

行政院國家科學委員會專題研究計畫 成果報告

滲流模型分析巨大磁阻材料的電導特性

計畫類別：個別型計畫

計畫編號：NSC91-2112-M-164-002-

執行期間：91年08月01日至92年07月31日

執行單位：修平技術學院電機工程系

計畫主持人：林振漢

報告類型：精簡報告

處理方式：本計畫可公開查詢

中 華 民 國 92 年 10 月 29 日

行政院國家科學委員會補助專題研究計畫成果報告

計畫名稱：滲流模型分析巨大磁阻材料的電導特性

計畫編號：NSC - 91 - 2112 - M - 164 - 002

執行期限：91年8月1日起至92年7月31日止

主持人：林振漢 修平技術學院 電機系

中文摘要

使用滲流模擬分析方法(Percolation simulation)探討巨大磁阻材料(CMR)的金屬-絕緣轉換(Metal-Insulator transition)過程。首先利用3d 立方晶體的易辛模型(Ising model)與蒙地卡羅模擬計算(Monte Carlo simulation)，決定具巨大磁阻材料的Mn晶格位置，熱平衡態的自旋方向分佈。模擬分析結果得出的磁化強度溫度倚變 $M(T)$ 與居禮溫度 T_c ，比較 $(La_{0.7-x}Nd_x)Pb_{0.3}MnO_3$ ($0 < x < 0.7$)氧化物材料試樣的 $M(T)$ 量測結果，在臨界溫度附近有極佳的吻合性。

考慮磁性化合物的電導主要貢獻來自Mn離子的 e_g 電子在Mn晶格位置間傳輸，並引入一局域化模型，其中包括雙互換交互作用(DE)與非磁性隨機位能(nonmagnetic random potential)。使用將Mn離子的熱平衡態自旋方向分佈的模擬結果，應用在鈣鈦礦結構中的Mn次晶格-SC中，建立Mn晶格位置之間的DE電導鍵，並執行滲流模擬分析計算。模擬分析結果與電阻-溫度倚變實驗結果 $\rho(T)$ 比較，證實在金屬絕緣轉換溫度 T_M ，存在從低溫鐵磁的DE金屬電導機制過渡到高溫順磁含有Coulomb Effects的變程躍遷電導機制。並確認滲流模型計算分析方法能定性的描述巨大磁阻材料系統的金屬-絕緣轉換現象。

關鍵詞：滲流模型，鐵磁性，順磁性，金

屬絕緣轉換，巨大磁阻，鈣鈦礦，雙互換交互作用，易辛模型，局域化，蒙地卡羅模擬，變程躍遷

英文摘要：

We explored the conduction properties of crossover phenomenon of metal-insulator transition and the mechanism of large negative magnetoresistance with percolation simulation method in the CMR materials. First, we shall use the Ising model and the Monte Carlo simulation to determine the spin orientation distribution on the Mn sites in the thermal equilibrium states. Consequently, the temperature dependence of magnetization $M(T)$ and the Curie temperature T_c shall consistent with the experiment.

In the conduction transport analysis, we propose the e_g electrons in the Mn oxide are the most important contribution of the conductivity. We introduce a localization model comprising double exchange(DE) and nonmagnetic random potential in this system. According to the distribution of orientation of the spin and DE theory, we established the DE conduction bond between Mn sites on SC

lattice, considerably a sub-lattice of perovskite structure, and perform the percolation simulation analysis to find the percolation threshold P_c , critical exponent. The analysis results compare with the experiments of temperature dependence of resistivity $\rho(T)$. The demonstration of the localization model with DE spin disorder and nonmagnetic disorder can reasonably explain the M-I transition phenomenon in CMR systems.

Keywords: Percolation, Ferromagnetic, Paramagnetic, Metal-insulator transition, The colossal magnetoresistance, Perovskite, Double exchange, Ising model, Monte Carlo simulation, Variable range hopping

一、前言

具有 Mn^{3+}/Mn^{4+} 混合價鍵的鈣鈦礦錳氧化物 $R_{1-x}A_xMnO_3$ ($R=La, Nd, Pr$ 與 $A=Ca, Sr, Ba, Pb$), 在 $0.2 < x < 0.5$ 的摻雜範圍內, 溫度冷卻過程中會出現順磁性 (PM) 絕緣體變為鐵磁性 (FM) 金屬導體的電導特性變化, 並在居禮溫度 T_c 附近有一高電阻峰值。外加磁場下, 轉換溫度與電阻峰值會移向高溫, 因此會產生負磁阻, 這有趣的電導特性, 稱為巨大磁阻 (CMR) [1-6]。一般使用 MR 比值來表示磁阻效應的強弱, 即

$$MR = \frac{\Delta\rho}{\rho} = \frac{\rho(T,0) - \rho(T,H)}{\rho(T,0)} \quad (1)$$

其中 $R(T,0)$ 、 (T,H) 分別在 T 溫度下, 為不加磁場與外加磁場 H 下的電阻率。CMR 材料具有極大的 MR 值 (如 $MR > 0.99$)。

CMR 效應在早期大多都使用 Zener 雙交換作用-Double Exchange (DE) 機制解釋 [11-13]。近年來很多的研究都顯示, 單純使用 DE 理論無法解釋在 T_c 溫度附近產生巨大磁阻變化的現象。巨大磁阻材料的金屬絕緣轉換 (MIT) 電導機制, 至今仍有許多待進一步探討的空間。

二、研究目的

對於 CMR 的金屬-絕緣轉換機制研究, 近年來大家持續的關注, 並將焦點集中在 DE 理論下的量子局域化效應 (quantum Localization effect)。因此值得我們朝此方向做進一步研究與分析, 以徹底了解此一機制的內涵。

由於此一系統的 MIT (金屬-絕緣轉換) 與順磁性-鐵磁性轉換極為類似, 這種臨界相變現象, 很適合利用滲流理論 (Percolation theory) 進行分析。因此我們引用 DE 理論與局域化效應, 經由滲流模擬計算做進一步了解, 對兩種電導機制隨溫度變化的過渡現象作深入的探討, 並提供巨大磁阻起源的理論解釋。

巨大磁阻材料的理論機制目前仍面臨許多問題尚待克服, 因此還有很大的研究探討空間。若要使其材料應用價值得到實現, 就必須通盤了解巨大磁阻特性與金屬絕緣轉換的機制。本計畫研究的成果可以提供此領域做進一步的研究分析, 以期能夠建立一套包含 DE 理論與易形模型的蒙地卡羅模擬計算, 與 Mn 氧化物的磁/電特性的滲流分析計算能力, 並建立分析模擬計算結果與實驗數據的技術與能量, 提供鈣鈦礦結構其它 Mn 氧化物材料的磁/電導特性機制分析

工具。

三、文獻探討

具有鈣鈦礦 (perovskite) 結構磁性化合物 $R_{1-x}A_xMnO_3$ 所以呈現 CMR 效應，早期使用 Zener 雙交換作用-Double Exchange (DE) 機制解釋 [7-9]。DE 理論解釋 $R_{1-x}A_xMnO_3$ 磁性化合物的巨磁阻現象。Mn 離子的 t_{2g}^{+3} 電子是局域態 (localize)，而 e_g^{+1} 電子可局域也可遊逸， e_g^{+1} 軌道與 O 的 2p 軌道能級相近，能夠進行雜化，這樣電子就可通過 O^{2-} 離子，由 $Mn^{3+} (d^{4+}; t_{2g}^{+3} e_g^{+1})$ 躍遷至 $Mn^{4+} (d^{3+}; t_{2g}^{+3})$ ，即： $[Mn^{3+} - O^{2-} - Mn^{3+}] \rightarrow [Mn^{4+} - O^{2-} - Mn^{3+}]$ 。如果兩相鄰 Mn 均為 Mn^{3+} ，則它們 3 個 t_{2g} 軌道和 1 個 e_g 軌道電子由於存在強烈的 Hund 耦合和 Coulomb 排斥作用，以致形成局域態、反鐵磁性的成對電子，而成為絕緣體。外加磁場的應用減少了 e_g 電子的自旋無序散射狀態，並通過磁化作用影響磁電阻效應 [10]。因此， Mn^{3+}/Mn^{4+} 的存在是影響亞鐵磁性和電子傳導從而產生磁電阻效應的關鍵，雙交換機制受結構參數的影響很大，Mn-O-Mn 鍵角以及 Mn^{3+}/Mn^{4+} 的轉化程度對磁電阻都有直接的影響。

在 1996 年 Millis 等人 [11] 使用微擾計算發現，單純使用 DE 理論無法解釋在 T_c 溫度附近產生的巨大磁阻變化的 CMR 現象。最近幾年內有許多新的理論解釋 $R_{1-x}A_xMnO_3$ 磁性化合物的金屬-絕緣轉換機制與 CMR 現象，摘要說明如下：

(1) 1995 年 Furukawa 與 Inoue 等人 [12,13]，嘗試使用 Kondo Lattice model 用在 DE 理論上，以及 Hubbard-Kondo Lattice model 並以

平均場理論處理，估算出 Mn 氧化物的電導傳輸特性。然而結果仍有不足之處。

- (2) Millis 與 Roder 等人 [14-15] 引入電子與晶格強烈的交互作用產生的 Jahn-Teller distortion，用以解釋 CMR 的傳輸特性。但對巨大磁阻實驗結果的估算，仍需作改進的修改。
- (3) 將局域化效應結合 DE 模型，應用非微擾處理 [16-17]，可進一步精確計算 Mn 氧化物的傳導特性。
- (4) 1997 年 Sheng 等人 [2] 提出 DE 自旋無序與非磁性無序的局域化模型，運用轉移矩陣方法 (transfer matrix method) 計算出電子局域化長度 (localization length)，計算得出的 CMR 特性與實驗結果吻合。
- (5) 2000 年 Smolyaninova 等人 [1] 研究 $La_{0.67}Ca_{0.33}MnO_3$ 與 $Nd_{0.7}Sr_{0.3}MnO_3$ 薄膜的金屬-絕緣轉換結果發現，以安德森局域化轉換 (Anderson localization transition) 理論，無法解釋具有 CMR 特性 Mn 氧化物的金屬-絕緣轉換現象。有關金屬-絕緣轉換的機制與 CMR 效應，仍有待做進一步的探討。

滲流理論起源於 1957 Broadbent 與 Hammersley 提出的理論，廣泛應用在無序系統的物理相變分析上 [18,19]。例如順磁性-鐵磁性轉換，金屬-絕緣轉換，金屬-超導體轉換，局域化-去局域化轉換... 等系統上。由於這套理論在建構晶格網路結構上，並應用統計物理與蒙特卡羅 (Monte Carlo) 模擬分析方法，可以深入了解在兩種物理機制之間轉換的臨界現象，包含相轉換的物理機制。

滲流理論又可分為鍵型 (Bond Type)

與座型(Site Type)兩種,在鍵型滲流模型的臨界現象可用一簡單的電阻網路做說明。網路節點之間的連接電阻可區分為高導電的金屬鍵,以及高電阻的絕緣鍵。當金屬鍵所佔的量百分比 P 很小時($p \rightarrow 0$),整個網路系統呈現一絕緣狀態:當金屬鍵所佔的量百分比 P 很大時($p \rightarrow 1$),則網路系統呈現一金屬導電狀態。在金屬導電與絕緣兩個極端狀態之間,存在一過渡的臨界現象,即 $p = p_c$ 時,系統從絕緣變為金屬導電特性。這裡的 P_c 被稱為滲流臨界點(percolation threshold), $0 < p_c < 1$ 。臨界點 P_c 與網路結構有關,例如鍵型的滲流模型在2維的正方晶格(square lattice)網路, $P_c=0.5$;3維的立方晶格(cubic lattice)網路, $P_c=0.249$ 。此外,透過滲流理論得出的臨界溫度(Critical temperature)- T_c ,滲流機率(Percolation Probability)- P ,關聯長度(Correlation Length)- ξ ,平均叢集大小(Mean Cluster Size) s_{av} ,都可以反應系統的電導與磁化特性。

四、研究方法

由於DE理論的傳輸機制與Mn離子之間的自旋排列方向有關。所以首先我們利用易辛模型(Ising model)與蒙地卡羅模擬計算(Monte Carlo simulation) [20-23],決定Mn晶格點上,在熱平衡態的自旋方向分佈。模擬分析結果得出的磁化強度溫度倚變 $M(T)$ 與居禮溫度 T_c ,必須符合Mn氧化物材料試樣的量測結果,做為進一步電導特性分析的依據。

1. 易辛模型與蒙地卡羅模擬方法

當易形模型的蒙地卡羅模擬計算原理與方法應用在鈣鈦礦結構磁性化合物

上,考慮磁化強度 M 的貢獻主要來自 Mn^{3+}/Mn^{4+} 離子晶格位置上的有效自旋, $S_{eff} = 3/2 + (1-s)/2$ 。其中 Mn^{3+} 離子的 $s=0$, $S_{eff} = 2$; Mn^{4+} 離子的 $s=1$, $S_{eff} = 3/2$ 。在鈣鈦礦結構中, Mn^{3+}/Mn^{4+} 離子所構成的次晶格構成簡單立方(SC),即每一個 Mn^{3+}/Mn^{4+} 離子有六個最相鄰的配位數。系統磁化強度 M 取決於 Mn^{3+}/Mn^{4+} 離子的電子自旋排列方向。整體系統可先由海森堡模型描述,即系統能量 E

$$E = -J \sum_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \mu H \sum_i \vec{S}_i \quad (2)$$

\vec{S}_i 是電子在晶格 i 的自旋, H 為外加磁場, J 代表DE雙互換交互作用強度。 $J > 0$ 代表兩電子自旋平行排列會使系統能量降低。在不考慮熱擾動影響時(溫度 $T \sim 0$),所有電子自旋回傾向同方向平行排列,達到最低能量狀態,電子自旋所貢獻的磁距會使系統產生最大磁化強度 $M \gg 0$ 。若系統唯一獨立封閉系統,在某一特定溫度下,由於熱擾動會激發電子自旋到反排列的高能量狀態,使得磁化強度 M 降低。歸納上述討論,影響電子自旋排列的因素有三,

- (1) 兩個最鄰近 Mn^{3+}/Mn^{4+} 離子透過中間氧離子所產生的 DE,可讓電子自旋因平行排列的趨於低能量的基態。
- (2) 在非零溫度下($T \neq 0$),熱擾動造成電子自旋提升到反平行方向的激發態。
- (3) 外加磁場下,電子自旋趨向磁場方向平行排列。

透過以上的模型分析,在實際計算

某一外加磁場 H ，特定溫度 T 的熱平衡狀態下的電子自旋排列分布，我們將海森堡模型簡化為易辛模型 (Ising Model)，即 $\bar{S}_i, \bar{S}_j = \pm 1$ 。在鈣鈦礦晶體結構的三維簡化晶格-SC中，利用蒙地卡羅方法，依照 x 含量，在點陣晶格中隨機產生 Mn^{3+}/Mn^{4+} 離子分布，考慮週期邊界條件，透過 Metropolis method 模擬分析，得出晶格點上所有 Mn^{3+}/Mn^{4+} 離子的電子自旋方向分布，進而求出系統的磁化強度 M 。當改變溫度 T 與外加磁場 H ，可求出 $M(T)$ ，以及居禮溫度 T_c 。並將此模型利用 Metropolis Algorithm 的做蒙地卡羅模擬計算。

在模擬 $M(T)$ 結果時，需要代入的互換交互能 J_{ex} 的大小可以由材料量測數據：居禮溫度 T_c 推估，

$$J_{ex} = \frac{3kT_c}{2z(s+1)s} \quad (3)$$

易辛模擬計算得出晶格點上 Mn^{3+}/Mn^{4+} 離子的自旋方向分布，可進行下一階段的滲流模型分析 [24]。透過局域化長度 (Localization Length)，臨界指數 (critical exponent) 等參數的計算，可做進一步的金屬-絕緣轉換特性分析

考慮磁性化合物的電導主要貢獻來自 Mn 離子的 e_g 電子在 Mn 晶格點間傳輸，並引入一局域化模型，其中包括雙互換交互作用 (DE) 與非磁性隨機位能 (nonmagnetic random potential)。 e_g 電子的 Hamiltonian 如下 [1-2]，

$$H_{eq} = -\sum_{ij} t_{ij} d_i^+ d_j + \sum_{ij} \epsilon_{ij} d_i^+ d_j \quad (4)$$

第一項這裡是等效 DE 的

Hamiltonian， \tilde{t}_{ij} 是含 Hund's coupling 的躍遷積分 (hopping integral)。第二項是非磁性的隨機位能，起源於電子-雜質散射。若考慮 A^{2+} 取代 R^{3+} 離子半徑的不同，造成隨機位能的擾動。依據估算 [24]，此一擾動範圍大約與 e_{2g} 的能帶寬度相當，因此對於躍遷傳輸 (hopping transport) 具有重要的影響力。

2. 滲流模型的計算

由於考慮磁性化合物的電導主要貢獻來自 e_g 電子在 Mn 晶格位置間傳輸，因此滲流分析用結構，在只考慮 Mn 晶格點情況下，將鈣鈦礦結構簡化為簡單立方 (SC) 的 Mn 次晶格。並在 Mn 晶格點之間建立電導鍵。由於我們在系統中引入雙互換交互作用與 Mn 離子本身內部的非磁性隨機位能 (random potential)，因此可衍生兩種電子傳輸機制：

- (1) DE 電導鍵: 兩個最鄰近 Mn^{3+}/Mn^{4+} 離子同方向平行排列，DE 交互作用最強， e_g 電子具有最大的傳輸機率，因此可視為高導電性/低電阻的金屬鍵，電阻率為 ρ_0 。這種型式的鍵結在三維簡化晶格的出現，取決於 Mn 離子晶格點上 e_g 電子自旋的排列分布。這部分我們可以直接引用 Metropolis method 模擬分析結果。
- (2) 躍遷鍵: e_g 電子在 Mn 晶格點之間，亦可利用聲子熱激發電子躍遷 (Phonon-assisted electron hopping) 方式進行電導傳輸。電阻率為，

$$\rho(T) = \rho_2 \exp[2\alpha S + \Delta E/kT] \quad (5)$$

其中 α 是電子波函數衰減因子 (wave function decay factor), S 為兩個錳離子晶格位置的距離。 ΔE 是兩個錳離子晶格位置上, e_g 電子被局域化的隨機位能的差值。 e_g 電子由一個局域化態, 躍遷到另一個局域化態由熱激發提供躍遷所需能量, 因此躍遷機率與波茲曼因子 kT 有關。

在執行滲流模擬分析計算時, 低溫時 ($T < T_M$), 考慮形成導通路徑以 DE 電導鍵為主; 高溫範圍 ($T > T_M$) 則以躍遷鍵主導, 求出滲流臨界點 (percolation threshold), 例如轉換溫度 T_M , 對照溫度倚變磁化強度 $M(T)$, 並觀察 T_c 與 T_M 的關係。

五、結果與討論

$M(T)$ 與 $\rho(T)$ 的材料分析數據採用 LaNdPbMn 氧化物多晶塊材試樣, 以傳統陶瓷燒結反應方式製成。共計有 5 組的 $\text{La}_{0.7-x}\text{Nd}_x\text{Pb}_{0.3}\text{MnO}_3$ 試樣 ($x=0, 0.1, 0.3, 0.5, 0.7$)。使用 X-ray 繞射儀在室溫下分析試樣, 確認的晶體結構; 磁特性數據的量測使用 SQUID 磁分析儀; 電阻與磁阻隨溫度的變化量測使用 dc four-wire 系統。

$M(T)$ 的磁化強度與溫度倚變的量測結果如圖 1。五組試樣在 5T 外加磁場下, 結果都顯示出順磁 (PM) 到鐵磁 (FM) 的轉換的特性, 轉換溫度 T_c 的定義是, $dM(T)/dT$ 達到最大值時。五組試樣的 T_c 分別為 317K ($x=0$), 284K ($x=0.1$), 223K ($x=0.3$), 185K ($x=0.5$), 141K ($x=0.7$)。隨著 Nd 的含量增加, T_c 溫度下降。飽和磁距分別為 72emu/g ($x=0$), 75emu/g ($x=0.1$), 86emu/g

($x=0.3$), 90emu/g ($x=0.5$), 92emu/g ($x=0.7$)。如 Table I 所示, 由此觀察出, 飽和磁距隨 Nd 的含量增加而變大。

由 T_c 推估互換交互能 J_{ex} 分別為 70.2k (317K; $x=0$), 62.9 k (284K; $x=0.1$), 49.4 k (223K; $x=0.3$), 41 k (185K; $x=0.5$), 31.2 k (141K; $x=0.7$)。其中 k 為波茲曼常數。

易辛模型的蒙地卡羅計算, 使用 $30 \times 30 \times 30$ 的 3d 立方晶格點, $\text{Mn}^{3+}/\text{Mn}^{4+}$ 離子依照 x 含量比例, 以無序方式填入。Metropolis method 的計算, 考慮週期性邊界條件 (cyclic boundary condition)。模擬溫度範圍在 $T=10\text{K} \sim 500\text{K}$, 每 10K 溫度計算一個組態分布, 每個組態的 mcs (Monte Carlo Step) 達 10000 次以上, 並確認數據的收斂結果。

蒙地卡羅模擬計算結果與 $M(T)$ 的實驗量測結果比較, 如圖 2、圖 3、圖 4 所示。由比較結果可看出, 在低溫範圍的模擬結果有高估現象, 而且隨著 Nd 的添加量 x 的增加, 有明顯的增加, 但在 T_c 附近就有較佳的吻合性。依推斷造成此一結果, 表示系統中, Nd 添加造成的晶格扭曲會影響低溫範圍自旋有序排列, 因此影響磁化強度。

由於 $\rho(T)$ 的實驗量測範圍僅在 15K~300K, 為了觀察金屬-絕緣轉換溫度 T_M 附近的 $\rho(T)$ 變化理想數據是 $x=0.5$ 的材料試樣。量測數據與滲流模型模擬分析結果如圖 5 所示。實驗量測結果顯示, 在 T_M 溫度時, 電阻率顯示一峰值。在 $T < T_M$ 時, 隨溫度降低, 電阻率有明顯下降趨勢。在 $T < T_M$ 時, 隨溫度升高, 電阻率也有明顯下降趨勢。

在 $T < T_M$ 的電導分析，由滲流模型的 $\xi(T)$ 關聯長度(correlation length)與溫度的倚變關係

$$\xi(T) \sim (T_M - T)^{-\nu} \quad (6)$$

其中 臨界指數(critical exponents)是滲流理論的尺寸特性(Scaling behavior)的重要參數，在3維空間 $\nu = 0.63$ 。電阻率與 $\xi(T)$ 關聯長度的關係引用 Laudauer formula[25]，

$$\rho(T) = (2h/e^2) \xi(T) \quad (7)$$

由圖可看模擬結果在低溫範圍偏離 T_M 有不錯的吻合性。

在 $T > T_M$ 的模擬分析，考慮利用 $\xi_l(T)$ 局域化長度(localization length)分析，考慮包含Coulomb effect 的變程躍遷(variable range hopping)[19]的局域化電導機制， $\rho(T)$ 溫度的倚變關係為

$$\rho(T) = \rho_1 \exp\left[(T_1/T)^{1/2}\right] \quad (8)$$

其中 $T_1 \propto 1/\xi$ 。由圖可看模擬結果在高溫偏離 T_M 範圍有不錯的吻合性。

圖5顯示的結果中，在順磁性-鐵磁性轉換過程，轉換溫度 T_M 兩邊有兩種不同的電導機制。在 $T < T_M$ 的鐵磁金屬電導區，電導主要透過DE電導鍵的滲流通路。在 $T > T_M$ 的順磁絕緣區，電導滲流通路是經由熱聲子激發的變程躍遷(VRH)。這兩端的模擬分析都能獲得良好結果，證實CMR材料系統確實存在這兩種電導機制。但在接近轉換溫度 $T \sim T_M$ 區域範圍，兩種電導機制的競爭與過渡，則有待進一步的分析與釐清。

五、研究成果與結論

本計畫利用易形模型與蒙地卡羅模擬計算方法，代入實際材料參數，求出磁化強度的溫度倚變關係 $M(T)$ ， $\rho(T)$ 、居禮溫度 T_c ，與金屬絕緣轉換溫度 T_M 。由實際量測數據做比對，證實在金屬絕緣轉換溫度 T_M ，存在從低溫鐵磁的DE金屬電導機制過渡到高溫順磁含有Coulomb Effects的變程躍遷電導機制。並確認滲流模型計算分析方法能定性的描述巨大磁阻材料系統的金屬-絕緣轉換現象。

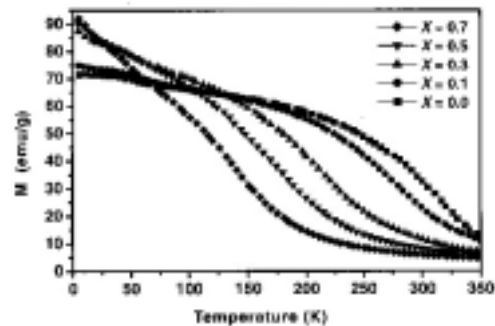
本計畫在鈣鈦礦結構的簡化晶格點上建立包含DE理論與易形模型的蒙地卡羅模擬計算，與Mn氧化物的磁/電特性的滲流分析計算能力，並執行綜合分析模擬計算結果與實驗數據。模擬分析技術的建立，將可提供鈣鈦礦結構其它Mn氧化物材料的磁/電導特性機制分析工具。

六、參考文獻

1. V. N. Smolyaninova et al., Phys. Rev. B 62,3010(2000)
2. L. Sheng et al., Phys. Rev. Lett. 79, 1710(1997)
3. S.L.Young, H.Z.Chen, C.H.Lin, Lance Horng, J.B.Shi, Y.C.Chen, J. Magn. and Magn. Mater. 239, 70(2002)
4. H. Z. Chen, S.L. Young, J.B. Shi, and Y.C. Chen, Phys. B 289,145 (2000)
5. S.L. Young, Y.C. Chen, Lance Horng, T.C. Wu, H. Z. Chen, J. Magn. Mater. 289, 145(2000)
6. K. Ghosh, S.B. Ogale, R. Ramesh, R.L. Greene, T. Vankatesan, K.M. Gapshup, R.S. Bathe, S.I. Patil, Phys. Rev. B 59, 533(1999)

7. C. Zener, Phys. Rev. 82, 403(1951)
8. P.W. Anderson and H. Hasegawa, Phys. Rev. 100. 675(1955)
9. P.-G. de Gennes, Phys. Rev. 118, 141(1960)
10. Gorbenko O Y, Kaul A R, Babushkina N A et al. J. Mater. Chem., 1997, 7(5) : 747~752
11. A. J. Millis et al., Phys. Rev. Lett. 74, 5144(1995)
12. N. Furukawa, J. Phys. Soci. Jpn. 63, 3214(1994)
13. J. Inoue and S.Maekawa, Phys. Rev. Lett. 74, 3407(1995)
14. A. J. Millis et al., Phys. Rev. Lett. 77, 175(1996)
15. H. Roder, J. Zang, and A.R. Bishop, Phys. Rev. Lett. 76, 1356(1996)
16. E. Muller-Hartmann and E. Doggato, Phys. Rev. B 54, R6819(1996)
17. C.M. Varma, Phys. Rev. B 54, 7328(1996)
18. Richard Zallen, "The physics of amorphous solids", A Wiley-Interscience Publication, 1983
19. B.I. Shklovskii A.L. Efros, "Electronic Properties of Doped Semiconductor", Springer-Verlog, 1984
20. J.M.D. Coey *et al.*, Phys. Rev. Lett. 75, 3910(1995)
21. Harvey Gounld, Jan Tobochnik, "An Introduction to Computer Simulation Methods", Addison Wesley, New York, 1996
22. S. Jain, "Monte Carlo Simulations of Disordered systems", World Scientific, New Jersey, 1992
23. K. Binder D.W. Heermann, "Monte Carlo Simulations in Statistical Physics", Springer-Verlog Berlin Heidelberg New York, 1988
24. C.-H. Lin, G.Y. Wu, Thin Solid Films 397 (2001) 280–287
25. A. Mackinnon and B. Kramer, Phys. Rev. Lett. 47, 1546(1981);Z.Phys. B 53,1 (1983)

圖1:五組M(T)磁化強度的溫度倚變數據



TableI:五組試樣的轉換溫度，飽和磁化強度，與互換能

x	T_c (K)	M_s (emu/g)	J_{ex} (k)	T_M (K)
0	317	72	70.2	331
0.1	284	75	62.9	276
0.3	223	86	49.4	232
0.5	185	90	41.0	132
0.7	141	92	32.1	56

圖2: $M(T)$ 實驗數據與模擬結果比較 ($x=0$)

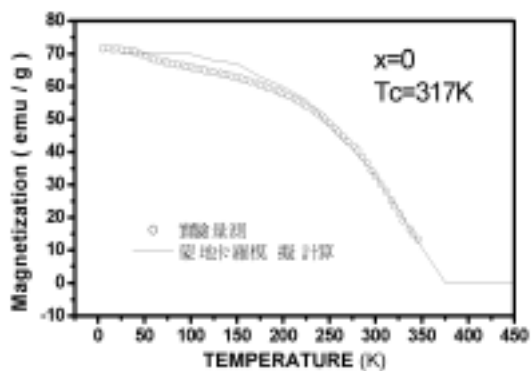


圖5: $\rho(T)$ 實驗量測數據與滲流模型模擬分析結果 ($x=0.5$ 的材料試樣)

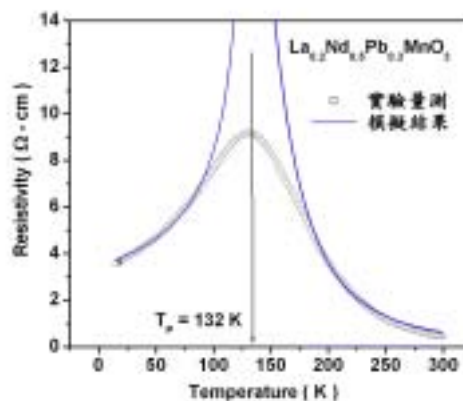


圖3: $M(T)$ 實驗數據與模擬結果比較 ($x=0.3$)

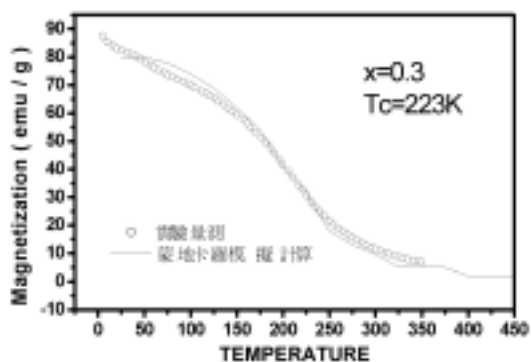


圖4: $M(T)$ 實驗數據與模擬結果比較 ($x=0.5$)

