12．3次元量子ＲＫＫＹスピングラスの基底状態

東工大理　富田靖浩　西森秀稔

３次元のスピングラスのモデルではイジング的な異方性があれば短距離相互作用でもスピングラス転移がありそうだという議論がなされているが，実際の実験の対象になる量子的スピンのＲＫＫＹ相互作用の場合どうなるかについては，ほとんど研究がない．そこで，われわれは有限系の数値的対角化の方法でこのような系の基底状態を求めた

考えたモデルは，Ｎ個の量子スピン(S=1/2)がFCC格子上にランダムに分布していて，RKKY相互作用をしているという系である．

Hamiltonianは

$$H = -2\sum_{i>j} J_{ij}\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j \qquad J_{ij} = -J_0 \cos(2k_F r_{ij})/r_{ij}^3 \qquad (1)$$

という形であり，ここでJ_{ij}はRKKY相互作用である．RKKY相互作用はスピン間の距離r_{ij}によって，符号が正・負に変動する．スピンがランダムに分布しているこの系では，したがって，J_{ij}の符号はランダムになっていると考えられる．我々の興味は，このような系に長距離の秩序(ＬＲＯ)ができるかどうかということである．

オーダーパラメーターとして，次のような量Ｑを定義した．

$$Q \quad 2<\sum_{i>j}<\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j>^2>_c/N(N-1) \qquad (2)$$

$< \quad >$　：基底状態の波動関数での期待値

$< \quad >_c$：配置平均

$S_i\cdot S_j$の期待値の２乗の和を考えているのは，スピングラスでは$\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j$の期待値の配置平均は０になってしまうからである．

もし，ＬＲＯがあるとすると，iとjとが遠く離れたスピンのペアであっても，$<S_i\cdot S_j>^2$は１のオーダーで残り，したがって，$< \quad >_c$の中は２重和によってN^2のオーダーになる．また，ＬＲＯがなくて，ＳＲＯしかなければ，iとjが近くのスピンのペアのときだけしか$<S_i\cdot S_j>^2$は１のオーダーで残らないから，２重和はiだけ、あるいはjだけの和と同じことになり，$< \quad >_c$の中はＮのオーダーになる．だから，(2)のようにN^{-2}で規格化しておけば，ＬＲＯのときは，十分大きな系において，Ｑは有限の値が残り，ＳＲＯのときは1/Nで０になる．また，

それらの間の場合は，０と-1の中間のベキになることが考えられる．このように，ＱのＮ依存性を調べることによって，系の基底状態における秩序の情報が得られるのである．

ところで，３次元RKKYで古典ハイゼンベルグ・スピンのＭＣシミュレーションがChakravartiとDasgputaによってなされていて，彼らによると，

$$T_g = 0、\ \nu = 0.87 \quad (\xi = T^{-\nu})$$

すなわち，Ｔ＝０がcriticalになっているということである．

実際に計算をするにあたって，フェルミ波数k_Fは，FCCの各格子点あたり１つの電子がある場合（half-filled)の値を用いた．格子定数を１とするとk_F=4.91となる．また磁性原子の濃度は0.1%とした．

計算結果は下の図に示してある．縦軸はＱ，横軸は1/Nで，Ｎ＝6,8,10,12,14について計算した．配置平均は1000サンプルについてとってある．統計誤差は図の各点の大きさの程度である。

次に，このデータをＮ→∞に外挿した．最小自乗法によるfittingを行うにあたって，次の２種類の関数形を仮定した．そして，

Ⅰ．Ｎ→∞で有限な値が残るとした場合には

$$Q = a + b/N + c/N^2$$

a=0.011±0.002　　b=0.419±0.031

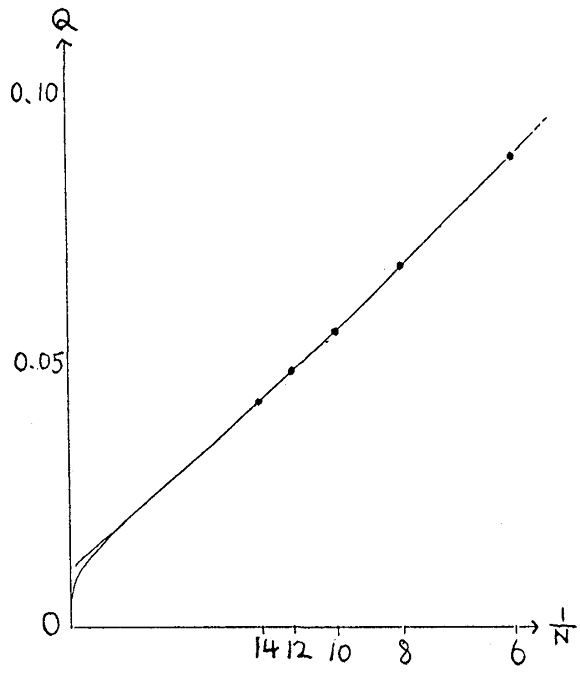
c=0.27±0.13

Ⅱ．Ｎ→∞で有限な値が残らないとした場合には

$$Q = N^{-a}(b+c/N)$$

a=0.21±0.17　　b=0.13±0.03

c=0.58±0.06



という値を得た．この外挿線は図に書き込んであるが，われわれが計算したデータの範囲ではfittingの精度に大差はなく，２つの外挿線は区別できなかった．また、２つの外挿線にあきらかな差がでるのは、Ｎ～100以上のところであり、我々の方法でそこまで計算するのは、事実上無理である。

したがって，可能性としては次の２つがあげられる．

Ⅰ．ＬＲＯがあるとしても，Ｑ＝0.011と大変小さな値である．

Qの値の目安としては，もし全てのスピンが強磁性的なオーダーをしているとすると，$S_i \cdot S_j = 1/4$だから，$Q = 1/16$になり，ここで得られた値はその1/5～1/6である．

II．LROは形成されず，$\langle S_i \cdot S_j \rangle^2 \sim r^{-1-\eta}$のようにpower decayすると考えると，指数ηは

$$\eta = -0.37 \pm 0.30$$

となる．このηは先ほどの$Q \sim N^{-a}$のaと$a=(1+\eta)/3$の関係がある．

我々が計算したデータだけからでは，これ以上のことは言えないが，古典系でのモンテカルロシミュレーションなどによると，3次元のRKKY相互作用をするハイゼンベルグ・スピン系では，有限温度でスピングラス秩序がないので，我々の今回の量子系についての結果（T＝0）も，II．のようにオーダーが残らないと見るほうが自然であろう．