

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

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

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。

$$Q = 2 \left\langle \sum_{i,j} \langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle^2 \right\rangle_0 / N(N-1) \quad (2)$$

$\langle \quad \rangle_0$: 基底状態の波動関数での期待値
 $\langle \quad \rangle_0$: 配置平均

$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j$ 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、 $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle^2$ は1のオーダーで残り、したがって、 $\langle \quad \rangle_0$ 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 $\langle \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle^2$ 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、 $\langle \quad \rangle_0$ 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Dasguptaによってなされていて、彼らによると、

$$T_0 = 0, \quad \nu = 0.87 \quad (\xi = T^{-\nu})$$

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 $N \rightarrow \infty$ 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. $N \rightarrow \infty$ で有限な値が残るとした場合
には

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

$$a = 0.011 \pm 0.002 \quad b = 0.419 \pm 0.031$$

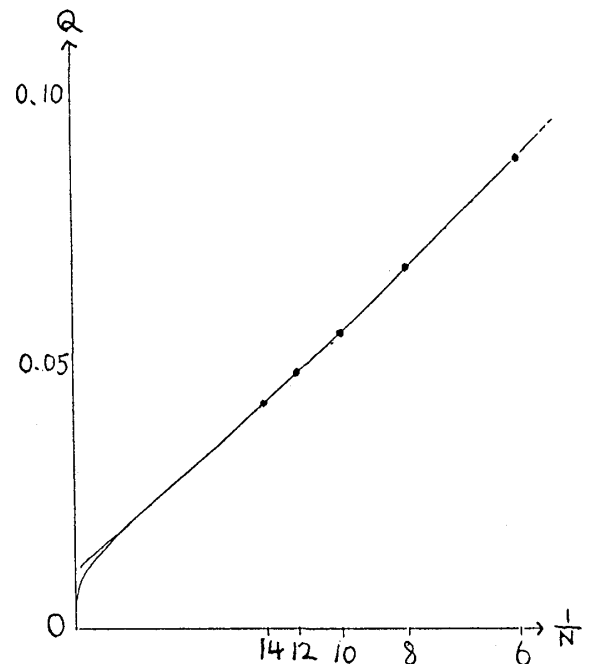
$$c = 0.27 \pm 0.13$$

II. $N \rightarrow \infty$ で有限な値が残らないとした
場合には

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

$$a = 0.21 \pm 0.17 \quad b = 0.13 \pm 0.03$$

$$c = 0.58 \pm 0.06$$



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、 $N \sim 100$ 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、もし全てのスピンの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。