

较高杂质浓度磁性合金负磁阻的 关联对模型

江 启 杜 刘 福 绥

(北京大学物理系)

1985 年 3 月 12 日收到

提 要

本文讨论在有外加磁场情况下, 较高杂质浓度磁性合金中传导电子与关联对散射引起的电阻及磁阻随温度和磁场的变化, 得到了 Rohrer 关于合金 AuFe 磁阻随杂质浓度变化的经验公式.

一、引 言

稀磁合金是 20 年来人们广泛研究的课题之一^[1-7]. 含有较高磁杂质浓度的系统也引起人们的兴趣^[8,9]. 实验发现, 当浓度增大时, 合金的电阻在 T_{\min} (电阻极小温度) 以下还会出现极大^[10]; 外加磁场时, 有些合金 (如 AuFe) 的磁阻的自旋部分 (负磁阻) 与杂质浓度有很强的依赖关系^[9]. 一般认为^[11,12], 这是磁性原子间的相互作用导致的. 为了研究磁性杂质之间相互作用对合金性质的影响, 许多人提出了分子场假设^[11,12]. 但是, 分子场考虑的是杂质间相互作用平均的效果, 因此忽略了其它杂质自旋的内禀性质, 这对与自旋相关散射有关的物理性质将有较大的影响. 如果三个以上杂质自旋集团的效应可以忽略, 则可认为, 合金系统中除了孤立杂质外, 还存在自旋耦合的杂质对, 以下称之为关联对. 本文在有外磁场条件下, 讨论传导电子与任意耦合强度的关联对散射随外磁场、温度和耦合强度的变化关系, 计算了关联对的磁阻, 结合孤立杂质的磁阻贡献, 我们定性上解释了 AuFe 的磁阻实验, 得到了 Rohrer 关于 AuFe 磁阻随杂质浓度变化的经验公式^[9].

二、单个关联对的电阻

传导电子与关联对系统的零级哈密顿量由相互对易的两部分组成

$$\mathcal{H}_0 = \mathcal{H}_c + \mathcal{H}_d,$$
$$\mathcal{H}_c = \sum_{k, m_s} \varepsilon_{k, m_s} a_{k, m_s}^\dagger a_{k, m_s}, \quad \varepsilon_{k, m_s} = \frac{\hbar^2 k^2}{2m} - g_c \mu_B m_s H. \quad (1)$$

\mathcal{H}_c 为传导电子的哈密顿量, $k, m_s (\pm \frac{1}{2})$ 分别为布洛赫波矢和自旋子分量量子数, H 为外加磁场, g_c, μ_B 分别为 g 因子和玻尔磁子. $a^\dagger (a)$ 为传导电子的产生 (湮灭) 算符. 两个耦

合杂质的哈密顿量为

$$\mathcal{H}_c = -W(R)\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2 - g_s \mu_B (S_1^z + S_2^z) H. \quad (2)$$

这里 $W(R)$ 为耦合强度, $\mathbf{S}_1, \mathbf{S}_2$ 为两个杂质的自旋算符(局域磁矩), 为了方便, 假设它们的自旋值相同. \mathcal{H}_c 的本征态和本征值分别为

$$\begin{aligned} |IM\rangle \quad I = 0, 1, 2, \dots, 2S; \quad M = -1, \dots, 1, \\ \varepsilon_{IM} = -\frac{1}{2} W(R)I(I+1) - g_s \mu_B H M. \end{aligned} \quad (2')$$

上面的 I 是总自旋 $\mathbf{I} = \mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2$ 的值, M 为 I^z 的本征值, R 为两自旋的距离. 上式中略去了常数项.

两个杂质系统的 s - d 相互作用为

$$\mathcal{H}' = \frac{1}{N} \sum_{k'km'_s m_s} [V_{k'k} \delta_{m'_s m_s} - J_{k'k}^+ (\mathbf{I} \cdot \boldsymbol{\sigma})_{m'_s m_s} - J_{k'k}^- (\boldsymbol{\sigma} \cdot \mathbf{s})_{m'_s m_s}] a_{k'm'_s}^+ a_{km_s}. \quad (3)$$

上式中 N 是原胞数. 其它量的定义为

$$\begin{aligned} V_{k'k} &= \langle k' | V(\mathbf{r}) + V(\mathbf{r} - \mathbf{R}) | k \rangle, \\ J_{k'k}^\pm &= \langle k' | J(\mathbf{r}) \pm J(\mathbf{r} - \mathbf{R}) | k \rangle. \end{aligned} \quad (4)$$

和通常一样, 假设 s - d 相互作用是局域的, 则

$$\begin{aligned} V_{k'k} &= V\alpha, \quad J_{k'k}^+ = \alpha J, \quad J_{k'k}^- = J\beta, \\ \alpha &= (1 + e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}}), \quad \beta = (1 - e^{-i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}}), \end{aligned} \quad (4')$$

V, J 为常数.

根据自旋相关非弹性散射理论^[33], 耦合杂质 s - d , 散射的弛豫时间为

$$\begin{aligned} \frac{1}{\tau_\pm(k)} &= \frac{mk_Q}{2\pi\hbar^3} \int_0^\pi \sin\theta (1 - \cos\theta) d\theta \left[\frac{dQ_R}{4\pi} \sum_{IM} P_{IM} \left[|\langle \pm IM | t | \pm IM \rangle|^2 \right. \right. \\ &+ |\langle \pm IM | t | \pm I - 1, M \rangle|^2 \frac{f(\varepsilon_\pm + IW)}{f(\varepsilon_\pm)} \\ &+ |\langle \pm IM | t | \pm I + 1, M \rangle|^2 \frac{f(\varepsilon_\pm - IW)}{f(\varepsilon_\pm)} \\ &+ |\langle \mp IM | t | \pm IM \mp 1 \rangle|^2 \frac{f(\varepsilon_\pm \pm y)}{f(\varepsilon_\pm)} \\ &+ |\langle \mp IM | t | \pm I - 1, M \mp 1 \rangle|^2 \frac{f(\varepsilon_\pm + IW \pm y)}{f(\varepsilon_\pm)} \\ &\left. \left. + |\langle \mp IM | t | \pm I + 1, M \mp 1 \rangle|^2 \frac{f(\varepsilon_\pm - IW \pm y)}{f(\varepsilon_\pm)} \right] \right. \\ &\quad \left. (I' = I + 1), \right. \end{aligned} \quad (5)$$

其中

$$P_{IM} = (e^{\frac{1}{2}I(I+1)W' + My'}) / \left[\sum_{I=0}^{2S} \sum_{M=-I}^I e^{\frac{1}{2}I(I+1)W' + My'} \right] \quad (5')$$

为杂质自旋处于 $|IM\rangle$ 态的几率. $W' = W/k_B T$, $y' = g_s \mu_B H / k_B T$. $f(\varepsilon)$ 为费密分布函数. θ 为散射角, 对 dQ_R 积分代表对杂质取向的平均. t 为 s - d 散射 T 矩阵

$$t = \mathcal{H}' + \mathcal{H}' G^{(0)} \mathcal{H}' + \cdots; G^{(0)}(E) = \frac{1}{E - \mathcal{H}_0}. \quad (6)$$

由(3)式不难得到一阶矩阵元^[13], 但二阶矩阵元的计算比较繁琐, 其结果参见附录.

把(5)式代入电导公式^[13]

$$\begin{aligned} \sigma^\pm &= -\frac{e^2}{6\pi^2 m^2} \int_{-\infty}^{+\infty} \tau_\pm(k) k^3 \frac{\partial f(\varepsilon_\pm)}{\partial \varepsilon_\pm} d\varepsilon_\pm \\ &= \frac{e^2}{6m\pi^2} \langle \tau_\pm(k) k_\pm^3 \rangle, \end{aligned} \quad (7)$$

形式上就能得到关联对的电导. 但对任意的 V 和 J , 要得到(7)式的明显表达式是非常困难的. 本文仅就 $|V| \gg |J|$ 的情形进行讨论. 对于实际合金, 这一条件一般是满足的. 把 τ_\pm 展开成 J/V 的级数, 取到 $\left(\frac{J}{V}\right)^2 J/E_F$ (E_F 为费密能量)项, 最后我们得到单个关联对电阻在任意耦合强度和磁场下的表达式

$$\rho_p = R_V \cdot \frac{a}{2N} \left[1 + \left(\frac{J}{2V}\right)^2 \rho_w \right]. \quad (8)$$

上式中

$$R_V = \frac{3\pi m Q V^2}{2 E_F e^2 \hbar N}, \quad (9)$$

$$\begin{aligned} \rho_w &= -4 \langle M \rangle_w^2 + \left(\frac{b}{a}\right) Y(W', y') + \frac{3zJ}{2 E_F} \\ &\quad \cdot \frac{1}{a} [X(W', y') - 2 \langle M \rangle_w Z(W', y')], \end{aligned} \quad (10)$$

$$\langle M \rangle_w = \sum_{l=0}^{2S} \sum_{M=-l}^l M P_{lM}, \quad (11)$$

$$\left. \begin{aligned} a &= 4 + \frac{16}{D^4} [2D^2 \sin D - (D^2 - 2) \cos D - 2] \\ b &= 4 - \frac{16}{D^4} [2D^2 \sin D - (D^2 - 2) \cos D - 2] \end{aligned} \right\} (D = 2k_F R). \quad (12)$$

a, b 以及下面的 A_3, A_4 反映了电子在两个杂质上散射相干的强弱. $D \gg 1$ 时, 散射是独立的.

$$\begin{aligned} bY(W', y') &= \sum_{lM} P_{lM} \{ 2b(I^2 - M^2) Q \mu(IW') \\ &\quad + (I + M)(I + M - 1) b Q \mu(IW' + y') \\ &\quad + b(I - M)(I - M - 1) Q \mu(IW' - y') \\ &\quad + a [M^2 + (I + M)(I - M + 1) \mu(y')] \}, \end{aligned} \quad (13)$$

$$\begin{aligned} X(W', y') &= \sum_{lM} P_{lM} \left\{ 2(I^2 - M^2) Q b \mu(IW') [\bar{R}(IW', -y') \right. \\ &\quad + \bar{R}(IW', y')] + A_4 I^- \mu(y') \bar{R}(y', 0) \\ &\quad \left. + I^- A_3 Q \mu(y') [(I + M - 1) \bar{R}(y', -IW')] \right\} \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + (I - M)\bar{R}(y', IW') - A_3 I^- Q' \mu(y') \\
& \times [(I' - M + 1)\bar{R}(y', I'W') \\
& + (I' + M)\bar{R}(y', -I'W')] \\
& + bQ \sum_{\delta=\pm 1} \cdot (I + \delta M)(I + \delta M - 1)\mu(IW' + \delta y') \\
& \times \left[\bar{R}(IW' + \delta y', \delta y') + \bar{R}(IW' + \delta y', 0) + \frac{M}{2} Z_{IM} \right], \quad (14)
\end{aligned}$$

$$Z(W', y') = \sum_{IM} P_{IM} Z_{IM}, \quad (15)$$

$$\begin{aligned}
Z_{IM} = & 2A_4 M \bar{R}(0, y') + A_3 Q \sum_{\delta=\pm 1} \delta(I + \delta M)(I + \delta M - 1) \bar{R}(0, IW' + \delta y') \\
& - A_3 Q' \sum_{\delta=\pm 1} (I' + \delta M)(I' + \delta M + 1) \bar{R}(0, I'W' + \delta y') \\
& \qquad \qquad \qquad (I' = I + 1), \quad (16)
\end{aligned}$$

$$I^- = (I + M)(I - M + 1), \quad \mu(x') = \left\langle \frac{f(\varepsilon + x)}{f(\varepsilon)} \right\rangle_{\varepsilon} = \frac{x'}{e^{x'} - 1}, \quad (17)$$

$$Q = \frac{(2S + 1)^2 - I^2}{4I^2 - 1}, \quad Q' = \frac{(2S + 1)^2 - (I + 1)^2}{4(I + 1)^2 - 1}, \quad (18)$$

$$\frac{3\pi J}{4E_F} \mu(x') \bar{R}(x', y') = \left\langle \frac{f(\varepsilon + x)}{f(\varepsilon)} g(\varepsilon + x) \right\rangle_{\varepsilon},$$

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}} \frac{f(\varepsilon_{\mathbf{q}})}{\varepsilon_{\mathbf{q}} - \varepsilon}, \quad (19)$$

$$A_4 = a + c, \quad A_3 = a - c, \quad c = \frac{16(1 - \cos D)}{D^2}. \quad (20)$$

以上表达式中 z 为原子的价电子数.

下面分别就几种简单情形讨论(8)式的特点.

1) 外场为零, $k_F R \gg 1$, 此时有

$$\begin{aligned}
\rho_F(W', y' = 0) = & R_V \cdot \frac{2}{N} \left\{ 1 + \left(\frac{J}{2V} \right)^2 Y(W', 0) \left[1 + \frac{3\pi J}{E_F} \ln \frac{T}{T_0} \right] \right. \\
& \left. + \frac{3\pi J}{E_F} \left(\frac{J}{2V} \right)^2 \bar{X}(W') \right\} \quad \left(T_0 = \frac{2E_F e^{-1.568}}{k_B} \right), \quad (21)
\end{aligned}$$

$$Y(W', 0) = \sum_{I=1}^{2S} (2I + 1) P_I [Q \mu(IW') \cdot 2I(2I - 1) + I(I + 1)], \quad (22)$$

$$\begin{aligned}
\bar{X}(W') = & \frac{1}{2} \sum_{I=1}^{2S} (2I + 1) P_I [4IQ(2I - 1)\mu(IW')(I_2(IW') - I_1(0)) \\
& + I(I + 1)(2I - 1)Q(I_1(IW') - I_1(I'W')) \\
& + I(I + 1)(I_1(I'W') - I_1(0))]. \quad (23)
\end{aligned}$$

从(21)式可以发现, Kondo $\ln T$ 的系数不再是常数, 而是与温度有关. 我们的计算结果

表明, 杂质间的相互作用使得 $\ln T$ 的贡献下降. $W = 0$ 时, (21) 式就和两个孤立杂质的结果一致^[3].

2) $W/k_B T \gg 1$

这是强铁磁耦合情形, 总自旋处于 $2S$ 态. 对于单个自旋而言, 由于相互作用, 自旋倒向散射被抑制, 但耦合自旋作为整体, 这种过程仍能发生, 因而 $\ln T$ 项仍将存在, 这是与分子场理论有本质上的不同的. 这时又有两种情况:

(1) $k_F R \rightarrow 0$ (实际金属中 $R \geq$ 最近邻距)

$$\begin{aligned} \rho_P = R_{V'} \cdot \frac{1}{N} \left\{ 1 + \left(\frac{J}{V'} \right)^2 \left[\langle M^2 \rangle_{2S} - 4 \langle M \rangle_{2S}^2 + \langle M \rangle_{2S} \cdot \frac{y'}{2} \cdot \frac{1}{\text{sh}^2 y'/2} \right] \right. \\ \cdot \left[1 + \frac{3zJ}{E_F} \ln \frac{T}{T_0} \right] + \frac{3zJ}{E_F} \left(\frac{J}{V'} \right)^2 \left[(\langle M^2 \rangle_{2S} - 4 \langle M \rangle_{2S}^2) (I_1(y')) \right. \\ \left. - I_1(0) \right] + \langle M \rangle_{2S} \cdot \frac{y'}{2} \cdot \frac{1}{\text{sh}^2 y'/2} (I_2(y') - I_1(0)) \left. \right\} \quad (V' = 2V). \quad (24) \end{aligned}$$

上式正是自旋为 $2S$ 的孤立杂质的结果^[14].

(2) $k_F R \gg 1$, 这时尽管两个杂质相距较远, 但仍有较强的铁磁耦合, 这在低温和具有长程杂质相互作用的合金中是能出现的. 于是有

$$\begin{aligned} \rho_P(W, y, T) = R_V \cdot \frac{2}{N} \left\{ 1 + \left(\frac{J'}{V} \right)^2 \left[\langle M^2 \rangle_{2S} - 4 \langle M \rangle_{2S}^2 + \langle M \rangle_{2S} \frac{y'/2}{\text{sh}^2 y'/2} \right] \right. \\ \cdot \left[1 + \frac{3zJ'}{E_F} \cdot \ln \frac{T}{T'_0} \right] + \frac{3zJ'}{E_F} \left(\frac{J'}{V} \right)^2 \\ \cdot \left[(\langle M^2 \rangle_{2S} - 4 \langle M \rangle_{2S}^2) (I_1(y') - I_1(0)) + \langle M \rangle_{2S} \right. \\ \left. \cdot \frac{y'}{2} \cdot \frac{1}{\text{sh}^2 \left(\frac{y'}{2} \right)} (I_2(y') - I_1(0)) \right] \left. \right\}, \quad (25) \end{aligned}$$

$$J' = \frac{J}{2}, \quad T'_0 = T_0 \cdot 2E_F / (S \cdot W \cdot e^2). \quad (25')$$

和 (24) 式比较, 可以发现, 上式和它形式上完全一样, 其不同点仅在于 $s-d$ 交换积分和 T_0 发生变化. 外场为零时, 上式和两个孤立杂质的偏离 $\Delta\rho$ 为

$$\Delta\rho = -SR_V \cdot \frac{2}{N} \left(\frac{J}{V} \right)^2 \left[1 + \frac{3zJ}{E_F} \cdot \frac{1}{2} \left(S + \frac{3}{2} \right) \ln \frac{T}{T'_0} \right], \quad (26)$$

$$T'_0 = T_0 \left[\frac{SWe^2}{2E_F} \right]^{(s+\frac{1}{2})/(s+\frac{3}{2})}. \quad (26')$$

3) $-W/k_B T \gg 1$, 即反铁磁杂质耦合, 总自旋处于单重态, 散射与自旋无关, 因而与磁场无关

$$\rho_P = \frac{2}{N} \cdot R_V. \quad (27)$$

所以

$$\Delta\rho = -\frac{2}{N} R_V \left(\frac{J}{V}\right)^2 S(S+1) \left(1 + \frac{3zJ}{E_F} \ln \frac{T}{T_0}\right). \quad (28)$$

在以上各式中 $I_1(x)$ 和 $I_2(x)$ 是两个积分函数,其定义见文献[13]. (26)和(28)式表明,无论是铁磁还是反铁磁杂质相互作用的关联对,其电阻相对于两个孤立杂质总是减小.这是因为无论是哪种耦合都是对自旋倒向散射起限制作用.文献[15]用这一模型来描述稀磁合金电阻的极大现象,结果表明,这一模型对大部分合金来说是一好的近似.

三、单个关联对的磁阻及结果讨论

一般情况下,稀磁合金的磁阻有两部分,即正常部分和自旋部分.前者是由于洛伦兹力作用导致的.它随磁场增加而增加.「本文仅讨论后者的贡献.如果杂质浓度足够低,以致可以忽略原子之间的相互作用,这时 Abrikosov^[16], Beál-Monod 等人^[14]的理论将得到比较好的结果.

Rohrer 对具有较高浓度的 AuFe 合金的磁阻进行了比较系统的测量,结果发现:

(1) $\Delta\rho_m(H, T)/\rho_i(H=0, T)$ 与杂质浓度有很强的依赖关系,且近似有经验规律

$$\Delta\rho_m/\rho_i = (B + cD)^{-1}. \quad (29)$$

$\Delta\rho_m$ 和 ρ_i 分别代表自旋部分的磁阻和零场下的杂质电阻. B 和 D 是与磁场和温度有关的函数, c 是杂质浓度.

(2) 存在一温度 T_0 , $T < T_0$ 时, $\Delta\rho_m/\rho_i$ 不再仅是 H/T 的函数.

(3) 磁场高达 200 kGs 时(脉冲场), $\Delta\rho_m/\rho_i$ 仍无饱和.

以上现象和现有的单杂质理论在定性上不符.按照文献[11],[14]和[16]的结果, $\Delta\rho_m/\rho_i$ 与浓度无关,且只是 H/T 的函数.这说明,杂质浓度较高时,自旋之间的相互作用不能忽略.作为近似,可以认为系统除了孤立杂质外,还存在关联对,这时合金的电阻可近似为

$$\rho_{\text{tot}} = \rho_{\text{iso}}(H, T) + cN_i z_{\text{eff}} \Delta\rho(W, H, T), \quad (30)$$

其中 N_i 是杂质数目, z_{eff} 可以认为是“有效近邻数”, $\Delta\rho$ 是关联对电阻相对于两个孤立杂质的偏差

$$\Delta\rho(W, H, T) = \rho_p(W, H, T) - \rho_p(0, H, T). \quad (31)$$

同样,合金的磁阻为

$$\Delta\rho_m = \Delta\rho_{\text{iso}} + cN_i z_{\text{eff}} [\Delta\rho(W, H, T) - \Delta\rho(W, 0, T)]. \quad (32)$$

由(30)–(32)和(8)–(10)式可以得到

$$\Delta\rho_m/\rho_{\text{tot}}(H=0) = \frac{\Delta R_0(H, T) + 2z_{\text{eff}}c\Delta R(W, H, T)}{\gamma^2 + R_0(0, T) + 2z_{\text{eff}}cR(W, 0, T)}. \quad (33)$$

浓度不是太高时则得

$$B = \frac{\gamma^2 + R_0(0, T)}{\Delta R_0(H, T)}, \quad \gamma = \left(\frac{2V}{J}\right)^2, \quad (34)$$

$$D = 2z_{\text{eff}} [R(W, 0, T) - B \cdot \Delta R(W, H, T)] / \Delta R_0,$$

其中

$$\begin{aligned}
 \Delta R(W, H, T) &= R(W, H, T) - R(W, 0, T) \\
 &= [\rho_H(H, T) - \rho_{W=0}(H, T)] - [\rho_H(0, T) - \rho_{W=0}(0, T)], \\
 \Delta R_0(H, T) &= R_0(H, T) - R_0(0, T), \\
 R_0(H, T) &= \rho_{W=0}(H, T) \quad (k_F R \gg 1).
 \end{aligned} \tag{35}$$

从(33)式可以看到: 合金的磁阻不仅是 H/T 的函数, 而且同 W/T 有关, 同时也与磁性杂质的浓度有关. 因为 $|V| \gg |J|$, 由(33)式就得到

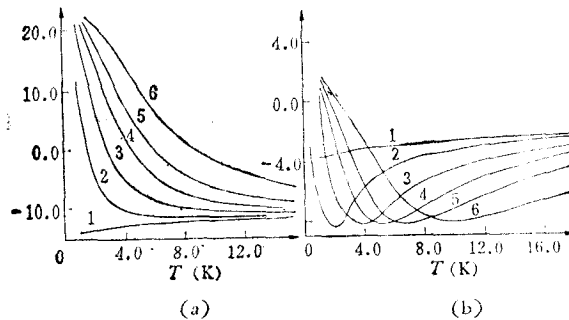
$$\Delta \rho_m / \rho_{\text{tot}}(H=0) \simeq (B + cD)^{-1}. \tag{36}$$

这正是 Rohrer 的经验公式. 这样, 我们从模型本身出发得到了与实验一致的结果.

为了进行定量计算, 假设 $W(R)$ 就是 RKKY 相互作用, 考虑到 d 轨道的简并度, $W(R)$ 可写为^[17]

$$W(R) = -\frac{9}{2} \pi \frac{(2l+1)^2 J^2 z}{E_F} \cdot \frac{(2k_F R_n) \cos(2k_F R_n) - \sin(2k_F R_n)}{(2k_F R_n)^4}, \tag{37}$$

R_n 为第 n 近邻距. 我们分别对不同的 S 值和 n 为 $1, 2, \dots, 6$ 的情形以及对不同的磁场计算了 $R(W, H, T)$ 随温度的变化曲线. 图 1 中给出了 $S = 3/2$, $n = 1, 2$ 的计算结果. 改变 S 值, $W > 0$ 和 $W < 0$ 时的曲线分别与图 1(a) 和 (b) 有相似的变化趋势.



(a) $4R(W, H, T) \times 10^{-1}; W = -113.4 \text{ K}; S = 3/2$ (b) $4R(W, H, T) \times 10^{-1}; W = 51 \text{ K}; S = 3/2$

图 1

曲线 1 为 0 kGs; 曲线 2 为 10 kGs; 曲线 3 为 20 kGs; 曲线 4 为 30 kGs; 曲线 5 为 40 kGs;
曲线 6 为 60 kGs

由图 1 可以得到关联对电阻贡献的两个特点: (1) 外场为零时, 无论是铁磁还是反铁磁杂质耦合都有 $R(W, 0, T) < 0$. 所以, 杂质间的相互作用可以导致合金 $\rho-T$ 曲线极大现象. (2) 外加磁场时, 铁磁关联对 ($W > 0$) 的磁阻在低温下大于零, 随温度升高迅速下降, 并转变为负. 对于反铁磁关联对 ($W < 0$), 其磁阻恒为正.

对于上述特点, 物理上是容易理解的: 当 $W/k_B T \gg 1$ 时, 关联对处于总自旋为 $2S$ 的态, 它的电阻与孤立杂质的结果在形式上一样, 但交换积分变小了 ($J = J/2$), 与两个孤立杂质的结果相比较, 等价于负磁阻减小, 即 $\Delta R(W, H, T) > 0$. 当 $W < 0$ 时, 外磁场总是起削弱关联对之间耦合的作用. 一方面, 杂质自旋倾向于沿磁场方向排列; 另一方面, 反铁磁耦合又要求自旋作反平行排列, 两者相互抗衡导致了正磁阻. 以上结果和分子场的理论不同. 按照分子场的观点, 局域磁矩同时感受到外场 H 和周围杂质的平均场 H_i 的作用, 则

$$\mathcal{H}_c = -g_s \mu_B \mathbf{S}_i \cdot (\mathbf{H}_{\text{ex}} + \mathbf{H}_i). \tag{38}$$

因此,除了必须对内场进行自洽处理外,它同外场处于同等的地位,按 Beal-Monod 的磁阻理论^[14],其磁阻贡献总是负的.如果按照同(33)式一样的分析就会发现 $D > 0$. 但 Rohrer 的实验结果表明,温度不太高时 ($T \lesssim 20$ K), $B < 0$, $D < 0$. 因此我们认为,分子场理论过分估计了自旋的有序排列,同时它完全忽略除 S_i 外其它杂质的内禀性质 (H_i 没有内部自由度),显然,这对与自旋相关散射有关的物理性质将有显著的影响. 对于关联对模型,计算结果表明, $D < 0$, 这与实验在定性上是一致的. 对 Au-Fe 合金, $S = 3/2$, 我们取 $|J/V| = 0.094$, 采用最近邻近似,计算的 B 值与实验比较的结果示于图 2 中. 在弱场下与实验很好符合. 利用实验得到的 D 值和(34)式,估计了 α_{eff} 的值,列在表 1 中. 表中数值在量级上是合理的.

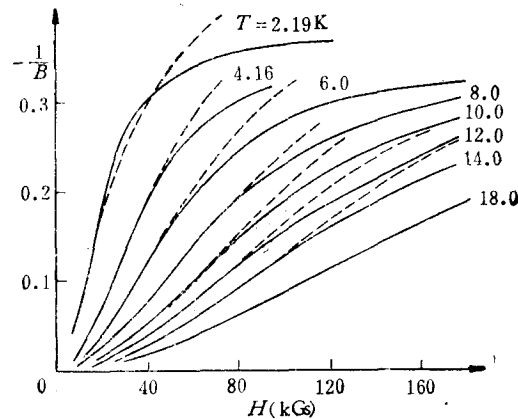


图 2

----为 Rohrer 的实验曲线^[15]

表 1

H(kGs)	60	90	120	150	190
α_{eff}	10.8	9.8	7.8	6.4	7.8

必须指出,尽管我们得到了与实验一致的结果,但这种比较仍然是定性的.这是因为我们在讨论中作了最近邻近似,而对于实际合金,我们必须考虑各种可能耦合强度的关联对的贡献,即

$$\Delta\rho_m = \Delta\rho_{\text{iso}} + 2c^2 \cdot \left(\frac{J}{2V}\right)^2 R_V \sum_{\langle W \rangle} P(W) \Delta R(W, H, T), \quad (39)$$

其中 $P(W)$ 是耦合强度为 W 的几率,即 W 的分布.再之,本文引入的 $W(R)$ 仍是唯象的,较严格的理论应从 $s-d$ 哈密顿量出发,采用自洽的方法处理^[16].但是,有外磁场时,即使对 $S = 1/2$ 的情形,这样的计算也是非常困难的^[17].

总结全文,关联对模型能够比较好地反映合金中杂质自旋之间的相互作用,它和分子场理论的区别在于,本模型同时考虑了两个杂质自旋的内部自由度.值得指出,最近 Nigam 等人^[8]在正则自旋玻璃上得到的磁阻实验结果与本文也是一致的.

附 录 一

在 (5) 式中, 我们必须计算二阶 t 矩阵在系统的态矢 $|m_s, l, M\rangle$ 之间的跃迁矩阵元. 下面以 $\langle k' + l - 1, M | t^{(2)} | k + l, M \rangle$ 为例作简单的推导, 其它矩阵元可同样得到.

$$\begin{aligned} \langle k' + l - 1, M | t^{(2)} | k + l, M \rangle = & \sum_{q m_1 l_1 M_1} \left\{ \langle k' + l - 1, M | \mathcal{H}'' | q m_1 l_1 M_1 \rangle \langle q m_1 l_1 M_1 | \mathcal{H}'' | k + l, M \rangle \right. \\ & \cdot \frac{1 - f(q m_1)}{\varepsilon_{l M}(k + l) - \varepsilon_{l_1 M_1}(q m_1)} + \langle q m_1 l_1 M_1 | \mathcal{H}'' | k + l, M \rangle \\ & \cdot \langle k' + l, M_1 | \mathcal{H}'' | q m_1 l M \rangle \\ & \left. \cdot \frac{f(q m_1)}{\varepsilon_{l M}(k + l) + \varepsilon_{q m_1} - (\varepsilon_{l_1 M_1}(k' + l) + \varepsilon_{k + l})} \right\}. \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

由能量守恒关系

$$E_{l M}(k + l) - \varepsilon_{l_1 M_1}(k' + l) = 0, \quad (\text{A.2})$$

和一阶 s - d 矩阵元^[13], 略去与温度无关的项, 最后得到

$$\begin{aligned} \langle k' + l - 1, M | t^{(2)} | k + l, M \rangle = & 2\sqrt{(l^2 - M^2)} \mathcal{Q} \left(\frac{J}{2N} \right)^2 \sum_q f(q-) \cdot [\alpha \beta' (\varepsilon(k + l) - \varepsilon(q -) + y)^{-1} \\ & + \alpha' \beta (\varepsilon(k + l) - \varepsilon(q -) + y - IV)^{-1}], \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned} \alpha &= (1 + e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}}), \quad \beta = (1 - e^{-i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{R}}), \\ \alpha' &= (1 + e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{R}}), \quad \beta' = (1 - e^{-i(\mathbf{k}'-\mathbf{q})\cdot\mathbf{R}}). \end{aligned} \quad (\text{A.4})$$

附 录 二

(14)式用到了函数 $\bar{R}(x', y')$, 它由下式定义:

$$N(E_F) \mu(x') \bar{R}(x', y') = \left\langle \frac{f(\varepsilon + x)}{f(\varepsilon)} g(\varepsilon + y) \right\rangle_\varepsilon. \quad (\text{A.5})$$

$N(E_F) = 3z/(4E_F)$ 为单一自旋态的能态密度.

$$\begin{aligned} g(y) &= \frac{1}{N} \sum_q \frac{f(q)}{\varepsilon_q - y} = \frac{\Omega}{2\pi^2} \int q^2 dq \frac{f(\varepsilon_q)}{\varepsilon_q - y} \\ &= N(E_F) \left[\lambda(T) - \int_0^\infty \ln \left| \frac{\varepsilon - y}{2k_B T} \right| \frac{\partial f(\varepsilon)}{\partial \varepsilon} d\varepsilon \right], \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

$$\lambda(T) = 2 + \ln \left| \frac{k_B T}{2E_F} \right|. \quad (\text{A.7})$$

所以

$$\left\langle \frac{f(\varepsilon + x)}{f(\varepsilon)} g(\varepsilon + y) \right\rangle_\varepsilon = N(E_F) [\mu(x') \lambda(T) + I_4(x', y')], \quad (\text{A.8})$$

$$x' = x/k_B T, \quad \mu(x') = \frac{x'}{e^{x'} - 1},$$

$$I_4(x', y') = \int_{-\infty}^{+\infty} \frac{\partial f}{\partial \varepsilon} \cdot \frac{\partial f'}{\partial \varepsilon'} \cdot \frac{f(\varepsilon + x)}{f(\varepsilon)} \ln \left| \frac{\varepsilon' - \varepsilon - y}{2k_B T} \right| d\varepsilon d\varepsilon'. \quad (\text{A.9})$$

作变换

$$v = (\varepsilon - \varepsilon')/2k_B T, \quad u = (\varepsilon + \varepsilon' - 2E_F)/2k_B T. \quad (\text{A.10})$$

对 u 的积分可以完成

$$I_4(x', y') = \mu(x') \bar{I}_4(x', y'), \quad (\text{A.11})$$

$$\bar{I}_4(x', y') = \int_{-\infty}^{+\infty} dv \ln \left| v - \frac{y'}{2} \right| F(v, x') dv. \quad (\text{A.12})$$

$F(v, x)$ 的定义为

$$F(v, x) = \frac{\partial}{\partial v} \left[\frac{\phi(v) - \phi(v - x/2)}{x} \right], \quad \phi(v) = v \text{cth} v. \quad (\text{A.13})$$

$F(v, x)$ 具有下列对称性质:

$$\begin{aligned} F(v, x) &= F(-v, -x), \quad F(v, -x) = F(-v, x), \\ F(v, x) &= F\left(\frac{x}{2} - v, x\right) = F\left(v - \frac{x}{2}, -x\right). \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

利用 (A.14) 式不难证明 $\bar{I}_4(x, y)$ 满足关系

$$\begin{aligned} \bar{I}_4(x, -y) &= \bar{I}_4(-x, y); \quad \bar{I}_4(0, y) = I_1(y), \\ \bar{I}_4(x, x) &= I_4(x, 0) = I_2(x), \\ \bar{I}_4(x, y) &= I_4(x, x - y), \\ \bar{I}_4(x, y) &= \frac{y}{x} I_2(y) + \frac{x - y}{x} I_2(x - y), \end{aligned} \quad (\text{A.15})$$

其中

$$\begin{aligned} I_1(x) &= \frac{1}{2} \int_{-\infty}^{+\infty} \ln \left| v + \frac{x}{2} \right| F(0, v) dv, \\ I_2(x) &= \int_{-\infty}^{+\infty} \ln |v| F(v, x) dv, \end{aligned} \quad (\text{A.16})$$

$$\begin{aligned} I_1(x) &\cong \begin{cases} -0.432 + 0.091x^2 & |x| < 2; \\ \ln \left| \frac{x}{2} \right| - \frac{3.27}{x^2} & |x| > 10, \end{cases} \\ I_2(x) &\cong \begin{cases} -0.432 + 0.030x^2 & |x| < 2; \\ \ln \left| \frac{x}{2} \right| - 1 + \frac{3.27}{x^2} & |x| > 10. \end{cases} \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

参 考 文 献

- [1] G. J. Van den Berg, *Prog. Low Temp. Phys.*, IV(1964), by C. J. Gorter, Amsterdam: North-Holland.
- [2] J. Kondo, *Prog. Theor. Phys.*, **32**(1964), 37 (Japan).
- [3] J. Kondo, *Solid State Phys.*, **23**, by F. Seitz, D. Turnbull and H. Ehrenreich, New York: Academic Press.
- [4] G. Grüner and A. Zawadowski, *Rep. Prog. Phys.*, **37** (1974), 1581.
- [5] C. Rizzuto, *Rep. Prog. Phys.*, **37** (1974), 147.
- [6] N. Andrei *et al.*, *Rev. Mod. Phys.*, **55**(2) (1983), 331.
- [7] A. A. Abrikosov, *Physics*, **2**(1965), 5.
- [8] A. K. Nigam, A. K. Majumdar, *Phys. Rev.*, **B27** (1983), 495.
- [9] H. Rohrer, *Phys. Rev.*, **174** (1968), 583.
- [10] F. T. Hedgcock, C. Rizzuto, *Phys. Rev.*, **163** (1967), 517.
- [11] R. J. Harrison and M. W. Klein, *Phys. Rev.*, **154** (1967), 540.
- [12] S. D. Silverstein, *Phys. Rev. Lett.*, **16** (1966), 466.
- [13] Tineke Van Peski-Tinbergen and A. J. Dekker, *Physica*, **29** (1963), 917.
- [14] M. T. Beal-Monod and R. A. Weiner, *Phys. Rev.*, **170** (1968), 552.
- [15] K. Matho and M. T. Beal-Monod, *Phys. Rev.*, **B5** (1972), 1899.
- [16] A. A. Abrikosov, *Physics*, **2**(1965), 61.
- [17] M. T. Beal-Monod, *Phys. Rev.*, **178** (1969), 874.
- [18] 汪仲诚、刘福绥, *物理学报*, **32**(1983), 33.

**COUPLING PAIR MODEL FOR NEGATIVE
MAGNETORESISTANCE OF MAGNETIC
ALLOY WITH SLIGHTLY HIGH
CONCENTRATION OF IMPURITY**

JIANG QI-DU LIU FU-SUI

(Department of Physics, Peking University)

ABSTRACT

This report discussed the dependence of the electrical resistance and magnetoresistance on temperature and magnetic field, which are resulted from the scattering of conducting electrons with coupled pairs in magnetic field for magnetic alloy with slightly high concentration of impurity. Rohrer's empirical formula of magnetoresistance variation with concentration for AuFe alloy is obtained here theoretically.
