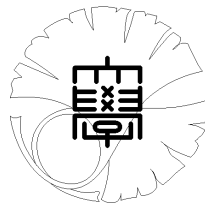


数理科学実践研究レター 2018-18 August 27, 2018

磁性体の臨界現象の結晶構造依存性

by

石井隆志



UNIVERSITY OF TOKYO
GRADUATE SCHOOL OF MATHEMATICAL SCIENCES
KOMABA, TOKYO, JAPAN

磁性体の臨界現象の結晶構造依存性

石井隆志¹ (東京大学理学系研究科)

Takashi Ishii (Graduate School of Science, University of Tokyo)

概要

磁石が示す磁性の起源は、電子が持つスピン磁気モーメントである。磁石の相転移は、結晶内の電子のスピン磁気モーメントが全体として一方向に揃う現象として説明される。本研究では磁性体のモデルとして Ising モデルを考え、その相転移の振る舞いが結晶の構造に依存してどのように変化するかという問題について調べた現在の結果を紹介する。

1 はじめに

磁石は、常温では全体として大きな磁化を生じているが、その温度を上げていくとある臨界温度 T_C で相転移を起こし、磁性を失う。逆に高温側から冷やしていくと磁性が復活する²。磁石の磁性の起源は、電子が持つスピン磁気モーメントである。Fe, Co, Ni などの原子は原子全体として無視できない大きさの磁気モーメントを作り出し得る電子配置を持っている。これらの原子が結晶構造をなし、各原子の磁気モーメントの方向が結晶全体として揃うことによって、全体としての磁化が生じる。本研究では、磁石の簡単なモデルである Ising モデルについての、複数の結晶構造の場合に関する数値計算の結果を示し、臨界現象の振る舞いが結晶構造にどのように依存するかについて考察する。

2 Ising モデルと統計力学

Ising モデルのハミルトニアンは

$$H = - \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j \quad (1)$$

で与えられる。ここで S_i は結晶格子上のサイト i に局在したスピンを表し、 $S_i = \pm 1$ とする。 $S_i = +1$ が「上向き」、 $S_i = -1$ が「下向き」のスピンを表すとする。 $\langle ij \rangle$ は隣り合うサイトのスピンに関する和をとることを表すものとする。このハミルトニアンは、隣同士のスピンの向きが同じである時にエネルギー的に得をすることを意味する。

統計力学によると、ハミルトニアンが H で与えられる系の温度 T の熱平衡状態は、状態 α における H の値、すなわちエネルギーを E_α として、全状態を

$$P_\alpha = \frac{e^{-\beta E_\alpha}}{\sum_{\alpha'} e^{-\beta E_{\alpha'}}} \quad (2)$$

の重みで混合した状態で与えられる。ここで β は逆温度 $\beta = 1/T$ である。

3 モンテカルロシミュレーション

今回の数値計算では結晶格子として、図1のような三種類の2次元格子を考えた。数値計算の手法としては、ハミルトニアン H のもとでの確率的ダイナミクスを考える、モンテカルロ法と呼ばれるものを用いた。初期状態を全てのスピンの状態にとり、境界条件は周期境界条件をとった。確率的ダイナミクスは、次に述べる操作を1ステップとしてステップ数を重ねていくことで実現する: 1ステップごとにランダムにサイトを1つ選び、そのサイトのスピンを

$$P_{(\pm)} = \frac{e^{-\beta E(\pm)}}{e^{-\beta E(+)} + e^{-\beta E(-)}} \quad (3)$$

¹ishii3@iis.u-tokyo.ac.jp

²ただし、現実の磁石では単に冷やしていくだけだと磁区と呼ばれる細かい構造を生じて全体としては磁石の機能を持たない場合も多い。

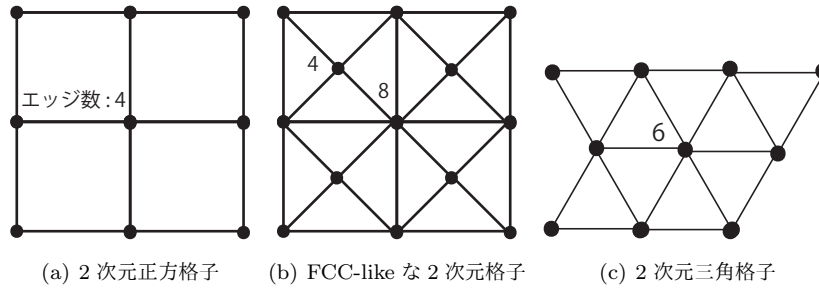


図 1: 三種類の 2 次元格子

の確率で 1 または -1 にする. ここで $P(+)(P(-))$ はスピンを 1 (-1) にする確率であり, $E(+)(E(-))$ はそのスピンを 1 (-1) にしたときの系全体のエネルギーである. こうしてステップを重ねていき, 状態がマクロに見て変化しなくなった状態を平衡状態とみなす. 平衡状態に到達するまでのステップ数を緩和時間と呼ぶ.

平衡状態について, 次の 2 つの物理量を観察した.

1. 磁化

$$m = \frac{1}{N} \left\langle \sum_i S_i \right\rangle \tag{4}$$

ただし N はサイト数であり, $\langle \cdot \rangle$ は平衡状態における平均値を表す. $m \neq 0$ の平衡状態は系が磁化を帯びていること (強磁性相) を表し, $m = 0$ は磁性を失っていること (常磁性相) を意味する.

2. 比熱

$$c = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} \tag{5}$$

ただし $\langle E \rangle$ は平衡状態におけるエネルギーの平均値である.

4 結果

図 2 は結果をまとめたものである. 上の 4 段は各結晶格子の場合についてエッジ数と, 平衡状態における磁化と比熱の温度依存性の結果を示している. 磁化と比熱は, それぞれある特定の温度において特異的な振る舞いを示しており, 系は相転移を起こしていると思われる. 5 段目にはそれらの結果から読み取った転移温度を書いた. 2 次元正方格子については厳密解が得られており [1], これも併記した.

以下に今回の結果の解釈を述べる. まず, 今回の結果とは別に, 1 次元の Ising モデルでは相転移は起こらないことが知られている [1]. すなわち任意の温度で常磁性相にあり, どんなに温度を下げてても相転移は起こらない. 一方, 今回シミュレーションした 2 次元正方格子では転移温度は約 2.3 (厳密解は約 2.269) であり, FCC-like な格子の転移温度は 4 近くであった. エッジの数が増えるほど転移温度が高くなっているようである.

このことは次のように解釈できる. 値 1 を持っているあるスピンの周りのスピンも全て 1 であった時, エッジ数が多いとそのスピンを -1 へとフリップさせまいとする周りからの影響が強くなり, 常磁性になりにくい. 常磁性にするためには, エッジが多いほど, より高温にしなければならない.

このことは式の上では以下のような初等的計算から見てとれる. まず (3) 式において

$$E(\pm) = E' + \Delta(\pm) \tag{6}$$

と書く. ただし $\Delta(\pm)$ はそのステップで選ばれたスピンを ± 1 としたときのエネルギーの差分の $1/2$ 倍を表すとし, $\Delta(+)= -\Delta(-)$ である. $\Delta(\pm)$ はエッジ数が多いほどその絶対値 (の最大値) が大き

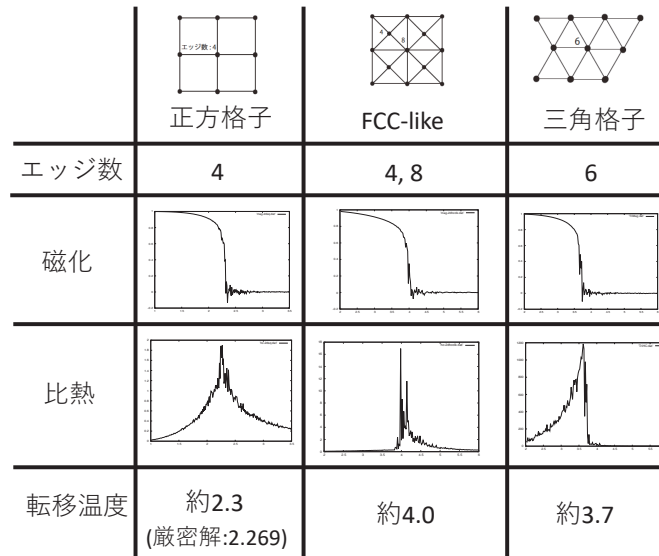


図 2: 結果のまとめ. グラフの横軸は温度 T である.

くなる. E' はエネルギーの残りの項である. このとき

$$P_{(\pm)} = \frac{e^{-\beta E(\pm)}}{e^{-\beta E(+)} + e^{-\beta E(-)}} \tag{7}$$

$$= \frac{e^{-\beta \Delta(\pm)}}{e^{-\beta \Delta(+)} + e^{-\beta \Delta(-)}} \tag{8}$$

$$= \begin{cases} 1/(1 + e^{-2\beta \Delta(-)}) & (P(+)) \\ e^{-2\beta \Delta(-)}/(1 + e^{-2\beta \Delta(-)}) & (P(-)) \end{cases} \tag{9}$$

となる. $\Delta(-) > 0$ として, $\Delta(-)$ が大きくなるほど $P(-)$ は小さくなる.

5 終わりに

本研究では, 磁性体の臨界現象の結晶構造依存性を, 三種類の 2 次元 Ising 模型について調べた結果を紹介した. 今後の課題としては, 3 次元結晶も含めた他の結晶構造の場合を調べることや, より現実の結晶に近いモデルとして, 格子点間の距離や原子の種類に応じて結合の強さが異なる場合を調べることが挙げられる.

謝辞

本課題研究は, 新日鐵住金株式会社 先端技術研究所 数理科学研究部の中川淳一先生, 東京大学数理科学研究科の若林泰央特任助教と議論を行いながら進めた. 東京大学数理科学研究科の佐々田槇子先生は研究の方向性について相談に乗ってくださった.

参考文献

- [1] 西森秀稔, 「相転移・臨界現象の統計物理学」(培風館, 2005).