+
        filename_tdm,'Pd'))
for i in l:
    p=re.findall(r"\d+\.\?\d*",i[0])
    negative_p=re.findall(r"-\\d+\.\?\d*",i[0])
    print(p,negative_p)
    y.append(float(p[2])*10**float(p[3]))
    err.append(float(p[4])*10**float(negative_p[0]))
    y0.append(float(p[6])*10**float(p[7]))
    y0err.append(float(p[8])*10**float(negative_p[1]))
plt.figure()
plt.errorbar(x,y,yerr=err,fmt='-co')
plt.errorbar(x,y0,yerr=y0err,fmt=',',ecolor='b',capsize=3)
plt.xlabel('T')
plt.ylabel('Pd_Pd0')
plt.title(str(V1_value)+'-'+str(V2s_value),fontsize=12)
plt.legend(title=('Pd','Pd0'))
plt.ylim(0,0.5)
# plt.xlim(0,30)
plt.show()

```

---

## 4.2 反铁磁结构因子

我们使用 DQMC 对 PAM 模型的反铁磁结构因子进行验证。利用图6(b) 进行验证。其中参数如下

```
V1_value = 1.0
V2s_value = 1.0
V12s=0.005
Ncell=6
Nsite=Ncell**2
ls=[20,40,60,80,100,120]
dtaus=[0.1,0.1,0.1,0.1,0.1,0.1]
T=ls*dtaus
seed='s1234567'
mus=0.0
```

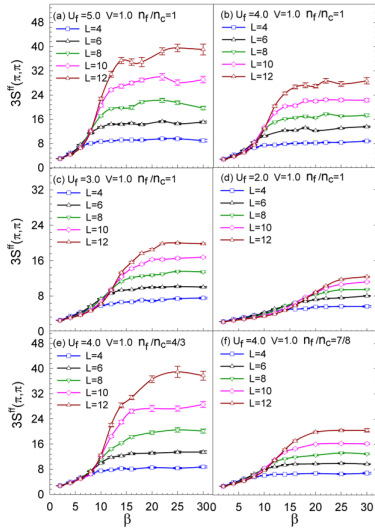
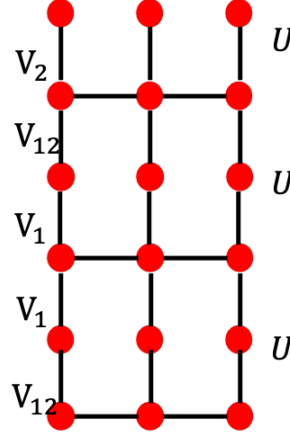


图 6: (a)-(d) 展示了在  $V=1$  时随着  $\beta$  的增加以及不同晶格大小的情况下 AF 结构因子的变化。



其中  $V1\_value$  是图7中的  $V_1$ ，同理  $V2s\_value$  是图7中的  $V_2$ 。通过服务器的模拟结果如图8所示。与文献中符合的较好。

## 4.3 超导计算结果

利用 DQMC 计算二维 Hubbard 模型的超导相，以下是设置参数

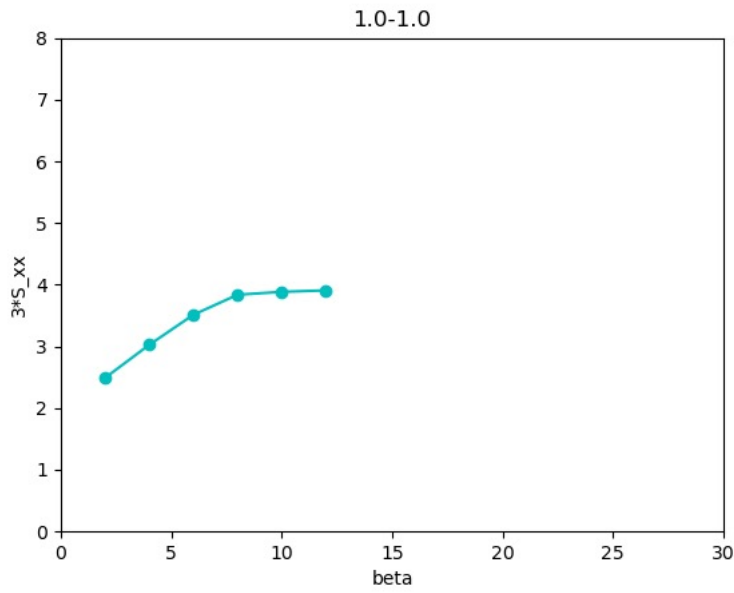


图 8: 横坐标  $\beta = 1/T$ ，而纵坐标为反铁磁结构因子。

```
V1_value = 1.0
V2s_value = 0.001
V12s=0.001
Ncell=4
Nsite=Ncell**2
ls=[20,40,60,80,100,120]
dtaus=[0.1,0.1,0.1,0.1,0.1,0.1]
T=ls*dtaus
seed='s1234567'
mus=0.0
```

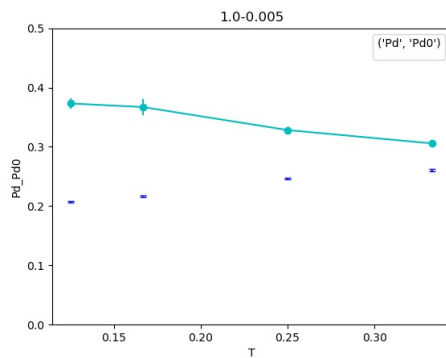


图 9: 不同温度下 Pd 和  $Pd_0$  的趋势图 (紫色为  $Pd_0$ , 蓝色为 Pd)



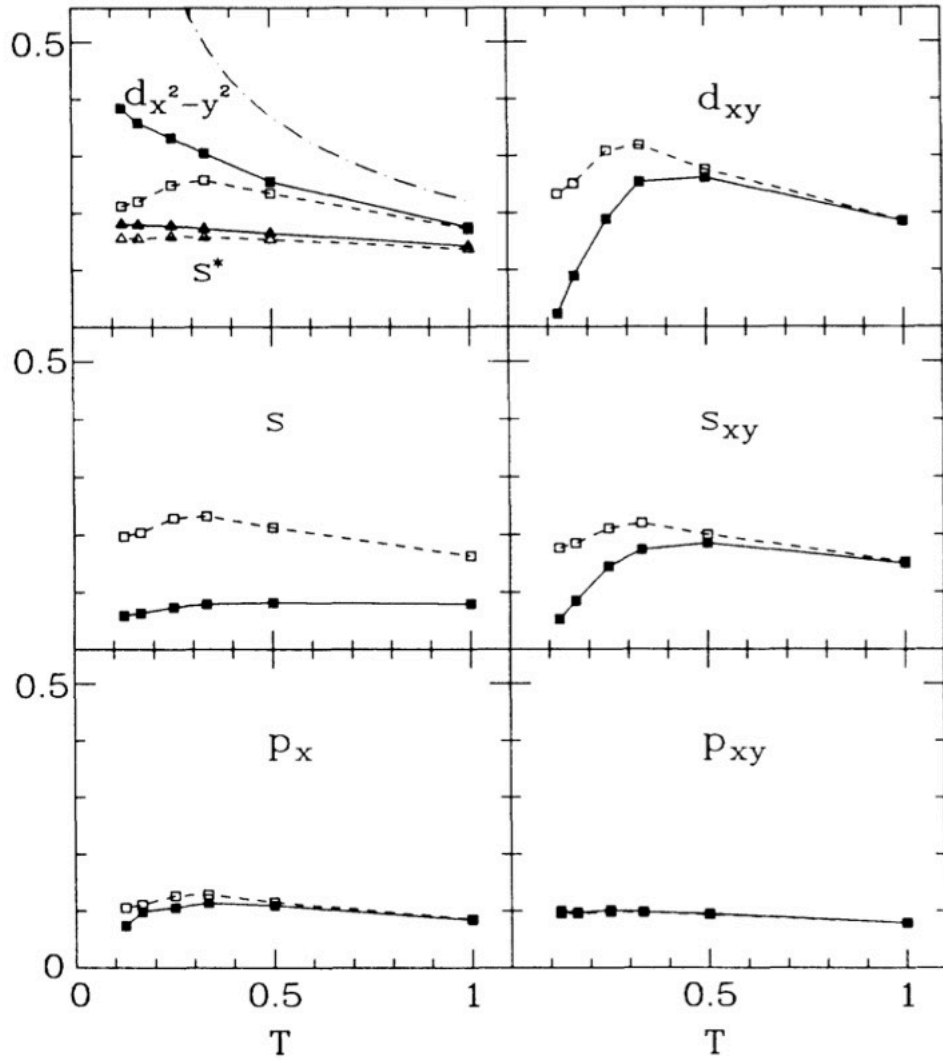


图 10: 在半填充 ( $\langle n \rangle = 1$ ) 下, 绘制了不同对场模式下对场磁化率  $P$  (实心点) 和不相关对场磁化率  $P$  (空心点) 与  $T$  的关系图。

利用图10验证结果正确性, 计算结果如图9所示。

## 第5章 总结与展望

### 5.1 总结

首先我们介绍了 $\text{Ce}_3(\text{Pd/Pt})\text{In}_{11}$ ，这种重费米子材料可以允许反铁磁和非常规超导的共存，并且两者还有竞争与共存机制，通过对这类材料的研究能够加深我们对重费米子材料超导机制的理解。并且我们对 Hubbard 模型近似，通过设置合适的参数，利用 DQMC 对周期安德森模型进行了模拟，与文献的结果符合较好。并且初步完成了对 Hubbard 模型的计算模拟，初步验证了在 $\text{Ce}_3(\text{Pd/Pt})\text{In}_{11}$  中超导和反铁磁的机制。

同时我们利用 python 对计算结果进行处理，成功实现了数据的自动化处理，极大方便了后期的数据备份以及分析。

### 5.2 未来展望

我们计划进一步通过设置参数利用 DQMC 对 Hubbard 模型进行进一步模拟，将 $\text{Ce}_3(\text{Pd/Pt})\text{In}_{11}$  材料中的超导与反铁磁共存与竞争机制通过计算机模拟出来。

对于反铁磁与超导态在微观上是如何相互耦合的，我们目前还没能很好的解释，也是我们未来的研究方向。

同样对于重费米子材料的研究，例如非常规超导的测量以及调控，能够拓展我们对强关联物理的理解，并且由于重费米子材料中的相互作用比较复杂，目前还未形成一个朴实的模型。目前主要有唯象自旋涨落理论、涨落交换近似理论、轨道选择理论、自洽重整化理论等多种理解思路。重费米子材料在当前的科学研究中发挥着重要作用

## 参考文献

- [1] Kratochvílová M, Prokleška J, Uhlířová K, et al. Coexistence of antiferromagnetism and superconductivity in heavy fermion cerium compound  $\text{Ce}_3\text{PtIn}_{11}$ [J]. Scientific reports, 2015, 5(1): 1-11.
- [2] Wu W, Tremblay A M S. d-wave superconductivity in the frustrated two-dimensional periodic Anderson model[J]. Physical Review X, 2015, 5(1): 011019.
- [3] Prokleška J, Kratochvílová M, Uhlířová K, et al. Magnetism, superconductivity, and quantum criticality in the multisite cerium heavy-fermion compound  $\text{Ce}_3\text{PtIn}_{11}$ [J]. Physical Review B, 2015, 92(16): 161114.
- [4] Custers J, Diviši M, Kratochvílová M. Quantum critical behavior and superconductivity in new multi-site cerium heavy fermion compound  $\text{Ce}_3\text{PtIn}_{11}$ [C]//Journal of Physics: Conference Series. IOP Publishing, 2016, 683(1): 012005.
- [5] Das D, Gnida D, Bochenek Ł, et al. Magnetic field driven complex phase diagram of antiferromagnetic heavy-fermion superconductor  $\text{Ce}_3\text{PtIn}_{11}$ [J]. Scientific Reports, 2018, 8(1): 1-10.
- [6] Kambe S, Sakai H, Tokunaga Y, et al. In 115 NQR study with evidence for two magnetic quantum critical points in dual Ce site superconductor  $\text{Ce}_3\text{PtIn}_{11}$ [J]. Physical Review B, 2020, 101(8): 081103.
- [7] Fukazawa H, Kumeda K, Shioda N, et al. Successive magnetic transitions in the heavy-fermion superconductor  $\text{Ce}_3\text{PtIn}_{11}$  studied by In 115 nuclear quadrupole resonance[J]. Physical Review B, 2020, 102(16): 165124.
- [8] Shioda N, Kumeda K, Fukazawa H, et al. Determination of the magnetic q vectors in the heavy fermion superconductor  $\text{Ce}_3\text{PtIn}_{11}$ [J]. Physical Review B, 2021, 104(24): 245119.
- [9] 沈斌, 袁辉球. 磁性量子相变 [J]. 物理, 2020, 49(9): 570-578.

## 致谢

感谢母校的栽培，感谢老师们的尊尊教诲。感谢施老师的指导和关心，他没有给我太大的压力，也没有让我过于放松，他能够因材施教，作业恰到好处。

## 附录

- 1 本文用到的代码都托管在 Github，获取链接：<https://github.com/absop/mlam>