

铁磁物质中有杂质势时束缚磁极化子产生的讨论*

刘涛¹, 黄书文¹, 范云霞¹, 汪克林^{1,2}

(1. 西南科技大学理学院, 四川绵阳 621010; 2. 中国科学技术大学近代物理系, 安徽合肥 230026)

摘要:对铁磁物质中束缚极化子的存在与介质中无杂质势密切相关的规律进行了系统的变分计算. 在变分计算前, 用 Schwinger 的角动量谐振子理论将其变换为载流子与两类玻色子耦合的问题, 计算后得到的结论与普遍的看法一致. 计算结果给出了杂质势的强弱对束缚极化子形成的影响、半宽度的变化规律和用有限格点数的晶体代替实际晶体作近似计算的条件.

关键词:束缚极化子; 杂质势; 模拟退火; 铁磁物质

中图分类号: O471.3 **文献标识码:** A

Discussion on the production of bound magnetic polaron in ferromagnetic material with impurity potential

LIU Tao¹, HUANG Shu-wen¹, FAN Yun-xia¹, WANG Ke-lin^{1,2}

(1. School of Science, Southwest University of Science and Technology, Mianyang 621010, China;

2. Department of Modern Physics, University of Science and Technology of China, Hefei 230026, China)

Abstract: A systematic variational calculation performed to find the behavior of the existence of bound polaron related with the impurity potential. Before the variational calculation the theory of oscillator momentrem suggested by Schwinger was applied to transform it into a problem of the coupling to transform charge carrier and two types of Boson. The results obtained by calculation show good agreement with the general view points in other works. The relation between the existence of polaron, the change of the half-width of polaron and the strength of the impurity potential were also given.

Key words: bound polaron; impurity potential; simulated annealing; ferromagnetic material

0 引言

近年来对巨磁阻现象和磁半导体的研究十分热烈^[1~11], 与之相关连的磁极化子问题是这一领域中大家都关心的基本问题. 磁极化子分为两类: 一类是磁物质中由于有杂质存在, 使载流子在杂质势及载流子自旋和晶格的定域自旋双重作用下, 在杂质的邻域形成定域的束缚磁极化子; 一类是在无杂质情

况下, 单纯由于载流子自旋与晶格定域磁矩的作用产生对载流子的磁作用势阱而形成的磁极化子, 又称为自由磁极化子或自陷磁极化子.

不论是实验还是理论工作, 几乎都一致认为如果铁磁物质没有杂质势存在时不存在极化子, 只有当杂质势存在时, 束缚的磁极化子才会出现. 而在没有杂质势存在的情况下, 只有反铁磁的物质会有自陷磁极化子出现^[12]. 本文将针对铁磁物质中无杂质

* 收稿日期: 2005-01-18; 修回日期: 2005-10-20

基金项目: 四川省教育厅基金(041139)资助.

作者简介: 刘涛(通讯作者), 男, 1960年生. 研究方向: 凝聚态物理. E-mail: liut@swust.edu.cn

时无束缚磁极化子、有杂质势时有束缚磁极化子的现象提出统一的计算方法,

1 模型

从已熟知的 Anderson-Hagawa 双交换模型出发

$$\hat{H} = t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} c_{i\sigma}^{\dagger} c_{j\sigma} - J^1 \sum_i \sigma_i s_i - J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j. \quad (1)$$

其中, $C_{i\sigma}$ ($C_{i\sigma}^{\dagger}$) 是载流子的湮灭(产生)算符, σ_i 是它的自旋算符, s_i 是晶格的定域自旋算符.

为简单计,我们只讨论一维晶格及最近邻作用. 为了计算的方便,首先用 Schwinger 的角动量谐振子理论将系统的哈氏量变换成载流子与两类玻色子的耦合问题,这两类玻色子的湮灭(产生)算符分别记为 a_i (a_i^{\dagger}) 和 b_i (b_i^{\dagger}), 它们有如下的对易关系

$$[a_i, a_j^{\dagger}] = [b_i, b_j^{\dagger}] = \delta_{ij},$$

而其余的对易关系均为零. 根据 Schwinger 理论, 两类玻色子和定域磁矩间有以下的关系

$$\left. \begin{aligned} S_{ix} &= \frac{1}{2}(a_i^{\dagger} b_i + b_i^{\dagger} a_i) \\ S_{iy} &= -\frac{i}{2}(a_i^{\dagger} b_i - b_i^{\dagger} a_i) \\ S_{iz} &= \frac{1}{2}(a_i^{\dagger} a_i - b_i^{\dagger} b_i) \end{aligned} \right\}. \quad (2)$$

引入两类玻色子的数算符

$$N_{ia} = a_i^{\dagger} a_i, \quad N_{ib} = b_i^{\dagger} b_i, \quad N_i = N_{ia} + N_{ib}, \quad (3)$$

可将定域磁矩 S_i 及第三分量 S_{iz} 用两类数算符表示

$$S_i = \frac{1}{2} N_i, \quad S_{iz} = \frac{1}{2} (N_{ia} - N_{ib}) \quad (4)$$

将关系式(2)代入(1)式, \hat{H} 可改写成

$$\begin{aligned} \hat{H} &= t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{j\uparrow} + c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{j\downarrow}) - \\ & J^1 \sum_i (c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} a_i^{\dagger} b_i + c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\downarrow} b_i^{\dagger} a_i) - \\ & \frac{J^1}{2} \sum_i (c_{i\uparrow}^{\dagger} c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^{\dagger} c_{i\downarrow}) (a_i^{\dagger} a_i - b_i^{\dagger} b_i) - \\ & \frac{J}{4} \sum_i [2a_i^{\dagger} b_i b_{i+1}^{\dagger} a_{i+1} + 2a_i^{\dagger} b_i b_{i-1}^{\dagger} a_{i-1} + \\ & 2b_i^{\dagger} a_i a_{i+1}^{\dagger} b_{i+1} + 2b_i^{\dagger} a_i a_{i-1}^{\dagger} b_{i-1} + \\ & (a_i^{\dagger} a_i - b_i^{\dagger} b_i) (a_{i+1}^{\dagger} a_{i+1} - b_{i+1}^{\dagger} b_{i+1}) + \\ & (a_i^{\dagger} a_i - b_i^{\dagger} b_i) (a_{i-1}^{\dagger} a_{i-1} - b_{i-1}^{\dagger} b_{i-1})] \end{aligned} \quad (5)$$

2 计算方法

为了求解式(5), 考虑到这种系统中两类玻色子数不守恒的特点, 根据其他人的工作^[13,14], 在变分

求解这一问题时采用相干态形式的尝试解是自然和合理的.

$$| \rangle = \sum_i (\phi_i c_{i\uparrow}^{\dagger} + \varphi_i c_{i\downarrow}^{\dagger}) e^{\sum_i (\alpha_i a_i^{\dagger} + \beta_i b_i^{\dagger} - \frac{1}{2} | \alpha_i |^2 - \frac{1}{2} | \beta_i |^2)}, \quad (6)$$

其中, φ_i 、 ϕ_i 、 α_i 和 β_i 是待定的参量. 在取实数解的情况下算出能量的期待值如下

$$\begin{aligned} E &= \frac{\langle |H| \rangle}{\langle | \rangle} = \\ & \left[\sum_i (\phi_i^{\dagger} \phi_i + \varphi_i^{\dagger} \varphi_i) \right]^{-1} \left[t \sum_{\langle i,j \rangle} (\phi_i^{\dagger} \phi_j + \varphi_i^{\dagger} \varphi_j) - \right. \\ & J^1 \sum_i (\varphi_i^{\dagger} \phi_j \alpha_i^{\dagger} \beta_i + \phi_i^{\dagger} \varphi_j \beta_i^{\dagger} \alpha_i) - \\ & \left. \frac{J^1}{2} \sum_i (\phi_i^{\dagger} \phi_i + \varphi_i^{\dagger} \varphi_i) (\alpha_i^{\dagger} \alpha_i - \beta_i^{\dagger} \beta_i) \right] - \\ & \frac{J}{4} \sum_i [4\alpha_i \beta_i (\alpha_{i+1} \beta_{i+1} + \alpha_{i-1} \beta_{i-1}) + \\ & (\alpha_i^2 - \beta_i^2) (\alpha_{i+1}^2 - \beta_{i+1}^2 + \alpha_{i-1}^2 - \beta_{i-1}^2)] \end{aligned} \quad (7)$$

由于定域磁矩的大小取固定值 j (本文中取 $j = \frac{5}{2}$), 因此有

$$\frac{\langle |a_i^{\dagger} a_i + b_i^{\dagger} b_i| \rangle}{\langle | \rangle} = \alpha_i^2 + \beta_i^2 = 2j, \quad (8)$$

得到 α_i 与 β_i 间的关系

$$\beta_i = \sqrt{2j - \alpha_i^2}. \quad (9)$$

将式(9)代入式(7)得

$$\begin{aligned} E &= \left[\sum_i (\phi_i^2 + \varphi_i^2) \right]^{-1} \left[t \sum_{\langle i,j \rangle} (\phi_i \phi_j + \varphi_i \varphi_j) - \right. \\ & 2J^1 \sum_i \varphi_i \phi_j \alpha_i \sqrt{2j - \alpha_i^2} - \\ & \left. J^1 \sum_i (\phi_i^2 - \varphi_i^2) (\alpha_i^2 - j) \right] - \\ & J \sum_i [\alpha_i \sqrt{2j - \alpha_i^2} (\alpha_{i+1} \sqrt{2j - \alpha_{i+1}^2} + \alpha_{i-1} \sqrt{2j - \alpha_{i-1}^2}) + \\ & (\alpha_i^2 - j) (\alpha_{i+1}^2 + \alpha_{i-1}^2 - 2j)]. \end{aligned} \quad (10)$$

由于在稍微复杂的情况下必须采用模拟退火方法作数值计算, 因此我们需要检验该方法的可靠性. 先讨论式(5)中的最后一项——定域磁矩——之间的相互作用可以忽略的简单情形, 将此时的解析解与模拟退火的数值解加以比较. 这里略去式(10)的最后一项, 对 Φ_i 、 φ_i 和 α_i 作变分

$$\frac{\partial E}{\partial \phi_i} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial \varphi_i} = 0, \quad \frac{\partial E}{\partial \alpha_i} = 0,$$

并引入

$$\rho \equiv \frac{t}{J^1} \quad \varepsilon \equiv \frac{E}{J^1}, \quad (11)$$

得到如下的方程

$$\rho(\phi_{i+1} + \phi_{i-1}) - \varphi_i \alpha_i \sqrt{2j - \alpha_i^2} - \phi_i (\alpha_i^2 - j) = \epsilon \phi_i, \quad (12)$$

$$\rho(\varphi_{i+1} + \varphi_{i-1}) - \phi_i \alpha_i \sqrt{2j - \alpha_i^2} - \varphi_i (\alpha_i^2 - j) = \epsilon \varphi_i, \quad (13)$$

$$(\phi_i^2 - \varphi_i^2) \alpha_i \sqrt{2j - \alpha_i^2} + \varphi_i \phi_i (2j - \alpha_i^2) - \varphi_i \phi_i \alpha_i^2 = 0. \quad (14)$$

由式(14)可得 4 组解

$$\alpha_{i,1} = \sqrt{2j} \frac{\phi_i}{\sqrt{\phi_i^2 + \varphi_i^2}}, \alpha_{i,2} = -\sqrt{2j} \frac{\phi_i}{\sqrt{\phi_i^2 + \varphi_i^2}},$$

$$\alpha_{i,3} = -\sqrt{2j} \frac{\varphi_i}{\sqrt{\phi_i^2 + \varphi_i^2}}, \alpha_{i,4} = \sqrt{2j} \frac{\varphi_i}{\sqrt{\phi_i^2 + \varphi_i^2}}. \quad (15)$$

判断这 4 组解中哪些是真正物理解的办法是：用式(15)解得的 α_{in} ($n=1, 2, 3, 4$) 代入(10)后作模拟退火求得 $\epsilon_{\min}(\alpha_{in})$ ，与直接从式(10)求得的 $\epsilon_{\min}(\alpha_i)$ 比较，见表 1，其中 N 为格点数。

计算结果表明：在精度为 10^{-18} 内

$$\epsilon_{\min}(\alpha_i, \phi_i, \varphi_i) = \epsilon_{\min}(\alpha_{i,1}, \phi_i, \varphi_i) = \epsilon_{\min}(\alpha_{i,2}, \phi_i, \varphi_i),$$

表 1 用模拟退火得到的值与 4 种解析解的比较 ($N=41$)

Tab. 1 Comparison of the values of E_{\min} obtained by annealing simulation and the four analytical solutions ($N=41$)

$\epsilon = \frac{E}{t} \rho$	$\rho=0.4$	$\rho=0.9$
$\epsilon_{\min}(\alpha_i)$	-3.297 652 640 946 992 348 1	-4.294 718 442 130 732 822 8
$\epsilon_{\min}(\alpha_{i,1})$	-3.297 652 640 946 992 348 2	-4.294 718 442 130 732 822 9
$\epsilon_{\min}(\alpha_{i,2})$	-3.297 652 640 946 992 347 5	-4.294 718 442 130 732 822 0
$\epsilon_{\min}(\alpha_{i,3})$	-3.673 734 590	-4.663 358 284
$\epsilon_{\min}(\alpha_{i,4})$	-3.664 597 968	-4.669 818 240

$\epsilon_{\min}(\alpha_i, \phi_i, \varphi_i) \neq \epsilon_{\min}(\alpha_{i,3}, \phi_i, \varphi_i) \neq \epsilon_{\min}(\alpha_{i,4}, \phi_i, \varphi_i)$ ，即只有 $\alpha_{i,1}, \alpha_{i,2}$ 是物理解。将 α_{i1} 代回(12)和(13)式得

$$\rho(\phi_{i+1} + \phi_{i-1}) - j\phi_i = \epsilon \phi_i, \quad (16)$$

和

$$\rho(\varphi_{i+1} + \varphi_{i-1}) - j\varphi_i = \epsilon \varphi_i. \quad (17)$$

从(16)、(17)出发用解析的方法解出 $\varphi_i, \phi_i, \alpha_i$ 和 ϵ ，结果在足够高的精度下和表 2 中的 $\epsilon_{\min}(\alpha_i)$ 的值的相符，从而证明了模拟退火方法在这类问题中应用的可靠性。

3 无铁磁项无杂质势的解析计算结果

图 1、图 2 是计算所得载流子的自旋向上向下的几率振幅 ϕ_i, φ_i ，它们分布在整个格点数 $N=41$ 所有晶格的格点上，表明载流子没有定域化的分布，即不存在磁极化子。图 3 表明这时定域磁矩在全晶格中整齐地排列在一个方向。图 4 为 $\rho=0.4$ 和 $N=41$ 载流子的几率分布图，它清楚地表明充满于全晶格分布的半宽度近于格点数的一半。

表 2 模拟退火数值计算与严格解析解的比较 ($N=41$)

Tab. 2 Comparison between annealing simulation and exact analytical solution ($N=41$)

$\epsilon = \frac{E}{t} \rho$	$\rho=0.4$	$\rho=0.9$
$\epsilon_{\min}(\alpha_i)$ [数字计算]	-3.297 652 640 946 992 348 1	-4.294 718 442 130 732 822 8
$\epsilon_{\min}(\alpha_{i,1})$ [解析计算]	-3.297 652 640 946 992 370 0	-4.294 718 442 130 732 832 5

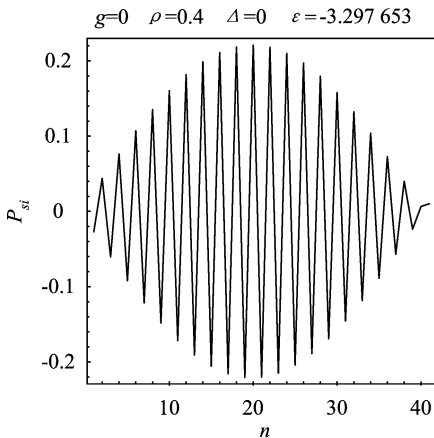


图 1 $g=0$ ，载流子自旋向上的几率振幅分布

Fig. 1 Under $g=0$ the distribution of the probability of carrier with spin up

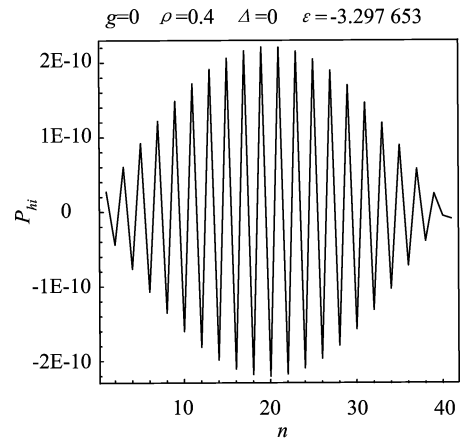


图 2 $g=0$ ，载流子自旋向下的几率振幅分布

Fig. 2 Under $g=0$ the distribution of the probability of carrier with spin down

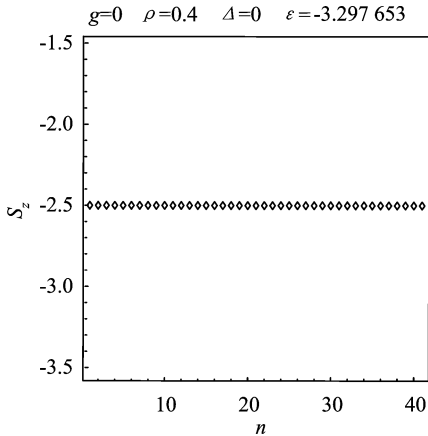


图 3 $g=0$, 定域磁矩的取向在整个晶格中的排列

Fig. 3 Under $g=0$ the array of localized spin projection in whole lattice

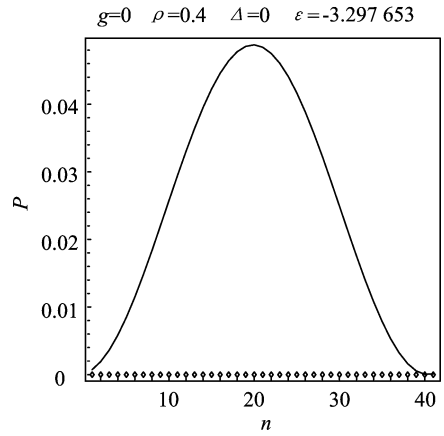


图 4 $g=0$, 相应于图 1、图 2, 载流子的几率密度分布

Fig. 4 Under $g=0$ the distribution of the probability of the carrier corresponding of Fig. 1, 2

图 5 给出在不同格点数下算出的载流子半宽度随格点数的变化. 直线表示不论格点数如何变化它的分布始终充满全部晶格. 表 3 给出 $N=41$ 和 $N=81$, 而 ρ 取不同值时, 载流子几率分布的半宽度 D , 仍然清楚表明不存在定域化的分布. 换句话说, 计算的结果告诉我们, 在不同的 N 及不同的 ρ 情况下不存在磁极化子.

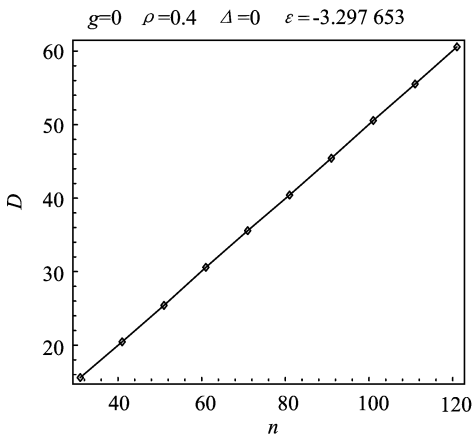


图 5 $g=0$, 载流子几率密度分布的半宽度随格点数线性变化

Fig. 5 Under $g=0$ the linear dependence of the half-width of the probability distribution of carrier on number of lattice

表 3 载流子半宽度在不同 ρ 值下的取值 ($g=0$)

Tab. 3 The half-width of the carrier under different ρ value

D	ρ									
	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
$D[41]$	20.53	20.46	20.46	20.46	20.52	20.46	20.52	20.53	20.46	20.52
$D[81]$	40.57	40.56	40.55	40.56	40.58	40.56	40.56	40.56	40.56	40.57

4 有铁磁项无杂质势的数字计算结果

以上结论是在忽略了定域磁矩之间的相互作用项时获得的. 现在再把式(10)中的最后一项加进来, 并引入

$$g \equiv \frac{J}{J'}. \tag{18}$$

在 $N=41, \rho=0.4$ 和 $g=0.01$ 时, 从图 6、7、8、9 中可看出结果和前面的情形相似, 载流子的分布铺满全晶格而没有定域化的磁极化子; 从图 10、表 4、表 5 同样可以看出对于不同的晶格数及不同的 g 和 ρ 情形下仍然没有磁极化子存在; 所有的结果都表明在铁磁物质中只要没有杂质势, 无论考不考虑定域磁矩的相互作用, 磁极化子都是不存在的, 这一点和其他人的结果一致.

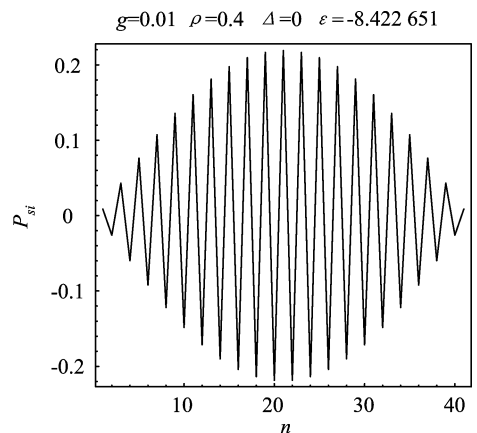


图 6 $g \neq 0$, 载流子自旋向上的几率振幅分布

Fig. 6 Under $g \neq 0$ the distribution of probability amplitude of carrier with spin up

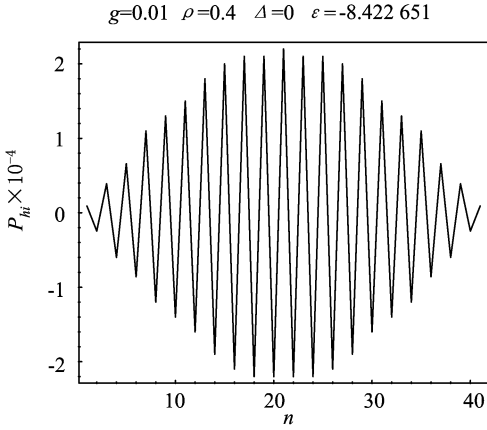


图 7 $g \neq 0$, 载流子自旋向下的几率振幅分布

Fig. 7 Under $g \neq 0$ the distribution of probability amplitude of carrier with spin down

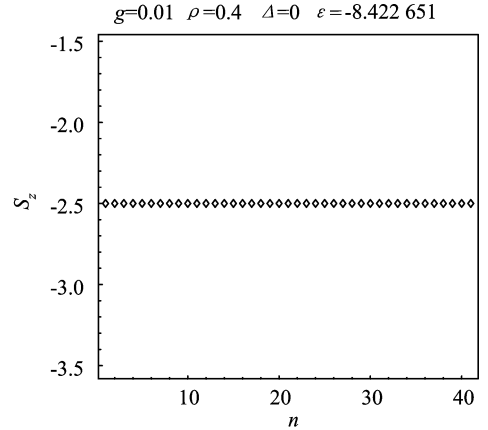


图 8 $g \neq 0$, 定域磁矩的取向在整个晶格中的排列

Fig. 8 Under $g \neq 0$ the array of the spin direction in whole lattice

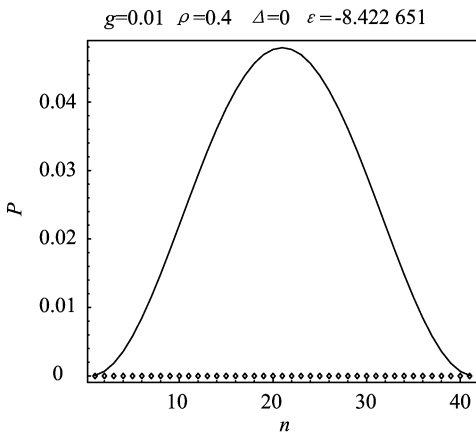


图 9 $g \neq 0$, 相应于图 6、图 7 的载流子的几率密度分布

Fig. 9 Under $g \neq 0$ the distribution of the probability of the carrier corresponding to Figs. 6 and 7

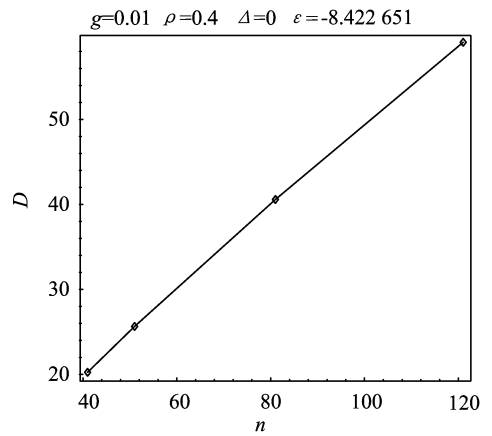


图 10 $g \neq 0$, 载流子几率密度分布的半宽度随格点数变化

Fig. 10 Under $g \neq 0$, the dependence of the half-width of the probability distribution of carrier on number of lattice

表 4 半宽度与 g 的关系 ($\rho=0.4$)

Tab. 4 The relation between half-width and g ($\rho=0.4$)

D	g					
	0.000 01	0.000 1	0.001	0.01	0.1	0.9
D [41]	20.51	20.18	20.41	20.18	20.52	20.24
D [81]	40.57	40.51	40.54	40.52	40.58	40.56

表 5 半宽度与 ρ 的关系 ($g=0.01$)

Tab. 5 The relation between half-width and ρ ($g=0.01$)

D	\rho									
	0.1	0.2	0.3	0.4	0.5	0.6	0.7	0.8	0.9	1.0
D [41]	20.53	20.46	20.46	20.18	20.52	20.46	20.52	20.53	20.46	20.52
D [81]	40.57	40.56	40.55	40.52	40.58	40.56	40.56	40.56	40.57	40.57

5 有杂质势无铁磁项的解析计算结果

现在考虑铁磁物质中存在杂质并有杂质势的情形, 这时系统的哈氏量增加一项杂质位于第 K 格点的杂质势项

$$\hat{H} = t \sum_{\langle i,j \rangle} (c_{i\uparrow}^\dagger c_{j\uparrow}^\dagger + c_{i\downarrow}^\dagger c_{j\downarrow}^\dagger) - J^1 \sum_i (c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} a_i^\dagger b_i + c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\downarrow} b_i^\dagger a_i) - \frac{J^1}{2} \sum_i [(c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} - c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow})(a_i^\dagger a_i - b_i^\dagger b_i) - \Delta_1 (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow})] \quad (19)$$

以下为了使图形对称起见, 不失普遍性地假定 K 总居于晶格的中点. 对于现在的系统, 除了多出一项 $\Delta_1 (c_{k\uparrow}^\dagger c_{k\uparrow} + c_{k\downarrow}^\dagger c_{k\downarrow})$ 以及在推导及计算中令 $\frac{\Delta_1}{J^1} = \Delta$,

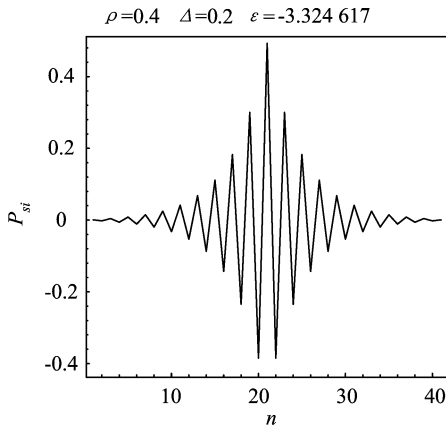


图 11 $\Delta=0.2$ 载流子自旋向上的几率振幅分布

Fig. 11 Under $\Delta=0.2$, the distribution of probability amplitude of carrier with spin up

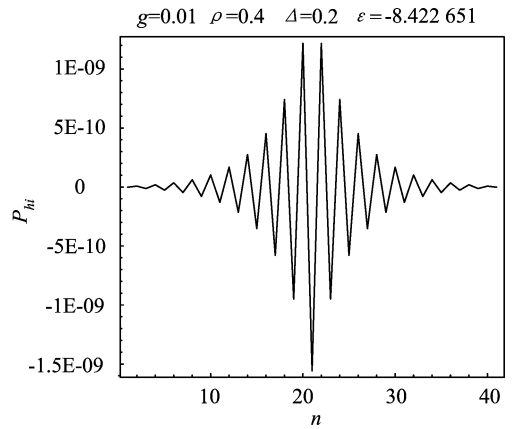


图 12 $\Delta=0.2$ 载流子自旋向下的几率振幅分布

Fig. 12 Under $\Delta=0.2$, the distribution of probability amplitude of carrier with spin down

并考虑这一项带来的变化外,所有的计算步骤都和上面讨论一样. 计算得到的结果如图 11、12、13、14 所示. 与没有杂质势时相应的图形作比较,可明显看出后者有定域化的特征,清楚表明了杂质势存在的情况下磁极化子的存在.

在图 11~14 中仍旧忽略了定域磁矩间的相互作用,即 g 取为 0. 为了说明在考虑了这项作用后结论仍不会改变,在其他参量相同的情况下算出 $g=0$ 和 $g=0.1$ 的载流子几率分布如图 15、16 所示. 通过比较可以看出,除细微的数值差别外,主要的定域化分布没有改变. 因此在下面的讨论中,也将定域磁矩间作用略去不计.

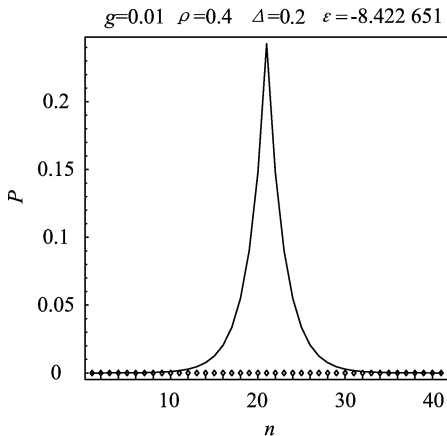


图 13 $\Delta=0.2$ 相应于图 11 及图 12 的载流子的两个方向的几率密度分布

Fig. 13 Under $\Delta=0.2$ the distribution of the probability density of carrier in two directions corresponding to Fig. 11, 12

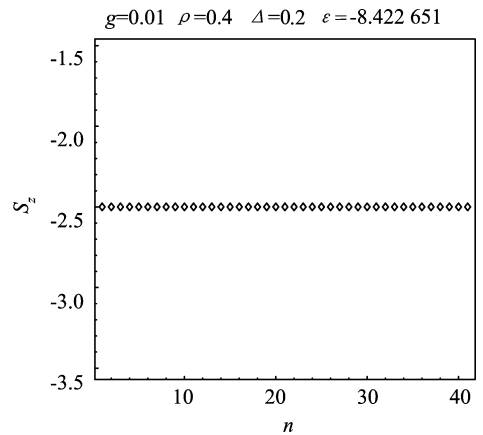


图 14 $\Delta=0.2$ 定域自旋取向的排列

Fig. 14 Under $\Delta=0.2$ array of the spin projection of localized spin.

6 结论

我们对各种参量值的情形进行了计算. 可以得出如下结论:

(I) 只要 Δ 足够强,用有限格点数的晶格代替实际晶体作计算已是很好的近似. 因为图 17~20 的右方部分四种晶格数算出的磁极化子半宽度都重合,用 $N=31$ 的格点数晶格作计算已足够了.

(II) 图 17~20 的重合区随 ρ 的减小扩大. 在 $\rho=0.1$ 的情形下, Δ 从较大的值变化到 0.025 时不同格点算出的半宽度都重合. 在 $\rho=0.4$ 时,重合范围从较大的值变化到 $\Delta=0.08$; 在 $\rho=0.9$ 时,重合范围从较大的值变化到 $\Delta=0.2$,这就是说随着 ρ 的减小可以在更大的 Δ 变化范围内用格点少的晶格作近似计算.

(Ⅲ) 不管 ρ 的大小如何. 随着 Δ 的进一步减小, 磁极化子的半宽度迅速增加, 当 Δ 接近于零时半宽度趋于各个格点数的一半. 由此可见杂质势趋于零

时载流子分布将铺满全晶格而磁极化子不再存在. 这一结论与无铁磁项无杂质势的解析计算结果自洽.

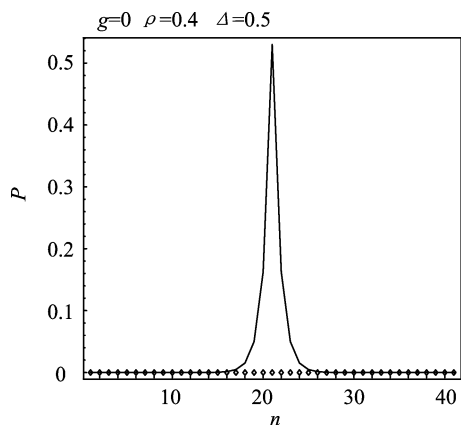


图 15 $g = 0.1, \rho = 0.4, \Delta = 0.5$ 载流子的几率密度分布(数字计算)

Fig. 15 Under $g = 0.1, \rho = 0.4, \Delta = 0.5$ the distribution of the probability density of carrier (numerical calculation)

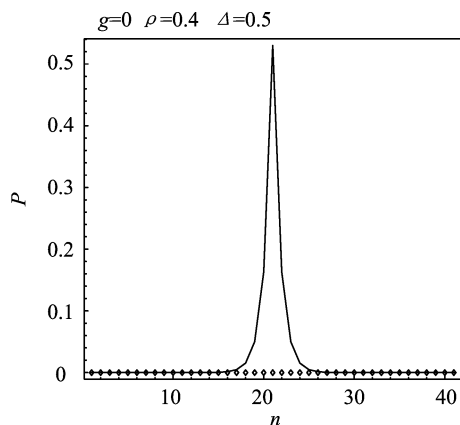


图 16 $g = 0, \rho = 0.4, \Delta = 0.5$ 载流子的几率密度分布

Fig. 16 Under $g = 0, \rho = 0.4, \Delta = 0.5$ the distribution of the probability density of carrier

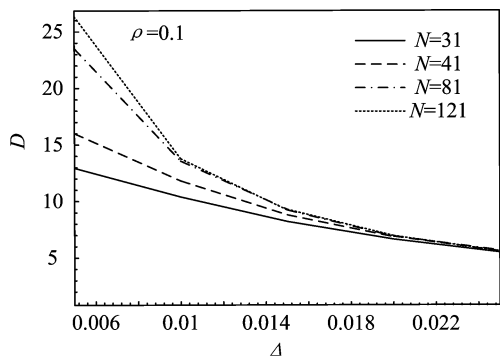


图 17 $\rho = 0.1$, 不同格点数的载流子几率密度分布的半宽度 D 随 Δ 的变化

Fig. 17 Under $\rho = 0.1$ the probability density distribution of carrier with different number of lattice varies with Δ

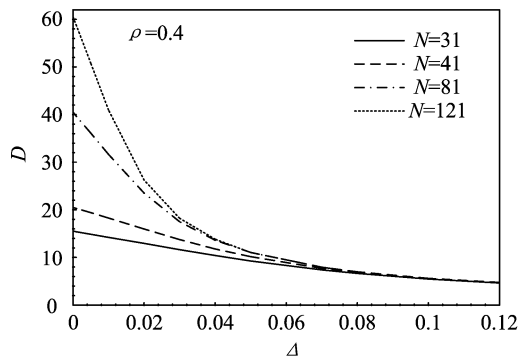


图 18 $\rho = 0.4$, 不同格点数的载流子几率密度分布的半宽度 D 随 Δ 的变化

Fig. 18 Under $\rho = 0.4$ the probability density distribution of carrier with different number of lattice varies with Δ

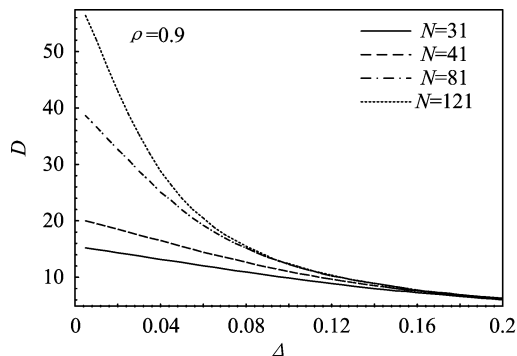


图 19 $\rho = 0.9$, 不同格点数的载流子几率密度分布的半宽度 D 随 Δ 的变化

Fig. 19 Under $\rho = 0.9$ the probability density distribution of carrier with different number of lattice varies with Δ

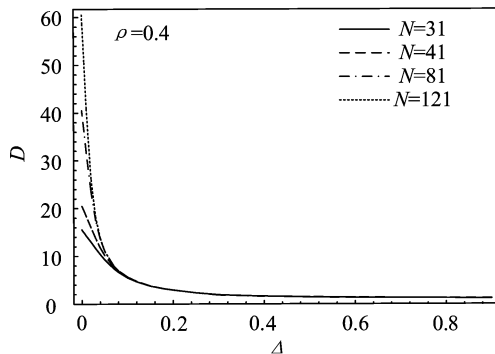


图 20 $\rho = 0.4$, 磁极化子半宽度 D 随 Δ 的变化

Fig. 20 Under $\rho = 0.4$ half-width of polaron varies with Δ

(IV) 尽管 Δ 足够小时, 用格点数少的晶格计算已不是好的近似, 但它仍能告诉我们应增加格点数到什么程度就可以作为好的近似. 例如从图 17 看出, 当 Δ 小于 0.025 时, $N=31$ 及 41 都不是好的近似, 但从 $\Delta=0.025\sim 0.01$ 这段范围内 $N=81$ 仍可看作是好的近似, 因为在这段范围内 $N=81$ 和 $N=121$ 几乎重合在一起. 类似的情形可从图 18 看出, 当 Δ 小于 0.08 时, $N=41$ 已不能看作好的近似, 但 Δ 从 0.08 \sim 0.04 这段范围内仍可用 $N=81$ 作为好的近似.

(V) 从图 20 可得出, 当 Δ 大于 0.1 后, 对于不同格点数的晶格不仅算出的磁极化子的半宽度都重合, 而且在 $\Delta=0.2$ 以后磁极化子半宽度几乎保持不变. 这就是说再增强杂质势的强度, 磁极化子的定域程度不会改变. 换句话说, 在杂质势强度达到一定程度后, 就不用再增强它. 因为它对磁极化子的定域化已不再有显著的影响.

参考文献 (References)

- [1] Majumdar P, Littlewood P. Magnetoresistance in Mn pyrochlore; electrical transport in a low carrier density ferromagnet[J]. Phys. Rev. Lett., 1998, 81:1 314-1 317.
- [2] Shimikawa Y, Kubo Y, Manako T. Giant magnetoresistance in $Tl_2Mn_2O_7$ with the pyrochlore structure[J]. Nature, 1996, 379:53-55.
- [3] Subramanian M A, Toby B H, Ramirez A P, et al. Colossal magnetoresistance without Mn^{3+}/Mn^{4+} double exchange in the stoichiometric pyrochlore $Tl_2Mn_2O_7$ [J]. Science, 1997, 273:81-84.
- [4] Ramirez A P, Subramanian M A. Large enhancement of magnetoresistance in $Tl_2Mn_2O_7$: pyrochlore versus perovskite[J]. Science, 1997, 277:546-549.
- [5] Martinez B, Senis R, Fontcuberta F, et al. Carrier density dependence of magnetoresistance in $Tl_2Mn_{2-x}Ru_xO_7$ pyrochlores[J]. Phys. Rev. Lett., 1999, 83:2 022-2 025.
- [6] Kagan M Y, Khomskii D I, Mostovoy M V. Double-exchange model; phase separation versus canted spins [DB]. eprint, condmat/9804213:1-10.
- [7] Moreo A, Yunoki S, Dagotto E. Phase separation scenario for manganese oxides and related materials [J]. Science, 1999, 283:2 034-2 040.
- [8] Coey J M D, Viret M, Ranno L, et al. Electron localization in mixed-valence manganites [J]. Phys. Rev. Lett., 1995, 75:3 910-3 913.
- [9] Allodi G, Genzi R, Guidi G. ^{139}La NMR in lanthanum manganites; Indication of the presence of magnetic polarons from spectra and nuclear relaxations [J]. Phys. Rev. B, 1998, 57:1 024-1 034.
- [10] Neumeier J J, Cohn J L. Possible signatures of magnetic phase segregation in electron-doped antiferromagnetic $CaMnO_3$ [J]. Phys. Rev. B, 2000, 61:14 319-14 322.
- [11] Cohn J L, Neumeier J J. Heat conduction and magnetic phase behavior in electron-doped $Ca_{1-x}La_xMnO_3$ ($0\leq x\leq 0.2$) [J]. Phys. Rev. B, 2002, 66: 100 404-100 407.
- [12] Meskine H, Saha-Dasgupta T, Satpathy S. Does the self-trapped magnetic polaron exist in electron-doped manganites? [J]. Phys. Rev. Lett., 2004, 92: 56 401-56 404.
- [13] Calderon M J, Brey L, Littlewood P B. Stability and dynamics of free magnetic polarons[J]. Phys. Rev. B, 2000, 62:3 368-3 371.
- [14] Barisic O S. Variational study of the Holstein polaron [J]. Phys. Rev. B, 2002, 65:144 301.