

多晶磁性块材电导率晶粒尺寸效应及巨磁阻效应

罗 威, 朱林利, 郑晓静

(兰州大学力学系, 兰州 730000)

摘要: 本文针对多晶磁性块体材料电导率的尺寸效应, 通过 Boltzmann 方程并考虑电子自旋相关的晶界散射, 讨论了多晶磁性块材电子在晶粒内部的分布及在磁场下的输运性质。考虑晶界散射的主要作用, 将晶界散射作为电子输运的边界条件, 研究了电导率和晶粒尺寸的关系, 给出了电导率的定量表达式。同时考虑在外加磁场的作用下晶粒间磁化强度的相对方向发生转变引起电子自旋方向的变化, 表现出明显的磁阻效应。计算结果表明: 随着晶粒尺寸的减小, 块材电导率显著下降; 在晶粒尺寸较小时表现出明显的巨磁阻效应。

关键词: 凝聚态物理; 电导率; 自旋; 电子平均自由程; 磁化强度; 巨磁阻效应; 晶粒尺寸

中图分类号: O469 **文献标识码:** A **文章编号:** 1674-2850(2008)08-0786-7

Grain size effect of electrical conductivity and giant magnetoresistance effect in bulk magnetic polycrystals

LUO Wei, ZHU Linli, ZHENG Xiaojing

(Department of Mechanics, Lanzhou University, Lanzhou 730000)

Abstract: Solving Boltzmann equation and considering the spin-dependent grain boundary scattering, the distribution of electrons in grains and the electrical transport properties in applied magnetic field are discussed. Considering the dominate influence of grain boundary scattering, taken as boundary conditions for electrical transport, investigated the dependence of electrical conductivity on grain size. Simultaneously, in applied magnetic field, the reorientation of the relative magnetisation between grains brings the change of spin, and it presents obvious giant magnetoresistance (GMR) effect. The results indicate that as the grain size decreases, the electrical conductivity descends evidently, and when the grain size is much smaller, the GMR effect is more obvious.

Key words: condensed matter physics; electrical conductivity; spin; the mean free path of electron; magnetisation; giant magnetoresistance (GMR) effect; grain size

0 引言

多晶材料相比单晶材料有着更加优异的电学、磁学、光学以及力学等特性, 因而引起众多学者的关注。多晶材料随着晶粒尺寸的减小晶界对电子散射增强, 使得材料的电导率表现出明显的尺寸效应。电导率尺寸效应的研究始于对金属薄膜或导线的电导率随着膜厚或导线直径的变化规律的讨论, 通过分别考虑表面效应和晶界效应建立能够解释电导率尺寸效应的 FS 和 MS 模型^[1~3], 随着结构尺寸的低维化, 低维材料电导率的尺寸效应更加明显, 使得材料的电导率远小于相应的块材值^[4~7], 由于块体热电材料在大热荷载中的重要应用^[8], 对块材电导率尺寸效应的研究具有重要意义。多晶块材电导率的尺寸效应不同于膜材和线材, 是由内部微结构组成即晶粒细化导致的, 实验研究^[9~10]表明, 块材的电导率随着晶粒尺寸的减小而显著减小, 当晶粒尺寸达到纳米尺度时尺寸效应更为明显。由于 FS 和 MS 模型都是对膜材和线材电导率尺寸效应的描述, 对于块材而言, 从研究薄膜晶界效应的 MS 模型出发, 虽然可以定性说明块材中由于晶界散射引起的电导率尺寸效应, 但对这种理论的借用是有争议

基金项目: 国家自然科学基金 (90405005); 高等学校博士学科点专项科研基金 (20050730016)

作者简介: 罗威 (1984—), 男, 硕士研究生, 主要研究方向: 纳尺度多场耦合

通信联系人: 郑晓静, 教授, 主要研究方向: 电磁固体力学、环境力学, E-mail: xjzheng@lzu.edu.cn

的^[11~13]。从晶粒内部电子的输运过程入手，可以解释块材的晶粒电导率尺寸效应，但已有的工作却很少有真正从材料的晶粒角度来探讨电导率尺寸效应的。

多晶磁性块材在外磁场作用下的性质也鲜有人研究，近年来，学者们对多层磁性复合材料、纳米超晶格材料和 Mn、Gd、Sr 等化合物以及其它材料的巨磁阻效应进行了大量的实验和理论研究。实验方面，GORDEEV 等^[14]对 DyFe₂/YFe₂ 超晶格进行实验研究，指出其中交换弹簧引起的巨磁阻效应与 LEVY 等^[15]的理论很好的吻合。LEBON 等^[16]对 SrFeO₃ 单晶的电子和磁性进行了实验研究，发现自旋—电荷有序与电子输运行为有密切的关系，并观测到了正的和负的巨磁阻效应。WU 等^[17]通过小角度中子散射实验揭示了天然掺杂钙钛矿的辉钴矿 La_{1-x}Sr_xCoO₃ 晶粒间的巨磁阻现象，并指出这种材料表现出的巨磁阻效应不需要预先引入化学界面。YU 等^[18]和 KOYAMA 等^[19]分别通过实验研究了 Ni₅₀Mn_{50-x}In 单晶合金马氏相变时和在强磁场诱导下锰铝铜强磁合金 Ni₅₀Mn₃₆Sn₁₄ 磁相变过程中大的磁阻效应。MIAO 等^[20]在 La_{0.67}Ca_{0.33}MnO₃(LCMO)/_xCuO ($x=20\%$) 和 SENGUPTA 等^[21]在 Gd 的几种化合物 Gd₂Co₂Al、Gd₂Co₂Ga 和 Gd₇Rh₃ 中观测到巨磁阻效应。理论方面，文献^{[22]~[23]}和文献^{[24]~[25]}分别从半经典的 Boltzmann 模型和量子力学模型出发对多层磁性薄膜结构中的巨磁阻现象进行了模拟，较好地拟和了实验结果。NÚÑEZ 等^[26]对反铁磁性金属中自旋扭转和巨磁阻效应从理论上进行了研究，指出电流对磁微结构产生了影响，而磁微结构的改变引起了电阻的变化。UDVARDI 等^[27]从缺省的 Korringa-Kohn-Rostoker 形式出发，利用一般的微扰方法计算了在螺旋磁性块体 MnAu₂ 为基体的合金中竞争交换作用导致阈场的减小，保证了较大复值的巨磁阻效应。但对于块材而言，巨磁阻效应的相关理论研究甚少，晶粒尺寸对它的影响更是少有论及。本文通过建立虑及电子自旋以描述多晶材料电导率晶粒尺寸效应的理论模型，并考虑磁场对块晶磁性材料内部电子输运性质的影响，讨论了块材中的磁致电阻效应。

本文基于 Boltzmann 输运方程，从晶粒内部导电电子输运角度研究块材中由晶界散射效应引起的电导率尺寸效应。由于块材晶界散射效应明显且各向异性，直接考虑众多晶粒间的散射十分复杂，因此将此反映在各晶粒内的边界上，即将晶界散射处理成边界条件。为了简化，这里先考虑各向同性情形，通过讨论内部晶粒的电导率并引入晶界势垒透射率（与自旋相关），建立块材晶粒尺寸效应的电导率理论。晶界电子散射的边界处理可以避免 Matthiessen 规则的失效问题，同时该理论有望解决各向异性问题。考虑在晶粒之间有一个反铁磁—铁磁耦合作用，在外磁场的作用下，晶粒间磁化强度的相对方向发生了从反平行到平行的转变，从而引起了电子自旋方向的变化（电子自旋向上或向下转变为自旋向下或向上），从这个角度讨论了外加磁场对电导率的影响（巨磁阻效应）。由于块材中晶界效应对电导率（电阻率）的作用是主要的，在块材电导率中可不计表面效应的影响。基于本文建立的虑及电子自旋用以描述多晶块体磁性材料电导率的晶粒尺寸效应和磁阻效应的理论模型，数值计算结果表明：电导率随着晶粒尺寸的减小而减小，当晶粒尺寸下降到 800 nm 以下，电导率下降更加明显；同时，随着晶粒尺寸的减小，材料的磁致电阻显著增强，表现出明显的巨磁阻效应。

1 模型的建立

一般从微观角度研究材料的电导率均采用基于 Boltzmann 方程的电子分布函数的统计分析，并用弛豫时间近似

$$\frac{\partial f}{\partial t} + \vec{v} \cdot \nabla f + \vec{F} \cdot \frac{\partial f}{\partial \vec{p}} = -\frac{f - f_0}{\tau_{\uparrow(\downarrow)}} \quad (1)$$

在定常状态下 $\partial f / \partial t = 0$ 。其中， f 为电子的分布函数，一般是粒子的位移、速度以及时间的函数； \vec{v} 为电子的速度； \vec{F} 为作用在电子上的力，有外加电磁场作用下表现为电磁力； \vec{p} 为电子的动量； f_0 为平衡态下的分布函数； τ 为弛豫时间； \uparrow (\downarrow) 表示电子自旋向上（向下）。

设 $f = f_0 + g(\vec{v}, x)$, 在 x 方向 (沿晶粒厚度方向) 有一外加电场 \vec{E} , g 仅仅是空间坐标 x 和电子速度 \vec{v} 的函数。代入 Boltzmann 方程中可得

$$\frac{\partial g}{\partial x} + \frac{g}{\tau_{\uparrow(\downarrow)}} = \frac{eE}{mv_x} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \quad (2)$$

式中忽略了偏离欧姆定律的项和由磁场产生的项 (由于它是二级小量)^[2,15], 如图 1 所示。

很容易得到式 (2) 的一般解, 即在区域 Q 中为 $g = g_{Q\uparrow}(v_x, x) + g_{Q\downarrow}(v_x, x)$, $v_x > 0$; 在区域 Q 中为 $g = g_{Q\uparrow}(v_x, x) + g_{Q\downarrow}(v_x, x)$, $v_x < 0$ 。代入式 (2) 中可得

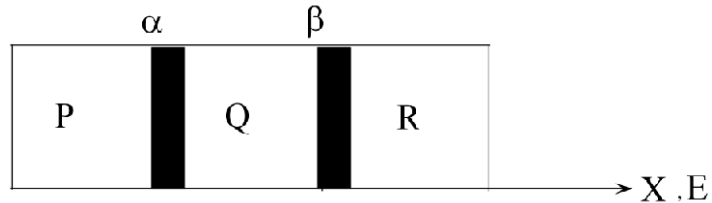


图 1 多晶块体材料微结构示意图

Fig. 1 The schematic diagram of microstructure of bulk polycrystals

$$g_{\pm\uparrow(\downarrow)}(v_x, x) = \begin{cases} \frac{eE\tau_{\uparrow(\downarrow)}}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \left\{ 1 + F_{\pm\uparrow(\downarrow)} \exp\left[\frac{\mp x}{\tau_{\uparrow(\downarrow)} |v_x|}\right] \right\}, & v_x > 0 \\ \frac{eE\tau_{\uparrow(\downarrow)}}{m} \frac{\partial f_0}{\partial v_x} \left\{ 1 + F_{\mp\uparrow(\downarrow)} \exp\left[\frac{\mp x}{\tau_{\uparrow(\downarrow)} |v_x|}\right] \right\}, & v_x < 0 \end{cases} \quad (3)$$

其中, $F_{\pm\uparrow(\downarrow)}$ 为速度的任意函数, 由边界条件确定。

由于 f_0 对电流无贡献, 则在 x 方向的电流密度为 $J_x = e(m/h)^3 \int v_x (g_{\uparrow} + g_{\downarrow}) d^3\vec{v}$ 。其中, m 为电子的有效质量, h 为普朗克常量。在 \vec{v} 空间引入极坐标, 设 $v = |\vec{v}|$, $\lambda_{\uparrow} = \tau_{\uparrow} v$, $\lambda_{\downarrow} = \tau_{\downarrow} v$, 则

$$J_x = -\frac{e^2 m^2 E_x}{h^3} \int_0^{\infty} dv \int_0^{\pi} v^3 \frac{\partial f_0}{\partial v} \sin^3 \theta d\theta \left\{ \left(\int_0^{\frac{\pi}{2}} d\varphi + \int_{\frac{3\pi}{2}}^{2\pi} d\varphi \right) \cos^2 \varphi \left[\tau_{\uparrow} \left(1 + F_{\uparrow} \exp\left(\frac{-x}{\lambda_{\uparrow} \sin\theta \cos\varphi}\right) \right) + \tau_{\downarrow} \left(1 + F_{\downarrow} \exp\left(\frac{-x}{\lambda_{\downarrow} \sin\theta \cos\varphi}\right) \right) \right] + \int_{\frac{\pi}{2}}^{\frac{3\pi}{2}} d\varphi \cos^2 \varphi \left[\tau_{\uparrow} \left(1 + F_{\uparrow} \exp\left(\frac{-x}{\lambda_{\uparrow} \sin\theta \cos\varphi}\right) \right) + \tau_{\downarrow} \left(1 + F_{\downarrow} \exp\left(\frac{-x}{\lambda_{\downarrow} \sin\theta \cos\varphi}\right) \right) \right] \right\} \quad (4)$$

因此, 晶粒内电导率作为块材电导率近似, 可以表示成

$$\sigma = \frac{1}{Ed} \int_0^d J_x(x) dx \quad (5)$$

2 边界条件及磁致电阻

由于在边界 A、B 处存在晶界势垒, 传导电子在晶界处发生散射 (与电子自旋相关), 设反射率为 $R_{\uparrow(\downarrow)}$, 透射率为 $T_{\uparrow(\downarrow)}$, 并且在外磁场的影响下电子穿越晶界时电子的自旋方向发生变化。 $P_{\uparrow\uparrow}$ 表示电子自旋向上 (关于 P 或 R 中磁化强度) 透射后在 Q 中转变为自旋向上 (关于 Q 中磁化强度) 的概率; 同理, $P_{\uparrow\downarrow}$ 表示电子自旋向上 (关于 P 或 R 中磁化强度) 透射后在 Q 中转变为自旋向下 (关于 Q 中磁化强度) 的概率; 类似可定义 $P_{\downarrow\uparrow}$ 、 $P_{\downarrow\downarrow}$ 。且有 $P_{\uparrow\uparrow} = P_{\downarrow\downarrow} = \cos^2(\Psi/2)$, $P_{\uparrow\downarrow} = P_{\downarrow\uparrow} = \sin^2(\Psi/2)$, 其中 Ψ 为在相邻晶粒中磁化强度的夹角, 则边界条件为:

在边界 α 处,

$$\begin{aligned} g_{Q\uparrow} &= P_{\uparrow\uparrow} T_{\uparrow} g_{P\uparrow}(d, v_x) + P_{\uparrow\downarrow} T_{\downarrow} g_{P\downarrow}(d, v_x) + R_{\uparrow} g_{Q\uparrow}(0, v_x) \\ g_{Q\downarrow} &= P_{\downarrow\downarrow} T_{\downarrow} g_{P\downarrow}(d, v_x) + P_{\downarrow\uparrow} T_{\uparrow} g_{P\uparrow}(d, v_x) + R_{\downarrow} g_{Q\downarrow}(0, v_x) \end{aligned} \quad (6)$$

在边界 β 处,

$$\begin{aligned} g_{Q\uparrow} &= P_{\uparrow\uparrow}T_{\uparrow}g_{R\uparrow}(d,v_x) + P_{\uparrow\downarrow}T_{\downarrow}g_{R\downarrow}(d,v_x) + R_{\uparrow}g_{Q\uparrow}(0,v_x) \\ g_{Q\downarrow} &= P_{\downarrow\downarrow}T_{\downarrow}g_{R\downarrow}(d,v_x) + P_{\downarrow\uparrow}T_{\uparrow}g_{R\uparrow}(d,v_x) + R_{\downarrow}g_{Q\downarrow}(0,v_x) \end{aligned} \quad (7)$$

假定各个晶粒周期分布, 电子分布无差异, 则 $g_{G\uparrow(\downarrow)} = g_{R\uparrow(\downarrow)}$, $g_{Q\uparrow(\downarrow)} = g_{P\uparrow(\downarrow)}$ 。根据式 (2) 的一般解, 式 (3) 结合以上给出的边界条件方程 (4) 和 (5) 即可确定一般解中的待定系数 $F_{\pm\uparrow(\downarrow)}$ 。令 $M_{\uparrow(\downarrow)} \exp[-d/(\tau_{\uparrow(\downarrow)} |v_x|)]$, $N_{\uparrow(\downarrow)} = \exp[d/(\tau_{\uparrow(\downarrow)} |v_x|)]$, 则边界方程条件可以表示成

$$\begin{cases} (1 - P_{\uparrow\uparrow}T_{\uparrow}M_{\uparrow})F_{\uparrow\uparrow} - P_{\uparrow\downarrow}T_{\downarrow}F_{\downarrow\uparrow} - R_{\uparrow}F_{\downarrow\uparrow} + 1 - P_{\uparrow\uparrow}T_{\uparrow} - P_{\uparrow\downarrow}T_{\downarrow} - R_{\uparrow} = 0 \\ -P_{\downarrow\uparrow}T_{\uparrow}M_{\downarrow}F_{\downarrow\uparrow} + (1 - P_{\downarrow\downarrow}T_{\downarrow}M_{\downarrow})F_{\downarrow\downarrow} - R_{\downarrow}F_{\downarrow\downarrow} + 1 - P_{\downarrow\downarrow}T_{\downarrow} - P_{\downarrow\uparrow}T_{\uparrow} - R_{\downarrow} = 0 \\ -R_{\uparrow}M_{\uparrow}F_{\uparrow\uparrow} + (N_{\uparrow} - P_{\uparrow\uparrow}T_{\uparrow})F_{\uparrow\downarrow} - P_{\uparrow\downarrow}T_{\downarrow}F_{\downarrow\downarrow} + 1 - P_{\uparrow\uparrow}T_{\uparrow} - P_{\uparrow\downarrow}T_{\downarrow} - R_{\uparrow} = 0 \\ -R_{\downarrow}M_{\downarrow}F_{\downarrow\downarrow} - P_{\downarrow\uparrow}T_{\uparrow}F_{\uparrow\downarrow} + (N_{\downarrow} - P_{\downarrow\downarrow}T_{\downarrow})F_{\downarrow\uparrow} + 1 - P_{\downarrow\downarrow}T_{\downarrow} - P_{\downarrow\uparrow}T_{\uparrow} - R_{\downarrow} = 0 \end{cases} \quad (8)$$

定义 $D_{\uparrow(\downarrow)} = 1 - T_{\uparrow(\downarrow)}$, $N_s = D_{\uparrow}/D_{\downarrow}$ 描述了电子散射在界面处的不对称性。 D_{\uparrow} 表示晶界粗糙度。对完美晶界而言, 在晶界处的电子散射将不会对电阻的变化起作用, 即这里将不会有磁致电阻效应^[24]。随着晶界粗糙度的增加 D_{\downarrow} 也随之增加。 N_s 决定了电子自旋向上和电子自旋向下散射的不对称性, N_s 越大电子自旋散射的不对称性越大。同时假设自旋向上和自旋向下的电子有相同的费米能、驰豫时间 τ 、有相同的等效质量。因此在这里忽略晶界散射对角度的依赖是合理的。同样假设在晶界处仅有透射和漫反射, 即 $R_{\uparrow} = R_{\downarrow} = 0$, 则现在依赖的参数为 τ , $T_{\uparrow(\downarrow)}$, Ψ , N_s 。为了方便表述, 令

$$\begin{aligned} a_1 &= 1 - P_{\uparrow\uparrow}T_{\uparrow}M_{\uparrow}; a_2 = -P_{\uparrow\downarrow}T_{\downarrow}M_{\downarrow}; b_1 = -P_{\downarrow\uparrow}T_{\uparrow}M_{\uparrow}; b_2 = 1 - P_{\downarrow\downarrow}T_{\downarrow}M_{\downarrow}; \\ c_1 &= N_{\uparrow} - P_{\uparrow\uparrow}T_{\uparrow}M_{\downarrow}; c_2 = -P_{\uparrow\downarrow}T_{\downarrow}; d_1 = -P_{\downarrow\uparrow}T_{\uparrow}; d_2 = N_{\downarrow} - P_{\downarrow\downarrow}T_{\downarrow}; \\ r_1 &= -1 + P_{\uparrow\uparrow}T_{\uparrow}; r_2 = -1 + P_{\downarrow\downarrow}T_{\downarrow} + P_{\downarrow\uparrow}T_{\uparrow} \end{aligned} \quad (9)$$

代入式 (6) 中得

$$\begin{aligned} F_{\uparrow\uparrow} &= (r_1b_2 - a_2r_2)/(a_1b_2 - a_2b_1); F_{\downarrow\uparrow} = (a_1r_2 - r_1b_1)/(a_1b_2 - a_2b_1); \\ F_{\uparrow\downarrow} &= (r_1d_2 - c_2r_2)/(c_1d_2 - c_2d_1); F_{\downarrow\downarrow} = (c_1r_2 - r_1d_1)/(c_1d_2 - c_2d_1) \end{aligned} \quad (10)$$

考虑难轴磁化强度^[27], 作一级近似处理, 即 $\cos \frac{\Psi}{2} = \frac{H}{H_a} = \frac{M}{M_s}$, 有

$$R_{\uparrow\uparrow} = P_{\downarrow\downarrow} = \cos^2(\Psi/2) = \left(\frac{M}{M_s}\right)^2, P_{\downarrow\uparrow} = P_{\uparrow\downarrow} = \sin^2(\Psi/2) = 1 - \left(\frac{M}{M_s}\right)^2 \quad (11)$$

其中, M_s 是饱和磁化强度。将式 (9) ~ (11) 代入电导率的表达式 (5) 中, 通过数值积分可以得到电导率的最终结果。电阻率的相对变化由下式给出 (从 $\Psi \neq 0$ 到 $\Psi = 0$)

$$\chi = \frac{\rho^{\uparrow\downarrow} - \rho^{\uparrow\uparrow}}{\rho^{\uparrow\uparrow}} \Big|_{\Psi=\pi} = \frac{\sigma^{\uparrow\uparrow} - \sigma^{\uparrow\downarrow}}{\sigma^{\uparrow\uparrow}} \Big|_{\Psi=\pi} \quad (12)$$

这里, $\rho^{\uparrow\downarrow}$ 和 $\rho^{\uparrow\uparrow}$ 表示晶粒间磁化强度方向反平行和平行时的电阻率。同理, $\sigma^{\uparrow\downarrow}$ 和 $\sigma^{\uparrow\uparrow}$ 表示晶粒间磁化强度方向反平行和平行的电导率。

3 计算结果及讨论

为了进一步定量分析晶粒尺寸、外加磁场以及一些材料物理参数对多晶磁性材料电导率的影响, 首先给出了电子自旋散射不对称性不同 (即 N_s 不同) 时材料的电导率随晶粒尺寸的变化规律, 如图 2 所示。电导率随着晶粒尺寸的增大而增大, 当晶粒尺寸小于 800 nm 时电导率随着晶粒尺寸的减小而急剧减小; 当晶粒尺寸大于 1 000 nm 时电导率的变化趋于平缓。并且, 由于电子自旋散射不对称性的不

同，在同一晶粒尺寸下，电导率随着不对称性的增大而增大。图3给出了在电子自旋散射不对称性不同（即 N_s 不同）时材料的相对电阻率随着晶粒尺寸的变化规律。在同一晶粒尺寸下，不对称性越大，相对电阻率越大。由于不对称性 N_s 是对晶界粗糙度的描述，粗糙度越大，不对称性越大，那么，相对电阻率越大。从图中可以看出，随着晶粒尺寸的增大，相对电阻率减小，即晶粒尺寸越小，巨磁阻效应越明显。在晶粒尺寸小于 20 nm 时，巨磁阻效应较为明显；在小于 10 nm 时，更为明显，在不同的对称性下最大值分别达到了 30% ($N_s=3.0$)，93% ($N_s=6.0$)，200% ($N_s=12.0$)。图4给出了在不同透射率情况下相对电阻率和晶粒尺寸的变化关系。从图中可以看出，晶粒尺寸较小时，相对电阻率较大。在晶粒尺寸小于 100 nm 时，相对电阻率的变化较为明显。在晶粒尺寸相同的情况下，透射率较小时，相对电阻率较大；透射率较大时，相对电阻率较小。

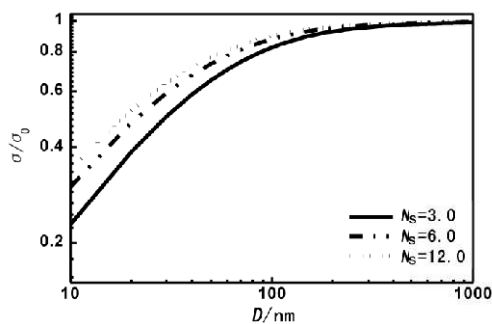


图2 $T_{\uparrow}=0.6$, $\lambda=80$ nm, $P_{\uparrow\uparrow}=0.5$, 不对称性不同时电导率随晶粒尺寸的变化规律
Fig. 2 $T_{\uparrow}=0.6$, $\lambda=80$ nm, $P_{\uparrow\uparrow}=0.5$, electrical conductivity as a function of grain size at different N_s

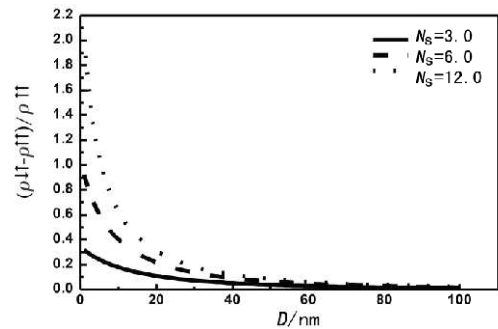


图3 $T_{\uparrow}=0.6$, $\lambda=80$ nm, 不同电子自旋散射不对称性相对电阻率随着晶粒尺寸的变化规律
Fig. 3 $T_{\uparrow}=0.6$, $\lambda=80$ nm, relative resistivity as a function of grain size at different N_s

图5给出了相对电阻率在电子平均自由程不同时随磁场的变化规律。从图中可以看出，不同电子平均自由程时，相对电阻率随磁场的变化规律大致相同，只是变化的幅度不一样。电子平均自由程越大，相对电阻率越大。电子平均自由程与费米能有关，费米速度越大，电子平均自由程也就越大。图6给出了相对电阻率在电子自旋散射不对称性不同时随磁场的变化规律。从图中可以看出，在电子自旋散射不同时，相对电阻率随磁场的变化规律基本一样。不对称性越大，相对电阻率越大。图7给出了在不同的晶粒尺寸下相对电阻率与磁场的关系。在零磁场下晶粒中的磁化强度沿易轴方向，相邻晶粒中的磁化强度方向为反平行的。在足够强的磁场作用下，磁化强度相对方向从反平行旋转为平行的，

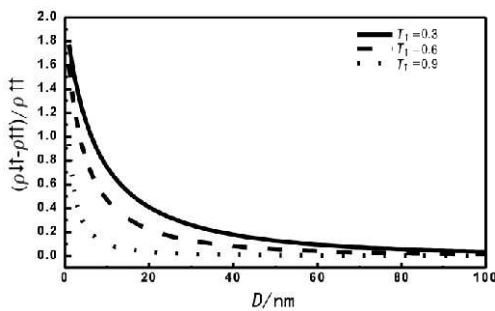


图4 $N_s=10.0$, $\lambda=80$ nm, 相对电阻率在不同透射率下的变化规律
Fig. 4 $N_s=10.0$, $\lambda=80$ nm, relative resistivity as a function of grain size at different T

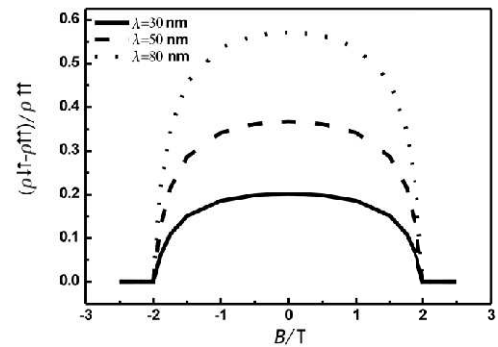


图5 $d=10$ nm, $T_{\uparrow}=0.5$, $N_s=10$, 不同电子平均自由程相对电阻率随磁场的变化规律
Fig. 5 $d=10$ nm, $T_{\uparrow}=0.5$, $N_s=10$, relative resistivity as a function of magnetic field at different λ

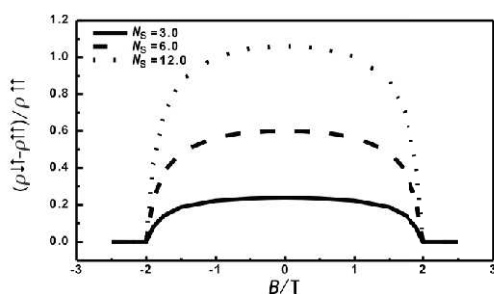


图 6 $d=5$ nm, $T_{\uparrow}=0.5$, $N_s=80$ nm, 不同电子自旋散射不对称性相对电阻率随磁场的变化规律

Fig. 6 $d=5$ nm, $T_{\uparrow}=0.5$, $N_s=80$ nm, relative resistivity as a function of magnetic field at different N_s

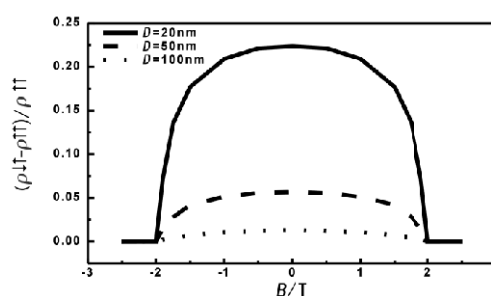


图 7 $T_{\uparrow}=0.6$, $N_s=10.0$ nm, $\lambda=80$ nm, 相对电阻率在不同晶粒尺寸时随磁场的变化规律

Fig. 7 $T_{\uparrow}=0.6$, $N_s=10.0$ nm, $\lambda=80$ nm, relative resistivity as a function of magnetic field at different D

在这个过程中伴随着电阻率的减小（即电导率的增加）。通过比较可以发现，在晶粒尺寸较小的时候，磁场对电阻率有较大的影响；在晶粒尺寸较大的时候，磁场对电阻率的影响较小。在晶粒尺寸为 20 nm 时，最大时的相对电阻率为 22%；而在晶粒尺寸为 100 nm 时，最大时的相对电阻率仅为 1.3%。这说明晶粒的尺寸效应是明显的。

4 结论

本文针对多晶磁性块材晶粒尺寸对电导率的影响，在材料各向同性的前提下讨论了电场方向上电导率与晶粒尺寸的定量关系，考虑到晶粒纳米化所导致的界面效应，将晶界对电子自旋散射的作用处理为晶粒边界条件，认为晶界区域存在一定的晶界势垒，不同自旋的电子有不同的透射率；同时，磁性块材晶粒中的磁化强度在磁场作用下会发生改变，相邻晶粒间磁化强度的相对方向在足够强的磁场作用下会发生从反平行到平行的转变，从而讨论了外加磁场对电导率的影响（巨磁阻效应），并利用双电流模型得到了电导率的定量表达式。通过数值计算，详细讨论了多晶磁性块材电导率与晶粒尺寸、外加磁场以及电子自旋性质之间的关系。结果表明：电导率随着晶粒尺寸的增大而增大，在晶粒尺寸小于 800 nm 区域尤为明显；透射率较小时，相对电阻率较大；电子自旋散射的不对称以及电子平均自由程越大，相对电阻率越大；同时，晶粒尺寸越小，相对电阻率越大，巨磁阻效应越明显。

[参考文献] (References)

- [1] FUCHS K. The conductivity of thin metallic films according to the electron theory of metals[J]. Proc. Camb. Phil. Soc., 1938, 34: 100~108.
- [2] SONDHEIMER E H. The mean free path of electrons in metals[J]. Adv. Phys., 1952, 1: 1~42.
- [3] MAYADAS A F, SHATZKES M. Electrical-resistivity model for polycrystalline films: the case of arbitrary reflection at external surfaces[J]. Phys. Rev. B, 1970, 1(4): 1382~1389.
- [4] WU W, BRONGERSMA S H, HOVE M V, et al. Influence of surface and grain-boundary scattering on the resistivity of copper in reduced dimensions[J]. Appl. Phys. Lett., 2004, 83(15): 2838~2840.
- [5] KÄSTLE G, BOYEN H G, SCHRDER A, et al. Size effect of the resistivity of thin epitaxial gold films[J]. Phys. Rev. B, 2004, 70(16): 165414~165419.
- [6] MEYEROVICH A E, PONNMAREV I V. Surface roughness and size effects in quantized films[J]. Phys. Rev. B, 2002, 65(15): 155413~155427.
- [7] MEYEROVICH A E, PONNMAREV I V. Surface roughness and effective stick-slip motion[J]. Phys. Rev. B, 2003, 67(2): 026302~026313.
- [8] DISALVO F J. Thermoelectric cooling and power generation[J]. Science, 1999, 285(5428): 703~706.

- [9] ZHAI P C, ZHAOW Y, LI Y, et al. Nanostructures and enhanced thermoelectric properties in Ce-filled skutterudite bulk materials[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, 89(5): 052111.
- [10] MI J L, ZHU T J, ZHAO X B, et al. Nanostructuring and thermoelectric properties of bulk skutterudite compound CoSb_3 [J]. *J. Appl. Phys.*, 2007, 101(5): 054314.
- [11] BIETSCH A, MICHEL B. Size and grain-boundary effects of a gold nanowire measured by conducting atomic force microscopy[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2002, 80(18): 3346~3348.
- [12] LANDAUER R. Spatial variation of currents and fields due to localized scatters in metallic conduction[J]. *IBM J. Res. Dev.*, 1957, 1: 223~231.
- [13] VANCEA J, REISS G, HOFFMANN H. Mean-free-path concept in polycrystalline metals[J]. *Phys. Rev. B*, 1987, 35(12): 6435~6437.
- [14] GORDEEV S N, BEAUJOUR J M L, BOWDEN G J, et al. Giant magnetoresistance by exchange springs in $\text{DyFe}_2/\text{YFe}_2$ superlattices[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2001, 87(18): 186808.
- [15] LEVY P M, ZHANG S, FERT A. Electrical conductivity of magnetic multilayered structures[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1990, 65(13): 1643~1646.
- [16] LEBON A, ADLER P, BERNHARD C, et al. Magnetism, charge order, and giant magnetoresistance in $\text{SrFeO}_{3.6}$ Single crystals[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2004, 92(3): 037202.
- [17] WU J, LYNN J W, GLINKA C J, et al. Intergranular giant magnetoresistance in a spontaneously phase separated perovskite oxide[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 2005, 94(3): 037201.
- [18] YU S Y, LIU Z H, LIU Z D, et al. Large magnetoresistance in single-crystalline $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{50-x}\text{In}_x$ alloys ($x=14\sim 16$) upon martensitic transformation[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, 89(16): 162503.
- [19] KOYAMA K, OKADA H, WATANABE K, et al. Observation of large magnetoresistance of magnetic Heusler alloy $\text{Ni}_{50}\text{Mn}_{36}\text{Sn}_{14}$ in high magnetic fields[J]. *Appl. Phys. Lett.*, 2006, 89(18): 182510.
- [20] MIAO J H, YUAN S L, XIAO X, et al. Giant magnetoresistance and unusual hysteresis behavior in $\text{La}_{0.67}\text{Ca}_{0.33}\text{MnO}_{3-x}\text{CuO}$ ($x=20\%$) composite[J]. *J. Appl. Phys.*, 2007, 101(4): 043904.
- [21] SENGUPTA K, IYER K K, SAMPATHRUMARAN E V. Large magnetoresistance and magnetocaloric effect above 70 K in $\text{Gd}_2\text{Co}_2\text{Al}$, $\text{Gd}_2\text{Co}_2\text{Ga}$, and Gd_7Rh_3 [J]. *Phys. Rev. B*, 2005, 72(5): 054422.
- [22] HOOD R Q, FALICOV L M, PENN D R. Effects of interfacial roughness on the magnetoresistance of magnetic metallic multilayers[J]. *Phys. Rev. B*, 1994, 49(1): 368~377.
- [23] CAMLEY R E, BARNAS J. Theory of giant magnetoresistance effects in magnetic layered structures with antiferromagnetic coupling[J]. *Phys. Rev. Lett.*, 1989, 63(6): 664~667.
- [24] ZHANG S, LEVY P M, FERT A. Conductivity and magnetoresistance of magnetic multilayered structures[J]. *Phys. Rev. B*, 1992, 45(15): 8689~8702.
- [25] NÚÑEZ A S, DUINE R A, HANEY P, et al. Theory of spin torques and giant magnetoresistance in antiferromagnetic metals[J]. *Phys. Rev. B*, 2006, 73(21): 214426.
- [26] UDUARDI L, KHMELEVSKYI S, SZUNYOGH L, et al. Helimagnetism and competition of exchange interactions in bulk giant magnetoresistance alloys based on MnAu_2 [J]. *Phys. Rev. B*, 2006, 73(10): 104446.
- [27] O'Handley R C. *Modern magnetic materials principles and applications*[M]. New York: John Wiley & Sons, Inc, 2000.