

金多-皮尔斯跃迁伴非对称型区域边界能隙形成

Kazumasa Hattori¹ and Hiroaki Kusunose²¹Department of physics, Tokyo Metropolitan University, 1-1 Minami-Osawa, Hachioji, Tokyo 192-0397, Japan²Department of Physics, Meiji University, Kawasaki 214-8571, Japan

我们研究了关联电子系统中的非对称空间群对称性破缺。在非对称对称性的条件下，人们已经知道，在布里渊区边界处存在电子 Bloch 态的简并。当系统经历相变进入有序相并且打破非对称对称性时，这种简并会被消除。即使序参量是均匀的情况下也是如此。我们指出这一普遍特征导致了在非对称系统中的各种均匀分布 Peierls 跃迁。特别是，我们展示了这样的 Peierls 能隙形成机制可以与均匀各向异性 Kondo 单态的形成相伴发生。这解释了在 CeCoSi 中观察到的隐藏电序。

引言。—相关电子在低温下表现出各种对称性破缺相。带有排序向量 $\mathbf{Q}$ 的电荷密度波 (DW) 和键序的原型可通过 Peierls 机制很好地理解¹⁻⁵⁾。平移对称性的破坏产生了两个子晶格，这将原始 Brillouin 区域 (BZ) 压缩到了 $\mathbf{Q}/2$ 处。这导致在新的 BZ 边界处形成了单粒子能量间隙。这样的电荷 DW 不仅可以通过电子关联⁶⁻⁹⁾ 和嵌套费米面^{10,11)} 驱动，还可以通过与其他自由度的耦合；通常是晶格声子¹²⁻¹⁴⁾ 和离子二聚体化^{15,16)}。

各种 DW 阶参数也可以通过用相应的自由度如自旋¹⁵⁻¹⁸⁾、轨道¹⁹⁻²¹⁾ 以及各种多重极²²⁻²⁴⁾ 来替换电荷自由度而类似地理解。当 $\mathbf{Q}$ 不可公度时，阶参数会出现长周期调制。几十年来，在多铁性材料²⁵⁾ 的背景下以及最近在斯格明子晶格的莫尔现象²⁶⁾ 中研究了这种不可公度 DW 阶。

当排序向量 $\mathbf{Q}$ 为零时，晶格平移不变，即单元胞未发生变化。认为没有强烈的驱动力导致“DW”有序，并且在单元胞内调制阶参数。这是因为单粒子谱中没有形成间隙的对称性原因。因此，是否发生 $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ 有序取决于所考虑系统的细节。然而，当系统具有非等腰对称性 (nSSs) 时，这种简单的预期并不成立。众所周知，在非等腰系统中，由对称操作保护的额外简并出现在布里渊区边界上²⁷⁾。即使通过带有 $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ 的有序也能打破这种 nSS。这导致在原始具有 nSSs 系统中的电子态简并的布里渊区边界形成部分间隙。²⁸⁾

在本通信中，我们展示了晶格单元中的亚晶格自

由度可以引起非对称科恩晶体系统中的 $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ “皮尔斯”跃迁。我们将通过使用简单的二维模型来引入一个直观的图像。然后，我们将讨论这种相变确实实现在非对称四边形化合物 CeCoSi²⁹⁾ 中，在那里我们使用了具有最近邻科恩交换相互作用的扩展科恩晶格。我们表明向各向异性科恩单态相转变导致在 BZ 边界上形成单粒子能隙。据我们所知，CeCoSi 是第一个实际材料候选者，其中由 Ghaemi 和 Senthil³⁰⁾ 理论上提出的跨位点各向异性科恩单态“序”得以实现。

一维锯齿模型。—为了直观地理解非对称型布里渊区边界能隙的形成，让我们讨论沿 x 方向具有两个晶格点的一维锯齿链中的简单模型，如最近所讨论的²⁸⁾。图 1 展示了三种代表性的电子轨道模式及其能量色散 ϵ_{k_x} ：(a) 无对称性破缺的均匀各向同性配置，(b) 由阶梯奇数势引起的各向异性配置，以及 (c) 子晶格对称性被破坏的情况。对于 (a) 和 (b)，仍然存在非对称操作，例如，绕 x 方向的 $(C_{2x}|\frac{a}{2})$ 次螺旋旋转操作，其

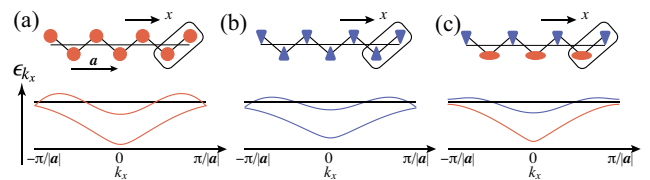


图 1. 示意图电子构型和能量色散 ϵ_{k_x} 沿着 k_x 。(a) 各向同性和 (b) 奇偶混合局部构型，保留了锯齿链中的 nSSs。(c) 子晶格对称性破坏构型，在此构型中没有 nSSs。水平线代表化学势。

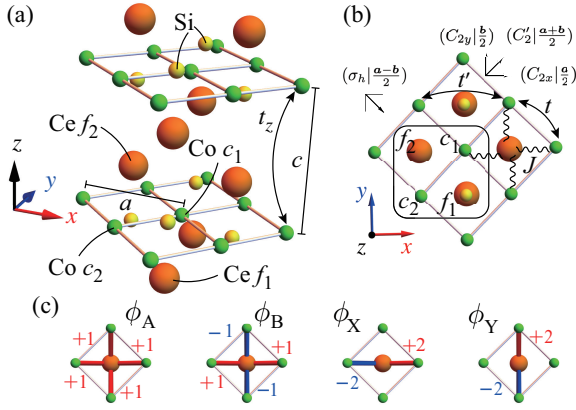


图 2. (a) 铈钴硅的晶体结构。(b) 在 xy 平面上单层的顶视图。晶胞由黑色线条包围，跳跃参数 t 和 t' ，以及 Kondo 耦合 J 被示意性地表示出来。(c) f_1 位点周围的局部序参量， $\phi_\alpha = \frac{1}{4} \sum_{i-j} C_{\alpha,i-j} \phi_{i-j}$ ： $\alpha = A, B, X$ 或 Y 。键旁边的数字表示线性组合中的系数 $C_{\alpha,i-j}$ 。类似的定义适用于 f_2 站点的 $\{\phi'\}$ 。

中 $\mathbf{a}$ 是基本平移矢量。由于 BZ 边界波矢在 $(C_{2x}|\frac{a}{2})$ 下保持不变，在 $k_x = \pi/|\mathbf{a}|$ 处至少存在两次简并。相反，在图 1(c) 所示的情况下，非对称操作丢失，导致 BZ 边界的能隙打开。

这些示例告诉我们一个可能的机制，即在非对称 Kondo 晶格系统中的 $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ DW 状态。假设近局域电子在其布里渊区边界附近具有费米面 (FSs)，在那里存在非对称简并性。参见图 1 中的水平线 (化学势)。这些 FSs 倾向于在 nSS 被某些电子序破坏时被带隙化，并且获得正的能量增益 [图 1(c)]。关键因素是，nSS 保证了布里渊区边界处的简并性和近局域性质，因此在 Kondo 系统中实现了巨大的能量增益。

这个铈钴硅化合物。—CeCoSi 是四方 Kondo 格子系统之一，其空间群为 $P4/nmm(D_{4h}^7, \text{No. } 129)^{29,31,32}$ ，如图 2(a) 所示。存在四种非对称操作： $g_h \equiv (\sigma_h|\frac{a+b}{2})$ ， $g_x \equiv (C_{2x}|\frac{a}{2})$ ， $g_y \equiv (C_{2y}|\frac{b}{2})$ 和 $g_d \equiv (C_2'|\frac{a+b}{2})$ 。见图 2(b)。该化合物在转变温度 $T_0 \approx 13\text{K}$ 和 $T_N \approx 9.4\text{K}$ ^{33,34} 处表现出两个连续的相变。最低- T -相已被确认为一种简单的奈尔有序，磁矩大致沿着 $x(a)$ 方向。³⁵ 详细 X 射线 ³⁶ 和核磁共振/核四极共振 ^{37,38} 实验已经阐明了对于 $T_N < T < T_0$ 的中间- T -相是一种均匀电序，伴随有晶格畸变，其对称性为 $\{yz, zx\}$ 类型 ³⁹。

该顺序的机制尚不清楚，尽管早期的理论研

究 ^{40,41} 表明，在 Ce 位点处的 f 电子的晶场 (CEF) 基态是 Γ_7 克来默双重态 ⁴²，没有四极矩矩阵元。此外，第一和第二激发 CEF 态分别位于 $\Delta E \approx 122(\Gamma_7)$ K 和 163 K (Γ_6)。难以想象在 $T_0 \ll \Delta E$ 处由基态和激发 CEF 状态之间的四极矩引起的四极矩序。

另一个问题是压力 (P) 对 $T_0^{29,31}$ 的影响。随着 P 的增加， T_0 迅速增至 $T \approx 40\text{K}$ ，在 $P \approx 1.5\text{GPa}$ 处与 T_N 中的行为形成对比；它几乎不受 P 影响，甚至在 $P \approx 1.5\text{GPa}$ 时消失。然后， T_0 在高于 $P \approx 1.5\text{GPa}$ 的情况下迅速下降，并在 $P \approx 2.2\text{GPa}$ 处消失。据报道，在更高的压力下，低温时可能再次发生结构转变，大约在 $P \sim 4\text{GPa}$ 以上 ^{43,44}，这似乎是一个纯粹的结构转变，与电子起源无关，不同于较低压力下的相。

同时，电阻率在 T_0^{29} 附近表现出一个驼峰，这表明一些 FSs 被打开了能隙。这种能隙打开的特征也在光学反射光谱 ⁴⁵ 中被报道过。此外，非弹性中子实验报告在环境压力下大约 $\omega \approx 2.5\text{meV}$ 处存在动量无关的激发。随着 P 的增加，激发能量也随之增加，这与 T_0^{35} 的增加一致。也很可能是 T_0 与科尔多能标 T_K 相关，而 T_N ，与 RKKY 相互作用成正比，并非 ⁴⁶。

上述谜团可以通过将低于 T_0 的中间阶与 Kondo 屏蔽关联起来得到解决。由于 CeCoSi 中的传导电子主要由 $\text{Co}d$ 电子组成，因此 Kondo 耦合是位间形式的。确实，这样的耦合已在第一性原理计算 ⁴⁷ 中报道。nSS 破缺可以通过实现非异性位点 Kondo 单态来发生，其有序矢量为 $\mathbf{Q} = \mathbf{0}$ ，正如在引言 ³⁰ 中提到的那样。这样的顺序可以打破 CeCoSi 中的 nSS，并且电阻率中的驼峰是由与阶参数成正比的 BZ 边界间隙引起的，只有当高压下阶参数足够大时才会变得显著。关于在 $P > 1.5\text{GPa}$ 下 T_0 的快速下降，最近报道的 ⁴⁴ 中所述铈价态的突然变化最有可能抑制了科尔多昂能量尺度。在这篇通讯中，我们专注于 T_0 处的有序机制，并不讨论 $T < T_N$ 的价态转变和平凡的尼埃尔序，以便使我们的分析更加清晰。

模型.—我们研究了具有格点间耦合 J_{ij} 的 Kondo 晶格模型，该耦合存在于第 i 个位置的局域自旋 $\mathbf{S}_i$ 和第 j 个位置的传导电子自旋 $\mathbf{s}_j$ 之间： $H_K = H_c + \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_j$ 。这里， H_c 是传导电子跃迁项和化学势 μ 项。 $\mathbf{s}_j = \frac{1}{2} \sum_{\sigma\sigma'} (\hat{\sigma})_{\sigma\sigma'} c_{j\sigma}^\dagger c_{j\sigma'}$ 是传导电子自旋算符，其中 $c_{j\sigma}$ ($\sigma = \uparrow, \downarrow$) 是第 j 个位置的传导电子湮灭算符，而 $\hat{\sigma}$ 是 Pauli 矩阵的向量。众所周知，从属粒子平均场近似可

以捕捉 Kondo 屏蔽的精髓⁴⁸⁾，我们采用 Abrikosov 费米子表示局部自旋为 $\mathbf{S}_i = \frac{1}{2} \sum_{\sigma,\sigma'=\uparrow,\downarrow} f_{i\sigma}^\dagger (\hat{\sigma})_{\sigma\sigma'} f_{i\sigma'}$ ，在局部约束下， $\sum_{\sigma} f_{i\sigma}^\dagger f_{i\sigma} \equiv \sum_{\sigma} n_{fi\sigma} = 1$ 。⁴⁹⁾ 为此引入拉格朗日乘数 λ_i 通过将项 $\sum_i \lambda_i (\sum_{\sigma} n_{fi\sigma} - 1)$ 添加到 H_K 中。

现在，我们讨论 CeCoSi 的简化模型。过渡金属位点上的导电电子具有磁性关联，正如在 LaMnSi⁵⁰⁾ 和 CeMnSi^{51,52)} 中报道的那样，在室温下存在反铁磁有序。我们构建了一个最小模型，其中包括 Co 位点处的 d 电子和 Ce 位点处的局域自旋，为了简单起见忽略了 Si 位点上的电子以及轨道自由度 [图 2(b)]。我们明确表示位置 $\mathbf{r}_j$ 和亚格子指数 $m = 1, 2$ 为 $f_{m\sigma}(\mathbf{r}_j)$ 和 $c_{m\sigma}(\mathbf{r}_j)$ 。通过使用傅里叶变换 $f_{km\sigma} = N^{-1/2} \sum_j e^{ik \cdot \mathbf{r}_j} f_{m\sigma}(\mathbf{r}_j)$ 和对 c 算子的变换，哈密顿量写为 $H = \sum_{k\sigma} \psi_{k\sigma}^\dagger \mathcal{H}_k \psi_{k\sigma}$ ，其中 $\psi_{k\sigma}^\dagger = (f_{k1\sigma}^\dagger, f_{k2\sigma}^\dagger, c_{k1\sigma}^\dagger, c_{k2\sigma}^\dagger)$ 和

$$\mathcal{H}_k = \begin{bmatrix} \hat{\Lambda} & -4\hat{J} \\ -4\hat{J}^\dagger & \epsilon_k^0 \hat{\sigma}^0 - 4tc'_x c'_y \hat{\sigma}^x \end{bmatrix}, \quad \hat{\Lambda} = \text{diag}(\lambda_1, \lambda_2). \quad (1)$$

这里， $\epsilon_k^0 = -2t'(c_x + c_y) - 2t_z c_z - \mu$ ，且 $c_{x,y} = \cos(k_{x,y}a)$ ， $c'_{x,y} = \cos(k_{x,y}a/2)$ ，以及 $c_z = \cos(k_z c)$ 。 $t(t')$ 是在 xy 平面上的 (下一个) 近邻跃迁，而 t_z 是沿 z 方向近邻跃迁。在这项研究中，我们使用了参数化方法来描述 $x^2 - y^2$ 轨道上的 $c_{1,2}$ 电子，这些电子向 Ce 原子扩散； $t < 0$ 和 $t', t_z > 0$ 。在第一性原理计算⁴⁷⁾ 中，报告了 Coxy 轨道在接近 FS 的电子状态中的重要性。我们的参数化方法也可以通过替换 $k_z \rightarrow k_z + \pi$ 和粒子空穴变换来应用于此类情况。 $\hat{J}$ 矩阵由

$$\hat{J} = J \begin{bmatrix} (\phi_A - \phi_B)c'_y + i\phi_Y s'_y & (\phi_A + \phi_B)c'_x + i\phi_X s'_x \\ (\phi'_A + \phi'_B)c'_x + i\phi'_X s'_x & (\phi'_A - \phi'_B)c'_y + i\phi'_Y s'_y \end{bmatrix}, \quad (2)$$

给出，其中 $s'_{x,y} = \sin(k_{x,y}a/2)$ 。我们介绍了图 2(c) 中列出的 $\langle \phi_{i-j} \rangle$ 的线性组合：对于包括 f_1 的键使用 $\phi \equiv (\phi_A, \phi_B, \phi_X, \phi_Y)$ ，以及包括 f_2 算子的 $\phi' \equiv (\phi'_A, \phi'_B, \phi'_X, \phi'_Y)$ 。它们通常是复变量。在某些情况下，平凡的局域规范变换 $f_{km\sigma} \rightarrow e^{i\theta_m} f_{km\sigma}$ 使得非磁性/磁性和宇称偶/奇序之间的区别模糊不清。在这种情况下，我们通常将它们视为非磁性和宇称偶的情况。

二级相变温度 T_c 可以通过以下线性自洽方程从高温 T 紊相确定

$$1 = \frac{J}{N} \sum_k \left[\frac{g_{k+}^2}{\epsilon_{k+}} \tanh\left(\frac{\epsilon_{k+}}{2T_c}\right) + \frac{g_{k-}^2}{\epsilon_{k-}} \tanh\left(\frac{\epsilon_{k-}}{2T_c}\right) \right], \quad (3)$$

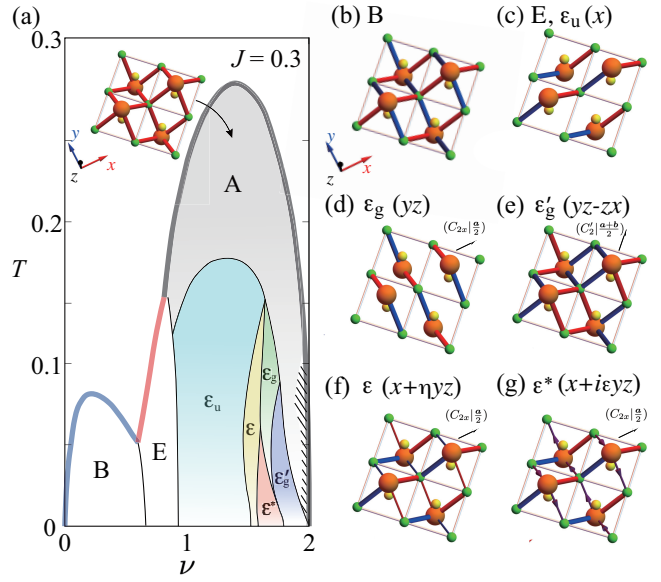


图 3. (a) 相图作为 T 和传导电子填充 ν 的函数对于 $t = -0.5, t' = 0.3, t_z = 0.1$ 和 $J = 0.3$ 。 ϕ 的示意图配置也显示出来了。(b)–(g) ϕ 的示意图配置。键的颜色和粗细分别表示 ϕ 的符号和大小。球体是如图 2 所示的 Ce、Co 和 Si 原子。为了简单起见，展示了主要的对称性破缺场。在 (g) 中，箭头指的是纯虚部序参量，朝向 Ce (大橙色球体) 的方向为正。

其中 $\epsilon_{k\pm} = \epsilon_k^0 \pm 4tc'_x c'_y$ 是导电电子能带色散对于 $\langle \phi_{ij} \rangle = 0$ ，而 $g_{k\pm}$ 是依赖于序参数的形式因子作为 $g_{k\pm} = c'_x \pm c'_y$ 对于 ϕ_A ， $g_{k\pm} = c'_x \mp c'_y$ 对于 ϕ_B 和 $g_{k+} = g_{k-} = \sqrt{2}s'_{x(y)}$ 对于 $\phi_{X(Y)}$ 序。由于 $T \geq T_c$ 存在子晶格规范对称性，因此只需考虑 $\phi_\alpha = \phi'_\alpha$ ($\alpha = A, B, X, Y$)，具有 $\phi_\alpha = -\phi'_\alpha$ 的阶给出相同的 T_c 。在 T_c 以下，稳定构型以自洽的方式确定。对于仅有“单个不可约表示”的相。序参数如 $\phi = \phi' = (\phi, 0, 0, 0)$ ，退简 ($\phi' \leftrightarrow -\phi'$) 即使在有序相中也保留下来。参见表 I 中的 A、B 和 E 相。请注意，均匀的 ϕ_A “序”与 A_{1g} 不可约表示相关，这是一个众所周知的现象，归因于平均场近似，因为这并没有打破任何对称性；应将其视为 Kondo 能量尺度 T_K 。

结果。—首先，我们将展示作为 T 函数的相图，并通过改变每个单元格的传导电子填充 ν 来在图 3 中显示。存在七种对称性破缺相：B 和 E 具有 $\phi_A = \phi'_A = 0$ 和 $\epsilon_{g,u}, \epsilon'_g \epsilon$ 以及具有有限 ϕ_A 和 ϕ'_A 的 ϵ^* ，如图 3(b)–(g) 和表 I 所示。A 相是如上所述的普通 Kondo 单态过渡。在 ϵ^* 相中，由于 $\phi_{X,Y}$ 是复数，时间反演对称性也被破坏了。基本上， T_c 由方程 (3) 给出，除非化学势接近带顶 $\nu \sim 2$ ，并且向 ϵ'_g 相的转变是一阶的。我们还发现了一个无均匀解的相分离区域 [图 3(a) 中的阴影区

表 I. 序参量候选者与不可约表示。(第四列) 在 D_{4h} 群中, 以及有序状态下剩余的代表性 nSS 操作 (第五列)。 δ 和 η 是实数。由于局部规范变换 $\phi' \leftrightarrow -\phi$, 具有 gerade 和 ungerade 的构型对于 A、B 和 E 来说是简并的。请注意, ε_u 、 ε 和 ε^* 相位破坏了反演对称性, 最后一个还破坏了时间反演对称性。

type	ϕ	ϕ'	irreps.	nSS	symmetry
A	(1, 0, 0, 0)	ϕ	A_{1g}	$g_{h,x,y,d}$	1
B	(0, 1, 0, 0)	ϕ	B_{1g}	$g_{h,x,y}$	$x^2 - y^2$
E	(0, 0, ± 1 , 1)	$-\phi$	E_g	g_h	$yz \pm zx$
ε_u	$(\phi, -\delta, 1, 0)$	ϕ	E_u	g_h, g_x	x
	$(\phi, +\delta, 0, 1)$	ϕ		g_h, g_y	y
ε_g	$(\phi, +\delta, 0, 1)$	$(\phi, +\delta, 0, -1)$	E_g	g_x	yz
	$(\phi, -\delta, 1, 0)$	$(\phi, -\delta, -1, 0)$		g_y	zx
ε'_g	$(\phi, 0, 1, 1)$	$(\phi, 0, -1, -1)$	E_g	g_d	$yz + zx$
	$(\phi, 0, 1, -1)$	$(\phi, 0, -1, 1)$		g_d	$yz - zx$
ε	$(\phi, -\delta, 1, \eta)$	$(\phi, -\delta, 1, -\eta)$	$E_u + E_g$	g_x	$x + \eta yz$
	$(\phi, +\delta, \eta, 1)$	$(\phi, +\delta, -\eta, 1)$		g_y	$y + \eta zx$
ε^*	$(\phi, +\delta, 1, i\eta)$	$(\phi, +\delta, 1, -i\eta)$	$E_u + iE_g$	g_x	$x + i\eta yz$
	$(\phi, -\delta, i\eta, 1)$	$(\phi, -\delta, -i\eta, 1)$		g_y	$y + i\eta zx$

域]。对于 $\nu \leq 1$, 各向异性的科恩相 B 和 E 单独出现。当化学势处于 nSS 简并区域 ($\nu \geq 1$) 时, 普通的科恩屏蔽 (A 相) 首先发生, 然后各种类型的 nSS 破坏序可以产生。

图 4 展示了杂化带的能带色散, 对于 (a) ε_g 相和 (b) ε'_g 相。颜色代表了几组 T 的色散, 显示出 BZ 边界间隙打开。见 X'-M 和 A-R' 在 (a), 此外, 在 (b) 中还有 X-M 和 A-R。在 A 相中, 没有对称性破缺, 并且所有 nSS 都保留。这确保了电子带简并, 例如, 在每个自旋的 BZ 边界上的 $k_z = 0$ 和 π 平面上。当 nSSs 被破坏时, 这些简并会被解除。对于如图 4(a) 所示具有 yz 类型序的 ε_g 相, 沿 X'-M 和 A-R' 的简并被解除, 而沿 X-M 和 A-R 则没有。这些结果可以这样理解。沿着 X-M 和 A-R, 能量本征态也可以通过镜像操作 ($y \rightarrow -y$) 的本征值来表征。在这个相位中, 通过 $g_x = (C_{2x}|\frac{a}{2})$ 对称性操作, $k_y \rightarrow -k_y$ 以及镜像本征值的符号被反转。这意味着在 X、R、M 和 A 点, 具有相反镜像本征值的两个本征态是简并的。对于 $k_x = \pi$ 平面上的其他一般 $\mathbf{k}$ 点, 反演对称性 ($\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$) 的存在确保了简并性。查看 X-R 和 R'-X' 在图 4(a) 中的区别。相比之下, 在 X'-M 和 A-R' 上, 本征态不能被视为镜像本征态。因此, 上述推理不成立。当 $\phi_X = -\phi'_X$

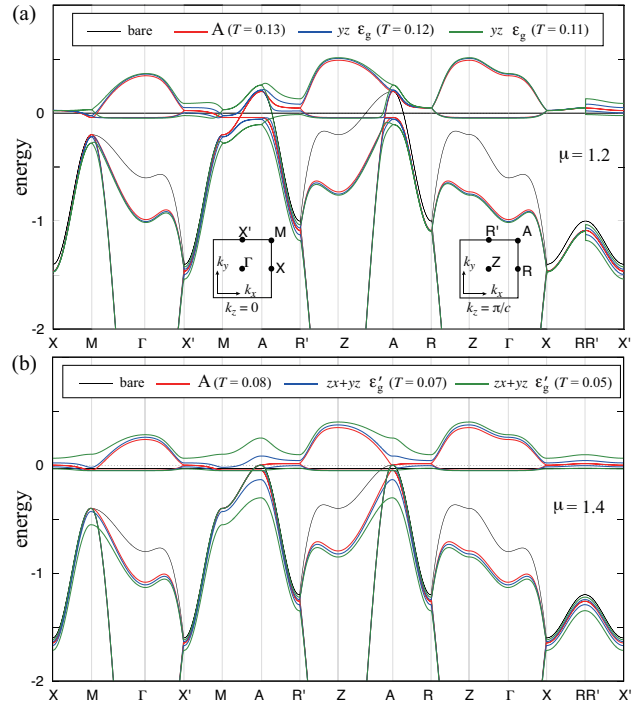


图 4. 带分散沿着高对称路径对于 (a) $\mu = 1.2$ 和 (b) $\mu = 1.4$, 其中 J 和 t 的情况与图 3 中相同。位置标签在 (a) 中的 $k_z = 0$ 和 π/c 平面上表示。裸分散 (细黑线) 和 A 相的分散 (粗红线) 在 BZ 边界处有简并。在 (a) 中, yz 类型 ε_g 相出现在 $T \sim 0.12$ 之下, 并且 $k_y = \pi$ 的 BZ 边界简并被解除, 而 $k_x = \pi$ 的则保持不变。在 (b) 中, $zx + yz$ 类型 ε'_g 相出现在 $T \sim 0.07$ 之下且没有 BZ 边界简并。

和 $\phi_Y = -\phi'_Y$ 都是有限时, 布里渊区边界简并被解除。请注意, 仍然存在对角二线螺旋对称性 g_d , 但这不会在布里渊区边界引起简并。

至于 B 和 ε_u 相, 存在水平滑移对称性 g_h , 因此保留了布里渊区边界的简并。

讨论。—我们已经证明, 各向异性的 Kondo 单重态相如 ε_g 和 ε'_g 可以在非对称 Kondo 系统中实现。事实上, ε'_g 相与 CeCoSi 中报道的 $T_N < T < T_0$ 情况一致。由于 ε_g 和 ε'_g 相之间的差异仅仅是二维不可约表示内的不同线性组合, 它们的能量相近, 自然会彼此相邻出现。当从高- T 相过渡为二级相变时, 其中一个被青睐, 这是由自由能中的四阶系数决定的^{34,39}。值得注意的是, 在磁场 $\parallel$ 下确实实现了 ε_g 类型的相变³⁴。

在最近的一次⁵³ 拉曼散射实验中, 结果被解释为两个 Ce 位点上的 f 电子之间直接 (自旋依赖) 杂化的表现, 以及在中子实验中 T_0 下方 $\omega \sim 2.5\text{meV}$ 的激发之间的关系。从我们的角度来看, 这些激发可以与

伴随 BZ 边界间隙打开形成的各向异性科尔多单态相关联，但需要对这一问题进行详细的分析。尽管抑制机制 T_0 未被包含在我们的模型中，且随着 J 的增加， T_c 最终也有所增加，我们预计由于压力下的 Ce 价态变化，这种抑制必然会发生，正如 x 射线衍射研究⁴⁴⁾ 和最近的计算⁵⁴⁾ 所建议的那样。本文中探讨的电子不稳定性 and 通过电子-声子耦合实现的实际晶格畸变之间的相互作用也留待未来的研究。

摘要。—我们研究了具有格间耦合的科尔多系统中的非对称性破缺。各向异性科尔多单态秩序可以解释在 CeCoSi 中观察到的神秘秩序，例如压力下转变温度的增加和间隙形成的特征，以及低能标下局部电子状态中四极自由度的缺失。我们的结果不仅提出了 CeCoSi 中可能的微观阶参数，而且还提出了一种独特的 BZ 间隙形成机制，类似于具有非对称性简并性的科尔多晶格系统中的 Peierls 机制。

致谢。—作者衷心感谢与田田、矢永、山田、石藤、日高、松村和长谷川关于 CeCoSi 的有益讨论。本工作得到了日本学术振兴会科学研究补助金（补助金号：JP23K20824, JP23K03288, JP23H04866 和 JP23H04869）的支持。

- 1) R. E. Peierls: Quantum Theory of Solids (Clarendon Press, Oxford, 1955).
- 2) W. L. McMillan: Phys. Rev. B 12 (1975) 1187.
- 3) G. Grüner: Rev. Mod. Phys. 60 (1988) 1129.
- 4) G. Gruner: Density Waves in Solids (Perseus Publishing, 2000).
- 5) X. Zhu, Y. Cao, J. Zhang, E. W. Plummer, and J. Guo: Proceedings of the National Academy of Sciences 112 (2015) 2367.
- 6) E. Dagotto: Rev. Mod. Phys. 66 (1994) 763.
- 7) P. A. Lee, N. Nagaosa, and X.-G. Wen: Rev. Mod. Phys. 78 (2006) 17.
- 8) Y. Nakata, K. Sugawara, A. Chainani, H. Oka, C. Bao, S. Zhou, P.-Y. Chuang, C.-M. Cheng, T. Kawakami, Y. Saruta, T. Fukumura, S. Zhou, T. Takahashi, and T. Sato: Nature Communications 12 (2021) 5873.

- 9) A. Ptok, S. Basak, A. Kobialka, M. Sternik, J. Łażewski, P. T. Jochym, A. M. Oleś, and P. Piekarczyk: Phys. Rev. Mater. 8 (2024) L080601.
- 10) M.-H. Whangbo, E. Canadell, P. Foury, and J. P. Pouget: Science 252 (1991) 96.
- 11) M. D. Johannes and I. I. Mazin: Phys. Rev. B 77 (2008) 165135.
- 12) H. M. Hill, S. Chowdhury, J. R. Simpson, A. F. Rigosi, D. B. Newell, H. Berger, F. Tavazza, and A. R. Hight Walker: Phys. Rev. B 99 (2019) 174110.
- 13) Y. Xie, Y. Li, P. Bourges, A. Ivanov, Z. Ye, J.-X. Yin, M. Z. Hasan, A. Luo, Y. Yao, Z. Wang, G. Xu, and P. Dai: Phys. Rev. B 105 (2022) L140501.
- 14) S. Wu, X. Xu, F.-T. Huang, T. Birol, S.-W. Cheong, and G. Blumberg: Phys. Rev. B 111 (2025) 224505.
- 15) G. M. Pastor and M. B. Lepetit: Bond-Order-Wave versus Spin-Density-Wave Dimerization in Polyacetylene (Springer US, 1998), pp. 45–52.
- 16) S. Caprara: physica status solidi (b) 216 (1999) 1089.
- 17) K. Kuboki and H. Fukuyama: J. Phys. Soc. Jpn. 56 (1987) 3126.
- 18) E. Fawcett: Rev. Mod. Phys. 60 (1988) 209.
- 19) T. Onimaru, T. Sakakibara, N. Aso, H. Yoshizawa, H. S. Suzuki, and T. Takeuchi: Phys. Rev. Lett. 94 (2005) 197201.
- 20) X.-L. Yu, D.-Y. Liu, Y.-M. Quan, J. Wu, H.-Q. Lin, K. Chang, and L.-J. Zou: Phys. Rev. B 96 (2017) 125138.
- 21) R. Z. Xu, X. Du, J. S. Zhou, X. Gu, Q. Q. Zhang, Y. D. Li, W. X. Zhao, F. W. Zheng, M. Arita, K. Shimada, T. K. Kim, C. Cacho, Y. F. Guo, Z. K. Liu, Y. L. Chen, and L. X. Yang: npj Quantum Materials 8 (2023) 44.
- 22) T. Takimoto: J. Phys. Soc. Jpn. 75 (2006) 034714.
- 23) D. Hafner, P. Khanenko, E.-O. Eljaouhari, R. Kuchler, J. Banda, N. Bannor, T. Lühmann, J. F. Landaeta, S. Mishra, I. Sheikin, E. Hassinger, S. Khim, C. Geibel, G. Zwicky, and M. Brando: Phys. Rev. X 12 (2022) 011023.
- 24) G. Labeyrie, J. G. M. Walker, G. R. M. Robb, R. Kaiser, and T. Ackemann: Phys. Rev. Lett. 132 (2024) 143402.
- 25) M. Fiebig, T. Lottermoser, D. Meier, and M. Trassin: Nature Reviews Materials 1 (2016) 16046.
- 26) Y. Xiao, J. Liu, and L. Fu: Matter 3 (2020) 1142.
- 27) M. S. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, and A. Jorio: Group Theory: Application to the Physics of Condensed Matter (Springer-Verlag Berlin Heidelberg, 2008).
- 28) T. Ishitobi: J. Phys. Soc. Jpn. 94 (2025) 075001.
- 29) E. Lengyel, M. Nicklas, N. Caroca-Canales, and C. Geibel: Phys. Rev. B 88 (2013) 155137.
- 30) P. Ghaemi and T. Senthil: Phys. Rev. B 75 (2007) 144412.
- 31) H. Tanida, Y. Muro, and T. Matsumura: J. Phys. Soc. Jpn. 87 (2018) 023705.
- 32) H. Tanida, K. Mitsumoto, Y. Muro, T. Fukuhara, Y. Kawamura, A. Kondo, K. Kindo, Y. Matsumoto, T. Namiki, T. Kuwai, and T. Matsumura: J. Phys. Soc. Jpn. 88 (2019) 054716.

- 33) H. Hidaka, S. Yanagiya, E. Hayasaka, Y. Kaneko, T. Yanagisawa, H. Tanida, and H. Amitsuka: J. Phys. Soc. Jpn. 91 (2022) 094701.
- 34) H. Hidaka, S. Yanagiya, S. Onodera, T. Yanagisawa, H. Amitsuka, H. Tanida, and T. Ishitobi: J. Phys. Soc. Jpn. 94 (2025) 034706.
- 35) S. E. Nikitin, D. G. Franco, J. Kwon, R. Bewley, A. Podlesnyak, A. Hoser, M. M. Koza, C. Geibel, and O. Stockert: Phys. Rev. B. 101 (2020) 214426.
- 36) T. Matsumura, S. Kishida, M. Tsukagoshi, Y. Kawamura, H. Nakao, and H. Tanida: J. Phys. Soc. Jpn. 91 (2022) 064704.
- 37) M. Manago, H. Kotegawa, H. Tou, H. Harima, and H. Tanida: J. Phys. Soc. Jpn. 90 (2021) 023702.
- 38) M. Manago, A. Ishigaki, H. Tou, H. Harima, H. Tanida, and H. Kotegawa: Phys. Rev. B. 108 (2023) 085118.
- 39) T. Ishitobi: arXiv.254.13188 (2025).
- 40) M. Yatsushiro and S. Hayami: J. Phys. Soc. Jpn. 89 (2020) 013703.
- 41) M. Yatsushiro and S. Hayami: J. Phys. Soc. Jpn. 91 (2022) 104701.
- 42) T. Kanda, H. Ishikawa, S. Imajo, K. Kindo, H. Tanida, and Y. Kohama: Phys. Rev. B. 109 (2024) 174402.
- 43) Y. Kawamura, H. Tanida, R. Ueda, J. Hayashi, K. Takeda, and C. Sekine: J. Phys. Soc. Jpn. 89 (2020) 054702.
- 44) Y. Kawamura, K. Ikeda, A. N. B. A. Dalan, J. Hayashi, K. Takeda, C. Sekine, T. Matsumura, J. Gouchi, Y. Uwatoko, T. Tomita, H. Takahashi, and H. Tanida: J. Phys. Soc. Jpn. 91 (2022) 064714.
- 45) S.-I. Kimura, H. Watanabe, S. Tatsukawa, and H. Tanida: J. Phys. Soc. Jpn. 92 (2023) 043704.
- 46) S. Doniach: Physica 91 (1977) 231.
- 47) T. Yamada, Y. Yanagi, and K. Mitsumoto: J. Phys. Soc. Jpn. 93 (2024) 053703.
- 48) C. M. Varma and Y. Yafet: Phys. Rev. B. 13 (1976) 2950.
- 49) A. A. Abrikosov: Physics 2 (1965) 5.
- 50) H. Tanida, H. Matsuoka, K. Mitsumoto, Y. Muro, T. Fukuhara, and H. Harima: J. Phys. Soc. Jpn. 91 (2022) 013704.
- 51) H. Tanida, H. Matsuoka, Y. Kawamura, and K. Mitsumoto: J. Phys. Soc. Jpn. 92 (2023) 044703.
- 52) H. Tanida, Y. Yanagi, T. Yamada, K. Mitsumoto, N. Higa, and T. Matsumura: J. Phys. Soc. Jpn. 93 (2024) 073703.
- 53) O. Moulding, M. Shimizu, A. Pawbake, Y. Gao, S. Ramakrishnan, G. Garbarino, N. Caroca-Canales, J. Debray, C. Faugeras, C. Geibel, Y. Yanase, and M.-A. Méasson: arXiv.2505.03249 (2025).
- 54) S.-K. Zhang, Y. Xu, G. Li, J. Wang, Z. Zhou, and Y. An: arXiv.2502.13585 (2025).