

铁磁金属中自旋波散射引起的电阻率

雷 啸 霖

(中国科学院上海冶金研究所)

1981年10月4日收到

提 要

铁磁金属中自旋向上电子与自旋向下电子的能量由于磁化而造成的分裂,在低温下对自旋波散射引起的电阻率(磁电阻率)有重要的影响。由于这个分裂,单带情况下低温磁电阻率总是衰减的;但两带情况下则有可能增强。考虑到自旋波谱中的能隙用单带模型所得的磁电阻率表达式与 Tb 和 Dy 的实验资料比较表明:不但低温电阻率的温度依赖性符合,数值上也与高温磁电阻测量结果一致。

一、引 言

在铁磁金属中,自旋无序散射对 $T \approx 0$ 的电阻率有重要的贡献,这个问题人们早就有过很多研究^[1-6]。若不计及晶格振动只考虑自旋无序散射时产生的电阻率叫磁电阻率,用 ρ_m 表示;则在单带模型中,对平方型自旋波谱

$$\hbar\omega_q = Dq^2, \quad (1)$$

人们已得到的结果是:低温下 $\rho_m \propto T^2$ 。纵然,磁电阻率与晶格振动引起的电阻率常难于区分,但实验上早就肯定:磁性重稀土金属 Tb, Dy 等的低温磁电阻率不满足 T^2 规律^[7-9]。Mackintosh^[8] 把不符合的原因归为这些稀土金属的自旋波谱中存在一个能隙 Δ ^[9]。若自旋波谱近似有

$$\hbar\omega_q = \Delta + Dq^2 \quad (2)$$

的形式,很容易看到磁化率在低温下不再按 $T^{3/2}$ 而是按

$$M_0 - M \propto T^{3/2} \exp(-\Delta/k_B T) \quad (3)$$

变化,与实验符合。Mackintosh 推测^[8],由于存在这样一个能隙,低温磁电阻率将有如下形式:

$$\rho \propto T^2 \exp(-\Delta/k_B T). \quad (4)$$

对于 Dy,他把用(3)式从实验磁化曲线定得的能隙 $\Delta/k_B = 20\text{K}$ 应用于电阻率的表达式(4)中,发现可以与 Dy 电阻率温度依赖性的实验结果符合。Coqblin^[9] 认为,考虑非弹性散射从玻耳兹曼方程可以推得(4)式。所以长期以来人们一直持这个观点。但是,正如人们已经知道的,对于 Tb,磁化曲线在低温下也具有(3)式的形式,而且由磁化规律定得的能隙值与其他方法(如直接从中子散射测自旋波谱)得到的能隙值都接近 $\Delta/k_B = 20\text{K}$ ^[9];然而把这个值用于(4)式中得到的电阻率行为与实验的温度规律相差甚远。

值得指出, 具有能隙的自旋波谱(2)式并不能使得磁电阻率在低温下有(4)式的形式, Coqblin 的推导是采用了一个在低温下不合适的近似的结果. 另一方面, 铁磁金属中由于自发磁化产生的分子场, 自旋向上电子的能量与自旋向下电子的能量要发生分裂, 这样一个能量的分裂对低温磁电阻率的温度依赖性有重要影响. 这一点迄今一直没有被认真考虑. 在本文中, 我们指出, 考虑到这一效应, Tb, Dy 等稀土金属的磁电阻率行为才可以得到较好的解释.

二、模 型

假定分布于晶格点阵上的离子形成一个海森堡铁磁系统, 金属中的公有化电子受到与自旋无关的周期势场 $U(\mathbf{r})$ 及与自旋有关的交换势场的作用. 单电子哈密顿量可写作

$$H = \frac{P^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - \sum_l J(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \mathbf{S}_l \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (5)$$

式中, 泡利矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$ 代表电子的自旋, $\mathbf{S}_l$ 代表位于格点 $\mathbf{R}_l$ 的离子的自旋, $J(\mathbf{r})$ 是交换势.

磁有序由离子自旋的统计平均值 $\langle \mathbf{S}_l \rangle$ 表征. 在居里温度以下沿 z 方向有一个自发磁化, $\langle S_l^z \rangle = \langle S^z \rangle \neq 0$, 没有外磁场时在顺磁区域 $\langle \mathbf{S}_l \rangle = 0$. 我们把哈密顿量分成

$$\begin{aligned} H &= H_0 + H_1, \\ H_0 &= -\frac{P^2}{2m} + U(\mathbf{r}) - \sum_l J(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \langle S^z \rangle \sigma_z, \\ H_1 &= -\sum_l J(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) (\mathbf{S}_l - \langle \mathbf{S}_l \rangle) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \end{aligned} \quad (6)$$

H_0 中的第三项是一个与自旋有关的周期势场, 所以 H_0 的本征态仍可用能带指标 n , 晶格动量 $\mathbf{k}$ 及自旋的 z 分量 σ 表示: 设波函数为 $\psi_{n\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r})$, 能量为 $\varepsilon_{n\mathbf{k}\sigma}$. 用这个表象, 电子-离子系统的哈密顿量可写作

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{n, \mathbf{k}, \sigma} \varepsilon_{n\mathbf{k}\sigma} c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{n\mathbf{k}\sigma} \\ &\quad - \frac{1}{N} \sum_{\substack{n, n', \sigma \\ \mathbf{k}, \mathbf{k}', l}} J_{\sigma\sigma'}^{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') e^{-i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_l} (\mathbf{S}_l - \langle \mathbf{S}_l \rangle) \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\sigma\sigma'} c_{n\mathbf{k}\sigma}^\dagger c_{n'\mathbf{k}'\sigma'} + \mathcal{H}_H, \end{aligned} \quad (7)$$

其中 N 为总离子数,

$$J_{\sigma\sigma'}^{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = \int \psi_{n'\mathbf{k}'\sigma'}^*(\mathbf{r}) J(\mathbf{r}) \psi_{n\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) d^3r. \quad (8)$$

(8) 式中的波函数在原胞 Ω_0 中是归一化的:

$$\int_{\Omega_0} |\psi_{n\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r})|^2 d^3r = 1. \quad (9)$$

作为初级近似, 可以认为 $\psi_{n\mathbf{k}\sigma}(\mathbf{r}) = \psi_{n\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \psi_\sigma$, 因而 $J_{\sigma\sigma'}^{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}')$ 将与 σ 无关. 如通常所做的, 我们进一步假定它只是 $\mathbf{k}' - \mathbf{k}$ 的函数, 记作 $J^{nn'}(\mathbf{k}, \mathbf{k}') = J^{nn'}(\mathbf{k}' - \mathbf{k})$. 于是能量可写成

$$\varepsilon_{n\mathbf{k}\sigma} = \varepsilon_{n\mathbf{k}} - \sigma \langle S^z \rangle J^{nn}(0). \quad (10)$$

这就是说, 当 $\langle S^z \rangle \neq 0$ 时, 同一个 $n\mathbf{k}$, 自旋向上电子的能量与自旋向下电子的能量发生

分裂. 这样一个分裂对磁电阻率的低温行为有重要影响.

三、单带情形

首先考虑单带情况, 假设费密面是球形. 由于对同一个 $\mathbf{k}$ 自旋 $\uparrow$ 电子与自旋 $\downarrow$ 电子的能量不等, 因而费密波矢 $k_{F\uparrow} \neq k_{F\downarrow}$. 记

$$\Delta k_F = |k_{F\downarrow} - k_{F\uparrow}|. \quad (11)$$

为简单起见, 我们假定 Δk_F 相对于 $k_{F\uparrow}$ 和 $k_{F\downarrow}$ 是小的.

按照哈密顿量 (7) 式, 电阻率主要由 $\mathbf{S} - \langle \mathbf{S}_i \rangle$ 的涨落引起, 它容易从玻耳兹曼方程计算. 在晶态金属中, Born 近似下, 电子自旋反向的跃迁几率为

$$P(\mathbf{k}\uparrow \rightarrow \mathbf{k}'\downarrow) = \frac{1}{\hbar} |J(\mathbf{k}' - \mathbf{k})|^2 \int d\omega \mathcal{S}^{+-}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \omega) \times f_{\mathbf{k}\uparrow} (1 - f_{\mathbf{k}'\downarrow}) \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'\downarrow} - \varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} - \hbar\omega), \quad (12a)$$

$$P(\mathbf{k}\downarrow \rightarrow \mathbf{k}'\uparrow) = \frac{1}{\hbar} |J(\mathbf{k}' - \mathbf{k})|^2 \int d\omega \mathcal{S}^{-+}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \omega) f_{\mathbf{k}\downarrow} (1 - f_{\mathbf{k}'\uparrow}) \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'\uparrow} - \varepsilon_{\mathbf{k}\downarrow} - \hbar\omega); \quad (12b)$$

自旋不变的跃迁几率为

$$P(\mathbf{k}\sigma \rightarrow \mathbf{k}'\sigma) = \frac{1}{\hbar} |J(\mathbf{k}' - \mathbf{k})|^2 \int d\omega \mathcal{S}^z(\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \omega) f_{\mathbf{k}\sigma} (1 - f_{\mathbf{k}'\sigma}) \times \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'\sigma} - \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma} - \hbar\omega), \quad (12c)$$

其中

$$f_{\mathbf{k}\sigma} = f(\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}) = \frac{1}{e^{\beta\varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} + 1}$$

是费密分布函数 (我们已把费密能量取作零点), $\mathcal{S}^{+-}(\mathbf{K}, \omega)$, $\mathcal{S}^{-+}(\mathbf{K}, \omega)$ 和 $\mathcal{S}^z(\mathbf{K}, \omega)$ 是离子系统自旋时间关联函数的傅里叶变换:

$$\mathcal{S}^{+-}(\mathbf{K}, \omega) = \int dt e^{-i\omega t} \frac{1}{N^2} \sum_{l, l'} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}')} \langle S_l^+(t) S_{l'}^-(0) \rangle, \quad (13a)$$

$$\mathcal{S}^{-+}(\mathbf{K}, \omega) = \int dt e^{-i\omega t} \frac{1}{N^2} \sum_{l, l'} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}')} \langle S_l^-(t) S_{l'}^+(0) \rangle, \quad (13b)$$

$$\mathcal{S}^z(\mathbf{K}, \omega) = \int dt e^{-i\omega t} \frac{1}{N^2} \sum_{l, l'} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{l} - \mathbf{l}')} \langle (S_l^z(t) - \langle S^z \rangle) (S_{l'}^z(0) - \langle S^z \rangle) \rangle, \quad (13c)$$

这里 $\langle \dots \rangle$ 表示对自旋系统的统计平均.

用变分方法求解一级近似的玻耳兹曼方程, 电阻率可表为^[10]

$$\rho = \frac{V}{2k_B T} \frac{\sum_{\mathbf{k}, \sigma} \sum_{\mathbf{k}', \sigma'} P(\mathbf{k}\sigma \rightarrow \mathbf{k}'\sigma') (\Phi(\mathbf{k}\sigma) - \Phi(\mathbf{k}'\sigma'))^2}{\left| e \sum_{\mathbf{k}, \sigma} v_{\mathbf{k}\sigma} \Phi(\mathbf{k}\sigma) \frac{\partial f_{\mathbf{k}\sigma}}{\partial \varepsilon_{\mathbf{k}\sigma}} \right|^2}, \quad (14)$$

其中 V 是系统的体积, $\Phi(\mathbf{k}\sigma)$ 是变分函数. 在 Δk_F 相对于 $k_{F\uparrow}$ 和 $k_{F\downarrow}$ 较小的情况下, $v_{\mathbf{k}\downarrow}$ 与 $v_{\mathbf{k}\uparrow}$ 相差不太大, 可以近似取一个与自旋无关的试探函数:

$$\Phi(\mathbf{k}\sigma) = \mathbf{v}_{\mathbf{k}} \cdot \hat{\mathbf{u}}, \quad (15)$$

其中 $\mathbf{v}_{\mathbf{k}}$ 是 $\mathbf{v}_{\mathbf{k}\uparrow}$ 与 $\mathbf{v}_{\mathbf{k}\downarrow}$ 的平均值, $\hat{\mathbf{u}}$ 代表外加电场的方向. 在这样的试探函数选择下电阻率可简单地表示成

$$\rho_m = \rho_{+-} + \rho_{-+} + \rho_{\uparrow\uparrow} + \rho_{\downarrow\downarrow}, \quad (16)$$

其中 ρ_{+-} 的表达式为

$$\rho_{+-} = \left[\frac{16\pi^2 e^2}{9\hbar^2} (v_{F\uparrow} k_{F\uparrow}^2 + v_{F\downarrow} k_{F\downarrow}^2) \right]^{-1} \frac{V}{2k_B T \hbar} \int d^3k d^3k' d\omega \mathcal{S}^{+-}(\mathbf{k} - \mathbf{k}', \omega) \times f(\varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow})(1 - f(\varepsilon_{\mathbf{k}'\downarrow}))[(\mathbf{v}_{\mathbf{k}'} - \mathbf{v}_{\mathbf{k}}) \cdot \hat{\mathbf{u}}]^2 \delta(\varepsilon_{\mathbf{k}'\downarrow} - \varepsilon_{\mathbf{k}\uparrow} - \hbar\omega). \quad (17)$$

ρ_{-+} , $\rho_{\uparrow\uparrow}$ 和 $\rho_{\downarrow\downarrow}$ 的表达式类似. 把对 $\mathbf{k}$ 及 $\mathbf{k}'$ 的积分换成对能量及方向的积分, 注意到主要贡献是来自 $k \sim k_{F\uparrow}$ 附近, $k' \sim k_{F\downarrow}$ 附近, 故

$$\int d^3k d^3k' \sim \frac{k_{F\uparrow}^2 k_{F\downarrow}^2}{\hbar^2 v_{F\uparrow} v_{F\downarrow}} \int d\varepsilon_{k\uparrow} d\varepsilon_{k'\downarrow} d\Omega_k d\Omega_{k'}.$$

因为

$$\int d\varepsilon f(\varepsilon)(1 - f(\varepsilon + \hbar\omega)) = \frac{\hbar\omega}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}}, \quad (18)$$

能量的积分很容易完成. 同时, 注意到被积函数只是 $\mathbf{K} = \mathbf{k}' - \mathbf{k}$ 的函数, 对角度的积分可化为

$$\int d\Omega_k d\Omega_{k'} \sim \frac{2\pi}{k_{F\uparrow} k_{F\downarrow}} \int K dK d\Omega_K.$$

由于

$$\mathcal{S}^{+-}(\mathbf{k}' - \mathbf{k}, \omega) = e^{-\beta\hbar\omega} \mathcal{S}^{+-}(\mathbf{k} - \mathbf{k}', -\omega),$$

ρ_{-+} 与 ρ_{+-} 是相等的. 如果略去 $k_{F\uparrow}$ 与 $k_{F\downarrow}$ 以及 $v_{F\uparrow}$ 和 $v_{F\downarrow}$ 的算求平均值与几何平均值的差别, 电阻率可以写成

$$\rho_m = \rho_s + \rho_n, \quad (19)$$

其中

$$\rho_s = \rho_{+-} + \rho_{-+} \simeq \frac{9}{8} \frac{V}{e^2 \hbar v_F^2 k_F^4 k_B T} \int_{\Delta k_F}^{2k_F} K dK \int \frac{d\Omega_K}{4\pi} |J(\mathbf{K})|^2 (\mathbf{K} \cdot \hat{\mathbf{u}})^2 \times \int d\omega \frac{\hbar\omega}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \mathcal{S}^{+-}(\mathbf{K}, \omega), \quad (20)$$

$$\rho_n = \rho_{\uparrow\uparrow} + \rho_{\downarrow\downarrow} \simeq \frac{9}{8} \frac{V}{e^2 \hbar v_F^2 k_F^4 k_B T} \int_0^{2k_F} K dK \int \frac{d\Omega_K}{4\pi} |J(\mathbf{K})|^2 (\mathbf{K} \cdot \hat{\mathbf{u}})^2 \times \int d\omega \frac{\hbar\omega}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \mathcal{S}^z(\mathbf{K}, \omega). \quad (21)$$

这是单带情况下磁电阻率的基本公式.

低温情况 低温下用自旋波模型是恰当的. 在自旋波近似下,

$$\mathcal{S}^{+-}(\mathbf{K}, \omega) = 2\pi \left(\frac{2S}{N} \right) \sum_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{H}} \delta_{\mathbf{K}+\mathbf{q}-\mathbf{H}} (1 + n_{\mathbf{q}}) \delta(\omega + \omega_{\mathbf{q}}), \quad (22)$$

$$\mathcal{S}^z(\mathbf{K}, \omega) = \frac{2\pi}{N^2} \sum_{\mathbf{q}_1, \mathbf{q}_2} \sum_{\mathbf{H}} \delta_{\mathbf{K}-\mathbf{q}_1+\mathbf{q}_2-\mathbf{H}} n_{\mathbf{q}_1} (1 + n_{\mathbf{q}_2}) \delta(\omega - \omega_{\mathbf{q}_1} + \omega_{\mathbf{q}_2}). \quad (23)$$

这里 $n_q = 1/(\exp(\beta\hbar\omega_q) - 1)$ 是玻色函数, $\mathbf{H}$ 代表倒格矢, $\delta_{\mathbf{K}} = 1$ 若 $\mathbf{K} = 0$, 否则 $\delta_{\mathbf{K}} = 0$. 于是

$$\rho_s = \frac{9\pi S Q_0}{2e^2 \hbar v_F^2 k_F^4 k_B T} \sum_{\mathbf{H}} \int_{\Delta k_F}^{2k_F} K dK \int \frac{dQ_K}{4\pi} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{K}-\mathbf{H}} |J(\mathbf{K})|^2 (\mathbf{K} \cdot \mathbf{u})^2}{(e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{K}-\mathbf{H}}} - 1)(1 - e^{-\beta\hbar\omega_{\mathbf{K}-\mathbf{H}}})}, \quad (24)$$

$$\rho_n = \frac{9\pi Q_0}{8e^2 \hbar v_F^2 k_F^4 k_B T} \sum_{\mathbf{H}} \int_0^{2k_F} K dK \int \frac{dQ_K}{4\pi} \left(\frac{1}{N} \right) \sum_{\mathbf{q}} \frac{\hbar(\omega_{\mathbf{K}-\mathbf{H}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}})}{(1 - e^{-\beta\hbar(\omega_{\mathbf{K}-\mathbf{H}+\mathbf{q}} - \omega_{\mathbf{q}})})} \\ \times \frac{|J(\mathbf{K})|^2 (\mathbf{K} \cdot \mathbf{u})^2}{(e^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{K}-\mathbf{H}+\mathbf{q}}} - 1)(1 - e^{-\beta\hbar\omega_{\mathbf{q}}})}, \quad (25)$$

求和是对所有有贡献的倒格矢.

我们假定最小的非零倒格矢大于 $2k_F$, 因此低温下可不考虑 U 过程的贡献, 即只考虑 $\mathbf{H} = 0$ 的项. 同时, 相应于各向同性的带模型, 我们自然认为 $|J(\mathbf{K})|^2$ 与 $\mathbf{K}$ 的方向无关; 或者, 对于多晶, 我们应当求 $\mathbf{u}$ 的方向平均, 结果最后出现于公式中的是 $|J(\mathbf{K})|^2$ 的方向平均值 $|J(K)|^2$. 于是 (24) 式写成

$$\rho_s = \frac{3\pi S Q_0}{2e^2 \hbar v_F^2 k_F^4 k_B T} \int_{\Delta k_F}^{q_D} dK \frac{K^3 |J(K)|^2 \hbar\omega_K}{(e^{\beta\hbar\omega_K} - 1)(1 - e^{-\beta\hbar\omega_K})}. \quad (26)$$

这里已经假设自旋波的谱是各向同性的. 如果自旋波有平方型的色散关系 $\hbar\omega_q = Dq^2$, (26) 式化为

$$\rho_s = \frac{3\pi S Q_0 J^2(0)}{4e^2 \hbar v_F^2} \left(\frac{k_B T}{D k_F^2} \right)^2 \int_{\frac{D \Delta k_F^2}{k_B T}}^{\infty} \frac{\eta^2 d\eta}{(e^\eta - 1)(1 - e^\eta)} \quad (27)$$

或者写成

$$\rho_s = \frac{3\pi S Q_0 J^2(0)}{4e^2 \hbar v_F^2} \left(\frac{q_D}{k_F} \right)^4 \left(\frac{T}{\theta_m} \right)^2 I_2 \left(\frac{\tilde{\theta}}{T} \right), \quad (28)$$

这里

$$\tilde{\theta} = \frac{D \Delta k_F^2}{k_B} = \theta_m \left(\frac{\Delta k_F}{q_D} \right)^2, \quad (29)$$

$$k_B \theta_m = D q_D^2, \quad (30)$$

$$I_2(y) = \int_y^{\infty} \frac{x^2 dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})}. \quad (31)$$

按照 (10) 式,

$$\varepsilon_{k\downarrow} - \varepsilon_{k\uparrow} = 2\langle S^z \rangle J(0) \simeq 2SJ(0),$$

因而

$$\Delta k_F \simeq \frac{2SJ(0)}{\hbar v_F}. \quad (32)$$

我们又可把低温下的 ρ_s 表示成

$$\rho_s = \frac{9\pi^3 \hbar \alpha^3}{8e^2 q_D S} \left(\frac{q_D}{k_F} \right)^4 \left(\frac{T}{\tilde{\theta}} \right)^2 I_2 \left(\frac{\tilde{\theta}}{T} \right), \quad (33)$$

其中

$$\alpha = \left(\frac{2SJ(0)}{\hbar v_F q_D} \right)^2 = \frac{\tilde{\theta}}{\theta_m}. \quad (34)$$

在 ρ_n 中, U 过程是起主要作用的, 由于低温下它按 $T^{5/2}$ 变化, 并不是总能忽略的. 它的大小可大致估计为

$$\frac{\rho_d}{\rho_s} \sim \frac{1}{S} \left(\frac{T}{\theta_m} \right)^{1/2} / I_2 \left(\frac{\tilde{\theta}}{T} \right) \sim \frac{J(0)}{E^*} \left(\frac{T}{\tilde{\theta}} \right)^{1/2} / I_2 \left(\frac{\tilde{\theta}}{T} \right), \quad (35)$$

其中 $E^* = \frac{1}{2} \hbar \nu_F q_D$ 大致相当于距离带底的费密能量. 一般 $J(0)/E^* < 0.1$, 所以, 只要温度不低到 $\sim 0.2\tilde{\theta}$, 作为初步近似, ρ_n 的贡献一般可不考虑, 即认为

$$\rho_m \simeq \rho_s. \quad (36)$$

在 (27) 式中令 $\Delta k_F = 0$ 或者 (28) 式中令 $\tilde{\theta} = 0$ 就是 Mannari^[4] 得到的低温磁电阻率第一项的表达式. 但是, 按照我们的模型, 单带情况下 $\tilde{\theta}$ 必定不等于零, 所以低温下 ρ_s 随温度的变化比平方规律要快得多. 在第四节中我们将看到, 正是这一点才能与实验符合.

高温情况 高温下, (20) 式和 (21) 式中的因子 $\hbar\omega/(1 - e^{-\beta\hbar\omega}) \simeq k_B T$, 注意到 (13a) — (13c) 式, 可以先完成对 ω 的积分, 得到

$$\begin{aligned} \rho_m = \rho_s + \rho_n = & \frac{9\pi Q_0}{4e^2 \hbar \nu_F^2 k_F^4} \int K dK \int \frac{dQ_K}{4\pi} |J(\mathbf{K})|^2 (\mathbf{K} \cdot \mathbf{u})^2 \\ & \times \frac{1}{N} \sum_{l, l'} e^{i\mathbf{K} \cdot (\mathbf{r}_l - \mathbf{r}_{l'})} (\langle \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l'} \rangle - \langle \mathbf{S} \rangle^2). \end{aligned} \quad (37)$$

在顺磁区域, $\langle \mathbf{S} \rangle = 0$, 我们如果假定不同格点上的离子自旋完全没有关联, 即设

$$\langle \mathbf{S}_l \cdot \mathbf{S}_{l'} \rangle = \begin{cases} 0 & \text{若 } l \neq l', \\ S(S+1) & \text{若 } l = l', \end{cases}$$

则得到顺磁区域的磁电阻率为

$$\rho_m^0 = \frac{3\pi Q_0 S(S+1)}{4e^2 \hbar \nu_F^2 k_F^4} \int_0^{2k_F} dK K^3 |J(K)|^2 \quad (38)$$

$$= \frac{3\pi Q_0 S(S+1)}{e^2 \hbar \nu_F^2} J_{\text{eff}}^2 \quad (39)$$

$$= \frac{9\pi^3 \hbar}{2e^2 q_D} \frac{S+1}{S} \frac{J_{\text{eff}}^2}{J^2(0)} \alpha. \quad (40)$$

(39) 式就是 de Gennes 和 Friedal 的结果^[2]. 不过我们不用 $J(K) = \text{常数}$ 的模型, 因而在表达式中明确 J_{eff}^2 是对 (38) 式的积分的一个有效中值, 它一般是小于 $J^2(0)$ 的. 实际上, 在 $\mathbf{r}$ 空间的交换函数 $J(\mathbf{r})$ 的扩展范围可估计为原子 f 电子波函数的宽度 $\sim a/2$ (a 是晶格常数). 而 $J(\mathbf{K})$ 是 $J(\mathbf{r})$ 的傅里叶变换, 它在 $\mathbf{K}$ 空间的宽度大致是 $10/a$, 一般 $\leq 4k_F$. 在积分 (38) 式中接近 $2k_F$ 端的权重很大, 所以 J_{eff}^2 一般情况下比 $J^2(0)$ 小得多.

四、两带情形

铁磁性过渡金属中自旋无序散射的两带模型^[6]意味着除了 s 电子以外, 还有一部分 d 电子也是公有化电子. 于是, 我们考虑传导电子形成两个带: $n = s, d$. 假定两个带的费密面都是球形, 费密速度 $\nu_{Fs} \gg \nu_{Fd}$.

仍然从 (14) 式出发, 把试探函数取为

$$\Phi_n(k\sigma) = v_{nk} \cdot u$$

(v_{nk} 是 $v_{nk\uparrow}$ 与 $v_{nk\downarrow}$ 的平均值), 电阻率可用第三节的方法计算. 在两带情况下, 自旋反向散射及自旋不变散射的贡献都有 ρ^{ss} , ρ^{dd} , ρ^{sd} 和 ρ^{ds} 这几项. 但由于 $v_{Fs} \gg v_{Fd}$, 电流主要由 s 电子载运, 而对电阻率的贡献一般情况下主要由 s 到 d 的散射决定, 所以 $\rho \approx \rho^{sd}$. 采用与上一节类似的近似, 注意到 $v_{Fs} \gg v_{Fd}$, 我们得到

$$\rho_s^{sd} = \frac{3}{16} \frac{V}{e^2 \hbar v_{Fs}^2 k_{Fs}^4 k_B T} \left(\frac{v_{Fs}}{v_{Fd}} \right) k_{Fs} k_{Fd} \left(\int_{|k_{Fs\downarrow} - k_{Fd\uparrow}|}^{k_{Fs\downarrow} + k_{Fd\uparrow}} + \int_{|k_{Fs\uparrow} - k_{Fd\downarrow}|}^{k_{Fs\uparrow} + k_{Fd\downarrow}} \right) K dK \int \frac{d\Omega_K}{4\pi} \times \int d\omega \frac{\hbar\omega}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \mathcal{S}^{+-}(K, \omega) |J_{sd}(K)|^2, \quad (41)$$

$$\rho_n^{sd} = \frac{3}{16} \frac{V}{e^2 \hbar v_{Fs}^2 k_{Fs}^4 k_B T} \left(\frac{v_{Fs}}{v_{Fd}} \right) k_{Fs} k_{Fd} \left(\int_{|k_{Fs\downarrow} - k_{Fd\uparrow}|}^{k_{Fs\downarrow} + k_{Fd\uparrow}} + \int_{|k_{Fs\uparrow} - k_{Fd\downarrow}|}^{k_{Fs\uparrow} + k_{Fd\downarrow}} \right) K dK \int \frac{d\Omega_K}{4\pi} \times \int d\omega \frac{\hbar\omega}{1 - e^{-\beta\hbar\omega}} \mathcal{S}^z(K, \omega) |J_{sd}(K)|^2. \quad (42)$$

现在, 积分下限可能有不同的情况. 因为未考虑哈密顿量 H_0 ((6)式)的第三项时, s 带与 d 带的费密波矢本来就可能是不同的: $\Delta k_{sd} \approx 0$; 所以由于磁化引起的自旋向上电子与自旋向下电子能量分裂以后, $|k_{Fs\downarrow} - k_{Fd\uparrow}|$ 及 $|k_{Fs\uparrow} - k_{Fd\downarrow}|$ 有可能变大, 也可能变小.

低温下, 用自旋波近似并假定平方型自旋波谱(1)式, 我们得

$$\rho_s^{sd} = \frac{3\pi S \Omega_0 |J_{sd}(0)|^2}{8e^2 \hbar v_{Fs}^2} \left(\frac{k_{Fd}}{k_{Fs}} \right) \left(\frac{q_D}{k_{Fs}} \right)^2 \left(\frac{v_{Fs}}{v_{Fd}} \right) \left(\frac{T}{\theta_m} \right) \left[I_1 \left(\frac{\tilde{\theta}_{\uparrow\downarrow}}{T} \right) + I_1 \left(\frac{\tilde{\theta}_{\downarrow\uparrow}}{T} \right) \right]. \quad (43)$$

这里

$$\tilde{\theta}_{\uparrow\downarrow} = D |k_{Fs\downarrow} - k_{Fd\uparrow}|^2 / k_B, \quad \tilde{\theta}_{\downarrow\uparrow} = D |k_{Fs\uparrow} - k_{Fd\downarrow}|^2 / k_B, \quad (44)$$

$$I_1(y) = \int_0^\infty \frac{x dx}{(e^x - 1)(1 - e^{-x})}. \quad (45)$$

由于在两带情况下 $\theta_{\uparrow\downarrow}$ 或 $\tilde{\theta}_{\uparrow\downarrow}$ 可能变得很小, 在某些铁磁金属 (如 Fe 和 Ni) 中 θ_m 又很大, (43) 式给出的电阻率比单带模型的结果可能大得多.

至于 ρ_n^{sd} , 与 ρ_s^{sd} 相比低温下通常可忽略. 我们不再详细讨论.

五、自旋波谱中能隙的效应

在某些六角密排的重稀土金属中, 例如 Dy 和 Tb, 由于各向异性, 自旋波谱中会出现一个能隙^[9]. 我们不研究由于电子能带结构各向异性对电阻率的影响, 计算这些元素的多晶材料的低温电阻率时, 作为初步近似, 我们仍然用前面的各向同性能带模型处理. 但自旋波谱中的能隙是必须考虑的, 我们假定

$$\hbar\omega_q = \Delta + Dq^2. \quad (2)$$

这样一个谱得到的磁化率行为 (3) 式可以相当好地符合 Dy 和 Tb 的低温磁化率测量结果^[8,9]. 把 (2) 式代入单带情况的磁电阻率表达式 (26) 中, 很容易得到

$$\rho_s = \frac{3\pi S \Omega_0 J^2(0)}{4e^2 \hbar v_{Fs}^2} \left(\frac{q_D}{k_{Fs}} \right)^4 \left(\frac{T}{\theta_m} \right)^2 \left[I_2 \left(\frac{\tilde{\theta} + \theta_\Delta}{T} \right) - \frac{\theta_\Delta}{T} I_1 \left(\frac{\tilde{\theta} + \theta_\Delta}{T} \right) \right], \quad (46)$$

其中

$$\theta_{\Delta} = \Delta/k_B.$$

但即使设 $\tilde{\theta} = 0$, (46) 式中方括号内的函数与指数函数 $2\exp(-\theta_{\Delta}/T)$ 相比, 不仅数值上大得多, 行为也不相同. 可见, 就是不考虑 $\sigma\uparrow$ 电子与 $\sigma\downarrow$ 电子能级的分裂, 我们的模型也得不到 (4) 式的结果. Coqblin^[9] 为什么能够从玻耳兹曼方程得到 (4) 式呢? 检查他的推导过程, 发现他所用的一个近似相当于把本文 (18) 式中的积分作如下的处理. Coqblin 实际上是从下面的恒等式出发:

$$\int d\epsilon f(\epsilon)(1 - f(\epsilon + \hbar\omega)) \equiv \int d\epsilon f(\epsilon)(1 - f(\epsilon)) \frac{1}{1 - f(\epsilon)(1 - e^{-\beta\hbar\omega})},$$

认为式中 $f(\epsilon)(1 - f(\epsilon)) = -k_B T (\partial f / \partial \epsilon)$ 几乎是一个 $\delta(\epsilon)$ 函数, 因而可以把积分近似为被积函数的其余部分在 $\epsilon = 0$ 之值, 即

$$\int d\epsilon f(\epsilon)(1 - f(\epsilon + \hbar\omega)) \simeq \frac{k_B T}{1 - f(0)(1 - e^{-\beta\hbar\omega})} = \frac{2k_B T}{1 + e^{-\beta\hbar\omega}}. \quad (47)$$

这个处理是不正确的, 因为函数 $(1 - f(\epsilon)(1 - e^{-\beta\hbar\omega}))^{-1}$ 本身也是一个在 $\epsilon = 0$ 附近迅变的函数, 它的迅变范围与 $f(\epsilon)(1 - f(\epsilon))$ 的宽度相当. 实际上, 严格的积分结果是 (18) 式. 只有 $\beta\hbar\omega \ll 1$ 时 (47) 式才与 (18) 式一致, 当 $\beta\hbar\omega \lesssim 1$ 时二者大不相同.

六、与实验的比较

本节中我们把单带模型考虑有能隙的自旋波谱 (2) 式所得的磁电阻率 (46) 式与 Tb 和 Dy 多晶低温电阻率测量结果比较.

为了从测量的总电阻率中分离出磁电阻率 ρ_m , 必须估算各个温度下声子对电阻率的贡献 ρ^i . Tb, Dy 与非磁性的 Lu 晶格结构和化学价相同, 原子量及德拜温度也接近, 所以我们可以认为它们的声子电阻率遵从同样的规律, 即同样的 T/Θ 的函数:

$$\rho^i \propto f\left(\frac{T}{\Theta}\right).$$

由于 $f(T/\Theta)$ 在高温下是 T 的线性函数, 因而上式中的比例系数由高温线性区域的斜率完全确定. 令 $(d\rho/dT)_{Lu}$ 和 $(d\rho/dT)_{Tb}$ 分别表示实验测得的 Lu 和 Tb 的电阻率高温线性区域的斜率, Θ_{Lu} 和 Θ_{Tb} 分别表示 Lu 和 Tb 的德拜温度, $\rho_{Lu}(T)$ 表示 Lu 的实验电阻率, 则可用下式估计 Tb 中的声子电阻率 ρ_{Tb}^i :

$$\rho_{Tb}^i(T) = \frac{\Theta_{Tb} (d\rho/dT)_{Tb}}{\Theta_{Lu} (d\rho/dT)_{Lu}} \rho_{Lu}\left(\frac{\Theta_{Lu}}{\Theta_{Tb}} T\right). \quad (48)$$

类似地可估计 Dy 的声子电阻率 $\rho_{Dy}^i(T)$. 声子电阻率在低温下未必遵从 T^5 定律^[9], 用 (46) 式估计似乎比假定低温下 $\rho^i \propto T^5$ 来估计^[8,9] 更合适一些.

Lu 的电阻率资料取自文献 [11], Tb 和 Dy 电阻率资料采用 Colvin 等人对多晶的测量^[7-9], 所用的 Θ 值及 $(d\rho/dT)$ 值列于表 1. 将总电阻率减去 ρ^i 就作为磁电阻率 ρ_m . 这样得到 Tb 和 Dy 的 ρ_m 为图 1 和图 2 的实验点. 图 1 和图 2 中的粗黑线是按 (46) 式, 即下式

$$\rho_m = \rho^* \left(\frac{T}{\tilde{\theta}}\right)^2 \left[I_2 \left(\frac{\tilde{\theta} + \theta_{\Delta}}{T} \right) - \frac{\theta_{\Delta}}{T} I_1 \left(\frac{\tilde{\theta} + \theta_{\Delta}}{T} \right) \right] \quad (49)$$

表 1 理论与实验比较所用的参数

金属	Q_0 ($\text{\AA}^3$)	Θ (K)	$d\rho/dT$ ($\mu\Omega \cdot \text{cm} \cdot \text{K}^{-1}$)	θ_Δ (K)	$\tilde{\theta}$ (K)	ρ^* ($\mu\Omega \cdot \text{cm}$)	S	A	ρ_m^0 ($\mu\Omega \cdot \text{cm}$)	ρ_m^0 ($\mu\Omega \cdot \text{cm}$)
Lu		166	0.181							
Tb	31.93	158	0.093	20	48	5.30	3	0.059	87.6	88.5
Dy	31.53	158	0.104	20	40	3.52	5/2	0.059	75.2	74.5

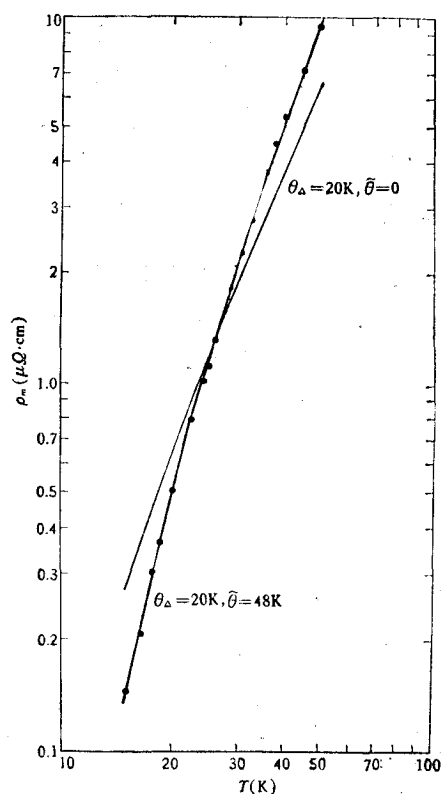


图 1 Tb 磁电阻率理论曲线与实验值的比较

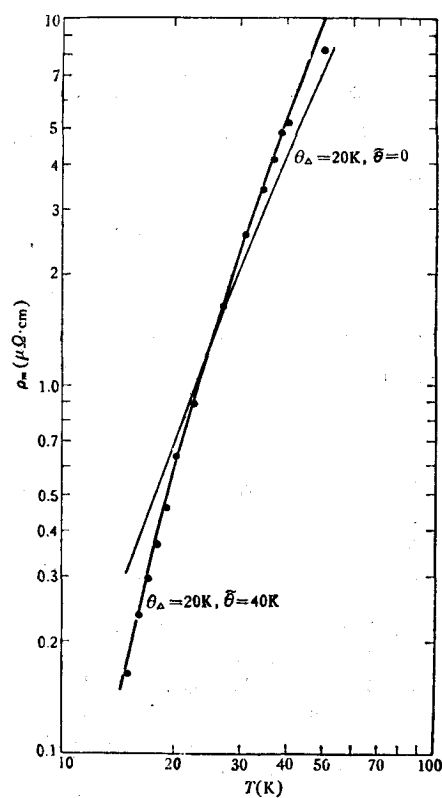


图 2 Dy 磁电阻率理论曲线与实验值的比较

计算的,所用的 θ_Δ 及 $\tilde{\theta}$ 也列在表 1 中. ρ^* 值的选取是使得在 25K 与实验较好符合. 另一方面,按照 (46) 式,

$$\rho^* = \frac{9\pi^3 \hbar \alpha^3}{8e^2 q_D S} \left(\frac{q_D}{k_F} \right)^4, \quad (50)$$

它与高温顺磁区域的磁电阻率 (40) 式

$$\rho_m^0 = \frac{9\pi^3 \hbar}{2e^2 q_D} \frac{S+1}{S} \frac{J_{\text{eff}}^2}{J^2(0)} \alpha \quad (40)$$

能够直接联系:

$$\rho_m^0 = \pi^2 \left(\frac{9\hbar}{e^2 q_D} \right)^{2/3} \frac{S+1}{S^{2/3}} A \rho^{*1/3}, \quad (51)$$

其中

$$A = \left(\frac{J_{\text{eff}}}{J(0)} \right)^2 \left(\frac{k_F}{q_D} \right)^{4/3} = \left(\frac{J_{\text{eff}}}{J(0)} \right)^2 \left(\frac{Z}{2} \right)^{4/9}, \quad (52)$$

Z 是按下式

$$k_F = \left(\frac{3\pi^2}{\Omega_0} Z \right)^{1/3} \quad (53)$$

定义的每原子有效传导电子数. 对于 Tb 和 Dy, 可以预期 Z 基本相同而且交换函数 $J(r)$ 的行为也相近, 因而 A 值不会有很大的差别. 我们假定二者的 A 值相同, 并取 $A=0.059$. 于是, 从低温磁电阻率 (49) 式符合实验所定得的 ρ^* 值就可以按 (51) 式计算 ρ_m^0 . 这样得到的 $\rho_{m\uparrow}^0$ 以及顺磁区域磁电阻率的实验值 ρ_{m*}^0 (取自文献[12]) 也列在表 1 中. 从表中可以看到: 计算值与实验符合得很好. 这表明本文的模型对低温和高温是一致的.

作为比较, 在图 1 和图 2 中还画出了按 (46) 式取 $\tilde{\theta} = 0$, 即

$$\rho_m \propto T^2 \left[I_2 \left(\frac{\theta_\Delta}{T} \right) - \frac{\theta_\Delta}{T} I_1 \left(\frac{\theta_\Delta}{T} \right) \right] \quad (54)$$

用 $\theta_\Delta = 20\text{K}$ 计算的曲线 (细实线), 也就是相当于不考虑 $\sigma\uparrow$ 电子与 $\sigma\downarrow$ 电子能级分裂的结果. 比例系数的选取是使 $T = 25\text{K}$ 处较好符合实验. 很明显, 不考虑自旋向上电子与自旋向下电子能级的分裂, Tb 和 Dy 低温磁电阻率行为不能得到解释.

参 考 文 献

- [1] T. Kasuya, *Progr. Theor. Phys.*, **16**(1956), 53.
- [2] P. G. de Gennes, J. Friedel, *J. Phys. Chem. Solid*, **4**(1958), 71.
- [3] T. Kasuya, *Progr. Theor. Phys.*, **22**(1959), 227.
- [4] I. Mannari, *Progr. Theor. Phys.*, **22**(1959), 335.
- [5] T. Van Peski-Tinbergen, A. J. Dekker, *Physica*, **29**(1963), 917.
- [6] D. A. Goodings, *Phys. Rev.*, **132**(1963), 542.
- [7] R. V. Colvin, S. Legvold, F. H. Spedding, *Phys. Rev.*, **120**(1960), 741.
- [8] A. R. Mackintosh, *Phys. Lett.*, **4**(1963), 140.
- [9] B. Coqblin, *The Electronic Structure of Rare-earth Metals and Alloys*, Academic Press, (1977).
- [10] J. M. Ziman, *Electrons and Phonons*, Oxford University Press, (1960).
- [11] S. Araj, R. V. Colvin, *J. Less-common Metals*, **4**(1962), 572.
- [12] G. S. Anderson, S. Legvold, *Phys. Rev. Lett.*, **1**(1958), 322.

RESISTIVITY DUE TO SPIN-WAVE SCATTERING IN FERROMAGNETIC METALS

LEI XIAO-LIN

(Shanghai Institute of Metallurgy, Academia Sinica)

ABSTRACT

We have discussed the effect of the split of the energy levels between spin-up and spin-down electrons caused by magnetization on the magnon-induced resistivity in ferromagnetic metals at low temperatures. As a result of such an energy split, the low-temperature magnetic resistivity always declines exponentially with decreasing temperature in the single-band model, while it may probably be enhanced in certain conditions in the two-band model. The comparison between the low-temperature expression of magnetic resistivity deduced from the single-band model considering the energy-gap in the spin-wave spectrum and the experimental data of Tb and Dy shows agreement not only on temperature dependence of resistivity at low temperatures but on the magnitude of high-temperature magnetic resistivity as well.