

量子 Sherrington-Kirkpatrick 自旋 玻璃模型的热力学性质*

各向异性和磁场影响

熊元生 易 林¹⁾ 姚凯伦¹⁾

(华中理工大学物理系和激光技术国家重点实验室, 武汉 430074)

(1993 年 12 月 20 日收到)

利用稳态量子 replica 对称自旋玻璃理论, 研究了具有 Dzyaloshinskii-Moriya (缩写为 DM) 各向异性相互作用的 Sherrington-Kirkpatrick 自旋玻璃在外场中的热力学性质. 数值计算了不同外场和各向异性作用的自旋为 $1/2$ 和 1 的熵、比热、局域磁化率和相应的序参数随温度的变化. 发现局域磁化率与热场动力学的结果相符合. 特别地, 本文的比热-温度曲线能满意地解释 Brodale 等实验观察到的不同磁场下的交叉特征.

PACC: 7540; 7550B; 7550K

1 引 言

近些年来, 磁性合金的低温自旋玻璃态的量子性质的研究已取得了显著的进展^[1-12]. 值得指出的是: Usadel 及其合作者的研究使得自旋玻璃的磁性得到了一些相当满意的理论诠释^[13-16]. 然而, 由于考虑到自旋的量子效应后导致的复杂性, 热力学性质的研究只限于零场伊辛自旋玻璃模型^[14]. 最近, 易林等提出的稳态 replica 对称理论允许将热力学和磁学性质在一个统一的框架中处理^[16,17]. 实验上, Brodale 等^[18]发现铜锰合金的比热在外场作用下, 比热的拐点随外场的作用消失并且呈现出典型的交叉特征. 理论上, 它们没有得到满意的解释.

本文将利用文献[16,17]中提出的理论, 数值研究具有 DM 各向异性的 Sherrington-Kirkpatrick(缩写为 SK) 量子自旋玻璃模型的热力学性质和相应的序参数, 并解释 Brodale 等的实验结果. 为了与热场动力学的结果比较, 磁化率随温度的变化也将给出数值结果.

* 国家自然科学基金资助的课题.

1) 中国高等科学技术中心(世界实验室), 北京 8730 信箱, 北京 100080.

2 热力学函数

具有随机 DM 相互作用的 SK 自旋玻璃模型哈密顿量为

$$H = - \sum_{ij} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \sum_{ij} \mathbf{D}_{ij} \cdot (\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j) - \sum_i \mathbf{h} \cdot \mathbf{S}_i \quad (1)$$

其中 $\mathbf{h}$ 为外场, 求和取各种可能的格点对 (i, j) 。交换相互作用强度 J_{ij} 和 $\mathbf{D}_{ij}$ 具有对称的高斯分布律

$$P(J_{ij}) = \left[\frac{N}{2\pi J^2} \right]^{1/2} \exp \left[- \frac{N J_{ij}^2}{2J^2} \right], \quad W(\mathbf{D}_{ij}) = \left[\frac{N}{2\pi D^2} \right]^{3/2} \exp \left[- \frac{N \mathbf{D}_{ij}^2}{2D^2} \right].$$

(1) 式中自旋算符满足标准的对易关系, 利用虚时泛函积分技术和 replica 方法, 在稳态 replica 对称近似下, 经过冗长的计算, 自由能密度由下式确定^[16,17]:

$$\beta F[\mathbf{R}, \mathbf{Q}] = \left[\frac{\beta J}{2} \right]^2 \{ R_1^2 + 2(1 + d^2) R_t^2 + 4d^2 R_1 R_t - [Q_1^2 + 2(1 + d^2) Q_t^2 + 4d^2 Q_1 Q_t] \} - \int D\mathbf{z} \ln L(\mathbf{z}), \quad (2)$$

$$L(\mathbf{z}) = \int D\mathbf{z}_1 \phi_i(\mathcal{Q}), \quad \phi_i(\mathcal{Q}) = \frac{\sinh[(2s+1)\mathcal{Q}]}{\sinh(\mathcal{Q})}, \quad (3)$$

其中

$$\mathcal{Q}(\mathbf{z}, \mathbf{z}_1) = \frac{\beta J}{2} \sqrt{(a_1 x + a_2 x_1)^2 + (a_1 y + a_2 y_1)^2 + (a_3 z + a_1 z_1 + \mathbf{h}/J)^2},$$

$$a_1 = [d^2 Q_1 + (1 + d^2) Q_t]^{1/2}, \quad a_2 = [d^2 (R_1 - Q_1) + (1 + d^2) (R_t - Q_t)]^{1/2},$$

$$a_3 = [Q_1 + 2d^2 Q_t]^{1/2}, \quad a_4 = [R_1 - Q_1 + 2d^2 (R_t - Q_t)]^{1/2}.$$

自旋自相互作用 $\mathbf{R}$ 和自旋玻璃序参量 $\mathbf{Q}$ 的纵(l)和横(t)分量满足自洽方程组^[16]

$$R_1 = \frac{1}{(a_1 J \beta)^2} \int \frac{D\mathbf{z}}{L(\mathbf{z})} \int D\mathbf{z}_1 \phi_i(\mathcal{Q}) (z_1^2 - 1), \quad (4)$$

$$R_t = \frac{1}{2(a_2 J \beta)^2} \int \frac{D\mathbf{z}}{L(\mathbf{z})} \int D\mathbf{z}_1 \phi_i(\mathcal{Q}) (x_1^2 + y_1^2 - 2), \quad (5)$$

$$Q_1 = R_1 - \frac{1}{(a_3 J \beta)^2} \int D\mathbf{z} (z^2 - 1) \ln L(\mathbf{z}), \quad (6)$$

$$Q_t = R_t - \frac{1}{2(a_1 J \beta)^2} \int D\mathbf{z} (x^2 + y^2 - 2) \ln L(\mathbf{z}), \quad (7)$$

且

$$\int D\mathbf{z} A(\mathbf{z}) = \int \frac{d^3 \mathbf{z}}{(2\pi)^{3/2}} \exp(-\mathbf{z}^2/2) \cdot A(\mathbf{z})$$

代表依赖噪声场 $\mathbf{z}$ 的物理量 $A(\mathbf{z})$ 的高斯平均值。

利用熟知的热力学关系, 并注意到序参量是温度的函数, 系统的等容熵为

$$S_V = \int \ln L(\mathbf{z}) D\mathbf{z} - \int \frac{D\mathbf{z}}{L(\mathbf{z})} \left[\mathcal{Q} \frac{\partial \phi}{\partial \mathcal{Q}} \right] D\mathbf{z}_1, \quad (8)$$

相应的比热为

$$C_V = \left[\frac{D\mathbf{z}}{L(\mathbf{z})} \int Q^2 \frac{\partial^2 \Phi_i}{\partial^2 Q} D\mathbf{z}_1 - \int \frac{D\mathbf{z}}{L(\mathbf{z})^2} \left(\int Q^2 \frac{\partial \Phi_i}{\partial Q} D\mathbf{z}_1 \right)^2 \right]. \quad (9)$$

因为熵和比热是序参量 $\mathbf{R}$ 和 $\mathbf{Q}$ 的函数, 温度隐含在序参量之中, 所以熵和比热应与方程 (4)–(7) 联立自洽确定。因此, 数值计算是必须的。

为了能与其它理论比较, 计算磁化率张量是有益的。磁化率由 (2) 式中的自由能密度对外场的二阶偏微分取负值确定, 即

$$\chi_{\mu\nu} = - \frac{\partial^2 F[\mathbf{R}, \mathbf{Q}, \mathbf{h}]}{\partial h_\mu \partial h_\nu}. \quad (10)$$

设磁场沿 z 轴方向。由于系统绕 z 轴存在旋转对称性, 磁化率张量通常采用如下的分解方案

$$\chi_{\mu\nu} = \delta_{\mu\nu} [\chi_l \delta_{\mu z} + \chi_t (1 - \delta_{\mu z})],$$

其中下标 l 和 t 分别代表纵向和横向分量。

3 数值结果与分析

采用厄密特方法, 利用公式 (8)–(10) 联立自洽方程组 (4)–(7) 数值计算了几种特殊情况下的热力学函数、局域磁化率和相应的序参量。考虑到弱的随机 DM 作用, 固定约化参数 d 为 0.2。

图 1 显示纵向和横向磁化率在不同的外场作用下的温度曲线。不难发现: 两种磁化

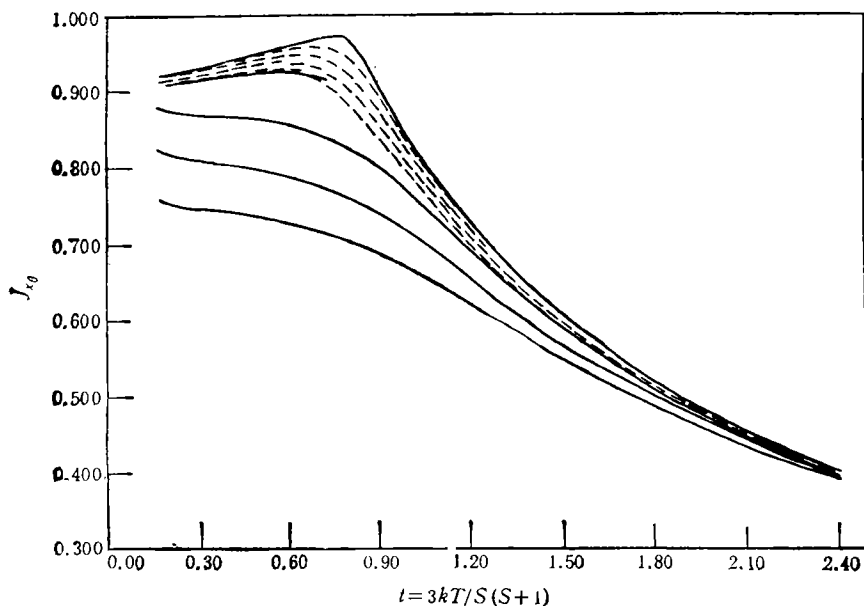


图 1 磁化率-温度曲线 θ 为 1, t , 实线和虚线分别代表纵向磁化率和横向磁化率, 从上到下约化磁场分别取 0.0, 0.1, 0.2, 0.3 和 0.4; 自旋 $S = 1$; 约化各向异性 $d = 0.2$

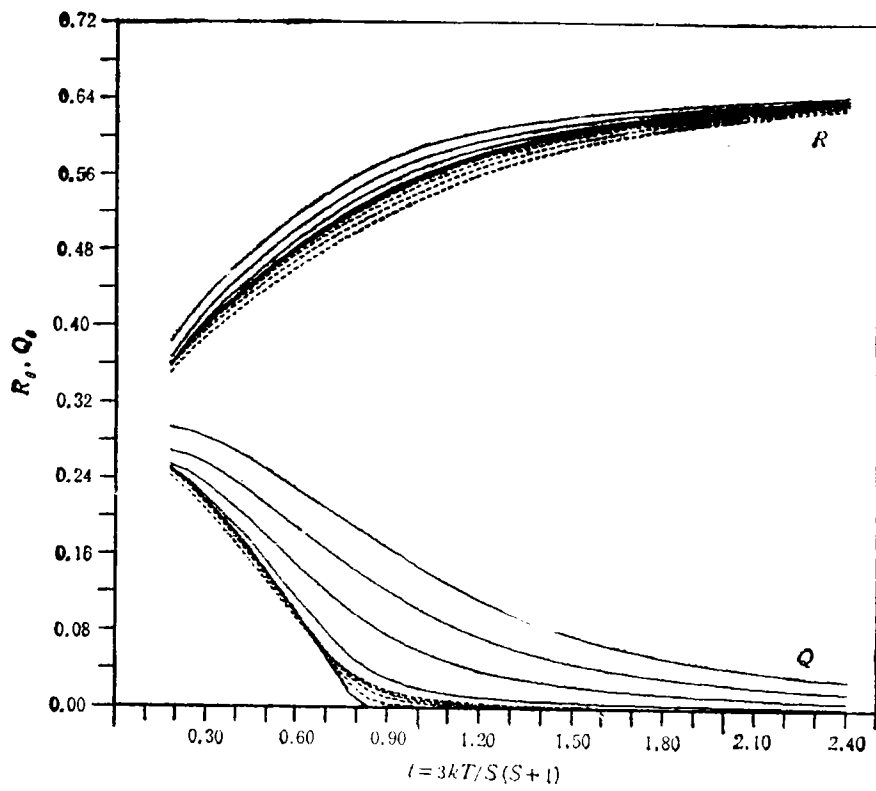


图2 序参量-温度曲线 θ 为 1, t , 实线和虚线分别代表纵向和横向序参量, 参数选择同图 1;
对横向序参量磁场由上到下, 对纵向序参量磁场由下到上

率在弱场下强烈地混合在一起。这反映了随机 DM 相互作用将不同模式耦合在一起的特征。这与 Kopeć 等^[12]的热场动力学计算相符合, 但他们计算研究的自旋为 1/2。

图 2 给出自旋自相互作用和自旋玻璃序参数在不同外场中随温度的变化。显然, 当外场为零时, 序参量的纵模和横模重合。随着温度的降低自旋玻璃序参数和相应的自旋自相互作用趋于重叠, 这使得低温时的自由能密度取极值^[16]。除约化场为零外, 自旋玻璃序参数总是非零的, 经典和量子理论均给出相似的结论^[12]。

熵随温度的变化由图 3 表示。我们的计算表明熵具有弱的外场依赖关系。由于趋近于零温的计算是极其困难的, 根据熵的连续性外推到 $T = 0$, 不难发现熵是非负的。可以认为这是由于 DM 各向异性抑制了低温下的量子涨落, 增强了 replica 对称解的稳定性^[16]。图 4, 5 展示了比热在不同外场下随温度的变化规律。结果表明, 外场的作用使得相变点变得圆滑, 在一个较宽的温度范围内比热取极值。不同的外场作用下的比热-温度曲线出现典型的交叉行为。这一特征已被 Brodale 等^[18]在铜锰合金的实验中观察到。我们的数值计算表明, 即使考虑到弱的随机 DM 作用, 对不同的自旋 ($S = 1/2$ 和 1) 玻璃体系这一特征仍然保持。

最后, 值得指出的是: 尽管我们的研究是对具有 DM 各向异性的 SK 自旋玻璃模型进行的, 但我们的处理方法可以延伸到其它的自旋玻璃模型, 例如: Potts 模型^[19]、偶

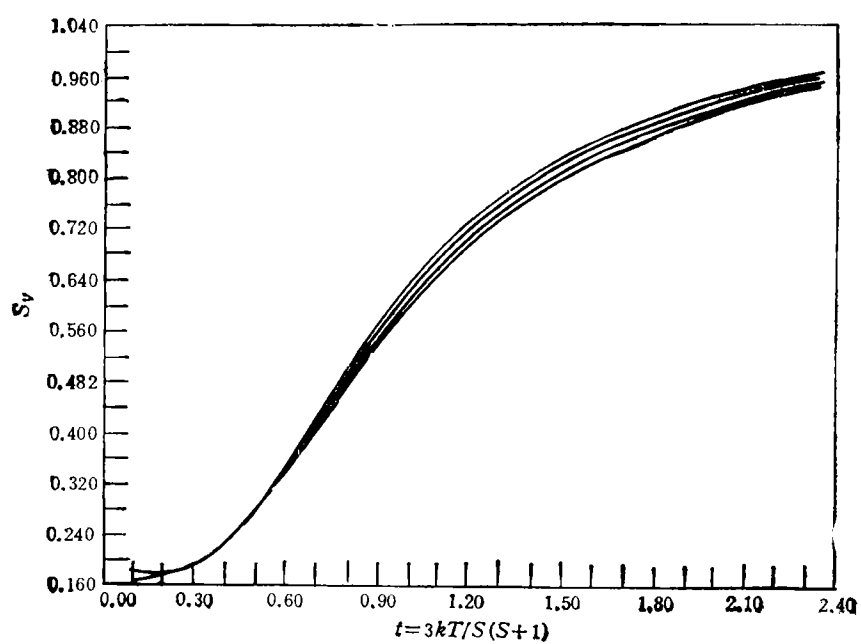


图3 熵-温度曲线 参数选择同图1

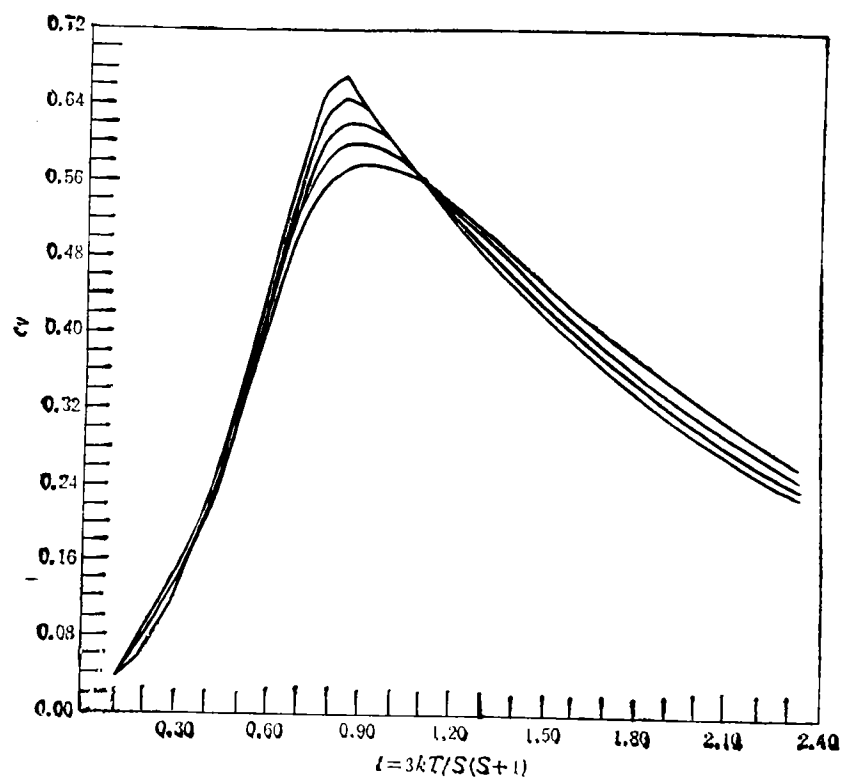


图4 比热-温度曲线 参数同图1

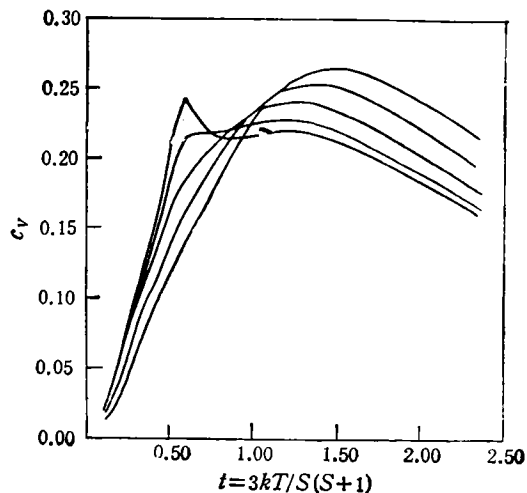


图5 比热-温度曲线 自旋 $S = 1/2$, 其余参数同图1

极-偶极作用模型^[20]和随机局域各向异性相互作用模型^[21]。另外,在零温极限下,对横场伊辛自旋玻璃模型,Büttner 等^[14]的精确数值计算表明,replica 对称近似的结果是相当好的,然而对称破缺在零温附近仍然存在。对三维的量子自旋玻璃模型考虑到可能存在的对称破缺情况,理论上仍有待进一步的研究。

易林对于德国 Duisburg 大学的 K. D. Usadel 教授的讨论,谨致谢忱。

- [1] H. -J. Sommers, *J. Magn. Magn. Mat.*, **22** (1980), 267.
- [2] A. J. Bray and M. A. Moore, *J. Phys. C*, **13**(1980), L655.
- [3] G. G. Kenning, D. Chu and R. Orbach, *Phys. Rev. Lett.*, **66** (1991), 2923.
- [4] K. Walasek and K. Lukierska-Walasek, *Phys. Rev.*, **B34** (1986), 4962.
- [5] T. Yamamoto, *J. Phys. C*, **21** (1988), 4377.
- [6] D. Thirumalai, Q. Li and T. B. Kirkpatrick, *J. Phys. A*, **22** (1989), 3339.
- [7] Y. Y. Goldschmidt and P. -Y. Lai, *Phys. Rev.*, **B43** (1991), 11434.
- [8] Su Zho-Bin, Yu Lu and Zhou Guang-Zhao, *Commun. Theor. Phys.*, **2** (1983), 1181; 1191.
- [9] C. Dasgupta and K. -L. Yao, *Phys. Rev.*, **B29** (1984), 4071.
- [10] A. J. Bray and M. A. Moore, *J. Phys. C*, **13** (1980), 1887.
- [11] A. Fert, P. Pureur, F. Hippert, K. Baberschke and F. Bruss, *Phys. Rev.*, **B26** (1982), 5300.
- [12] T. K. Kopeć and G. Büttner, *Phys. Rev.*, **B43** (1991), 10853.
- [13] K. D. Usadel, *Solid State Commun.*, **58** (1986), 629.
- [14] G. Büttner and K. D. Usadel, *Phys. Rev.*, **B42** (1990), 6385.
- [15] G. Breskorn and K. D. Usadel, *J. Phys. C*, **19** (1986), 3413.
- [16] L. Yi, G. Büttner, K. D. Usadel and K. L. Yao, *Phys. Rev.*, **B47** (1993), 254.
- [17] L. Yi and K. -L. Yao, *Acta Phys. Sin.*, **42** (1993), 488; 992 (in Chinese).
- [18] G. E. Brodale, R. A. Fisher, W. E. Fogle, N. E. Phillips and J. van Curen, *J. Magn. Magn. Mat.*, **31-34** (1983), 1331.
- [19] K. Binder and A. P. Young, *Rev. Mod. Phys.*, **58** (1988), 801.
- [20] A. J. Bray and M. A. Moore, *J. Phys. C*, **15** (1982), 3897.
- [21] K. H. Fischer and A. Zippelius, *J. Phys. C*, **18** (1985), L1138.

THERMODYNAMIC PROPERTIES OF QUANTUM SHERRINGTON-KIRKPATRICK SPIN GLASS MODEL ANISOTROPY AND MAGNETIC EFFECTS

XIONG YUAN-SHENG YI LIN YAO KAI-LUN

(*Department of Physics, Huazhong University of Science and Technology and
State Key Laboratory of Laser Technology, Wuhan 430074*)

(Received 20 December 1993)

ABSTRACT

With the help of the static replica symmetric spin glass theory, thermodynamic properties of the Sherrington-Kirkpatrick (SK) spin glass model with the random Dzyaloshinskii-Moriya (DM) interaction in external magnetic fields are investigated. The dependences of entropy, specific heat, susceptibility and the corresponding order parameters on temperature are studied numerically for different magnetic fields and spin numbers $1/2$ and 1 . It is found that the local susceptibility is in good agreement with that given by the thermo-field dynamic theory. Especially, the crossover behavior of the specific heat-temperature curves for different magnetic fields observed by Brodale *et al.* can be explained very excellently.

PACC: 7540; 7550B; 7550K