СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ
Дубна

Р4 - 6068

Б. Козажевски

ЛАБОРАТОРИЯ ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЕ МЕТАЛЛА С ПАРАМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

1971

P4 - 6068

Б. Козажевски

МАГНЕТОСОПРОТИВЛЕНИЕ МЕТАЛЛА С ПАРАМАГНИТНЫМИ ПРИМЕСЯМИ

Задача рассеяния электронов проводимости на примесях со спином при наличии магнитного поля изучалась рядом авторов. Абрикосов[1], суммируя главные диаграммы в предложенной им технике, получил для сопротивления некоторое выражение, верное в пределе слабого поля и температур выше температуры Кондо T_K. Другим путем похожие результаты были получены Гинзбургом[2]. В[3] магнетосопротивление вычислялось по теории возмущений с точностью до третьего порядка, результат этой работы тоже годится только в области $T > T_K$. Поведение некоторых физических величин при наличии магнитного поля в области $T < T_K$ и для $S = 1$ рассмотрено в работе[4] в связи с вопросом о связанных состояниях электронов и локализованного спина.

Совершенно другой подход был использован в работе[5], где авторы обобщили уравнение Сула на случай произвольного магнитного поля, затем получили приближенное численное решение этого уравнения и определили критическое магнитное поле. Численные расчёты сопротивления были в некоторых частных случаях проведены Блумфильдом и др.[6].

В данной работе для изучения взаимодействия электронов проводимости с парамагнитными примесями используется метод уравнений для термодинамических функций Грина[7]. Рассматривается только обменная часть взаимодействия электронов с примесью и предполагается, что факторы Ланде электронов и примеси одинаковы. После некоторых приближений решается основная система интегральных уравнений для матрицы рассеяния и получаются выражения для критического поля и магнетосопротивления, верные, в принципе, при произвольных температурах.

1. Уравнения для функций Грина и приближения

Предположим, что рассматриваемая система описывается моделью $s-d$ -обмена. Гамильтониан этой модели в присутствии магнитного поля имеет вид

$$\mathcal{H} = \sum_{k,s} \epsilon_{ks} c_{ks} c_{ks} - hS_z - \frac{\mathcal{J}}{2N} \sum_{kk'ss'} S \cdot \sigma_{ss'} c^{+}_{ks} c_{k's'}, \tag{1}$$

где $\epsilon_{ks} = \epsilon_k - \frac{1}{2} sh, \quad h = g\mu_B H, \quad s = +, -.$

Введем функции Грина

$$G_{kk's}(\tau) = -\langle T c_{k's}(\tau), c^{+}_{ks}(0)\rangle, \tag{2}$$

$$\Gamma_{kk's}(\tau) = -\sum_{s'} \langle T S \cdot \sigma_{ss'} c_{k's'}(\tau), c^{+}_{ks}(0)\rangle. \tag{3}$$

Для фурье-компонент функции (2) получаем уравнение

$$(z - \epsilon_{k's}) G_{kk's}(z) = \delta_{kk'} - \frac{\mathcal{J}}{2N} \sum_l \Gamma_{kls}(z), \tag{4}$$

где $z = i\omega_n = (2n+1)\frac{\pi}{\beta} i$.

Рассмотрим уравнение для функции (3). Появляющиеся в этом уравнении функции Грина высших порядков сведем к функциям (2) и (3), используя расцепления и симметрию системы. Но в присутствии магнитного поля остается еще член, пропорциональный намагниченности электронов проводимости. Так как нас интересуют не слишком сильные поля, то этим членом можно пренебречь. Тогда получим приближенное уравнение

$$(z - \epsilon_{k's}) \Gamma_{kk's}(z) = s\langle S_z\rangle \delta_{kk'} + \frac{\mathcal{J}}{2N} [m_{k'-s} - S(S+1)] \times$$
$$\times \sum_l G_{kls}(z) - \frac{\mathcal{J}}{N} [n_{k'-s} - \frac{1}{2}] \sum_l \Gamma_{kls}(z), \tag{5}$$

где введены обозначения

$$n_{ks} = \sum_{k'} < c^{+}_{k's}\, c_{ks} > = \frac{1}{\beta} \sum_{k'\omega} e^{i\omega\delta}\, G_{k'k}\,(i\omega) \equiv$$

$$\equiv \sum_{k'} \mathcal{F}\{ G_{k'ks}\,(i\omega)\}, \tag{6}$$

$$m_{ks} = 2 \sum_{k's'} < S\cdot\sigma_{ss'}\, c^{+}_{k's}\, c_{ks'} > =$$

$$= 2 \sum_{k'} \mathcal{F}\{\Gamma_{k'ks}(i\omega)\}. \tag{7}$$

Решая уравнения (4) и (5) относительно $G_{kk's}$, получим:

$$G_{kk's}\,(z) = \frac{\delta_{kk'}}{z - \epsilon_{k's}} + \frac{1}{N}\,\frac{t_s(z)}{(z-\epsilon_{ks})(z-\epsilon_{k's})}, \tag{8}$$

где

$$t_s\,(z) = -\frac{\mathcal{J}}{2}\,\frac{s<S_z> + \frac{\mathcal{J}}{2}\,\Gamma_s(z)}{1 + \mathcal{J}G_s(z) + \frac{\mathcal{J}^2}{4}F_s(z)\Gamma_s(z)}, \tag{9}$$

матрица рассеяния связана с линейной по концентрации частью массового оператора соотношением/8/

$\Sigma_s(z) = N_i\, t_s(z)$, $\qquad N_i$ – число примесей,

$$F_s\,(z) = \frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{z-\epsilon_{ks}}, \quad G_s(z) = \frac{1}{N}\sum_k \frac{n_{k-s} - \frac{1}{2}}{z-\epsilon_{ks}},$$

$$\Gamma_s\,(z) = \frac{1}{N}\sum_k \frac{m_{k-s} - S(S+1)}{z-\epsilon_{ks}}. \tag{10}$$

Выразим теперь с помощью соотношений (6) и (7) величины G_s и Γ_s через матрицу рассеяния. В случае G_s очевидно, что

$$G_s(z)=\mathfrak{F}\{\frac{F_{-s}(i\omega)-F_s(z)}{z-i\omega+sh}F_{-s}(i\omega)t_{-s}(i\omega)\}+R_s(z), \tag{11}$$

где

$$R_s(z)=\mathfrak{F}\{\frac{F_{-s}(i\omega)-F_s(z)}{z-i\omega+sh}\}-\frac{1}{2}F_s(z). \tag{12}$$

Рассмотрим теперь Γ_s. Удобно вычислить сначала

$$m^*_{k-s}=2\sum_{k'}\mathfrak{F}\{\Gamma_{kk'-s}(i\omega)\}.$$

Так как $\sum_{k'}\Gamma_{kk's}=-\frac{2}{\mathcal{J}}\frac{t_s}{z-\epsilon_{ks}}$, то, используя свойство $t^*_s(z)=t_s(z^*)$ и последние из соотношений (10), имеем

$$\Gamma_s(z)=-\frac{4}{\mathcal{J}}\mathfrak{F}\{\frac{F_{-s}(i\omega)-F_s(z)}{z-i\omega+sh}t_{-s}(i\omega)\}- \tag{13}$$

$$-S(S+1)F_s(z).$$

Подставляя (11) и (13) в (9), получим окончательно систему двух интегральных уравнений на $t_\pm(z)$:

$$t_s(z)=[-\frac{\mathcal{J}}{2}s<S_z>+\frac{\mathcal{J}^2}{4}S(S+1)F_s(z)+\mathcal{J}\mathfrak{F}\{\frac{F_{-s}(i\omega)-F_s(z)}{z-i\omega+sh}t_{-s}(i\omega)\}]\times$$

$$\times[1-\frac{\mathcal{J}^2}{4}S(S+1)F^2_s(z)+\mathcal{J}R_s(z)+ \tag{14}$$

$$+\mathcal{J}\mathfrak{F}\{\frac{[F_{-s}(i\omega)-F_s(z)]^2}{z-i\omega+sh}t_{-s}(i\omega)\}]^{-1}.$$

2. Решение интегральных уравнений

При решении уравнений (14) воспользуемся некоторым обобщением метода, предложенного в работе /9/. Введем прежде всего плотность состояний в зоне проводимости $N(0)\rho(\epsilon)$, где $N(0)$ – плотность состояний на поверхности Ферми, $\rho(\epsilon)$ – функция, у которой существует аналитическое продолжение в окрестность вещественной оси и $\rho(0)=1$. Таким образом, первое из соотношений (10) определяет кусочно-аналитическую функцию

$$F_s(z)=F(z+\frac{1}{2}sh)=\frac{N(0)}{N}\int_{-\infty}^{\infty}\frac{\rho(\omega)}{z+\frac{1}{2}sh-\omega}\,d\omega, \tag{15}$$

предельные значения которой в окрестности вещественной оси равны

$F_r(z)$, если $Im\, z>0$, и $F_a(z)$, если $Im\, z<0$.

Прежде чем решать уравнения (14), удобно ввести некоторое преобразование. Полагая

$$t_s(z-\frac{1}{2}sh)=t(s;z), \tag{16}$$

$$\mathcal{F}\{g(i\omega-\frac{1}{2}sh)\}\equiv\mathcal{F}_s\{g(i\omega)\}=$$

$$=\frac{1}{4\pi i}\int_{-\infty}^{\infty}th\frac{\beta(\omega+\frac{1}{2}sh)}{2}[g_r(\omega)-g_a(\omega)]d\omega, \tag{17}$$

приведем (14) к следующему виду:

$$t(s,z)=[-\frac{\mathcal{J}}{2}s<S_z>+\frac{\mathcal{J}^2}{4}S(S+1)F(z)+$$

$$+\mathcal{J}\mathcal{F}_s\{\frac{F(i\omega)-F(z)}{z-i\omega}\,t(-s;i\omega)\}][1-\frac{\mathcal{J}^2}{4}S(S+1)F^2(z)\;+$$

$$+\ \mathcal{G}R(s,z)+\ \mathcal{G}\mathcal{F}_s\{\ \frac{[F(i\omega)-F(z)]^2}{z-i\omega}\ t(-s;i\omega)\}]^{-1}, \tag{14'}$$

где

$$R(s;z)=\mathcal{F}_s\{\frac{F(i\omega)-F(z)}{z-i\omega}\}-\frac{1}{2}F(z). \tag{12}$$

Уравнение (14'), определяющее кусочно-аналитическую функцию

$$t(s;z)=\begin{cases} t_r(s;z) & \text{для}\quad Im\,z>0,\\ t_a(s;z) & \text{для}\quad Im\,z<0,\end{cases}$$

необходимо для дальнейших вычислений записать в следующей форме:

$$1\pm[F_r(z)-F_a(z)]t_{r,a}(s;z)=\frac{X_{r,a}(s;z)}{\Phi_{r,a}(s;z)}, \tag{18}$$

где

$$X_r(s;z)=1-\frac{\mathcal{G}}{2}s<S_z>(F_r-F_a)-\frac{\mathcal{G}^2}{4}S(S+1)F_r\ F_a+ \\ +\ \mathcal{G}R(s;\ z)+\chi(s;z), \tag{19}$$

$$\chi(s;z)=F_r\,F_a\ L_0(s;z)-(F_r+F_a)L_1(s;z)+L_2(s;z), \tag{20}$$

$$\Phi_r(s;z)=1-\frac{\mathcal{G}^2}{4}S(S+1)F_r^2+\ \mathcal{G}R(s;z)+\ \mathcal{G}F_r^2\,L_0(s;z)- \\ -2\ \mathcal{G}F_r\ L_1(s;z)+\ \mathcal{G}L_2(s;z), \tag{21}$$

$$L_n(s;z)=\mathcal{F}_s\{\frac{F^n(i\omega)t(-s;i\omega)}{z-i\omega}\}. \tag{22}$$

Меняя в (19) и (21) местами F_r и F_a, получим выражения для X_a и Φ_a. Как и в отсутствие магнитного поля, можно показать, что решение уравнений (18) сводится к решению обобщенной задачи Римана на отыскание кусочно-аналитических функций по заданному скачку вдоль вещественной оси. Для этого рассмотрим функцию $R^{\pm}(s;\omega) = R(s;\omega \pm i\delta)$, ее скачок при переходе через вещественную ось равен (для сокращения записи опускаем аргумент ω)

$$R^+(s) - R^-(s) = -\frac{1}{2}(F_r - F_a)\, th\, \frac{\beta(\omega + \frac{1}{2}sh)}{2}.$$

Подобным образом

$$L_n^+(s) - L_n^-(s) = -\frac{1}{2}[F_r^n t_r(-s) - F_a^n t_a(-s)]\, th\, \frac{\beta(\omega + \frac{1}{2}sh)}{2}.$$

Используя эти соотношения, вычислим скачки функций X_r и Φ_r, из которых после сравнения следует

$$\Phi_r^+(s) - \Phi_r^-(s) = [X_r^+(s) - X_r^-(s)][1 - (F_r - F_a)t_a(-s)],$$

откуда с помощью (18) получим окончательно

$$\Phi_r^+(s)\Phi_a^-(-s) - \Phi_r^-(s)\Phi_a^-(-s) = \tag{23}$$
$$= X_r^+(s)X_a^-(-s) - X_r^-(s)X_a^-(-s).$$

Аналогичным путем, рассматривая скачки функций X_a и Φ_a, имеем

$$\Phi_r^+(s)\Phi_a^+(-s) - \Phi_r^+(s)\Phi_a^-(-s) = \tag{24}$$
$$= X_r^+(s)X_a^+(-s) - X_r^+(s)X_a^-(-s).$$

Из (23) и (24) непосредственно следует, что

$$\Phi_r^+(s)\Phi_a^+(-s) - X_r^+(s)X_a^+(-s) =$$
$$= \Phi_r^-(s)\Phi_a^-(-s) - X_r^-(s)X_a^-(-s),$$

т.е. функция

$$w(s,z) = \Phi_r(s,z)\Phi_a(-s;z) - X_r(s;z)X_a(-s;z) \tag{25}$$

непрерывна при переходе через вещественную ось. Вычисляя $w(s;z)$ с помощью (19) и (22), получим сложное выражение, общий вид которого

$$w(s;z) = \sum_l P_l(F_r, F_a)\, w_l(s;z).$$

P_l и w_l – непрерывные функции при переходе через вещественную ось. Кроме того, w_l представляются интегралами Коши, и следовательно, целые функции. Таким образом, применяя теорему Лиувилля, получаем

$$w(s;z) = \mathcal{J} s \langle S_z \rangle (F_r - F_a) - \frac{\mathcal{J}^2}{4}(F_r - F_a) \times \\ \times [S(S+1) + \langle S_z \rangle^2]. \tag{26}$$

Сравнивая (23) и (25) для $z = \omega - i\delta$, найдем

$$\Phi_r^+(s;\omega)\Phi_a^-(-s;\omega) = K(s;\omega), \tag{27}$$

где

$$K(s;\omega) = X_r^+(s;\omega)X_a^-(-s;\omega) + w(s;\omega) \tag{28}$$

определено с точностью до регулярной функции $\chi(s;\omega)$, которой в большинстве случаев можно пренебречь. Уравнение (27) представляет собой однородную задачу Римана (см., например,/10/), решение которой имеет вид

$$\Phi_r(s;z) = K^{-1/2}(s;z)\, e^{i\eta(s;z)}, \quad \Phi_a(s;z) = K^{-1/2}(-s;z)\, e^{-i\eta(s;z)}, \tag{29}$$

где

$$\eta(s;z) = \frac{P}{2\pi i}\int_{-\infty}^{\infty} \frac{\ln K(s;\omega)}{\omega - z}\, d\omega. \tag{30}$$

3. Вычисление некоторых физических величин

Самой простой функцией плотности состояний, для которой выполнены требуемые предложения, является

$$\rho(\omega) = \frac{D^2}{\omega^2 + D^2}.$$

Тогда из (15) и (12') при условии $h \ll D$ следует, что

$$R^{\pm}(s;\omega) = \frac{N(0)}{N}\rho(\omega)\left[\ln\frac{\beta D}{2\pi} - \psi\left(\frac{1}{2} \pm \frac{\beta}{2\pi i}\left(\omega + \frac{1}{2}sh\right)\right)\right]. \tag{31}$$

Подставив эти формулы в (19), получим

$$X_{r,a}(s;\omega) = 1 + \gamma\rho(\omega)\left[\ln\frac{\beta D}{2\pi} - \psi\left(\frac{1}{2} \pm \frac{\beta}{2\pi i}\left(\omega + \frac{1}{2}sh\right)\right) - \frac{\pi^2}{4}\gamma S(S+1) \pm \pi i s \langle S_z \rangle\right], \tag{32}$$

где $\gamma = \mathcal{J}\frac{N(0)}{N}$ – безразмерная постоянная связи. Зависимость критического поля от температуры определяется условием $\sum_s X_r\left(s, \frac{h}{2}\right) = 0$, которое, используя определение температуры Кондо

$$k_B T_K = \frac{2aD}{\pi}\exp\left[\frac{1}{\gamma} + \pi^2\gamma\ S(S+1)\right],$$

можно записать следующим образом:

$$\frac{1}{2}\sum_s g_s\left[\frac{g\mu_B H_K(T)}{2\pi k_B T_K}\right] = \ln\frac{T_K}{T}, \tag{33}$$

где $g_{\pm}(x) = \psi\left(\frac{1}{2} \mp ix\right) - \psi\left(\frac{1}{2}\right)$, $\psi(x)$ – логарифмическая производная функции гамма.

В частном случае из (33) следует, что $H_K(0) = \frac{\pi k_B T_K}{2ag\mu_B}$ и $H_K(T) = 5{,}1 H_K(0)\sqrt{1 - \frac{T}{T_K}}$ для $T \to T_K$. Последнее выражение совпадает с результатом работы[4].

Перейдем теперь к рассмотрению матрицы $t_s(\omega)$ в окрестности $\omega = 0$. Так как $\rho\left(\omega + \frac{1}{2}sh\right) \simeq 1$ для $\omega \ll D$ и $h \ll D$, то (32) можно записать в более компактной форме:

$$X_{r,a}(s;\omega) = -\gamma[\ell n \frac{T}{T_K} + g_{\pm}(\beta \frac{\omega + \frac{1}{2} sh}{2\pi})_{\mp} i\pi\, s < S_z >]. \tag{34}$$

Благодаря симметрии $X_r(s;-\omega) = X_a(-s;\omega)$, фазовый множитель (30) стремится к нулю при $\omega \to 0$, далее из (26) следует, что в окрестности нуля

$$w(s;\omega) = \pi^2 \gamma^2 [s(s+1) + < S_z >^2] - 2\pi i \gamma\, s < S_z >. \tag{35}$$

Последние формулы вместе с (16), (18) и (19) дадут выражение для $t_s^r(\omega)$ в окрестности поверхности Ферми

$$t_s^r(\omega) = \frac{N}{2\pi i N(0)} [1 - \frac{X_r(s;\omega + \frac{1}{2} sh)}{\sqrt{X_r(s;\omega + \frac{1}{2} sh) X_a(-s;\omega - \frac{1}{2} sh) + w(s,\omega)}}]. \tag{36}$$

Рассмотрим некоторые частные случаи формулы (36). Если $H = 0$, то (36) сводится к известным результатам [9]. В пределе $T \gg T_K$, $\beta h \ll 1$ и $S = \frac{1}{2}$ выражение для $Im\, t_s^r(0)$ совпадает с полученным в работе [2], если в ней учесть только обменное взаимодействие.

Полученный результат (36) позволяет провести исследование проводимости металла с парамагнитными примесями в широком интервале значений температур и магнитного поля. Следуя обычному подходу, имеем

$$\rho^{-1}_{\text{обм.}}(H) = -\frac{1}{3} e^2 N(0) v_F^2 \sum_s \int \frac{\partial f(\omega)}{\partial(\omega)} \tau_s(\omega) d\omega,$$

где время жизни

$$\tau_s^{-1}(\omega) = c\, Im\, t_s^r(\omega).$$

Подставляя (36) в эти формулы после интегрирования по ω с точностью до первого члена в разложении Зоммерфельда, получаем

$$\rho_{\text{обм.}}(H) = \rho_0 c\, [1 - Re \frac{\lambda}{\sqrt{\lambda^2 + \pi^2 [S(S+1) + < S_z >^2] - \frac{2\pi}{\gamma} i < S_z >}}], \tag{37}$$

где

$$\rho_0 = \frac{m^*}{\pi n e^2 N(0)}, \quad \lambda = \ln \frac{T}{T_K} + g_+ \left(\frac{\beta h}{2\pi} \right) - i\pi < S_z > .$$

Наконец, приведем приближенные формулы для магнетосопротивления в двух предельных случаях:

а) $\underline{\beta h \ll 1}$

$$\rho(H) - \rho(0) = -\frac{7\xi(3)}{2\pi} \frac{\mu_B g \rho_0 c}{k_B} \frac{H}{T} \left[\ln^2 \frac{T}{T_K} + \pi^2 S(S+1) \right]^{-1/2},$$

б) $\underline{\beta h \gg 1}$

$$\rho(H) - \rho(0) = -\rho_0 c \left\{ 1 + \ln \frac{H}{H_K(0)} \left[\ln^2 \frac{H}{H_K(0)} + \pi^2 \left(S^2 - \frac{1}{4} \right) \right]^{-1/2} \right\},$$

где $\rho(0)$ — сопротивление в отсутствие магнитного поля. При выводе этих формул мы использовали асимптотические выражения для функции $g_+(x)$ в области малых в первом и больших во втором случае аргументов.

В заключение автор выражает благодарность Д.Н. Зубареву за внимание к работе и интересные обсуждения.

Литература

1. А.А. Абрикосов. Physics, 2, 71 (1965).
2. С.Л. Гинзбург. ФТТ, 11, 1368 (1969).
3. M.T. Beal-Monod, R.A. Winer. Phys.Rev., 170, 552 (1968).
4. А.А. Абрикосов. ЖЭТФ, 53, 2109 (1967).
5. R. More, H. Suhl. Phys.Rev.Lett., 20, 500 (1968).
6. P.E. Boolmfield, R. Hecht, P.R. Sievert. Phys.Rev., B2, 3714 (1970).
7. Д.Н. Зубарев. УФН, 71 (1960).
8. W. Brenig, W. Götze. Z.Phys., 217, 188 (1968).
9. J. Zittartz, E. Müller-Hartman. Z.Phys., 212, 380 (1968).
10. Ф.Д. Гахов. Краевые задачи, ГИФМЛ, М., 1963.

Рукопись поступила в издательский отдел
5 октября 1971 года.