

直接利用磁场和温度精确确定磁性材料

 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的电阻率*

刘雅洁†

(嘉兴学院南湖学院数理与信息工程系, 嘉兴 314001)

(2012年6月15日收到; 2012年7月30日收到修改稿)

电阻率是研究钙钛矿结构锰氧化物磁性材料的重要参数之一, 它与温度和外加磁场有密切关系. 本文的工作之一是寻找合适的方法, 确定在金属 - 绝缘体转换过程中, 不同磁场情况下, 材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的电阻率随温度变化的数学解析关系. 通过非线性数值拟合, 找到了满足这一关系的函数为双曲正切修正的高斯函数. 同时, 获得金属 - 绝缘体转换时居里温度 T_C 满足的微分方程以及与该温度对应的最大电阻率 $\rho_{\max}$. 本文的另一个工作是寻求最大电阻率 $\rho_{\max}$ 和磁场之间的函数关系, 发现采用波尔兹曼函数可以精确反映两者之间的数学联系. 两项工作得到的数学拟合结果与实验数据之间的最小相关系数为 0.998, 最大平均相对误差 4.35%, 说明数据拟合的结果与实验结果十分符合.

关键词: 钙钛矿结构锰氧化物, 电阻率, 转换温度, 非线性数值拟合

PACS: 76.50.+g, 72.90.+y, 75.60.-d, 61.05.-a

DOI: 10.7498/aps.62.017601

1 引言

1993 年, Helmut 等发现钙钛矿结构锰氧化物具有巨大的磁电阻效应, 这个发现使得对锰氧化物的研究在 20 世纪 90 年代复苏, 并蓬勃发展^[1-5]. 由于锰氧化物的磁阻随着外加磁场的变化有极高的响应, 远超过以往的巨磁阻 (giant magnetoresistance, GMR) 效应, 因而被称为庞磁阻 (colossal magnetoresistance, CMR) 效应. 所谓的钙钛矿结构锰氧化物具有 $R_{1-x}A_x\text{MnO}_3$ 的结构, 其中 R 表示三价稀土阳离子, 如 La^{3+} , Pr^{3+} , Nd^{3+} , Sm^{3+} 或 Bi^{3+} , A 表示碱金属阳离子, 如 Sr^{2+} , Ca^{2+} , Ba^{2+} , Pb^{2+} 或 Na^+ , K^+ , Li^+ . 在组分中, 当 $x \approx 0.3$ 时, 化合物基态为铁磁金属相, 呈现半金属铁磁行为. 随着温度的变化, 伴随着顺磁 - 铁磁相变, 在居里温度 T_C 附近, 电阻率 ρ 出现一个峰值, 在 T_C 之上变为绝缘体, 表现出金属 - 绝缘体相变. 这是由于 $R_{1-x}A_x\text{MnO}_3$ 的多层结构所致的丰富相变以及复相同存的现象, 非常值得深入研究.

得深入研究.

$\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ ^[3] 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ ^[6] 等是较为典型的庞磁阻材料, 在较低的温度 (近乎室温) 时, 这些材料可表现出较大的磁阻. 系统地研究这些材料的电阻率 ρ 随温度和外加磁场的变化规律, 有助于解释材料的结构, 提供各种成分之间相互作用的合理信息, 建立合适的理论模型或检验已有的理论模型的合理性. 通过分析电阻率 ρ 作为温度的函数的表达形式, 可以预测磁性材料发生金属 - 绝缘体相变时的转换温度, 这个温度即居里温度 T_C . 金属 - 绝缘体之间的转变温度 T_C 与外加磁场关系密切^[3,6], 因此, 与温度相关的金属 - 绝缘体的转换是反映材料电磁特性的重要参数, 是一个值得从多角度研究的问题.

讨论一个物理问题的有效方法很多, 其中一种是获取能够描述这一问题的数学表达形式, 通过该表达式定量分析各物理量之间的关系, 引申出一些有意义的结论. 然而, 现有的一些理论模型^[7-9] 适合讨论高温 ($T > T_C$) 时电阻率 ρ 随温度的变化情

* 浙江省教育厅科技项目 (批准号: Y201122757) 资助的课题.

† 通讯作者. E-mail: lyj0919@mail.zjxu.edu.cn

况,能够较好地解释该温度段内温度变化时的传导机理,结果也与实验结论较为符合,但有一定的局限性^[10].

在实际研究中,人们对钙钛矿结构锰氧化物的电阻率 ρ 随温度的变化越来越感兴趣,而涉及这方面的研究却非常少.一般情况下,可以通过两种途径得到电阻率 ρ 在不同磁场情况下随温度变化关系.其一是直接寻找各物理量满足的拟合函数,另一种是建立一个数学模型,通过求解各物理量之间的关系方程得到函数关系.然而,在现有的理论框架下,精确表述钙钛矿结构锰氧化物的电阻率 ρ 在不同磁场情况下随温度变化关系是一件十分困难的事情^[11–13].一些已有的经验公式只能反映一些特定的温度区域和特殊的输运机理^[14–19]下的结果,如表达式 $\rho = \rho_0 + \rho_2 T^2$ 在低温金属态与实验结果相符合,第二项 $\rho_2 T^2$ 被认为与电子(electron-electron)之间的散射过程有关^[14]; Venkataiah等^[15]使用表达式 $\rho = \rho_0 + \rho_{2.5} T^{2.5}$ 来拟合低温电阻态,第二项 $\rho_{2.5} T^{2.5}$ 来自电子和磁子(electron-magnon)之间的散射贡献.而Li等^[16]进一步认为,磁子与载流子(magnon-carrier)之间的散射也会出现在金属区域.表达式 $\rho = \rho_0 + \rho_2 T^2 + \rho_{4.5} T^{4.5}$ 与铁磁区域的实验结论相符合, $\rho_{4.5} T^{4.5}$ 体现了双磁子-电子(two-magnon-electron)之间的散射贡献^[15,17].变程跳跃模型(VRH)^[18]在略高于转换温度 T_C 的区域与实验符合较好,VRH模型使用了Mott定律,即 $\rho = \rho_0 \exp(T_0/T)^{1/4}$.但是,以上所有的近似表达均无法精确说明不同磁场情况下钙钛矿结构锰氧化物材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 在整个实验温度区间内电阻率 ρ 随温度的连续变化关系.这说明,电阻率虽然是反映新材料性能的重要物理参数,但从理论计算的途径精确获得电阻率 ρ 随温度的连续变化关系却是非常困难的.

本文通过非线性拟合的方法,给出一个数学函数,用于确定 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 在不同磁场下,金属-绝缘体转换过程中的电阻率 ρ 随温度的变化关系.这个数学函数为修正的高斯型函数,亦即在高斯函数的基础上加上双曲正切函数的修正项.通过与实验曲线进行比较发现,以该函数反映的在不同磁场情况下电阻率 ρ 随温度的变化曲线与实验结果十分符合.另外,本文还讨论了居里温度 T_C 对应的最大电阻率 $\rho_{\max}$ 随磁场的变化关系,给出了最大电阻率 $\rho_{\max}$ 随外加磁场变化的函数.这些结论不仅能够说明钙钛矿结构锰氧化物材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的电阻

率随温度的变化关系,还能够通过外加磁场的数值,预判该磁场对应的最大电阻率 $\rho_{\max}$.本文所得到的结论较上面所述文献的结论复杂,这从另外的角度说明,到目前为止,人们对钙钛矿结构锰氧化物材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的结构的认识还远远不够,这是因为影响钙钛矿结构锰氧化物材料的电阻率 ρ 的因素很多,如成分、温度、外加磁场、晶粒大小等.因此,本文得到的结论能够为校验并修正已有模型提供有益的帮助.

2 数据讨论

一些电阻率在不同的磁场中随温度变化的数据已经给出^[3,6],图1(a)和(b)分别是通过回归分析得到的低温时 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 在不同磁场下电阻率随温度的变化关系由图1可以看出,10条曲线有一个共同的特点,即每条曲线有一个峰值温度 T_C ,对应材料的最大电阻率 $\rho_{\max}$.电阻率的测量值与温度有关是磁阻材料的一个典型特征,居里温度 T_C 是一个特征温度,标志着材料的金属-绝缘体的转换温度,即温度在0— T_C 的变化过程中,电阻率 ρ 逐渐增大,在高于 T_C 的温度,电阻率 ρ 又逐渐减少,所以每条曲线有一个峰值.

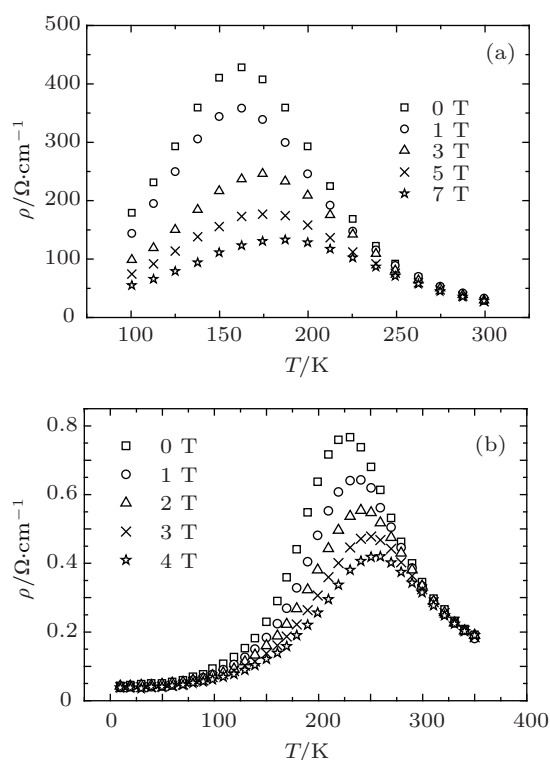


图1 不同磁场情况下 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的电阻率随温度的变化关系 (a) $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$; (b) $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$

我们通过分析图 1 给出的磁性材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 在不同磁场的曲线形状,发现用以下修正的高斯函数可以精确地描述图 1 给出的实验关系,表达式如下:

$$\rho = A \exp\left(-\frac{(T-T_p)^2}{2w}\right) + \frac{\rho_0}{2}(1 + \tanh k(T-T_d)), \quad (1)$$

这里, A , ρ_0 , T_p 和 T_d 是待优化的大于零的参数. 对材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$, $k = 0.08$, 而对材料 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$, $k = 0.006$. 当温度 $T \rightarrow \infty$ 时, $\rho \rightarrow \rho_0$, 且 ρ_0 是 ρ 的极小值,说明在温度极高时,材料的电阻率是 ρ_0 . T_p 和 T_d 是两个不相等的参数,它们共同影响着金属-绝缘体转变时的居里温度 T_C 以及对应的电阻率的极大值 $\rho_{\max}$ 的取值. 居里温度 T_C 可以通过数值求解超越方程 (2) 得到,也可以用做图法获得,然后将其值带入 (1) 式,即可得到对应的 $\rho_{\max}$. T_C 满足的超越方程为

$$\exp\left(-\frac{(T-T_p)^2}{2w}\right)(T-T_p)$$

$$= \frac{k w \rho_0}{2A} \frac{1}{\cosh^2 k(T-T_d)}. \quad (2)$$

按照 (1) 式给出的关系,对图 1 的所有情况进行分析,得到了不同情况下的优化参数和居里温度 T_C ,并列于表 1 中. 同时,为了说明 (1) 式给出的方法与实验结论的拟合程度,在表 1 中同时列出相关系数 (R) 和平均相对误差 (ARE). 平均相对误差,定义为

$$ARE = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \frac{|\rho_{\text{im}} - \rho_{\text{is}}|}{\rho_{\text{im}}} \cdot 100\%,$$

这里 ρ_{im} 表示实验结果, ρ_{is} 表示拟合的数据. 在表 1 中,最小的相关系数为 0.998,最大的平均相对误差为 4.35%,说明模型 (1) 给出的拟合结果与实验数据符合得非常好,其结果如图 2 所示. 这样一个良好的拟合结果说明,由 (2) 式可以很方便地得到金属-绝缘体转换温度 T_C ,进而使用模型 (1) 可以得到磁性材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 在不同磁场下的电阻率的极大值 $\rho_{\max}$ 和极小值 ρ_0 .

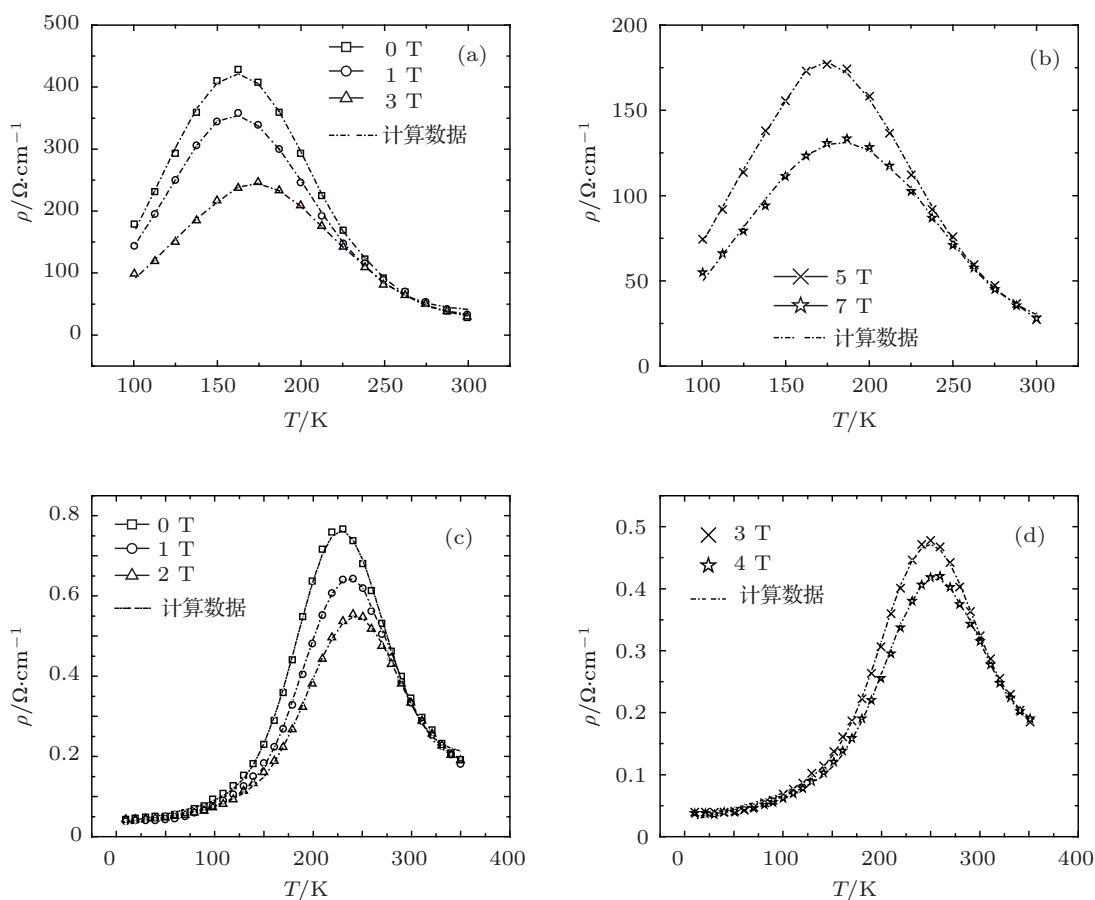


图 2 不同磁场情况下 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的电阻率随温度的变化关系的实验数据 (图中散点) 与模型 (1) 的理论计算 (图中相应的点划线) 的比较 (a) 和 (b) 材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 在 0, 1, 3, 5, 7 T 时的结果; (c) 和 (d) 材料 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 在 0, 1, 2, 3, 4 T 时的结果

表 1 10 条曲线的电阻率 ρ 在不同的磁场下随温度的变化关系

材料	磁场/T	函数形式	T_c/K	R	$ARE/\%$
$\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$	0	$\rho = 421.3 \exp\left(-\frac{(T-161.9)^2}{4092}\right) + 14.10(1 + \tanh(0.08(T-230.2)))$	161.9	0.999	3.07
$\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$	1	$\rho = 318.3 \exp\left(-\frac{(T-159.0)^2}{4254.2}\right) + 19.20(1 + \tanh(0.08(T-140.4)))$	160.5	0.999	3.53
$\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$	3	$\rho = 223.8 \exp\left(-\frac{(T-168.3)^2}{5067.2}\right) + 12.01(1 + \tanh(0.08(T-157.8)))$	172.0	0.999	2.40
$\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$	5	$\rho = 159.3 \exp\left(-\frac{(T-169.0)^2}{5992.2}\right) + 10.25(1 + \tanh(0.08(T-156.3)))$	172.9	0.999	2.20
$\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$	7	$\rho = 131.4 \exp\left(-\frac{(T-183.6)^2}{7134.8}\right) + 3.99(1 + \tanh(0.08(T-276.0)))$	183.6	0.998	1.90
$\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$	0	$\rho = 0.6 \exp\left(-\frac{(T-227.0)^2}{3582}\right) + 0.11(1 + \tanh(0.006(T-141.0)))$	228.5	0.999	4.20
$\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$	1	$\rho = 0.5 \exp\left(-\frac{(T-235.0)^2}{3794}\right) + 0.10(1 + \tanh(0.006(T-148.0)))$	236.7	0.999	4.35
$\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$	2	$\rho = 0.4 \exp\left(-\frac{(T-241.0)^2}{3922}\right) + 0.10(1 + \tanh(0.006(T-138.0)))$	242.9	0.999	3.79
$\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$	3	$\rho = 0.33 \exp\left(-\frac{(T-247.0)^2}{4180}\right) + 0.09(1 + \tanh(0.006(T-140.0)))$	249.3	0.999	4.09
$\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$	4	$\rho = 0.28 \exp\left(-\frac{(T-252.0)^2}{4218}\right) + 0.09(1 + \tanh(0.006(T-146.0)))$	254.6	0.999	3.48

R 为相关系数; ARE 为平均相对误差.

磁场的大小影响着磁性材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 电阻率的极大值 $\rho_{\max}$. 从图 1 或图 2 均可以看出, 磁场强度的增加导致电阻率的极大值 $\rho_{\max}$ 减小, 体现了典型的庞磁阻效应. 锰氧化物是一种典型的强关联电子体系, 与电子电荷、轨道和自旋自由度之间相互高度耦合, 寻找磁场与电阻率的极大值 $\rho_{\max}$ 之间的数学函数关系也是一个值得考虑的问题. 图 3(a), (b) 显示了材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的电阻率的极大值 $\rho_{\max}$ 随磁场的变化关系, 这个变化关系可用 Boltzmann 函数表示:

$$\rho_{\max} = A_1 + \frac{A_2}{1 + \exp\left[\left(\frac{B}{B_a} - A_3\right)\right]}, \quad (3)$$

式中, A_1, A_2, A_3 和 B_a 是依赖材料的可优化参数. 图 3(a) 是由上式给出的材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 的最大电阻率 $\rho_{\max}$ 与磁场之间的关系与由模型 (1) 得到结果的比较. 最大电阻率 $\rho_{\max}$ 与磁场之间的函数关系满足

$$\rho_{\max} = 67.76 + \frac{1507.5}{1 + \exp\left[\left(\frac{B}{3.58} + 1.05\right)\right]}, \quad (4)$$

比较结果表明, 两者之间的相关系数为 0.9999, 平均误差为 0.64%. 同样, 图 3(b) 是 (3) 式决定的材料 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的最大电阻率 $\rho_{\max}$ 与磁场之间

的关系与由模型 (1) 得到的结果的比较, 最大电阻率 $\rho_{\max}$ 与磁场之间的函数关系满足

$$\rho_{\max} = 0.29 + \frac{1.94}{1 + \exp\left[\left(\frac{B}{2.38} + 0.62\right)\right]}, \quad (5)$$

比较结果表明, 两者之间的相关系数为 0.9999, 平均误差为 0.35%.

目前, 还没有一个普适的理论来解释结构复杂的庞磁阻材料形成及变化机理. 双交换模型^[20,21]可对锰氧化物铁磁转变温度 T_c 附近庞磁阻现象进行直观解释, 成功地解释了铁磁性和金属性在 $R_{1-x}A_x\text{MnO}_3$ ($x = 0.2, 0.3, 0.4, 0.5$) 中同时存在的现象以及伴随着绝缘体 - 金属相变的铁磁相变过程. 然而, 庞磁阻锰氧化物的物理机理远比双交换模型复杂, 有许多双交换模型失效的例子, 如与 CMR 效应相关的 T_c 之上的绝缘体行为、电荷有序和轨道有序态等. 为了合理解释实验结果, 必将引入更复杂的作用机理.

我们使用 Boltzmann 模型成功地从庞磁电阻锰氧化物 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的实验数据中获得了的最大电阻率随温度、磁场的变化函数关系. 最大电阻率随着磁场的增加而减少, 说明在这个变化过程中载流子向材料两端漂移的浓度增加了. 这个现象可以这样理解, 与霍尔效应一样, 磁场中的载流子受到洛伦兹力的作用发生偏转,

在材料两端产生积聚电荷并产生霍尔电场. 达到稳态时, 如果某一速度载流子受到的霍尔电场力的作用和洛伦兹力作用刚好抵消, 那么小于或大于该速度的载流子将发生偏转, 因而沿外加电场方向 (电流方向) 运动的载流子数量将减少, 电阻增大. 另外, Boltzmann 模型适合用于在加载磁场之前预测最大电阻率, 在设计磁场传感器、磁记录、磁泡检测器等应用方面有一定的辅助作用. 如最早采用的锰铁磁体制成的读写磁头, 其磁致电阻的变化仅为 1%—2% 之间, 读取数据要求一定强度的磁场. 若磁道密度太大, 较强的磁场会带来误读信息的缺陷. 为了使硬盘具有大容量、小型化的特点, 要求读写的磁信号在尽可能弱的情况下就能导致磁性材料发生非常显著的电阻变化. 若根据方程 (3) 预测到最大电阻率, 可以根据电阻率的最大和最小的变化区间, 合理选择外加磁场. 如今, 笔记本电脑、音乐播放器等各类数码电子产品中所装备的硬盘, 基本上都应用了巨磁阻效应.

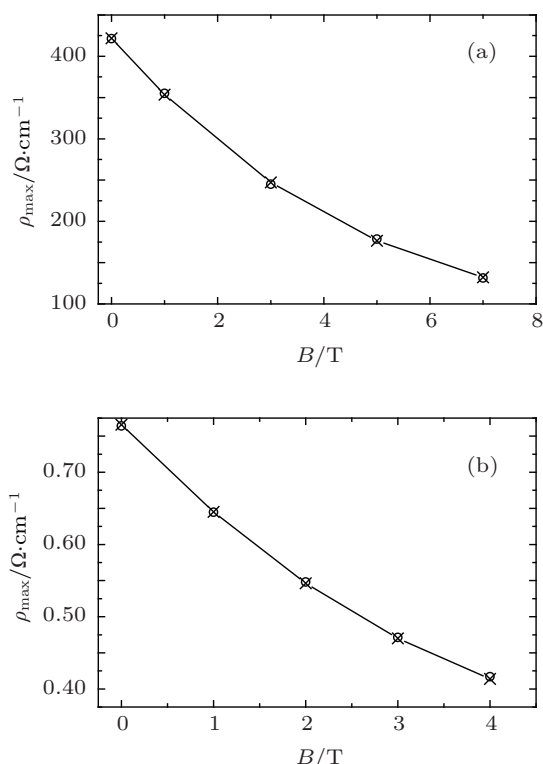


图 3 材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的最大电阻率随磁场的变化关系比较, 图中散点 “o” 为模型 (1) 的数据, “—x—” 为磁场与最大电阻率满足的函数关系曲线

当然, 反映金属 - 绝缘体转换的居里温度 T_C 也是不可忽视的重要参数, 原则上说可以采用非线性拟合的方法找到 T_C 与外加磁场之间的函数关系. 拟合后发现, 居里温度 T_C 与磁场之间的函数关系

十分复杂, 这从决定 T_C 的超越方程 (2) 可见一斑. 因此, T_C 与磁场之间的关系无法用显式表达. 实际上, $T_C, B, \rho_{\max}$ 并不相互独立, 从 Boltzmann 模型 (3) 得到不同磁场时的最大电阻率 $\rho_{\max}$, 可带回 (1) 式得到居里温度 T_C . 从图 1 和表 1 中可以看出, 增大磁场, 居里温度 T_C 向高温移动. 这源于载流子在受到的磁场力的作用下发生偏移, 反过来, 这种偏移抑制电阻率并导致磁旋局部有序, 使得铁磁 - 金属态较顺磁 - 绝缘体态占优势. 在磁畴内部, 导电电子 (e_g^1) 被完全极化, 通过氧, 导电电子 (e_g^1) 极易从 $\text{Mn}^{3+} (t_{2g}^3 e_g^1 : S = 2)$ 输运到 $\text{Mn}^{4+} (t_{2g}^3 e_g^0 : S = 3/2)$ 致使居里温度 T_C 向高温移动.

3 结论

本文讨论了在不同磁场情况下庞磁电阻锰氧化物 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 从金属 - 绝缘体的相变过程中电阻率 ρ 作为温度的函数的变化规律, 并给出了一个有用的数学函数. 根据这个数学函数, 不仅可以计算在实验的温度区间内材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的电阻率 ρ , 还可以间接预测磁性材料的某些特征指标, 如该类材料的热电优值 ZT , 因 ZT 与其电阻率 ρ 呈反比变化.

本文的仿真得到的理论数据与实验数据非常一致, 最大的平均相对误差为 4.35%, 最小的相关系数为 0.998. 需要指出的是, 这里仅给出磁性材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 以磁场为参数的电阻率随温度的变化关系, 并不是所有材料的电阻率随温度的变化关系均可用修正的高斯函数表示, 甚至由于材料的复杂性和差异性致使一些材料的电阻率随温度的变化关系不能精确地用某一确定的函数关系表示. 如同样是庞磁电阻锰氧化物的 $\text{La}_{0.825}\text{Sr}_{0.175}\text{MnO}_3$ [22] 材料, 不同磁场下其电阻率随温度的变化关系不能用方程 (1) 给出的函数关系表示, 这是因为实验结果不具有对称性的原因.

可以发现, 在材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的电阻率 ρ 的函数表达式中, $\tanh$ 函数前的系数 $\rho_0/2$ 与高斯函数前的系数 A 相比较, 存在 $\rho_0/2 < A$, 说明高斯函数是主要函数, $\tanh$ 函数是修正项. 大家知道, 可用高斯函数说明的过程是一个弛豫过程. 因此, 可以说材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的电阻率 ρ 随温度的变化过程是以高斯函数为主的弛豫过程.

本文还讨论了材料 $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ 和 $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ 的最大电阻率 $\rho_{\max}$ 随磁场的变化关系, 该关系满足 Boltzmann 模型. 根据这个模型, 可以知道任意外加磁场对应的最大电阻率 $\rho_{\max}$, 然后可回推出金属 - 绝缘体的转换温度 T_C .

本文按照模型预测得到的磁电阻值与实验结果符合得非常好, 有助于通过数学方法理解锰氧化物的特性.

感谢北京大学物理学院马玉彬博士的讨论.

-
- [1] von Helmolt R, Wecker J, Holzapfel B, Schultz L, Samwer K 1993 *Phys. Rev. Lett.* **71** 2331
 - [2] Jin S, Tiefel T H, McCormack M, Fastnacht R A, Ramesh R, Chen L H 1994 *Science* **264** 413
 - [3] Venkataiah G, Lakshmi Y K, Reddy P V 2008 *PMC Phys. B* **11**
 - [4] Ma Y B 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4901 (in Chinese) [马玉彬 2009 物理学报 **58** 4901]
 - [5] Ma Y B 2009 *Acta Phys. Sin.* **58** 4976 (in Chinese) [马玉彬 2009 物理学报 **58** 4976]
 - [6] Budhani R C, Pandey N K, Padhan P, Srivastava S 2001 *Phys. Rev. B* **65** 014429
 - [7] Kusters R M, Singleton J, Keen D A, McGreevy R, Hayes W 1989 *Physica B* **155** 362
 - [8] Snyder G J, Hiskes R, DiCarolis S, Beasley M R, Geballe T H 1996 *Phys. Rev. B* **53** 14434
 - [9] Viret M, Ranno L, Coey J M D 1997 *Phys. Rev. B* **55** 8067
 - [10] Ziese M, Srinithiwarawong C 1998 *Phys. Rev. B* **58** 11519
 - [11] Haghiri-Gosnet A M, Renard J P 2003 *J. Phys. D: Appl. Phys.* **36** R127
 - [12] Ewe L S, Hamadneh I, Salama H, Hamid N A, Halim S A, Abd-Shukor R 2009 *Appl. Phys. A* **95** 457
 - [13] Dagotto E, Hotta T, Moreo A 2001 *Phys. Reports* **344** 1
 - [14] Bhattacharya S, Sudipta P, Mukherjee R K, Chaudhuri B K 2004 *J. Magn. Magn. Mater.* **269** 359
 - [15] Venkataiah G, Krishna D C, Vithal M, Rao S S, Bhat S V, Prasad V, Subramanyam S V, Venugopal Reddy P 2005 *Physica B* **357** 370
 - [16] Li P, Zheng L, Zhang Y 2000 *Phys. Rev. B* **61** 8917
 - [17] Urushibara A, Moritomo Y, Arima T, Asamitsu A, Kido G, Tokura Y 1995 *Phys. Rev. B* **51** 14103
 - [18] Govardhan R T, Yadagiri P R, Raghavendra V R, Ajay G, Mukul G, Rama K R 2005 *Solid State Commun.* **133** 77
 - [19] Ewe L S, Hamadneh I, Salama H, Hamid N A, Halim S A, Abd-Shukor R 2009 *Appl. Phys. A* **95** 457
 - [20] Zhao G M 2000 *Phys. Rev. B* **62** 11639
 - [21] Krishnamurthy H R 2005 *PRAMANA-J. Phys.* **64** 1063
 - [22] Tokura Y, Urushibara A, Moritomo Y, Arima T, Asamitsu A, Kido G, Furukawa N 1994 *J. Phys. Soc. Jpn.* **63** 393

Prediction of the magneto-resistivity of manganese oxides $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ and $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ via temperature and magnetic field*

Liu Ya-Jie[†]

(Division of Mathematics, Physics and Information Engineering, Nanhu Department, Jiaxing College, Jiaxing 314001, China)

(Received 15 June 2012; revised manuscript received 30 July 2012)

Abstract

The resistivity related to temperature and magnetic field is a crucial parameter for determining the physical properties of the perovskite-type manganese oxide. The first task of this work is to find out a suitable method to predict the resistivities of $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_3$ and $\text{Pr}_{0.7}\text{Sr}_{0.3}\text{MnO}_3$ in the process from insulator phase to the metal phase via the temperature and the magnetic field. Based on the nonlinear numerical fitting, an analytical expression showing the dependence of the resistivity on temperature both less than and higher than the metal-insulator transition Curie temperature (T_C) at different magnetic fields, and the maximum resistivity ($\rho_{\max}$) corresponding to each Curie temperature is acquired. The second task of this work is to trace a mathematical relationship between the magnetic field and the maximum resistivity, and the Boltzmann function can be used successfully by numerical fitting. The lowest correlation coefficient and the largest average relative error between the actual and the calculated data are 0.998 and 4.35% in all considered cases respectively.

Keywords: perovskite-type manganese oxides, magneto-resistivity, transition temperature, nonlinear numerical fitting

PACS: 76.50.+g, 72.90.+y, 75.60.-d, 61.05.-a

DOI: 10.7498/aps.62.017601

* Project supported by the Scientific Fund of Education Department of Zhejiang Province, China (Grant No. Y201122757).

[†] Corresponding author. E-mail: lyj0919@mail.zjxu.edu.cn