

自旋玻璃系统的量子输运方程*

易 林 姚凯伦¹⁾

华中理工大学物理系, 武汉 430074

1993年5月3日收到

通过引入电子的弹性散射和非弹性散射的自能和相应的物理格林函数, 将磁场中的 Mahan-Hänsch 量子输运方程推广到自旋玻璃系统中, 在电子的近弹性散射近似下, 求解了 s-d 交换相互作用导致的自旋玻璃态霍耳电导; 获得了电阻率与自旋玻璃 Edwards-Anderson (EA) 序参数和局域磁化率之间的关系; 讨论了自旋玻璃热电势和特征温度.

PACC: 7540; 7550B; 6630; 7630

一、引言

近些年来, 低温磁性材料的研究极其活跃, 尤其在量子自旋玻璃的磁性方面, 研究已取得了显著的进展^[1-4]. 然而, 在电输运性质方面, 由于磁系统中电子所受的散射非常复杂, 人们常采用玻耳兹曼方程近似处理^[5,6]. 众所周知, 低温量子涨落对输运系数的影响通常必须考虑. 对磁性玻璃系统, 相应的量子输运方程有待建立.

本文将推广磁场中的 Mahan-Hänsch 定态量子输运方程到磁性玻璃系统, 获得电场作用下的定态方程. 应用方程计算了具有 s-d 交换作用的自旋玻璃模型的霍耳电导和热电势, 并讨论了系统的几个特征温度和自旋玻璃序参数的关系.

二、量子输运方程

Mahan 和 Hänsch 采用 Kadanoff-Baym 的梯度展开方法, 经过冗长的推导, 获得了磁场中的定态多体输运方程^[7]

$$\begin{aligned} G^>(\mathbf{Q}, \omega) \Sigma^<(\mathbf{Q}, \omega) - \Sigma^>(\mathbf{Q}, \omega) G^<(\mathbf{Q}, \omega) \\ = i(e/c) \mathbf{V}_\mathbf{q} \cdot [\mathbf{H} \times \nabla_\mathbf{q} G^<(\mathbf{Q}, \omega)] - e \mathbf{E} \cdot \mathbf{V}_\mathbf{q} \Gamma(\omega) A^2(\mathbf{Q}, \omega) \frac{\partial n(\omega)}{\partial \omega}. \quad (1) \end{aligned}$$

其中 $G^>$ 和 $G^<$ 为电子的物理格林函数, $\Sigma^>$ 和 $\Sigma^<$ 为相应的自能, $\Gamma(\omega)$ 为系统的弛豫函数, $A(\mathbf{Q}, \omega)$ 为谱函数, $\mathbf{V}_\mathbf{q}$ 为电子群速度, $\mathbf{H}$ 和 $\mathbf{E}$ 分别为外加的磁场和电场. 详细参见文献[7]. 由于方程(1)是从有序系统推导得出的, 不能直接应用于无序自旋玻璃系统. 但是, 方程(1)仍可视作某个固定杂质位形的定态方程. 考虑到各种可能的位形分

* 国家自然科学基金资助的课题.

1) 中国高等科学技术中心(世界实验室), 北京 100080.

布,必须对方程(1)进行无规平均。为此,将电子受杂质自旋的散射分为弹性散射和非弹性散射,物理自能和相应的格林函数可表示为

$$\begin{aligned}\Sigma^><(\mathbf{Q},\omega) &= \Sigma_e^><(\mathbf{Q},\omega) + \Sigma_i^><(\mathbf{Q},\omega); \\ G^><(\mathbf{Q},\omega) &= G_e^><(\mathbf{Q},\omega) + G_i^><(\mathbf{Q},\omega),\end{aligned}\quad (2)$$

其中下标 e 和 i 分别为弹性量和非弹性量。利用(2)式,考虑对方程(1)的无规平均项

$$\begin{aligned}\langle G^>(\mathbf{Q},\omega)\Sigma^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle &= \langle G_e^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle\Sigma_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle + \langle G_e^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle\Sigma_i^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle \\ &+ \langle G_i^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle\Sigma_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle + \langle G_i^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle\Sigma_i^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle,\end{aligned}\quad (3)$$

其中尖括号为对杂质自旋位形的无规平均。(3)式等号右边的分解利用了费曼图形规则,即

$$\begin{aligned}\langle G_e^>(\mathbf{Q},\omega)\Sigma_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle &= \langle G_e^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle\Sigma_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle; \\ \langle G_e^>(\mathbf{Q},\omega)\Sigma_i^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle &= \langle G_e^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle\Sigma_i^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle; \\ \langle G_i^>(\mathbf{Q},\omega)\Sigma_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle &= \langle G_i^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle\Sigma_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle.\end{aligned}$$

同理,有

$$\begin{aligned}\langle\Sigma^>(\mathbf{Q},\omega)G^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle &= \langle\Sigma_e^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle G_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle + \langle\Sigma_e^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle G_i^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle \\ &+ \langle\Sigma_i^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle G_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle + \langle\Sigma_i^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle G_i^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle.\end{aligned}\quad (4)$$

因为无规平均为相对于杂质位形的,而电子的谱函数为杂质位形的慢变函数^[5,6],故方程(1)等号右边第二项平均后,仅作弛豫平均变换 $\Gamma(\omega) \rightarrow \langle\Gamma(\omega)\rangle$ 。为简单计,后面将略去尖括号。将(3)和(4)式代入(1)式,定义广义的“碰撞函数” L 为

$$\begin{aligned}L_{ii} &= \langle G_e^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle\Sigma_i^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle - \langle\Sigma_e^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle G_i^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle, \\ L_{ee} &= \langle G_e^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle\Sigma_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle - \langle\Sigma_e^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle G_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle, \\ L_{ie} &= \langle G_i^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle\Sigma_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle - \langle\Sigma_i^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle G_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle, \\ L_{ii} &= \langle G_i^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle\Sigma_i^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle - \langle\Sigma_i^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle G_i^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle.\end{aligned}\quad (5)$$

利用(5)式中的 L 函数,得到推广的自旋玻璃输运方程

$$\begin{aligned}L_{ei} + L_{ee} + L_{ie} + L_{ii} &= i(e/c)\mathbf{V}_q \cdot [\mathbf{H} \times \nabla_q G_e^<(\mathbf{Q},\omega)] \\ &- e\mathbf{E} \cdot \mathbf{V}_q \Gamma(\omega) A^2(\mathbf{Q},\omega) \frac{\partial n(\omega)}{\partial \omega}.\end{aligned}\quad (6)$$

方程(6)表明,由于 L_{ii} 的关联作用是完全非弹性的,求解极其困难。好在稀磁系统, L_{ee} 和 L_{ii} 两部分的贡献较 L_{ie} 和 L_{ie} 大得多。近似地,后者可以忽略,得

$$\begin{aligned}\langle G_e^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle\Sigma^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle - \langle\Sigma^>(\mathbf{Q},\omega)\rangle\langle G_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle \\ = i(e/c)\mathbf{V}_q \cdot [\mathbf{H} \times \nabla_q \langle G_e^<(\mathbf{Q},\omega)\rangle] - e\mathbf{E} \cdot \mathbf{V}_q \Gamma(\omega) A^2(\mathbf{Q},\omega) \frac{\partial n(\omega)}{\partial \omega},\end{aligned}\quad (7)$$

其中 $\Sigma^>$ 和 $\Sigma^<$ 由(2)式给出。将方程(7)和方程(1)相比较,发现形式完全相同,仅需将(1)式中的有关函数视为弹性位形平均。若将 $\partial n(\omega)/\partial \omega$ 近似为 $\delta(\omega)$ 函数,方程退化为玻耳兹曼方程^[9]。显然,这是合理的。

三、自旋玻璃霍耳电导

Fischer 利用微扰方法和经典玻耳兹曼方程,计算了自旋玻璃的电阻率^[9]、文献[6]采

用运动格林函数方法的切断近似, 也计算了 s' - d 交换相互作用的磁性玻璃的电阻率和热电势。我们已系统地研究了稀磁合金的电导^[8,9]。考虑到某个固定的杂质位形, 物理自能和相应的格林函数满足关系

$$\Sigma^>(\mathbf{Q}, \omega) = -in_i(J/N_0)S_i^2 + n_i \sum_q \int d\omega' \frac{(J/N_0)^2}{\omega - \omega'} \times [S_i^- S_i^+ + (S_i^z)^2] G^>(\mathbf{Q}', \omega'), \quad (8)$$

$$\Sigma^<(\mathbf{Q}, \omega) = in_i(J/N_0)S_i^2 + n_i \sum_q \int d\omega' \frac{(J/N_0)^2}{\omega - \omega'} \times [S_i^+ S_i^- + (S_i^z)^2] G^<(\mathbf{Q}', \omega'), \quad (9)$$

对(8)和(9)式分别进行无规高斯平均。在准弹性散射近似下, 相应的物理自能(略去平均符号)为^[6]

$$\Sigma_i^>^<(\mathbf{Q}, \omega) = n_i \sum_q \int d\omega' \frac{(J/N_0)^2}{\omega - \omega'} [\chi + Q] G_i^>^<(\mathbf{Q}', \omega'), \quad (10)$$

其中 $Q = \langle [\mathbf{S}]^2 \rangle$ 为 Edwards-Anderson (EA) 自旋玻璃序参数, $\chi = \langle [\delta \mathbf{S}_i \cdot \delta \mathbf{S}_i] \rangle$ 为局域磁化率^[6]。考虑到外磁场的作用, 本文的 EA 序参数和局域磁化率应视为纵向 $Q_L(\chi_L)$ 和横向 $Q_T(\chi_T)$ 之和。由于 Q 和 χ 均和热场相连^[3], 因此自能是非弹性的, 进一步, 考虑到电子的直接作用, 弹性散射自能可以表为

$$\Sigma_i^>^<(\mathbf{Q}, \omega) = n_i \sum_q \int d\omega' \frac{(V/N_0)^2}{\omega - \omega'} G_i^>^<(\mathbf{Q}', \omega'), \quad (11)$$

其中 V 为直接作用强度^[5]。将(10)和(11)式代入方程(7)中, 并利用物理格林函数的近平衡条件

$$G_i^>(\mathbf{Q}, \omega) = G_i^<(\mathbf{Q}, \omega) - iA(\mathbf{Q}, \omega) \quad (12)$$

和

$$G_i^<(\mathbf{Q}, \omega) = in(\omega)A(\mathbf{Q}, \omega) - i \frac{\partial n(\omega)}{\partial \omega} \gamma(\mathbf{Q}, \omega), \quad (13)$$

采用自洽迭代方法, 在慢弛豫弱场近似下, 相似于文献[10]的步骤, 定义电导张量

$$\sigma_{\mu\nu} = e^2 \int_{-\pi}^{\pi} \left[-\frac{\partial n(\omega)}{\partial \omega} \right] \sigma_{\mu\nu}(\omega), \quad (14)$$

其中 $\mu, \nu = x, y, z$ 。零场依赖能量的电导为

$$\sigma^{(0)}(\omega) = \left[\frac{n_0}{\Gamma(\omega)_m} \right] \left[1 - M + \frac{M}{1 - N \ln[(\omega - \omega_F)/D]} \right], \quad (15)$$

其中

$$M = \int dq q \left[1 - \frac{q^2}{2k_F^2} \right] [A(\mathbf{Q}', \omega_F)]^2 \left\{ 2\Gamma(\omega) \int dq q \left[1 - \frac{q^2}{2k_F^2} \right] A(\mathbf{Q}', \omega_F) \right\}^{-1}, \quad (16)$$

$$N = \frac{n_i[(J/N_0)^2(\chi + Q) + (V/N_0)^2]}{2(2\pi)^3 V_F \Gamma(\omega)} \int dq q \left[1 - \frac{q^2}{2k_F^2} \right] A(\mathbf{Q}', \omega_F). \quad (17)$$

相应的霍耳电导分量为

$$\sigma_{xx} = \frac{1}{3} \left[\frac{1}{1 + h^2} \right] \sigma^{(0)}, \quad \sigma_{xy} = \frac{1}{3} \left[\frac{h}{1 + h^2} \right] \sigma^{(0)}, \quad (18)$$

$$\sigma^{(0)} = C + \frac{X}{1 - Z \ln(T/D)}, \quad (19)$$

其中 $h = eH/2c\Gamma$ 为系统的小参数,其它参量为

$$\begin{aligned} C &= \frac{e^2 n_0}{m} \int d\xi \left[-\frac{\partial n(\xi)}{\partial \xi} \right] \left[\frac{1-M}{\Gamma(\omega)} \right], \\ X &= \frac{e^2 n_0}{m} \int d\xi \left[-\frac{\partial n(\xi)}{\partial \xi} \right] \frac{M}{(1 - N \ln \xi) \Gamma(\xi)}, \\ Z &= \frac{e^2 n_0}{X_m} \int d\xi \left[-\frac{\partial n(\xi)}{\partial \xi} \right] \frac{MN}{(1 - N \ln \xi)^2 \Gamma(\xi)}. \end{aligned} \quad (20)$$

系统的 Kondo 温度由(19)式确定^[7,8]

$$T_K = D \exp \left[\frac{1}{Z} \right]. \quad (21)$$

实验发现磁性玻璃系统的电阻率有一极大值^[9],其温度可利用电阻率对温度的微分确定,由(19)式可以求得

$$T_m = T_K \exp \left[\frac{2}{T} \left[\frac{Q' + X'}{Q + X} \right] \right]_{T=T_m}, \quad (22)$$

其中 $X' = dX/dT$, $Q' = dQ/dT$. 计算中利用了关系

$$\frac{dC}{dT} = 0; \quad \frac{dZ}{dT} = Z \frac{Q' + X'}{Q + X}; \quad \frac{dX}{dT} = -X \frac{Q' + X'}{Q + X}.$$

通常,实验观察到的 T_m 在自旋玻璃相变温度 T_c 之上. 当温度降低到 T_c 时,横自旋玻璃序参量为零,纵自旋玻璃序参量不为零,即

$$Q_T(T_c) = 0; \quad Q_L(T_c) \neq 0. \quad (23)$$

将本文的 T_m 表达式(22)与文献[6]比较,发现在零场和 $T_m > T_c$ 时,两者相符合. 显然,在外磁场作用下,由于自旋玻璃序的纵分量 $Q_L \neq 0$,量子效应对 T_m 有一修正因子,故我们的表达式 T_m 有较宽的适用范围. 另外,我们的电导也克服了文献[5]和[6]的发散困难. 究其根源,文献[5]和[6]略去了部分高级修正项的贡献.

四、热 电 势

对于准弹性散射,系统的热电势和电导之间满足 Mott 关系^[7,11]

$$S_{\mu\nu}(H) = eL_0 T \left[\frac{d}{d\omega} \ln \sigma_{\mu\nu}(\omega) \right]_{\omega=\omega_F}, \quad (24)$$

其中 L_0 为洛仑兹数 ($L_0 = 2.44 \times 10^{-8} \text{V}^2 \text{K}^{-2}$), ω_F 为费密能. 对角的热电势为

$$S_d(H) = S_{xx}(H) - S_{xy}(H) \frac{\sigma_{xy}(H)}{\sigma_{xx}(H)}. \quad (25)$$

利用(15),(18)和(19)式,不难证明

$$\left[\frac{d}{d\omega} \ln \sigma_{xy}(\omega) \right] = \left[\frac{d}{d\omega} \ln \sigma_{xx}(\omega) \right].$$

结合(25)式,热电势 $S_d(H)$ 为

$$S_d(H) = \frac{eL_0 MND(1-h)}{[1 - N\ln(T/D)]^2[1 - M + M/(1 - N\ln(T/D))]} \longrightarrow (\chi + Q). \quad (26)$$

(26)式和文献[6]中的计算是一致的。细节上的差异来自于不同的计算方法。我们的计算是基于量子输运方程而文献[6]采用的是玻耳兹曼方程。

值得指出的是理论上通过格林函数方法自旋玻璃序参数 $Q_L(Q_T)$ 和局域磁化率 $\chi_L(\chi_T)$ 均可计算。但是,求解过程将是冗长的。通常的近似方法是找出电输运系数和这些序参量的关系后,再利用已有的结论,从而获得输运系数的变化规律^[6]。这样,本文给出的输运系数和特征温度的表达式是极其重要的。

- [1] K. D. Usadel, *Solid State Commun.*, **58**(1986), 629.
- [2] G. Kenning, D. Clu and R. Orbach, *Phys. Rev. Lett.*, **66**(1991), 2923.
- [3] L. Yi *et al.*, *Phys. Rev.*, **B47**(1993), 254.
- [4] 易林、姚凯伦,物理学报,**42**(1993),488; 992.
- [5] K. H. Fischer, *Z. Phys.*, **B34**(1979), 45.
- [6] K. Satish Das, R. S. Tripathi, S. K. Joshi, *Phys. Rev.*, **B29**(1984), 2745.
- [7] W. Hänsch and G. D. Mahan, *Phys. Rev.*, **B28**(1983) 1886; 1902.
- [8] L. Yi and K. L. Yao, *Phys. Rev.*, **B46**(1992), 1202.
- [9] K. L. Yao and L. Yi, *Phys. Rev.*, **B44**(1991), 190.
- [10] L. Yi *et al.*, *Z. Phys.*, **B93**(1993), 307.
- [11] J. Ziman, *Electrons and Phonons* (Oxford, University Press, London, 1964) Chap. XII.

QUANTUM TRANSPORT EQUATION FOR SPIN GLASS SYSTEMS

YI LIN YAO KAI-LUN

Department of Physics, Huazhong University of Science and Technology, Wuhan 430074

(Received 3 May 1993)

ABSTRACT

The static Mahan-Hänsch quantum transport equation in applied magnetic fields is extended to spin glass systems through introducing physical self-energies of elastic and inelastic scattering. In the quasi-elastic scattering limit, the Hall conductivity for spin glass model with the s-d exchange interaction between electrons and localized moments is evaluated by using this equation. The relation between resistivity and the Edwards-Anderson (EA) spin glass parameter and local susceptibility is obtained. Finally, thermoelectric power of spin glasses and some interesting characteristic temperatures are discussed.

PACC: 7540; 7550B; 6630; 7630