

Sherrington-Kirkpatrick 自旋玻璃模型 的非平衡态性质^{*}

张开成[†]

(中国科学院物理研究所, 北京 100190)

(2008 年 12 月 29 日收到, 2009 年 1 月 19 日收到修改稿)

通过动力学蒙特卡罗模拟对 Sherrington-Kirkpatrick (SK) 自旋玻璃模型进行研究. 结果表明, 弱场下自旋玻璃的磁化率在转变点非常陡峭, 而比热容则呈现比较宽的转变. 同时, 也成功地模拟了自旋玻璃体的年龄效应和记忆效应. 通过模拟发现, 不同的弛豫时间对系统的能量影响很大, 这直接导致了年龄效应和记忆效应. 各向同性的 SK 模型不能给出实验中的交换偏移现象.

关键词: 自旋玻璃, 记忆效应, 年龄效应, 磁化率

PACC: 7115Q, 7510N, 7550L, 7560E

1. 引言

自从自旋玻璃态^[1]被发现以来, 这种新的物质态就成为磁学研究的一个焦点. 无论从磁化性质方面^[2-4]还是从输运性质方面, 它都具有十分丰富的物理内容. 自旋玻璃态行为在很多物质中被发现, 例如磁性金属合金^[5,6]、高温超导体^[7]、磁性纳米粒子系统^[8]以及掺杂的磁性绝缘体^[9]和稀磁半导体^[10]. 实验上, 经典的自旋玻璃体是由磁性金属 Fe, Co, Ni 与贵金属熔合而成的稀磁合金. 合金中的磁性原子浓度小于 0.1% 的稀磁合金, 由于其中传导电子被磁性原子所散射而形成低温下的近藤散射. 浓度逐渐增加时, 由于 RKKY 相互作用, 磁性原子间形成空间振荡衰减的铁磁和反铁磁相互作用. 由于磁性原子在合金中无规则分布, 其相互作用也大小不均, 所以被称为自旋玻璃. 自旋玻璃具有一系列奇怪的性质, 例如弱磁场下其磁化率在相变点处呈现尖锐的锯齿状^[6], 通常这一行为表明系统发生了磁相变, 而比热容转变则相对较宽, 与通常的二级相变截然不同. 将其在磁场中从高温顺磁态冷却至转变温度之下时, 其磁滞回线则沿着磁场的方向发生偏移, 称为交换偏移^[5]. 此外, 在低于转变温度

时, 自旋玻璃的磁弛豫十分缓慢, 磁化强度与玻璃态的历史相关, 其中最著名的现象就是年龄效应^[11-13]和记忆效应^[14-16].

迄今为止, 已经有很多实验^[17,18]和理论^[19-21]用来解释自旋玻璃态行为. 由于玻璃态中磁性原子间的相互作用无规则, 理论上用来描述玻璃态的模型有 Sherrington-Kirkpatrick (SK) 模型^[22], 其耦合常数通常为高斯分布的随机耦合. 数学上处理该模型十分困难, 唯象的理论^[16]只能定性地给出一些结论, 而对于自旋玻璃模型所能提供的物理性质现在了解甚少. 尽管此前有些模拟^[23-25]研究了一些玻璃态的性质, 但是非平衡态的性质却很少被研究. 本文利用动力学蒙特卡罗方法来模拟 SK 自旋玻璃模型, 并与已有的实验结果做比较. 研究发现, 磁化率对外磁场的变化十分敏感, 在弱场下呈现比较明显的转变, 而比热容的转变则比较平缓. 磁弛豫呈现对数衰减, 并且依赖于初始磁化强度和系统温度. 此外, 我们还模拟了玻璃态的年龄效应和记忆效应, 发现 SK 模型不能用来研究自旋玻璃体的交换偏移现象.

2. 模型和方法

SK 自旋玻璃态的哈密顿量可以写成

^{*} 国家自然科学基金(批准号: 10874232, 10774180)资助的课题.

[†] E-mail: kezhang@aphy.iphy.ac.cn

$$H = - \sum_{i,j} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - g \mu_0 \mu_B B \sum_i \sigma_i, \quad (1)$$

其中第一项为第 i 个自旋和第 j 个自旋间的耦合, 求和号取遍所有的自旋格点, J_{ij} 是高斯分布的耦合常数, 其分布概率为 $P(J_{ij}) = e^{-J_{ij}^2/2J^2}$, $J = 0.224$; 第二项是磁性原子在外磁场中的塞曼能. 自旋翻转按照 Metropolis 抽样方法. 模拟中比定容热容和磁化率的计算公式为

$$C_V = (E - E^2) / (k_B T^2), \quad (2)$$

$$\chi = (\sigma - \sigma^2) / (k_B T). \quad (3)$$

模拟中使用 20×20 的二维正方晶格. 为了减少计算误差, 所有的数据全部平均 1000 次. 由于我们只对 SK 模型的非平衡态性质感兴趣, 上述晶格没有进一步取大. 在动力学蒙特卡罗模拟中时间单位 t_0 为 2000 蒙特卡罗步 (MCS). 同时磁场采用约化单位 $\mu B/J$, 其中 $H = h H_0 k_B$.

3. 模拟结果

图 1(a) 给出了零场冷和场冷磁化曲线. 十分明显, 零场冷曲线的转变温度 $T_g = 33$ K, 而场冷曲线在低温处变得平缓. 同时当外磁场增大时, 磁化强度显著增加, 零场冷曲线在转变处变宽. 图 1(b) 和 (c) 分别给出不同磁场下的比热容曲线和磁化率曲线. 由此可以看出, 比热容对磁场的变化很不敏感, 而磁化率对磁场的变化十分敏感, 在弱场下磁化率曲线在转变处变得陡峭, 这与文献 [23] 的模拟是一致的. 其对应转变温度为 42 K, 这比零场冷转变温度 33 K 要高.

实验上将自旋玻璃从高温顺磁态场冷至 T_g 之下扫场, 发现系统磁滞回线发生偏离 [5]. 图 2 给出了系统场冷后的磁滞回线的模拟结果. 在模拟中, 外加磁场大小 $\mu B/J = 26.8$, 将系统从 300 K 分别冷却到 10 和 2 K, 然后扫描磁场. 模拟结果表明, 场冷后自旋玻璃的磁滞回线并没有明显的偏移.

零场冷记忆效应 [15] 在实验上采取如下磁性测量方法观测: 首先将系统零场冷却到低温, 然后在温度点 T_s 停止并且等待一段时间 t_w . 然后系统被进一步冷却到更低温度. 从低温处施加一个弱的探测磁场, 然后均匀升温. 通过这个方法在实验上观测到, 等待的零场冷磁化曲线和没有等待的参考曲线在高温处和低温处都重合, 只是在等待的温度点 T_s 附近偏离.

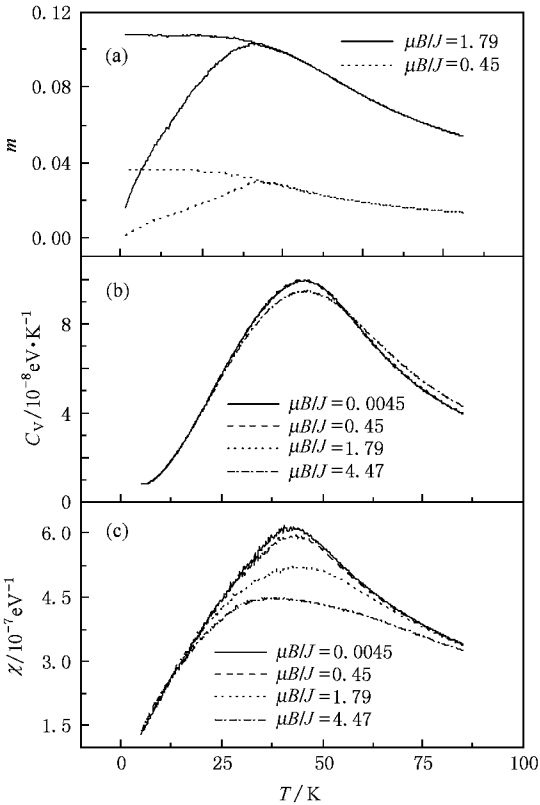


图 1 不同磁场下的场冷和零场冷磁化曲线、比热容曲线和磁化率曲线 (a) 磁化曲线 (b) 比热容曲线 (c) 磁化率曲线

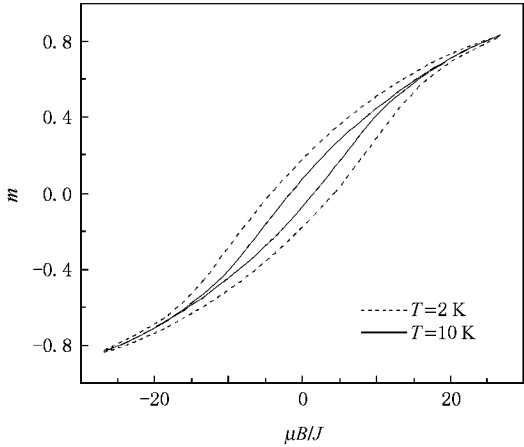


图 2 场冷后自旋玻璃的磁滞回线. 系统初始温度为 300 K, 外磁场大小 $\mu B/J = 26.8$

图 3 给出了零场冷记忆曲线. 在我们的模拟中, 系统在 20 K 时分别等待 $1t_0$, $10t_0$ 和 $50t_0$. 把等待时间为 $1t_0$ 的曲线作为参考曲线. 从图 3 可以看出等待时间为 $10t_0$ 的曲线在 10 K 时开始偏离参考曲线, 一直到 25 K 才和参考曲线重合. 超过这个区

域,等待的磁化曲线和参考曲线重合.对于等待时间为 $50t_0$ 的曲线,其温度分离区域更宽,这和实验结果^[15]相符合.

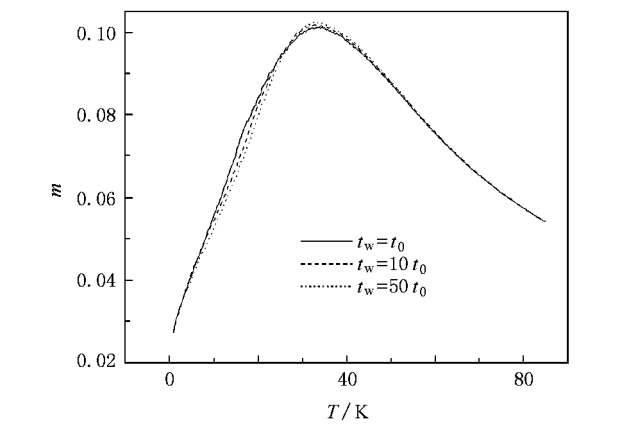


图3 零场冷记忆曲线 零场冷降温过程中系统在 20 K 分别等待了 $1t_0$, $10t_0$ 和 $50t_0$. 升温时外磁场大小 $\mu B/J = 1.79$.

对于自旋玻璃体的年龄效应,通常采用如下磁性测量方法:首先将系统在零场下从高温处迅速冷却到低温,然后在目标温度等待一段时间 t_w ,然后再施加一个弱的探测磁场,并且开始记录磁化强度随时间的变化.在我们的模拟中,系统被迅速冷却到 5 K,在施加外磁场之前分别等待 $100t_0$, $1000t_0$ 和 $10000t_0$. 模拟结果在图 4 (a)中给出.三条曲线初始时几乎互相平行上升,当测量时间达到等待时间量级之后,磁化强度曲线开始逐渐地凹下去.定义磁弛豫速率为

$$S = \frac{\partial m}{\partial \log t}.$$

对图 4 (a)曲线拟合后求导可以得到磁弛豫速率.结果在图 4 (b)中给出.从图 4 (b)可以看到,磁弛豫速率在分别在 $100t_0$, $1000t_0$ 和 $10000t_0$ 处出现峰值.表明系统的弛豫速率与其等待的时间密切相关.同时我们也模拟了弛豫时间对系统能量的影响,图 5 (a)给出了系统在 20 K 时等待 $1t_0$ 和 $100t_0$ 的能量差值.从图 5 (a)可以看出,曲线在 20 K 附近迅速下降.除此之外,曲线变化较小.图 5 (a)的内插图是二者磁化率之间的差值.内插图显示,磁化率也在等待温度处凹陷,这和实验结果^[26]相符合.图 5 (b)给出不同等待时间的系统能量和没有等待的系统能量差值与测量时间的关系曲线.从图 5 (b)可以看到,等待的时间越长系统的能量降低越多,但是当测量时间达到等待时间尺度时,系统间的能量差值趋于零,

并且三条曲线在测量时间远大于等待时间处重合.

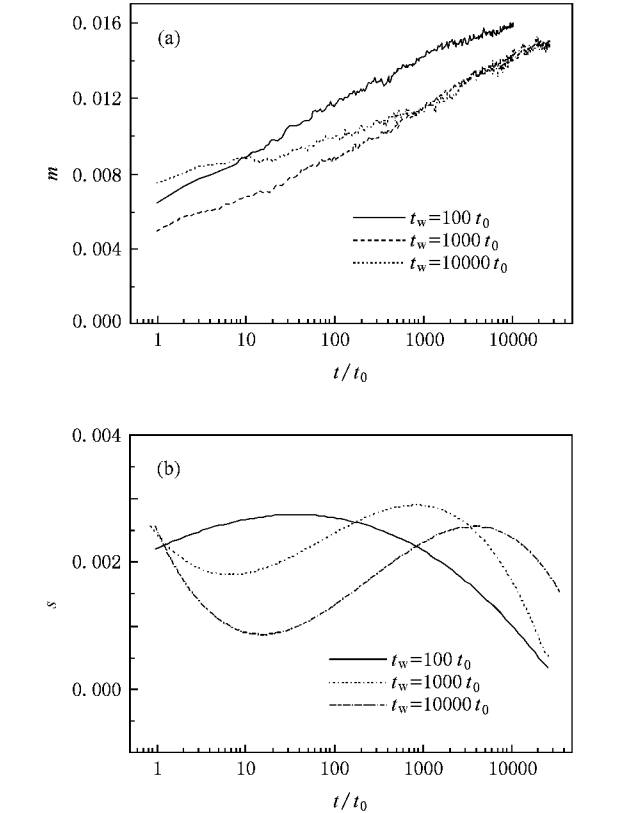


图4 磁化强度曲线和磁弛豫速率曲线 (a)磁化强度随时间的变化曲线.系统首先在零磁场中冷却到 5 K,然后分别等待了 $100t_0$, $1000t_0$ 和 $10000t_0$,然后施加大小 $\mu B/J = 0.45$ 的磁场;(b)自旋玻璃系统在 5 K 时的磁弛豫速率

在模拟中将自旋玻璃系统场冷至转变温度 T_g 之下,然后去掉磁场,记录系统的剩余磁化强度与时间的关系.通过改变初始时刻的磁化强度 $m(0)$ 或者改变系统温度 T 来研究其对磁弛豫的影响.图 6 (a)给出了不同温度下具有相同 $m(0)$ 的磁化强度的衰减.从图 6 (a)可以看到,温度越高系统的磁化强度衰减越迅速,相应的剩余磁化强度也越小.低温时相应的磁弛豫曲线的斜率较大,而高温时磁弛豫曲线斜率只在初始时刻较大,然后迅速衰减,最后曲线变得扁平.图 6 (b)给出了具有不同初始 $m(0)$ 的系统在 5 K 的磁弛豫曲线.当 $m(0)$ 逐渐增大时, $m(t)$ 曲线的斜率也逐渐增大,磁弛豫速率变大.当 $m(0) < 0.4$ 时,剩余磁化强度 $m(t)$ 随着初始 $m(0)$ 的增大而增大,但是当 $m(0) > 0.4$ 时,剩余磁化强度 $m(t)$ 反而随着 $m(0)$ 的增大而减小.图 6 还表明,自旋玻璃系统在较长的时间内都是呈对数形式衰减.

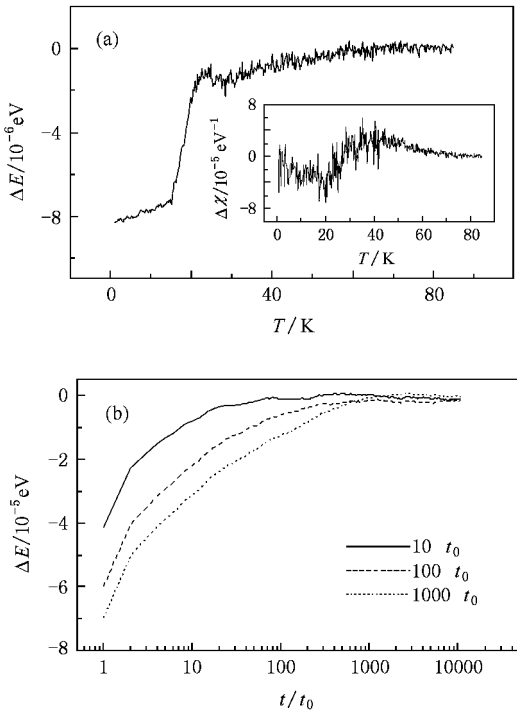


图5 系统的能量差 ΔE 与温度 T 和等待时间 t 的关系曲线 (a) 零场冷时不同等待时间的自旋玻璃系统的能量差值与温度的关系曲线, 内插图为相应的磁化系数差值与温度的关系曲线; (b) 在 5 K 时分别等待 $10t_0$, $100t_0$ 和 $1000t_0$ 的系统和没有等待的系统能量差与测量时间的关系曲线

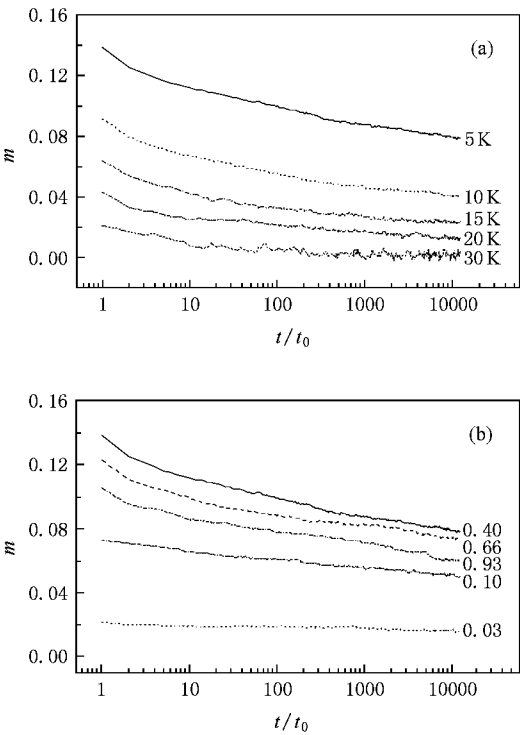


图6 磁化强度 $m(t)$ 随时间 t 的衰减 (a) 不同温度下的磁化强度随时间的衰减, $m(0) = 0.4$, (b) 5 K 下具有不同 $m(0)$ 的系统磁化强度随时间的衰减

4. 讨 论

当自旋玻璃系统从高温冷却到低温时, 降温速率越大系统的磁耦合能量越高. 如果系统在某一温度处弛豫, 则系统将缓慢地向平衡态弛豫并降低其耦合能量. 由于系统的每一个磁性原子都有其特征弛豫时间 τ , 并且 τ 分布很宽. 当系统在某一温度处等待时间为 t_w 时, 系统中只有 $\tau \approx t_w$ 的自旋弛豫从而降低其耦合能量. 而对于 $\tau > t_w$ 或 $\tau < t_w$, 自旋处在冻结状态和顺磁态, 故其耦合能量不受弛豫的影响. 当等待结束之后, 系统进一步迅速冷却到低温, 那些特征时间小的自旋将依次冻结. 因此在整个降温冷却过程中, 系统只有在等待的温度处才充分地弛豫, 除此之外的温度区域都没有很好弛豫, 这可以从图 5(a) 得到充分肯定. 由此表明, 经过弛豫的自旋其势垒变高, 而那些没有弛豫的自旋其势垒没有变化. 因此, 升温测量时那些没有弛豫的温度区域磁化强度曲线与参考曲线重合, 而在发生弛豫

的温度范围内, 由于自旋势垒变高, 自旋翻转受到更大的阻碍, 从而导致了磁化强度和磁化率变低.

对于系统所表现的年龄效应可以作如下理解: 当系统等待时间为 t_w 时, 那些 $\tau \approx t_w$ 的自旋优先降低耦合能量, 从而造成相应的磁化系数“硬化”. 所以, 等待的时间越长, 磁化率越小. 当系统的测量时间从零增加到 t_w 尺度时, 磁化率经历了由正常到“硬化”的转变过程, 故磁化强度相应地在 $t = t_w$ 处出现了一个凹陷. 此凹陷导致其微分曲线上相应时间处出现峰值. 当测量时间远大于等待时间时, 不同等待系统的能量差值趋于零, 此时等待的系统和参考系统在能量上没有差别, 故其相应的年龄效应在 $t \gg t_w$ 时消失, 不同等待时间的磁化曲线在此处互相重合. 这个性质已经被实验^[3]所证实.

对于具有分布的特征弛豫时间的系统^[27], 磁化强度和时间的函数关系:

$$m(t) = m(t_1) \left[1 - \frac{k_B T}{U} \ln(t/t_1) \right], \quad (4)$$

其中 $m(t_1)$ 是系统在 t_1 时的磁化强度, U 是系统平均势垒高度. 对于在低温下弛豫的自旋玻璃, 其

自旋翻转由于被玻璃态钉扎而具有翻转势垒. 由 (4) 式可以得到自旋玻璃系统的磁化强度随时间呈对数形式衰减. 这与模拟结果一致. 此外, 对于处在高温的系统, 其剩余磁化强度要远远小于低温时的数值. 如果假定自旋的翻转势垒在比较小的磁化强度内是常数, 则可以得到随着初始 $m(0)$ 的增大, 剩余磁化强度也随之增大. 但是当 $m(0)$ 很大时, 平均势垒 U 由于自旋间迅速增加的排斥作用而显著降低, 故其剩余磁化强度反而下降. 这很好地解释了图 6 中剩余磁化强度 m 随着初始 $m(0)$ 的增大而呈现非单调行为.

此外, 由于 SK 自旋玻璃模型是一个空间均匀的模型, 这点显著区别于 RKKY 相互作用的玻璃模型. 这导致了在扫描外磁场时系统呈现磁对称, 从而不能描述实验上所观察到的交换偏移现象.

5. 结 论

采用动力学蒙特卡罗方法, 研究了 SK 自旋玻璃模型的非平衡态性质. 结果表明, 磁化系数对外磁场的变化十分敏感, 在弱场下转变非常明显, 而比热容的转变对磁场的变化不敏感. 此外, 通过模拟不同的磁性测量过程, 得到了自旋玻璃体的零场冷记忆效应和年龄效应. 模拟表明, 玻璃态的弛豫时间对系统的能量影响至关重要, 弛豫导致了系统的磁化率降低并因此导致了年龄效应. 我们还发现 SK 模型不能用来刻画自旋玻璃系统的交换偏移现象. 由于自旋玻璃态的研究一直都是磁学研究的焦点之一, 本文的结果将有助于更好地理解这种复杂系统的磁性现象.

-
- [1] Owen J, Browne M, Knight W D, Kittel C 1956 *Phys. Rev.* **102** 1501
 - [2] Wu W, Israel C, Hur N, Park S, Cheong S W, Lozanne A D 2006 *Nat. Mater.* **5** 881
 - [3] Kenning G G, Rodriguez G F, Orbach R 2006 *Phys. Rev. Lett.* **97** 057201
 - [4] Nam D N H, Khien N V, Dai D V, Hong L V, Phuc N X 2008 *Phys. Rev. B* **77** 214406
 - [5] Kouvel J S 1960 *J. Appl. Phys.* **31** S142
 - [6] Canella V, Mydosh J A, Budnick J I 1971 *J. Appl. Phys.* **42** 1689
 - [7] Gardchareon A, Mathieu R, Jonsson P E, Nordblad P 2003 *Phys. Rev. B* **67** 052505
 - [8] Parker D, Dupuis V, Ladieu F, Bouchaud J P, Dubois E, Perzynski R, Vincent E 2008 *Phys. Rev. B* **77** 104428
 - [9] Torres C A, Silevitch D M, Aepli G, Rosenbaum T F 2008 *Phys. Rev. Lett.* **101** 057201
 - [10] Yang Y Q 1984 *Acta Phys. Sin.* **33** 1454 (in Chinese) [杨育清 1984 物理学报 **33** 1454]
 - [11] Lundgren L, Svedlindh P, Nordblad P, Beckman O 1983 *Phys. Rev. Lett.* **51** 911
 - [12] Chu D, Kenning G G, Orbach R 1994 *Phys. Rev. Lett.* **72** 3270
 - [13] Bernardi L W, Yoshino H, Hukushima K, Takayama H, Tobo A, Ito A 2001 *Phys. Rev. Lett.* **86** 720
 - [14] Jonason K, Vincent E, Hammann J, Bouchand J P, Nordblad P 1998 *Phys. Rev. Lett.* **81** 3243
 - [15] Mathieu R, Jonsson P E, Nordblad P, Katori H A, Ito A 2001 *Phys. Rev. B* **65** 012411
 - [16] Jonason K, Nordblad P, Vincent E, Hammann J, Bouchaud J P 2000 *Eur. Phys. J. B* **13** 99
 - [17] Qiu M Q, Fang M H 2006 *Acta Phys. Sin.* **55** 4912 (in Chinese) [邱梅清、方明虎 2006 物理学报 **55** 4912]
 - [18] Zhao L Z, Chen G, Li F Y, Du F, Wei Y J, Huang Z F, Wang C Z 2007 *Acta Phys. Sin.* **56** 6045 (in Chinese) [赵立竹、陈岗、历凤燕、杜菲、魏英进、黄祖飞、王春忠 2007 物理学报 **56** 6045]
 - [19] Fisher D S, Huse D A 1988 *Phys. Rev. B* **38** 373
 - [20] Vincent E, Bouchaud J P, Hammann J, F Lefloch 1995 *Philos. Mag. B* **71** 489
 - [21] Huse D A 1991 *Phys. Rev. B* **43** 8673
 - [22] Sherrington D, Kirkpatrick S 1975 *Phys. Rev. Lett.* **35** 1792
 - [23] Binder K, Schroder K 1976 *Solid State Commun.* **18** 1361
 - [24] Andersson J O, Mattsson J, Svedlindh P 1992 *Phys. Rev. B* **46** 8297
 - [25] Berthier L, Young A P 2004 *Phys. Rev. B* **69** 184423
 - [26] Jonsson P E, Mathieu R, Nordblad P, Yoshino H, Katori H A, Ito A 2004 *Phys. Rev. B* **70** 174402
 - [27] Tejada J, Zhang X X, Chudnovsky E M 1993 *Phys. Rev. B* **47** 14977

Nonequilibrium properties of Sherrington-Kirkpatrick spin glass model^{*}

Zhang Kai-Cheng[†]

(*Institute of Physics , Chinese Academy of Science , Beijing 100190 , China*)

(Received 29 December 2008 ; revised manuscript received 19 January 2009)

Abstract

Using Sherrington-Kirkpatrick (SK) model we investigated the nonequilibrium properties of spin glass by dynamical Monte Carlo simulation. Our results revealed that the susceptibility in the weak field shows a cusp near the glass transition , while the specific heat shows a more broad transition. The aging and zero-field cooling memory effect is also reproduced in our simulation , and the phenomena can be explained by energy relaxation. Our simulation also reveals that homogeneous SK model can not reproduce the exchange bias effect observed in the experiment.

Keywords : spin glass , memory effect , ageing effect , susceptibility

PACC : 7115Q , 7510N , 7550L , 7560E

^{*} Project supported by the National Natural Science Foundation of China (Grant Nos. 10874232 , 10774180).

[†] E-mail : kczhang@aphy.iphy.ac.cn