

无穷长力程反铁磁性自旋玻璃的相图

沈 宇 沈 仲 钧

华东师范大学物理系, 上海 200062

于 录

中国科学院理论物理研究所, 北京 100080

1991年 11 月 25 日收到

提出了反铁磁性自旋玻璃 Ising 模型, 并据此给出其相图。

PACC: 7510

一、引 言

自旋玻璃已被许多人讨论过^[1-5], 但讨论仅限于铁磁性自旋玻璃, 而关于反铁磁性自旋玻璃的讨论尚未见报道。

所谓铁磁性自旋玻璃指的是其哈密顿量可写成

$$H = - \sum_{i>j} J_{ij} S_i S_j - J_0 \sum_{i>j} S_i S_j \quad (1)$$

形式的体系, 其中 J_0 和 J_{ij} 为交换相互作用常数, $J_0 > 0$, $J_{ii} = 0$, J_{ij} 的平均值为零, i, j 为对近邻求和。值得指出的是, 由 (1) 式给出的哈密顿量的配分函数是无法严格求解的, 因而 Sherrington 和 Kirkpatrick (SK)^[6] 为了讨论的方便, 引进了无穷长力程铁磁性自旋玻璃 (Ising 模型) 的哈密顿量, 也就是将体系的哈密顿量写成如下形式:

$$H = \sum_{i>j}^N J_{ij} S_i S_j - \frac{J_0}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2, \quad S_i = \pm 1, \quad (2)$$

式中 N 为自旋的总数, $J_0 = NJ'$, $J_0 > 0$, J_{ij} 遵循高斯分布, 即

$$P(J_{ij}) = \frac{1}{J} \left(\frac{N}{2\pi} \right)^{1/2} \exp \left(-\frac{NJ_{ij}^2}{2J^2} \right), \quad (3)$$

式中 J 为分布宽度。Sherrington 等人利用这个模型 (SK 模型) 成功地给出无穷长力程铁磁性自旋玻璃的相图。

对 $\text{La}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}$ 高温超导氧化物的研究表明^[6-8], $\text{La}_{2-x}\text{M}_x\text{CuO}$ 系统存在一个反铁磁相, 而且反铁磁相和超导相之间通常还有一个自旋玻璃相, 磁相互作用可能对高温超导电性起着重要作用。可见研究反铁磁性自旋玻璃有着重要意义, 本文的目的是要讨论反铁磁性自旋玻璃的相图。

二、反铁磁性物质的模型

粗看起来,似乎只要把 SK 模型中的 $J_0 > 0$ 改成 $J_0 < 0$, 就可得到无穷长力程反铁磁性自旋玻璃的有关结果,但事情并非如此简单. 这是因为,即使对于纯粹的反铁磁性物质,也不能简单地将其在无穷长力程近似下的哈密顿量写成

$$H = -\frac{J_0}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2, \quad S_i = \pm 1, \quad (4)$$

式中 $J_0 < 0$, 这是因为与(4)式相应的配分函数为

$$Z = \sum_{S_i = \pm 1} \exp \left[\beta \frac{J_0}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 \right], \quad (5)$$

式中 $\beta = 1/kT$. 利用公式

$$\exp \left(-\frac{\lambda}{2} a^2 \right) = \left(\frac{\lambda}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{\lambda}{2} x^2 + i a \lambda x \right) dx, \quad (6)$$

其中 $\lambda > 0$, 可得

$$Z = \left(\frac{N\beta|J_0|}{2\pi} \right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp \left(-\frac{N\beta|J_0|}{2} x^2 \right) \cdot [2 \cos(\beta|J_0|x)]^N dx, \quad (7)$$

再利用最陡下降法,可得

$$Z = \exp \left[-\frac{N\beta|J_0|}{2} x_0^2 + N \ln (2 \cos \beta|J_0|x_0) \right], \quad (8)$$

式中 x_0 是使 Z 为最大值的 x 值. 不难从(8)式看出,不管 β 和 $|J_0|$ 为何值,该模型的序参量 $x_0 = \langle S_i \rangle$ 始终为零,即体系不可能产生磁有序相,因而体系没有相变,这与反铁磁性物质有相变这一事实有矛盾. 这就说明简单地把 $J_0 > 0$ 改成 $J_0 < 0$ 是得不到反铁磁性物质的有关结果的. 因此,必须重新寻找一个合适的模型,用来描写反铁磁性物质的性质. 事实上,可以将具有 Ising 相互作用的 $2N$ 个自旋组成的无穷长力程近似下的反铁磁性物质的哈密顿量写成

$$H = -\frac{J_0}{2N} \sum_{i=1}^N S_i \sum_{j=N+1}^{2N} S_j, \quad (S_i, S_j = \pm 1), \quad (9)$$

式中 $J_0 < 0$, 其相应的配分函数为

$$\begin{aligned} Z &= \sum_{S_i, S_j = \pm 1} \exp \left[-\frac{\beta|J_0|}{N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right) \left(\sum_{j=N+1}^{2N} S_j \right) \right] \\ &= \sum_{S_i, S_j} \exp \left[\frac{\beta|J_0|}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i - \sum_{j=N+1}^{2N} S_j \right)^2 \right. \\ &\quad \left. - \frac{\beta|J_0|}{2N} \left(\sum_{i=1}^N S_i \right)^2 - \frac{\beta|J_0|}{2N} \left(\sum_{j=N+1}^{2N} S_j \right)^2 \right], \end{aligned} \quad (10)$$

利用(6)式和

$$\exp\left(\frac{\lambda}{2}a^2\right) = \left(\frac{\lambda}{2\pi}\right)^{1/2} \int_{-\infty}^{\infty} \exp\left[-\frac{\lambda}{2}x^2 + a\lambda x\right] dx, \quad (11)$$

式中 $\lambda > 0$, 可得

$$\begin{aligned} Z = & \int dx dx_1 dx_2 \exp\left\{-2N\beta|J_0|x^2 - \frac{N}{2}\beta|J_0|x_1^2\right. \\ & - \frac{N}{2}\beta|J_0|x_2^2 + N\ln[2\text{ch}(2\beta|J_0|x + i\beta x_1)] \\ & \left. + N\ln[2\text{ch}(-2\beta|J_0|x + i\beta|J_0|x_2)]\right\}, \end{aligned} \quad (12)$$

利用最陡下降法, 可得

$$\begin{aligned} Z = & \exp\left\{-2N\beta|J_0|x_0^2 - \frac{N}{2}\beta|J_0|x_{10}^2 - \frac{N}{2}\beta|J_0|x_{20}^2\right. \\ & + N\ln[2\text{ch}(2\beta|J_0|x_0 + i\beta|J_0|x_{10})] \\ & \left. + N\ln[2\text{ch}(-2\beta|J_0|x_0 + i\beta|J_0|x_{20})]\right\}, \end{aligned} \quad (13)$$

式中 x_{10} , x_{20} 和 x_0 是使得 Z 为最大值的 x_1 , x_2 和 x 的值. 由于 Z 为实数, (13) 式中的 x_{10} 必须等于 x_{20} . 这样,

$$\begin{aligned} Z = & \exp\left\{-2N\beta|J_0|x_0^2 - N\beta|J_0|x_{10}^2\right. \\ & + N\ln[4\text{ch}^2(2\beta|J_0|x_0)\cos^2(\beta|J_0|x_{10}) \\ & \left. + 4\text{sh}^2(2\beta|J_0|x_0)\sin^2(\beta|J_0|x_{10})]\right\}. \end{aligned} \quad (14)$$

不难看出, 使得 Z 取最大值的 x_{10} 和 x_0 的值分别为

$$x_{10} = x_{20} = 0 \quad (15)$$

和

$$x_0 = \text{th}(\beta|J_0|x_0). \quad (16)$$

显然, 当 $\beta|J_0| < 1$ 时, $x_0 = 0$, 而当 $\beta|J_0| > 1$ 时, $x_0 \neq 0$. 这里, $x_{10} = \langle S_i \rangle$, $x_{20} = \langle S_i \rangle$ 和 $x_0 = \langle S_i \rangle - \langle S_j \rangle$. $x_0 \neq 0$ 表示系统有对称破缺. 由于 x_0 是表示物质反铁磁性的序参量, 可见, 当 $\beta|J_0| = 1$ 时, 体系发生了从顺磁相到反铁磁相的相变, 所以本文模型可以用来描述反铁磁性物质.

三、反铁磁性自旋玻璃的相图

以上给出了一个可以描述反铁磁性物质在无穷长力程近似下的模型, 现在把这个模型推广到反铁磁性自旋玻璃. 体系的哈密顿量为

$$H = - \sum_{i>j} J_{ij} S_i S_j - \frac{J_0}{2N} \sum_{i=1}^N S_i \sum_{j=N+1}^{2N} S_j, \quad (S_i, S_j = \pm 1), \quad (17)$$

相应的配分函数为

$$Z = \sum_{S_i, S_j = \pm 1} \exp\left\{\sum_{i>j} \beta J_{ij} S_i S_j + \frac{\beta J_0}{N} \left(\sum_{i=1}^N S_i\right) \left(\sum_{j=N+1}^{2N} S_j\right)\right\}, \quad (18)$$

式中 $J_0 < 0$, J_{ij} 为相互独立的随机变量, 它们的分布函数由 (3) 式表示. 由于 J_{ij} 为随

机变量,自由能 $F = -kT \ln Z$ 应对 J_{ij} 求平均,即平均自由能

$$F = -kT \overline{\ln Z}, \quad (19)$$

式中 $\ln Z$ 上方的横线表示对 J_{ij} 求平均。 $\overline{\ln Z}$ 可写成^[4]

$$\overline{\ln Z} = \lim_{n \rightarrow 0} (\bar{Z}^n - 1)/n. \quad (20)$$

显然

$$\begin{aligned} \bar{Z}^n = & \sum_{S_1^a, S_1^r, S_2^a, S_2^r = \pm 1} \exp \left\{ N^{-1} \sum_{i>j} \left[\frac{1}{2} (\beta J)^2 \sum_{\alpha, \gamma=1}^n S_i^a S_j^r S_i^r S_j^a \right] \right. \\ & \left. - \frac{\beta |J_0|}{N} \sum_{\alpha=1}^n \left[\left(\sum_{i=1}^N S_i^a \right) \left(\sum_{i=N+1}^{2N} S_i^a \right) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (21)$$

式中 α 和 γ 表示 n 次重复的指标。利用(6),(11)式和最陡下降法,有

$$\begin{aligned} \bar{Z}^n = & \exp [(\beta J)^2 n N] \exp \left\{ -2N(\beta J)^2 \sum_{\alpha>\gamma} q_{\alpha\gamma}^2 - 2N\beta |J_0| \sum_{\alpha} x_{\alpha}^2 \right. \\ & - \frac{N}{2} \beta |J_0| \sum_{\alpha} x_{\alpha 1}^2 - \frac{N}{2} \beta |J_0| \sum_{\alpha} x_{\alpha 2}^2 + N \ln \\ & \cdot \sum_{S_1^a, S_1^r, S_2^a, S_2^r = \pm 1} \exp \left[2|\beta J|^2 \sum_{\alpha>\gamma} q_{\alpha\gamma} (S_1^a S_1^r + S_2^a S_2^r) + 2\beta |J_0| \sum_{\alpha} x_{\alpha} (S_1^a - S_2^a) \right. \\ & \left. \left. + \beta |J_0| \sum_{\alpha} x_{\alpha 1} S_1^a + \beta |J_0| \sum_{\alpha} x_{\alpha 2} S_2^a \right] \right\}, \end{aligned} \quad (22)$$

式中 $q_{\alpha\gamma}$, x_{α} , $x_{\alpha 1}$, 和 $x_{\alpha 2}$ 使得 $\bar{Z}^n$ 取最大值,它们是体系的序参量。显然

$$\begin{aligned} q_{\alpha\gamma} = & \sum_{S_1^a, S_1^r, S_2^a, S_2^r = \pm 1} [(S_1^a S_1^r + S_2^a S_2^r) L(q_{\alpha\gamma}, x_{\alpha}, x_{\alpha 1}, x_{\alpha 2})] / \\ & 2 \sum_{S_1^a, S_1^r, S_2^a, S_2^r = \pm 1} L(q_{\alpha\gamma}, x_{\alpha}, x_{\alpha 1}, x_{\alpha 2}), \end{aligned} \quad (23)$$

$$\begin{aligned} x_{\alpha} = & \sum_{S_1^a, S_1^r, S_2^a, S_2^r = \pm 1} [(S_1^a - S_2^a) L(q_{\alpha\gamma}, x_{\alpha}, x_{\alpha 1}, x_{\alpha 2})] / \\ & 2 \sum_{S_1^a, S_1^r, S_2^a, S_2^r = \pm 1} L(q_{\alpha\gamma}, x_{\alpha}, x_{\alpha 1}, x_{\alpha 2}), \end{aligned} \quad (24)$$

$$\begin{aligned} x_{\alpha 1} = & \sum_{S_1^a, S_1^r, S_2^a, S_2^r = \pm 1} S_1^a L(q_{\alpha\gamma}, x_{\alpha}, x_{\alpha 1}, x_{\alpha 2}) / \\ & 2 \sum_{S_1^a, S_1^r, S_2^a, S_2^r = \pm 1} L(q_{\alpha\gamma}, x_{\alpha}, x_{\alpha 1}, x_{\alpha 2}), \end{aligned} \quad (25)$$

$$\begin{aligned} x_{\alpha 2} = & \sum_{S_1^a, S_1^r, S_2^a, S_2^r = \pm 1} S_2^a L(q_{\alpha\gamma}, x_{\alpha}, x_{\alpha 1}, x_{\alpha 2}) / \\ & 2 \sum_{S_1^a, S_1^r, S_2^a, S_2^r = \pm 1} L(q_{\alpha\gamma}, x_{\alpha}, x_{\alpha 1}, x_{\alpha 2}), \end{aligned} \quad (26)$$

式中

$$\begin{aligned}
 L(q_{\alpha\gamma}, x_{\alpha}, x_{\alpha 1}, x_{\alpha 2}) = & \exp \left[2(\beta J)^2 \sum_{\alpha < \gamma} q_{\alpha\gamma} (S_i^{\alpha} S_i^{\gamma} + S_i^{\gamma} S_i^{\alpha}) \right. \\
 & + 2\beta |J_0| \sum_{\alpha} x_{\alpha} (S_i^{\alpha} - S_i^{\gamma}) + \beta |J_0| i \left(\sum_{\alpha} x_{\alpha 1} S_i^{\alpha} \right) \\
 & \left. + \beta |J_0| i \left(\sum_{\alpha} x_{\alpha 2} S_i^{\alpha} \right) \right], \quad (27)
 \end{aligned}$$

取 $q_{\alpha\gamma}$, x_{α} , $x_{\alpha 1}$ 和 $x_{\alpha 2}$ 的对称解, 即 $q_{\alpha\gamma} = q$, $x_{\alpha} = x$, $x_{\alpha 1} = x_1$, $x_{\alpha 2} = x_2$, 它们与 α, γ 的取值无关. 注意到

$$\begin{aligned}
 \sum_{\alpha > \gamma} q_{\alpha\gamma} (S_i^{\alpha} S_i^{\gamma} + S_i^{\gamma} S_i^{\alpha}) = & \frac{1}{2} q \left[\left(\sum_{\alpha} S_i^{\alpha} \right)^2 - n \right] \\
 & + \frac{1}{2} q \left[\left(\sum_{\alpha} S_i^{\alpha} \right)^2 - n \right], \quad (28)
 \end{aligned}$$

有

$$\begin{aligned}
 \overline{\ln Z} = & \lim_{n \rightarrow 0} (\bar{Z}^n - 1)/n \\
 = & (\beta J)^2 (1 - q)^2 - 2N\beta |J_0| x^2 - \frac{N}{2} \beta |J_0| x_1^2 - \frac{N}{2} \beta |J_0| x_2^2 \\
 & + (2\pi)^{-1/2} \int \exp(-z^2/2) \ln [2\text{ch}(\sqrt{2} \beta J q^{1/2} z + 2\beta |J_0| x \\
 & + \beta |J_0| i x_1)] dz + \frac{1}{(2\pi)^{1/2}} \int \exp(-z^2/2) \ln [2\text{ch}(\sqrt{2} \beta J q^{1/2} z \\
 & - 2\beta |J_0| x + \beta |J_0| i x_2)] dz. \quad (29)
 \end{aligned}$$

由于 $\overline{\ln Z}$ 必须是实数, 所以必须有 $x_1 = x_2$, 这样

$$\begin{aligned}
 \overline{\ln Z} = & N(\beta J)^2 (1 - q)^2 - 2N\beta |J_0| x^2 - \frac{N}{2} \beta |J_0| x_1^2 - \frac{N}{2} \beta |J_0| x_2^2 \\
 & + \left(\frac{1}{2\pi} \right)^{1/2} \int \exp(-z^2/2) \ln \{ 4[\text{ch}^2(\sqrt{2} \beta J q^{1/2} z \\
 & + 2\beta |J_0| x) \cos^2(\beta J_0 x_1) + \text{sh}^2(\sqrt{2} \beta J q^{1/2} z \\
 & + 2\beta |J_0| x) \sin^2(\beta J_0 x_1)] \} dz. \quad (30)
 \end{aligned}$$

显然, 要使 $\overline{\ln Z}$ 取最大值, 必须有

$$x_1 = x_2 = 0. \quad (31)$$

这样

$$\begin{aligned}
 \overline{\ln Z} = & N(\beta J)^2 (1 - q)^2 - 2N\beta |J_0| x^2 + (2\pi)^{-1/2} \int \exp(-z^2/2) \\
 & \cdot \ln \{ 4\text{ch}^2(\sqrt{2} \beta J q^{1/2} z + 2\beta |J_0| x) \} dz. \quad (32)
 \end{aligned}$$

为了计算 q 和 x , 令(23)和(24)式中的 $n \rightarrow 0$, 亦即

$$q = \lim_{n \rightarrow 0} q_{\alpha\alpha} = \int (2\pi)^{-1/2} \exp(-z^2/2) \text{th}^2(\sqrt{2} \beta J q^{1/2} z + 2\beta |J_0| x) dz, \quad (33)$$

$$x = \lim_{n \rightarrow 0} x_n = \int (2\pi)^{-1/2} \exp(-z^2/2) \text{th}(\sqrt{2} \beta J q^{1/2} z + 2\beta |J_0| x) dz, \quad (34)$$

令

$$J'' = \sqrt{2} J \quad (35)$$

和

$$J'_0 = 2J_0, \quad (36)$$

可得

$$q = (2\pi)^{-1/2} \int \exp(-z^2/2) \text{th}^2(\beta J'' q^{1/2} z + J'_0 \beta x) dz, \quad (37)$$

$$x = (2\pi)^{-1/2} \int \exp(-z^2/2) \text{th}(\beta J'' q^{1/2} z + J'_0 \beta x) dz. \quad (38)$$

由于

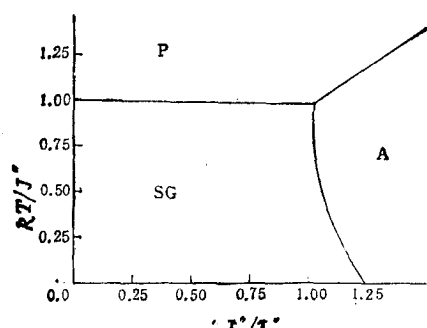


图 1 自旋玻璃反铁磁体的相图

量所满足的方程有相似的形式, 所以本文的反铁磁性自旋玻璃的相图与 SK 得到的铁磁性自旋玻璃的相图也相似。

图 1 中 P 表示顺磁相 ($q = x = 0$), AF 表示反铁磁相 ($q \neq 0, x \neq 0$), SG 表示自旋玻璃相 ($q \neq 0, x = 0$)。

$$q = \langle S_i^2 \rangle, \quad (39)$$

$$x = \langle S_i \rangle - \langle S_i \rangle, \quad (40)$$

式中 $\langle \rangle$ 代表热力学平均, $\langle S_i \rangle$, $\langle S_i^2 \rangle$ 和 $\langle S_i \rangle^2$ 上方的横线代表对 J_{ij} 求平均。非零的 q 值表示磁有序, 除 $q \neq 0$ 外 x 也不等于零表示反铁磁有序。当 $x = 0, q \neq 0$ 时, 为自旋玻璃态。

根据序参量 q 和 x 所满足的方程 (37) 和 (38) 可以得到自旋玻璃反铁磁体的相图 (见图 1)。由于方程 (37) 和 (38) 与 SK^[1] 得到的序参

- [1] D. Sherrington and S. Kirkpatrick, *Phys. Rev. Lett.*, **35** (1975), 1972.
- [2] S. F. Edwards and P. W. Anderson, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **5**(1975), 965.
- [3] D. Sherrington and B. W. Southern, *J. Phys. F: Met. Phys.*, **5**(1975), L49.
- [4] K. H. Fischer, *Phys. Rev. Lett.*, **34** (1975), 1438.
- [5] K. Binder and A. P. Young, *Rev. Mod. Phys.*, **58** (1986), 801.
- [6] 邢定钰、刘楣, 物理学进展, **10**(1990), 472.
- [7] A. Aharony *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **60**(1988), 1330.
- [8] W. E. Pickett, *Rev. Mod. Phys.*, **61**(1989), 433.

PHASE DIAGRAM OF ANTIFERROMAGNETIC SPIN GLASS WITH INFINITE-RANGED EXCHANGE INTERACTION

SHEN YU SHEN ZHONG-JUN

Department of Physics, East China Normal University, Shanghai 200062

Yu Lu

Institute of Theoretical Physics, Academia Sinica, Beijing 100080

(Received 25 November 1991)

ABSTRACT

In this paper, we establish a Ising model of antiferromagnetic spin glass and give its phase diagram.

PACC: 7510