

s-f 交换作用和电子交换作用对 s 电子比热容的影响

关立强 王 翠 李贞姬 金光星

(延边大学物理系, 延吉 133002)

(1996 年 10 月 18 日收到)

根据 s-d 交换作用模型, 考虑了 s-f 交换效应对稀土金属电子-声子耦合的影响, 具体讨论了 s 电子的比热容. 计算结果表明, s 电子的比热容可以写为如下的形式:

$$\gamma = \gamma_0 + \gamma_{ep} + \gamma_{ex} + \gamma_{sf}.$$

PACC: 6320K; 6540

1 引 言

迄今为止, 许多人在研究稀土磁性合金的异常性质和具有局域磁矩的杂质与传导电子之间的 s-d 交换效应时, 都考虑了 RKKY 关联效应. 80 年代以来我国不少作者, 如: 刘福绥、江启杜等^[1-8]用多体量子场论方法研究了间接交换作用对各个物理过程的影响. 李正中等^[9]则扩充了稀土磁性合金中杂质效应的理论——在 $T < T_k$ 侧面, 考虑了 Kondo 合金中 s-d 交换效应.

本文考虑到 4f 壳层未填满的稀土金属中的 s-f 交换作用, 认为晶格振动实际上是周期性排列的离子与局域磁矩的振动, 且传导电子与这种格波发生互作用, 从而将传导电子所在势场写为

$$U(\mathbf{r}) = \sum_n U_{s-i}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0 + \delta \mathbf{R}_n) + \sum_n U_{s-f}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0 + \delta \mathbf{R}_n),$$

式中等号右端第一项是通常的格波与传导电子的互作用; 第二项表示振动的局域磁矩与 f 电子之间的交换作用. 本文将具体讨论电子间交换作用和 s-f 交换作用通过晶格振动所产生的对电子比热容的影响.

2 s-f 电子与声子系统的 Hamiltonian 和 Green 函数

设稀土金属的 4f 电子形成局域磁矩, 其在 $\mathbf{R}_n$ 格点上的自旋磁矩由算符 $\mathbf{S}_n$ 描述, 它是原子的 4f 壳层局域电子的总自旋算符. 将传导电子与 f 电子之间交换作用的 Hamiltonian 写为

$$H_{s-f} = -\left(\frac{J}{N}\right) \sum_{nkk'} \sum_{\mu\mu'} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_n} (\mathbf{S}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}_{\mu\mu'}) C_{k\mu}^+ C_{k'\mu'}, \quad (1)$$

其中 μ, μ' 代表传导电子的自旋取向, 并设格点自旋 $S=1/2$, (1) 式所对应的单电子势可写为

$$U_{s-f}(\mathbf{r}) \equiv - \left(\frac{J}{N} \right) \sum_n \mathbf{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_n} (\mathbf{S}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}) \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n). \quad (2)$$

此式表示 s-f 相互作用是局域自旋 $\mathbf{S}_n$ 与传导电子 Pauli 矩阵 $\boldsymbol{\sigma}$ 之间的短程交换作用. 这样, 位矢为 $\mathbf{r}$ 上的电子与第 n 个格点(考虑晶格振动, $\mathbf{R}_n = \mathbf{R}_n^0 + \delta \mathbf{R}_n$) 之间的相互作用势可用泰勒级数展开成如下形式:

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &\equiv U_{s-i}(\mathbf{r}) + U_{s-f}(\mathbf{r}) \\ &= \sum_n U_0(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0) - \sum_n \delta \mathbf{R}_n \cdot \nabla_{\mathbf{r}} U(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n^0) + \cdots, \end{aligned} \quad (3)$$

式中 U_0 表示周期势场; 等号右端第二项表示晶格振动(离子实与局域矩的振动)与传导电子的相互作用. 可把此式进一步写成

$$\begin{aligned} U(\mathbf{r}) &= \sum_n (U_0^{s-i}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) + U_0^{s-f}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n)) \\ &= \sum_n \delta \mathbf{R}_n \cdot \nabla_{\mathbf{r}} \left[\frac{4\pi ze^2}{|\mathbf{r} - \mathbf{R}_n|} - \left(\frac{J}{N} \right) (\mathbf{S}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{e}^{i(\mathbf{k}-\mathbf{k}') \cdot \mathbf{R}_n} \delta(\mathbf{r} - \mathbf{R}_n) \right] + \cdots, \end{aligned} \quad (4)$$

(4) 式等号右端第二项表示考虑 s-f 交换作用后晶格振动与传导电子间的相互作用. 如果把晶格振动用声子算符来表示, 并写为二次量子化的形式, 则有如下的相互作用 Hamiltonian

$$H_i = \sum_{\mathbf{q}, \sigma} [\alpha_{s-i}(\mathbf{q}) + \alpha_{s-f}(\mathbf{q})] (b_{\mathbf{q}\sigma} + b_{-\mathbf{q}\sigma}^\dagger) C_{\mathbf{k}+\mathbf{q}, \sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (5)$$

式中

$$\alpha_{s-i}(\mathbf{q}) = -i \left(\frac{\hbar N}{2M\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \frac{4\pi ze^2}{|\mathbf{q} + \mathbf{K}_n|} [\mathbf{e}_{\mathbf{q}\sigma} \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{k}_h)], \quad (6)$$

$$\alpha_{s-f}(\mathbf{q}) = -i \left(\frac{\hbar N}{2M\omega_{\mathbf{q}}} \right)^{1/2} \left(\frac{J}{N} \right) (\mathbf{S}_n \cdot \boldsymbol{\sigma}) \mathbf{e}_{\mathbf{q}\sigma} \cdot (\mathbf{q} + \mathbf{k}_h), \quad (7)$$

这里 M 是原子质量, z 是金属价, e 是电子电荷, $\omega_{\mathbf{q}}$ 是屏蔽的声子频率, $\mathbf{k}_h$ 是倒格矢; $\mathbf{e}_{\mathbf{q}\sigma}$ 是单位矢量, 表示位移的极化; $\hbar = h/2\pi$, h 是 Planck 常量. 于是此系统的 Hamiltonian 可以写为

$$H = H_0 + H_{e-e} + H_i, \quad (8)$$

式中

$$H_0 = \sum_{\mathbf{k}\sigma} \epsilon_{\mathbf{k}\sigma} n_{\mathbf{k}\sigma}, \quad (9)$$

$$H_{e-e} = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'\sigma\sigma'} V(\mathbf{q}) C_{\mathbf{k}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{k}'+\mathbf{q}, \sigma'}^\dagger C_{\mathbf{k}'\sigma'} C_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma}. \quad (10)$$

在上式中 H_{e-e} 表示传导电子之间的相互作用, 可将此式改写为 Coulomb 作用和交换作用的形式; H_i 用(5)式表达, 是考虑到 s-f 交换作用后的电子-声子相互作用的 Hamiltonian.

3 声子 Green 函数与电子自能

利用上一节的 Hamiltonian, 可以用下面的 Feynman 图来计算此系统的声子 Green 函

数^[10]

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} + \dots \quad (11)$$

考虑到电子的屏蔽, (11)式改为

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} + \dots \quad (12)$$

在上式中

$$\text{---} = \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} + \text{---} \bigcirc \text{---} \bigcirc \text{---} + \dots \equiv \tilde{V}_{\text{sc}}(\mathbf{q}) \quad (13)$$

$$\text{---} = V(\mathbf{q}) \quad (14)$$

$$\bigcirc = \bigcirc + \text{---} \bigcirc + \text{---} \bigcirc \text{---} + \dots \quad (15)$$

$$\bigcirc \equiv \Pi_{\sigma}(\mathbf{q}, i\nu_m) \quad (16)$$

按照 Feynman 图的规则, 声子 Green 函数可以写为

$$D_{\mathbf{q}}(i\nu_m) = 2\hbar\Omega_{\mathbf{q}} / \left\{ \nu_m^2 + \hbar^2\Omega_{\mathbf{q}}^2 \left[1 - \frac{2}{\hbar\Omega_{\mathbf{q}}} |\alpha_{\text{s-i}}(\mathbf{q}) + \alpha_{\text{s-f}}(\mathbf{q})|^2 \frac{\tilde{\Pi}(\mathbf{q}, i\nu_m)}{1 + V(\mathbf{q})\tilde{\Pi}(\mathbf{q}, i\nu_m)} \right] \right\}. \quad (17)$$

(17)式中 $\Omega_{\mathbf{q}}$ 是裸声子频率, ν_m 是 Boson Matsubara 频率,

$$|\alpha|^2 \equiv \alpha(\mathbf{q})\alpha(-\mathbf{q}), \quad (18)$$

$$\tilde{\Pi}_{\sigma}(\mathbf{q}, i\nu_m) = \frac{\Pi_{\sigma}(\mathbf{q}, i\nu_m)}{1 - \tilde{V}_{\text{sc}}(\mathbf{q})\Pi_{\sigma}(\mathbf{q}, i\nu_m)}, \quad (19)$$

$$\tilde{\Pi}(\mathbf{q}, i\nu_m) = \sum_{\sigma} \tilde{\Pi}_{\sigma}(\mathbf{q}, i\nu_m), \quad (20)$$

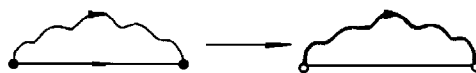
$$\tilde{V}_{\text{sc}}(\mathbf{q}) = \frac{V(\mathbf{q})}{1 + V(\mathbf{q})\tilde{\Pi}(\mathbf{q}, i\nu_m)}. \quad (21)$$

传统的电子-声子相互作用所引起的电子自能为

$$\sum_{\sigma} \langle \mathbf{k}, i\omega_m \rangle = \beta^{-1} \sum_{\mathbf{q}m} |\alpha(\mathbf{q})|^2 D^0(\mathbf{q}, i\nu_m) G_{\sigma}^0(\mathbf{k} - \mathbf{q}, i\nu_{m-n}), \quad (22)$$

式中 D^0 是自由声子的 Green 函数, G_{σ}^0 是自由电子的 Green 函数. 如果考虑到传导电子间交换作用与自旋分裂, 以及 s-f 交换作用的影响, 则电子自能图中的细电子线和声子线、两个顶点分别被改为粗线与圈, 即

于是(22)式应改写为


(23)

$$\sum_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_m) \beta^{-1} \sum_{m\mathbf{q}} |\bar{\alpha}_{s-i}(\mathbf{q}) + \alpha_{s-f}(\mathbf{q})|^2 D(\mathbf{q}, i\nu_m) G_{\sigma}(\mathbf{k} - \mathbf{q}, i\nu_{n-m}), \quad (24)$$

式中

$$\bar{\alpha}_{s-i}(\mathbf{q}) = \frac{\alpha_{s-i}(\mathbf{q})}{\epsilon_{\sigma}(\mathbf{q}, i\nu_m)}, \quad (25)$$

$$\epsilon_{\sigma}(\mathbf{q}, i\nu_m) = (1 + 2V(\mathbf{q})\bar{F}(\mathbf{q}, i\nu_m))[1 - \bar{V}(\mathbf{q})\bar{F}(\mathbf{q}, i\nu_m)], \quad (26)$$

$$G_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) = \frac{1}{i\omega_n - \epsilon_{k\sigma} - \Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n)}, \quad (27)$$

式中 $D(\mathbf{q}, i\nu_m)$ 用(17)式表示, $V(\mathbf{q})$ 则表示电子之间的 Coulomb 相互作用, $\bar{V}(\mathbf{q})$ 表示电子之间的交换作用, $\bar{F}$ 是扩展的 Lindhard 函数. 为了简便起见, 取静态近似, 即 $\alpha(\mathbf{q}, i\nu_m) \rightarrow \alpha(\mathbf{q}, 0)$. 在(24)式中, 对 m 求和之后得到

$$\begin{aligned} \Sigma_{\sigma}(\mathbf{k}, i\omega_n) = & \beta^{-1} \sum_{\mathbf{q}} \frac{\Omega_{\mathbf{q}}}{\omega_{\mathbf{q}}} |\alpha_{s-i}(\mathbf{q}, 0) + \alpha_{s-f}(\mathbf{q}, 0)|^2 \\ & \times \int \frac{dz}{e^{\beta z} + 1} \frac{1}{z - \epsilon_{\mathbf{k}-\mathbf{q}, \sigma}} \left(\frac{1}{\hbar\omega_{\mathbf{q}} + i\omega_n + z} + \frac{1}{\hbar\omega_{\mathbf{q}} - i\omega_n + z} \right), \end{aligned} \quad (28)$$

式中声子频率可以写为

$$\begin{aligned} \omega_{\mathbf{q}} \approx & \left\{ \left(\Omega_{\mathbf{q}}^2 - \frac{4}{\hbar} \Omega_{\mathbf{q}} |\alpha_{s-i}(\mathbf{q}, 0) + \alpha_{s-f}(\mathbf{q}, 0)|^2 F(x) N(0) \right) \right. \\ & \times [1 + (\bar{V}(0) - 2V(\mathbf{q})N(0)F(x))] \left. \right\}^{1/2}. \end{aligned} \quad (29)$$

这里

$$F(x) = 1 + \frac{1-x^2}{2x} \ln \left| \frac{1+x}{1-x} \right| \quad (x = q/2k_F). \quad (30)$$

将裸声子频率 $\Omega_{\mathbf{q}}$ 用 Plasma 频率 Ω_{p1} 来近似代替, 这样就可以进行定量计算. 换言之, 可以讨论 Jellium model 的情况.

4 电子间交换作用和 s-f 交换作用对电子-声子耦合的影响及电子的比热容

通过对(28)式的具体计算, 可得到自能和自能实部. 自能实部可以写为

$$\text{Re } \Sigma = -\lambda\omega, \quad (31)$$

$$\lambda = \lambda_{ep} + \lambda_{ex} + \lambda_{s-f} + \lambda_{coup}, \quad (32)$$

式中

$$\lambda_{ep} = \frac{mNZ^4 e^4}{M\hbar^2 S^3 V k_F} \Omega_{p1} \int_0^{q_D} \frac{dq}{q^4 V^2(q) F^2(x)}, \quad (33)$$

$$\lambda_{ex} = \frac{mNZ^4 e^4 \Omega_{p1}}{MV\hbar^2 S^3 k_F} \int_0^{q_D} \left[\frac{1}{V^2(q) N(0) F(x)} - \frac{\bar{V}(0)}{V^2(q)} \right] \frac{dq}{q^4}, \quad (34)$$

$$\lambda_{s-f} = \frac{mVN\Omega_{p1}}{2MS^3\hbar^2\pi^2} \left(\frac{1}{k_F} \right) \left(\frac{J}{N} \right) (S \cdot \sigma) \\ \times \int_0^{q_D} \left[\left(\frac{J}{2N} \right) (S_n \cdot \sigma) + \frac{2\pi Z^2 e^2}{V} \frac{1}{N(0)V(q)F(x)} \right] dq. \quad (35)$$

这里 λ_{ep} 是通常的电子-声子耦合系数; λ_{ex} 是电子间交换作用对电子-声子耦合的影响; λ_{s-f} 是 s-f 交换作用对电子-声子耦合的贡献; λ_{coup} 是诸互作用的耦合项, 可以忽略不计. 在 (33) — (35) 式中 S 是 Bohm-Staver 声速, $N(0)$ 是单自旋态密度.

根据单电子 Green 函数的发散条件, 此系统的准电子能量可写为

$$\omega = \epsilon_k + \text{Re} \Sigma, \quad (36)$$

式中 ϵ_k 是自由电子能. 由 (36) 式可以得出费密面附近电子的比热容系数. 经过计算, 比热容系数可写为如下形式:

$$\gamma = \gamma_0 + \gamma_{ep} + \gamma_{ex} + \gamma_{s-f}, \quad (37)$$

式中

$$\gamma_0 = \left(\frac{\pi k_B}{\hbar k_F} \right)^2 m, \quad (38)$$

$$\gamma_{ep} = \gamma_0 \lambda_{ep}, \quad (39)$$

$$\gamma_{ex} = \gamma_0 \lambda_{ex}, \quad (40)$$

$$\gamma_{s-f} = \gamma_0 \lambda_{s-f}. \quad (41)$$

这里 γ_{ep} 是通常的电子-声子耦合对电子比热容系数的贡献; γ_{ex} 是电子间交换作用对电子比热容系数的贡献; 而 γ_{s-f} 是 s-f 交换作用通过电子-声子耦合产生的对电子比热容系数的贡献.

5 结果与讨论

为了定量地估计电子间交换作用与 s-f 交换作用对电子-声子耦合及电子比热容的影响, 需要具体地计算新引进的耦合常数 λ_{ep} , λ_{ex} 和 λ_{s-f} 等. 通过对积分的运算, 可得到

$$\lambda_{ep} = \frac{mVN\Omega_q Z^2}{32\pi^2 \hbar^2 N^2(0) S^3 M} \\ = \frac{\ln 5}{32\pi^2} \frac{mVN\Omega_q Z^2}{\hbar^2 N^2(0) S^3 M}, \quad (42)$$

$$\lambda_{ex} = \frac{Nm\tilde{V}(0)\Omega_q Z^2}{4\pi^2 MS^3 \hbar^2} \left\{ \frac{1}{\sqrt{8}N(0)} \ln \frac{\sqrt{8}-2}{\sqrt{8}+2} - \frac{\tilde{V}(0)}{4} \right\}, \quad (43)$$

$$\lambda_{s-f} = \frac{NmV\Omega_q}{2\pi^2 M\hbar^2 k_F S^3} \left(\frac{J}{N} \right) (\hat{\sigma} \cdot \hat{S}) \left\{ \left(\frac{J}{N} \right) (\hat{\sigma} \cdot \hat{S}) - \frac{2}{\sqrt{8}} \ln \left| \frac{2-\sqrt{8}}{2+\sqrt{8}} \right| \cdot \frac{Z}{N(0)} \right\}. \quad (44)$$

为了简便起见, 将 (37) 式改写为如下形式:

$$\gamma = \gamma_0 + \gamma_{ep}(1 + \alpha_{ex} + \alpha_{s-f}), \quad (45)$$

$$\alpha_{ex} = \frac{4N(0)}{\ln 5} \left\{ \frac{1}{\sqrt{8}N(0)} \ln \frac{\sqrt{8}-2}{\sqrt{8}+2} - \frac{\tilde{V}(0)}{4} \right\}, \quad (46)$$

$$\alpha_{s-f} = \frac{4N^2(0)}{\ln 5 Z^2} \left(\frac{J}{N} \right) (\hat{\sigma} \cdot \hat{S}) \left\{ \left(\frac{J}{N} \right) (\hat{\sigma} \cdot \hat{S}) - \frac{2}{\sqrt{8}} \ln \frac{\sqrt{8}-2}{\sqrt{8}+2} \cdot \frac{Z}{N(0)} \right\}, \quad (47)$$

式中 α_{ex} 表示电子间交换作用对电子比热容的贡献与电子-声子耦合对电子比热容的贡献之比; α_{s-f} 表示 s-f 交换作用对电子比热容的贡献与通常的电子-声子耦合对电子比热容的贡献之比. 它们具体地表示出了电子间交换作用、s-f

电子交换作用等各个效应对电子比热容的贡献是通常的电子-声子耦合对电子比热容之贡献的多少倍.

在 β -Ce 的情况下, 其费密能为 $\mu = 7.46$ eV, 电子平均所占球半径为 $r_s = 2.6$, 由有效 Bohr 磁子数的实验值, 可近似估计 $S \sim 1/2$. 图 1 画出了电子间交换作用对电子比热的贡献与通常的电子-声子相互作用对电子比热容的贡献之比 α_{ex} 与电子间交换强度

$\bar{V}(0)$ 间的依赖关系. 由此可知, 交换作用通过电子-声子耦合, 对电子比热容产生的贡献是负的. 换言之, 电子交换作用会减小电子的比热容, 而且交换强度越强, 影响的程度也越大 (如图 1 所示), 其影响的程度大约是电子-声子耦合效应的 10^{-1} 数量级. γ_{s-f} 与 γ_{ep} 之比 α_{s-f} 与 s-f 交换积分 J 的依赖关系如图 2 所示. α_{s-f} 与 J 近似地呈直线关系. 当 $J < 0$ 时 (产生 Kondo 效应的情况), s-f 交换作用对比热容的贡献是正的; 当 $J > 0$ 时, s-f 交换作用对电子比热容的贡献是负的, 其影响的程度大约是电子-声子耦合效应的 10^{-2} 数量级.

总之, 在我们所考虑的稀土金属的情况下, 电子交换作用与 s-f 交换作用对传导电子比热容的影响是比较可观的.

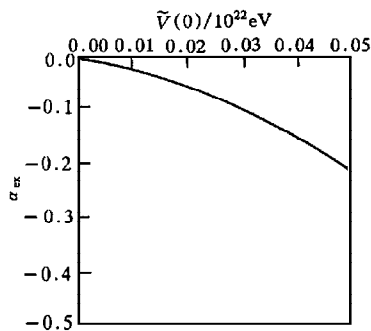


图 1 在 β -Ce 情况下 $\bar{V}(0)$ 与 α_{ex} 的关系

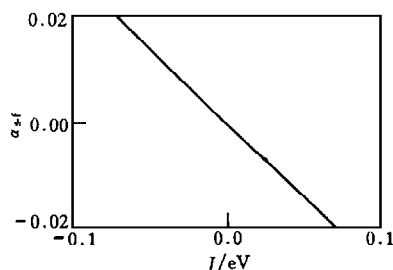


图 2 在 β -Ce 情况下 J 与 α_{s-f} 的关系

- [1] 江启杜、刘福绥, 物理学报, **35**(1986), 177.
- [2] Fusui Liu, J. Ruvalds, *Bulletin Amer. Phys. Soc.*, **26**(1981), 344.
- [3] J. Ruvalds, Fusui Liu, *Solid State Commun.*, **39**(1981), 25.
- [4] 汪仲诚、刘福绥, 物理学报, **31**(1982), 779.
- [5] 江启杜、刘福绥, 物理学报, **33**(1984), 1408.
- [6] Fusui Liu, Zengfan Yang, *Comm. Theor. Phys.*, **2**(1983), 1607.
- [7] 余梅、刘福绥、罗惠临, 物理学报, **25**(1986), 33.
- [8] Fusui Liu, Gao Lin, Zanghan Lin, *International Center for Theor. Phys. Trieste, Italy*(1985), p. 254.
- [9] 李正中、胡筱欣, 物理学报, **34**(1985), 146.
- [10] D.J. Kim, *Physics Reports, A Review Section of Physic Letters*, **4**(1988), 175.

THE INFLUENCE OF s-f EXCHANGE EFFECT AND ELECTRON EXCHANGE EFFECT ON THE SPECIFIC HEAT OF CONDUCTING ELECTRON

GUAN LI-QIANG WANG CUI LI ZHEN-JI JIN GUANG-XING

(Department of Physics, Yanbian University, Yanji 133002)

(Received 18 October 1996)

ABSTRACT

Based on the s-d interaction model, we consider the influence of s-f exchange effect on the electron-phonon coupling and discuss the specific heat of conducting electron in a rare earth metal. The results of calculation show that the specific heat of conducting electron can be written as $\gamma = \gamma_0 + \gamma_{ep} + \gamma_{ex} + \gamma_{s-f}$, where $\gamma_0 = \left(\frac{\pi k_B}{\hbar k_F} \right)^2 m$, $\gamma_{ep} = \gamma_0 \lambda_{ep}$, $\gamma_{ex} = \gamma_0 \lambda_{ex}$, $\gamma_{s-f} = \gamma_0 \lambda_{s-f}$; here ep = e-p coupling, ex = exchange, s-f = s-f exchange.

PACC: 6320K; 6540