有限温度における２次元三角格子双極子結晶の磁性

斎藤 吉彦 大阪市立科学館 中之島科学研究所 〒530-0005 大阪市北区中之島 4 - 2 - 1

方位磁石による２次元三角格子結晶の近似モデルとして、双極子結晶の磁性の温度依存性を調べる。統計力学の手法と時間平均による手法との２つの計算を試みる。前者は強磁性-常磁性転移を導き、後者は強磁性-反磁性転移を導く。前者は量子論的な原理に依拠するもので、後者は統計力学の結果を慣例的に使ったもので根拠が明らかでない。巨視的な方位磁石結晶の磁性の温度依存性を厳格に吟味するのは困難である。

1. はじめに

著者は方位磁石を結晶のように規則正しく並べることで、自発的対称性の破れを具現したり強磁性や反強磁性を視覚的に見せる教具を考案し、大阪市立科学館で展示している。その一つが図１のように強磁性を示すもので、これを論じた「方位磁石集団による磁区演示と「自発的対称性の破れ」」[1)]が日本物理教育学会の大塚賞（2005 年度）の対象論文になっている。また、この展示は大阪大学の体験入学や京コンピューターの一般公開に出展されるなどの評価も得ている。

方位磁石集団を使ったデモンストレーションは実在の強磁性体の微視的な特徴を象徴的にイメージさせるものである。以下にその現象を列挙する。(a) 自発的対称性の破れは南部陽一郎先生が素粒子論に導入された概念で、南部先生はこの功績で 2010 年にノーベル物理学賞を受賞された。図１のように三角格子に並んだ方位磁石は向きが部分的に揃うが、これが自発的対称性の破れを局所的に具現している[1)]。(b) 図１の部分的に揃った領域によって強磁性体の磁区構造をイメージすることができる。(c) 正方格子の場合は反強磁性となる[2)]。(d) 外部から磁石を近づけることで強磁性の場合（三角格子）は強く磁化され、反強磁性の場合 (正方格子）はほとんど磁化されないことが視覚的に確認できる[3)]。ステンレスは結晶構造の違いによって磁性が異なるが、この現象はその類推を与える。(e) 三角格子の場合、磁気ヒステリシスを確認できる[2)]。(f) 図２のようなデモンストレーションはキュリー点における強磁性-常磁性転移をイメージさせる。

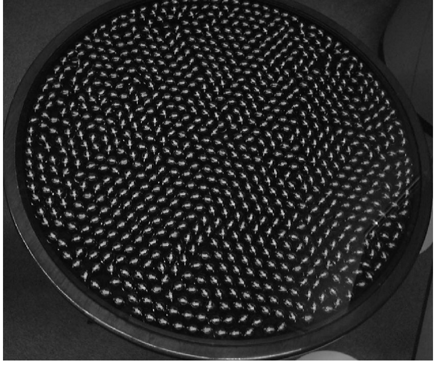
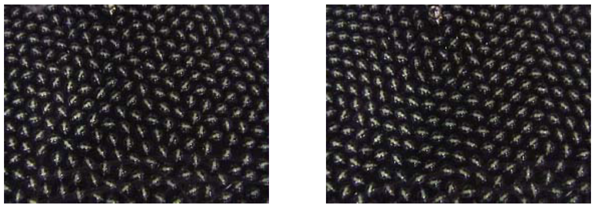


図 1. ２次元三角格子方位磁石結晶の展示。方位磁石の向きの揃った小集団が形成されている。いわゆる強磁性体の磁区をイメージさせる。



[1] [2]

図 2. 強磁性-常磁性転移のデモンストレーション。 [1] 磁石で外から方位磁石集団をかく乱すると、[2] しばらくすると各方位磁石が静止し磁区が生成される。前者を高温での常磁性状態、後者を低温での強磁性状態と対応付けた解説をしている。

このように、誰でもが知っている磁石同士の相互作用で実在の強磁性体を象徴するような現象を観察することができるのである。方位磁石結晶の教育的効果は極めて大きく、イラストなどによる図説との効果の違いは計り知れない。実在の鉄やニッケルなどの強磁性は量子論的な交換相互作用によるもので、巨視的な方位磁石結晶の現象とは質的に異なるけれども、方位磁石結晶が強磁性の教材として評価を得る所以である。また、現象自体が

非常に興味深いので、南部先生に代表されるように方位磁石結晶を訪ねてくる専門家は少なくない。ちなみに南部先生は2008年と2012年にこれを訪ねて来られた。

ところで、科学館での解説はしっかりとした裏付けを持って行われるべきである。交換相互作用のない方位磁石系がどのようにしてこれらの現象を示すのか、方位磁石系の磁性を調べる事は重要な課題であり、同時に展示の価値を高めるための大事な仕事である。

そこで、本稿では磁石の大きさを無視した2次元三角格子双極子結晶を近似モデルとして理論的な考察をする。構成子である方位磁石はカーアクセサリー用のもので、直径3cmのプラスチック容器に3mmのフェライト磁石が油に浮いて水平面内で自由に回転できるようにしたものである。磁石が小さいので双極子として近似してもよいであろう。ちなみに磁石が格子間隔程度の大きさになると強磁性は現れないようである。

2次元三角格子双極子結晶は無限系の場合、すべての双極子が同じ方向に揃うのが基底状態である。これは既に知られたことで[4)]、揃うという意味で強磁性である。交換相互作用による強磁性は主に最近接の原子磁石同士を同じ向きに揃えるものである。一方、双極子同士の相互作用は異方性が強く、最近接近似では強磁性を説明できない。つまり、長距離の効果を考慮しなければならないのである。このような双極子相互作用による強磁性はほとんど知られていないようである。それは、双極子相互作用は交換相互作用より3ケタ程度小さいので考慮する必要がないからであろう。西松毅先生の公開ソフトは有限系の双極子すべての相互作用を計算するもので[5)]、これを使えば、2次元三角格子双極子結晶は強磁性であること、そして、図1のような構造を確認することができる[2)]。実際の磁区構造は、原子磁石が全て同じ向きに揃うと大きな静磁エネルギーが固体表面に蓄積されるので、これを緩和するために形成される。有限双極子系の場合も同様である。したがって、図1の磁区に似た現象は次のように解釈することができる。双極子相互作用で磁気モーメントの向きが揃うが、系の縁の静磁エネルギーを緩和する作用により、全ての磁気モーメントが揃うことができず、部分的に揃う。ちなみに2次元正方格子の場合は反強磁性となることが知られていて[6)]、方位磁石系もその特徴を表す。この場合も西松ソフトで有限系の計算をすれば、正方格子の方位磁石系の現象が反強磁性であることが確認できる[2)]。

図2のような強磁性-常磁性転移をイメージさせる現象については、これまで理論的な吟味をしないままでいた。南部先生も生前、図1に対して「熱は?」との疑問を持たれたのであるが、図2のような現象をお見せしただけで、吟味することなく今日に至っている。2次元三角格子双極子結晶の磁性の熱的振る舞いを調べる事が、大阪市立科学館にとって重要な課題として残っているのである。

まず考えられるのが統計力学による考察である。文献7)ではランジュバン理論に基づくワイスの方法が論じられているが、これに三角格子双極子結晶の基底状態が強磁性であることを使えば、有限温度の磁性を論じる事が可能である。2章ではその議論を行い、強磁性-常磁性転移を得ている。転移温度は異なるものの、現実の強磁性体と同様の性質で、これまでの大阪市立科学館の解説を裏付けるものである。

しかし、統計力学は状態数を数え上げるという量子論的な操作を基礎としており、方位磁石集団のような純粋に古典的な対象の場合にその現象を記述できるかどうか疑問が生じる。じっさい、純粋に古典的な考察は高エネルギーで反磁性を導く。このことは次のような置き換えで簡単に理解できる。すなわち、磁場中の双極子の運動が剛体振り子の運動と等価なので、磁場の向きを重力の方向に、双極子の向きを剛体振り子の向きに対応させるのである。剛体振り子はエネルギーが小さい場合は単振動で近似され、振り子の向きはおおよそ重力の方向である。しかし、エネルギーが大きい場合、重力の向きにあるときは速く重力と逆向きのときは遅いので、運動を時間平均すると重力と逆向きになる。つまり、一様磁場中におかれた双極子はエネルギーが大きくなると時間平均が磁場と反対向きになるので、高温で反磁性という可能性が期待されるのである。

以降では、2次元三角格子双極子結晶の有限温度における磁性を次の2つの処方で求める。2章ではその一つの処方として、統計力学に従い、文献7)の議論のエッセンスを2次元三角格子双極子結晶に対して展開し、強磁性-常磁性転移を得る。3章では、もう一つの処方として、古典的運動を純粋に反映させることを目論んで、双極子の運動を時間平均しボルツマン係数をかけて熱平均をする。その結果、2章の帰結に反して強磁性-反磁性転移を得る。4章で両者の違いについて議論する。付録には2章の基礎となるランジュバン理論の考察を与える。

2. 統計力学による考察

文献7)では、常磁性体モデルであるランジュバンの理論をもとに強磁性が論じられている。本章では、この議論に沿って2次元三角格子双極子結晶の磁性を考察する。付録に示したように、ランジュバンの理論は統計力

学の手法に従ったものであり、カノニカル分布における位相空間の積分を角運動量に関して積分することで得られる。カノニカル分布は位相空間の状態数を数え上げることから導かれるもので、不確定性関係によってその意味が明確になる。したがって、本章で展開することは純粋に古典力学に依拠するものでないことに注意が必要である。

ランジュバンの理論は常磁性体を双極子の集合体とみなしたモデルで、双極子間の相互作用を無視し、各双極子が磁場 H となす角度が温度 T で θ となる確率をボルツマン係数

$$\exp\left(-\frac{U}{kT}\right) = \exp\left(\frac{mH}{kT}\cos\theta\right) \tag{1}$$

に比例するとしたものである。ここで、U は磁場 H の中に置かれた双極子のポテンシャルエネルギー、k はボルツマン定数、m は双極子モーメントの大きさである。

3 次元の場合、(1) をもとに常磁性体の磁化率が絶対温度の逆数に比例するというキュリーの法則が導かれる。さらにポテンシャルエネルギーに対して量子効果による離散化を考慮すると、低温における常磁性塩の磁化曲線が実験値とよく合ったものになる[7)]。このようにランジュバン理論は実験結果によってその正しさが裏付けされるのである。

本稿では、現実の磁性体を扱うのではなく、図 1、図 2 の 2 次元方位磁石結晶を考察するので、次のようにランジュバンの理論を 2 次元の場合に修正する。それは温度 T と磁場 H における各双極子の双極子モーメント m の熱平均を

$$\overline{m} = m\frac{\displaystyle\int_0^{\pi}\exp(mH\cos\theta/kT)\cos\theta d\theta}{\displaystyle\int_0^{\pi}\exp(mH\cos\theta/kT)d\theta} \tag{2}$$

としたもである。これを

$$\overline{m} = mL_{2D}(mH/kT) \tag{3}$$

と記す。高温あるいは弱い磁場に対して

$$\overline{m} \sim m\frac{mH}{2kT} \tag{4}$$

となり、2 次元の場合もキュリーの法則を与える。

ランジュバン理論は双極子間の相互作用を無視した常磁性体の理論であるが、文献 7) では各双極子に周囲の双極子による磁場

$$H_{in} = wI_m \tag{5}$$

が作用するとして、ランジュバン理論をもとにしたワイスによる強磁性論が紹介されている。ここで I_m は磁性体の磁化で、H_{in} がこれに比例するとするのである。現実の強磁性体の場合、(5) の係数 w は静磁気的に求めた場合よりけた違いに大きい。したがって、現実の強磁性体は静磁的な双極子相互作用では説明できないのであるが、本稿で議論するのは図 1、図 2 の 2 次元方位磁石結晶を理想化したものなので、愚直に静磁気的な相互作用を扱うこととし、ワイスの方法、すなわち平均場近似で 2 次元三角格子双極子結晶の強磁性を考察する。

三角格子双極子結晶の基底状態は全ての双極子が同方向に揃った状態で、その向きは任意である[2)4)]。したがって基底状態は原点に置いた双極子に作用する磁場が

$$\boldsymbol{H}_0 = \sum_i \frac{1}{4\pi\mu_0}\left(3\frac{(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{r}_i}{{r_i}^5} - \frac{\boldsymbol{m}}{{r_i}^3}\right) \tag{6}$$

で与えられる。ここで、$\boldsymbol{r}_i$ は原点を除いた各双極子 i の位置ベクトル、$\boldsymbol{m}$ は各双極子の双極子モーメントである。$\boldsymbol{H}_0$ と $\boldsymbol{m}$ は平行で、(6) の無限和は格子間隔を a とすると次のように有限値に収束する。

$$\boldsymbol{H}_0 = \frac{\alpha\boldsymbol{m}}{4\pi\mu_0 a^3}, \tag{7}$$

ここで、α は数値的に求める事が出来て、2 次元結晶の場合は 5.8 が得られる。無限系なので原点以外の格子点上の磁場も同じである。

このように基底状態では各双極子が自発磁場 $\boldsymbol{H_0}$ の向きに揃って静止するが、有限温度では各双極子がお互い相互作用しながら運動する。各双極子の双極子モーメントを $\boldsymbol{m}_i$ と書くと双極子 j に作用する磁場は

$$\boldsymbol{H_j} = \sum_{i\neq j} \frac{1}{4\pi\mu_0}\left(3\frac{(\boldsymbol{m}_i\cdot\boldsymbol{r}_{ij})\boldsymbol{r}_{ij}}{{r_{ij}}^5} - \frac{\boldsymbol{m}_i}{{r_{ij}}^3}\right) \tag{8}$$

である。ここで、$\boldsymbol{r}_{ij} = \boldsymbol{r}_i - \boldsymbol{r}_j$ である。このような磁場をもとに各双極子の運動を厳密に求めるのは絶望的なので平均場近似で系の熱的性質を調べる。

次が平均場近似による双極子結晶の自発磁場を求める処方である。まず、温度 T に対して自発磁場 $H_{in}(T)$ が決まると仮定し、各双極子がこの $H_{in}(T)$ の中で熱運動するとする。そして、各双極子の磁気モーメントをこの熱運動による平均化されたものとして自発磁場を求める。これが $H_{in}(T)$ に等しいと仮定し、これらの仮定で必要

とされる条件から自発磁場を求めるのが平均場近似である。

絶対 0 度近傍でこの状況を考察すれば物理的な意味がわかりやすいであろう。すなわち、絶対 0 度近傍の低温では各双極子の運動は非常に小さいので、自発磁場はほとんど $\boldsymbol{H}_0$ に等しいと考えられる。この非常に小さな運動はほとんど $\boldsymbol{H}_0$ に等しい自発磁場の中での運動である。双極子モーメントはこの小さな運動による平均化で僅かに減少するので、自発磁場も (7) にしたがって僅かに減少するはずである。このような状況は

$$\boldsymbol{H}_{in}(T) = \frac{\alpha \overline{\boldsymbol{m}}(T)}{4\pi\mu_0 a^3} \tag{9}$$

と表現することができる。ここで、$H_{in}(T)$ は温度 T で決まる自発磁場、$\overline{m}(T)$ は各双極子の双極子モーメントの熱平均である。$\overline{m}(T)/m$ は飽和磁化を単位とした磁化なので、本稿ではこれを磁化と呼ぶことにする。ちなみに、$H_{in}(0) = H_0$、$\overline{m}(0) = m$ である。また、このように温度 T では、自発磁場 $H_{in}(T)$ の中で各双極子が熱運動すると仮定するので、双極子の熱平均は (3) に $H = H_{in}(T)$ を代入した

$$\overline{m}(T) = mL_{2D}(mH_{in}(T)/kT) \tag{10}$$

が成立しなければならない。平均場近似は、任意の温度 T に対して、この 2 つの条件 (9) と (10) から決まる $\overline{m}(T)$ と $H_{in}(T)$ を解とするのである。じっさい、次のようにしてその解を求める事ができる。

$$x = mH_{in}(T)/kT \tag{11}$$

$$y = \overline{m}(T)/m \tag{12}$$

とおいて、(7) を使って (9)(10) を

$$y = \frac{kT}{mH_0}x \tag{13}$$

$$y = L_{2D}(x) \tag{14}$$

と書き換え、図 3 のようにそれぞれのグラフの交点を求めたらよい。ここで (14) のグラフは数値的に求めたものである。解析的には原点では傾きが 0.5 であり、x の増加とともに y の値は単純に増大し漸近的に 1 に収束することがわかる。さて、交点の値を (11)(12) に代入すれば、その温度での自発磁場と磁化が得られるのである。

このようにして得た温度に対する磁化曲線が図 4（左）である。原点は任意の温度で解となるが、文献 7) の 126 ページでは不安定と解釈されている。原点以外には低温の場合に解が存在するが、温度が増せば直線 (13) の傾き

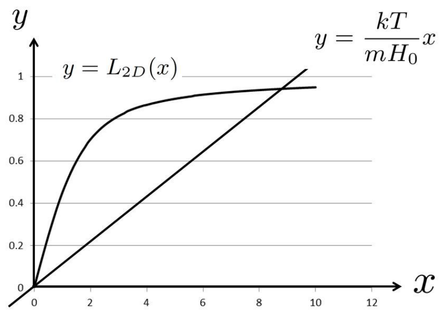


図 3. 平均場近似による解。交点が (11)(12) により自発磁場と双極子モーメントの熱平均を与える。

が増し、(14) の原点での傾きが 0.5 なので $kT/mH_0 = 0.5$ を越えると解がなくなるのである。この温度がキュリー点である *。

外磁場 H_{ex} がある場合は、各双極子が磁場

$$H = H_{in}(T) + H_{ex} \tag{15}$$

による作用で運動するので (10) に代わって、

$$\overline{m}(T) = mL_{2D}(m(H_{in}(T) + H_{ex})/kT) \tag{16}$$

が要求される。したがって、上の議論と同様に

$$y = L_{2D}(x + mH_{ex}/kT) \tag{17}$$

と (13) とのグラフの交点を求めたらよい。(17) のグラフは (14) のものを x 軸の負の方向に mH_{ex}/kT だけ平行移動したものなので外磁場 H_{ex} が 0 でなければ必ず交点が存在し、外磁場の方向へ磁化されることが分かる。ただし、キュリー点を越えると急激に磁化は小さくなる。外磁場が 0 でない限り任意の温度で外磁場の方向へ磁化される。次章で述べるような反磁性となることはない。$H_{ex}/H_0 = 0.01$ の場合をプロットしたのが図 4(右）である。

3. 時間平均による考察

第 1 章で述べたように双極子の古典的運動の時間平均は高エネルギーで反磁性になるので、前章と矛盾した結果を導く可能性がある。本章ではこの時間平均をもとに 2 次元双極子結晶の磁性を考察する。

磁場 $\boldsymbol{H}$ の中に置かれた双極子モーメント $\boldsymbol{m}$ の双極子

*実際の鉄結晶の物理量を使うと、すなわち m を鉄原子の双極子モーメント $2.1\mu_B$、a を鉄結晶の格子間隔 1.24Å とするとキュリー点は 4K となり、現実の鉄と比して 2 桁以上も低いことがわかる。実際の強磁性体内部での相互作用は静磁的な相互作用と比べて極めて強いことが示唆されるのである。

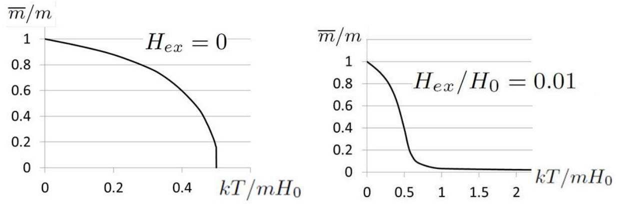


図 4. 統計力学による磁化曲線

は、次の運動方程式にしたがって振動あるいは回転運動を行う。

$$I\ddot{\theta} = -mH\sin\theta, \tag{18}$$

ここで、I は双極子の慣性モーメントである。振動が小さいときは $\sin\theta \approx \theta$ なので単振動で近似できるが、大きな振動や一方向への回転運動も扱うので (18) を基にしなければならない。この運動による双極子モーメントの時間平均

$$< m >= m < \cos\theta >= m\frac{\displaystyle\int \cos\theta(t)dt}{\displaystyle\int dt} \tag{19}$$

は次のようにして数値的に求めることができる。ここで、$< \cdots >$ は時間平均を意味する。(18) の両辺に $\dot{\theta}$ を掛けて時間積分すれば次のエネルギー保存則が得られる。

$$\frac{I}{2}\dot{\theta}^2 - mH(\cos\theta - 1) \quad = \epsilon \tag{20}$$

ここで ϵ は双極子の全エネルギーで、運動エネルギーの最大値である。(20) より

$$\dot{\theta} = \sqrt{\frac{2}{I}(mH(\cos\theta - 1) + \epsilon} \tag{21}$$

(21) を使って (19) の数値計算を行う。すなわち、(21) より

$$dt = \sqrt{\frac{I}{2mH}}\,\frac{d\theta}{\sqrt{\cos\theta - 1 + \epsilon/mH}} \tag{22}$$

なので、$< \cos\theta >$ は ϵ/mH の関数となり、

$$< \cos\theta >= f(\epsilon/mH) \tag{23}$$

と表すことができる。ここで、

$$f(x) \equiv \frac{\displaystyle\int_0^{\theta_{Max}} \frac{\cos\theta d\theta}{\sqrt{\cos\theta - 1 + x}}}{\displaystyle\int_0^{\theta_{Max}} \frac{d\theta}{\sqrt{\cos\theta - 1 + x}}}, \tag{24}$$

$$\theta_{Max} \equiv \begin{cases} \arccos(1 - \epsilon/mH) & (\epsilon/mH \le 2) \\ \pi & (\epsilon/mH \ge 2) \end{cases}$$

数値計算した結果が図5である。$\epsilon/mH < 1.65$ で $< \cos\theta >$ は正、すなわち双極子の時間平均は磁場の方向を向き、$\epsilon/mH > 1.65$ で $< \cos\theta >$ は負、すなわち磁場と反対を向く。$\epsilon/mH = 2$ は磁場と反対方向を向いて静止する状態で、それ以上では一方向への回転運動となる。また、$\epsilon \gg mH$ の場合はほとんど磁場の影響を受けることなく自由に回転するので、

$$< \cos\theta > \sim -\frac{mH}{4\epsilon} \tag{25}$$

となる。

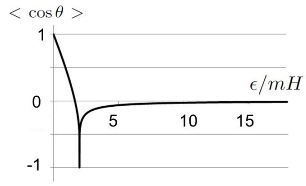


図 5. $\cos\theta$ 単位モーメント当たりの双極子モーメントの時間平均

さて、双極子モーメントの温度依存性を (1) と同じように仮定して考察する。すなわち双極子の全エネルギー ϵ が温度 T で実現する確率がボルツマン係数 $e^{-\epsilon/kT}$ に比例すると仮定する。回転運動が 2 方向あることを考慮して (23) より

$$\begin{aligned} \overline{m} &= \frac{m}{N}\Big(\int_0^{2mH} f(\epsilon/mH)\exp(-\epsilon/kT)d\epsilon \\ &+ 2\int_{2mH}^{\infty} f(\epsilon/mH)\exp(-\epsilon/kT)d\epsilon\Big) \end{aligned} \tag{26}$$

ここで N は規格化定数

$$\begin{aligned} N &\equiv \int_0^{2mH} \exp(-\epsilon/kT)d\epsilon + 2\int_{2mH}^{\infty} \exp(-\epsilon/kT)d\epsilon \\ &= kT(1 + \exp(-2mH/kT)) \end{aligned} \tag{27}$$

である。このように温度をパラメーターにして議論する場合、ボルツマン係数 $e^{-\epsilon/kT}$ がしばしば使われるが、次章で議論するようにこれには注意が必要である。

関数 $L_R(x)$ を

$$\begin{aligned} L_R(x) &\equiv \frac{x}{1 + e^{-2x}}\Big(\int_0^2 f(\xi)\exp(-x\xi)d\xi \\ &+ 2\int_2^{\infty} f(\xi)\exp(-x\xi)d\xi\Big) \end{aligned} \tag{28}$$

で定義すれば (26) は

$$\overline{m} = m\overline{\cos\theta} = mL_R(mH/kT) \tag{29}$$

となる。数値積分したのが図 6 で、その特徴を描いたの

が図7である。図6の破線は2次元ランジュヴァン理論 (3) によるもので比較のために重ねて描かれている。$L_R(x)$ は $x < 0.14$ で負となり $L_{2D}(x)$ と逆符号になる。これが以降で反磁性に寄与するのである。$x > 3.2$ を超えると両者の差は1%以下になり、$x \gg 1$ で漸近的に一致する。

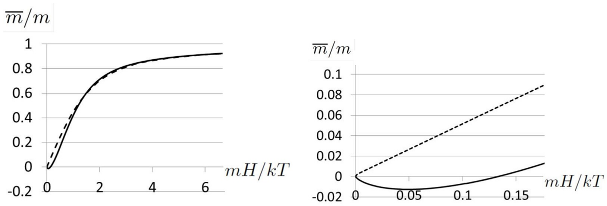


図 6. 双極子の磁化曲線

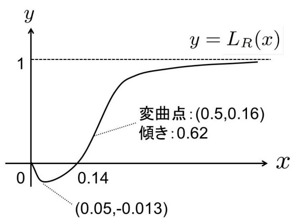


図 7. $y = L_R(x)$ の特徴

多体系であっても、外磁場が十分強い場合は双極子同士の相互作用が無視できるので、強磁性-反磁性転移のあることが分かる。以降はこれが無視できない場合を前章と同じ方法、平均場近似で議論する。すなわち、(10)〜(17) で、L_{2D} を L_R と置き換えて、各温度に対して図8のように2つのグラフの交点を求める。

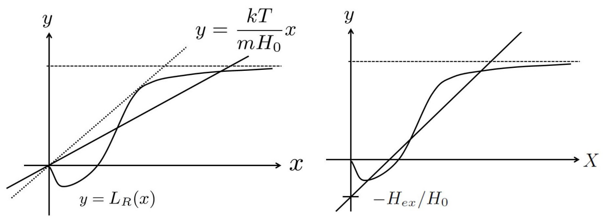


図 8. 交点が平均場近似の解を与える。

外磁場がない場合は図8（左）のように (13) と

$$y = L_R(x) \tag{30}$$

とのグラフの交点を求めたらよい。$kT/mH_0 < 0.49$ では実線で示したように解が3つ、$kT/mH_0 = 0.49$ では点線で示したようにこの2つのグラフが接して解は2つ、$kT/mH_0 > 0.49$ では原点のみが解となる。原点は任意の温度に対して磁化が0となる解である。外磁場がある場合は

$$\overline{m}(T) = mL_R(m(H_{in}(T) + H_{ex})/kT) \tag{31}$$

となるので、(13) と

$$y = L_R(x + mH_{ex}/kT) \tag{32}$$

との交点を求めたらよい。(32) は (30) を mH_{ex}/kT だけ x 軸の負の方向へ平行移動したものであるが、

$$X = x + mH_{ex}/kT \tag{33}$$

と変数変換し、(13) と (30) を次のように書き換えると図8（右）のように解が見やすくなる。

$$y = \frac{kT}{mH_0}X - \frac{H_{ex}}{H_0} \tag{34}$$

$$y = L_R(X) \tag{35}$$

これらをプロットした磁化曲線は外磁場の増加に伴い図9から図12のように変化する。図8(右）から分かるように温度と外磁場に対して一般には3つの交点が存在する。この3つの交点に対して磁化曲線は磁化が、絶対0度から温度が増すとともに飽和磁化から減じるA解、温度とともに上昇するB解、高温で負になるC解の3つに分類される。図9から図11において、磁化曲線の実線、点線、破線がそれぞれA解、B解、C解を示している。

これら3つの解の H_{ex} の変化に伴う特徴的な変化は図7と図8(右）から直線の傾きと y 切片を変化させることで簡単に考察できる。そのほとんどが次のとおりである。すなわち、A解とB解は、$H_{ex} = 0$ の場合、$kT/mH_0 \leqq 0.42$ で存在し、(0.42,0.46) を共有し、$kT/mH_0 > 0.42$ ではこれらの2つの解は存在しない。外磁場の増加とともにこの共有解は図9〜図11で見るように右下方向へ移動し、$H_{ex}/H_0 = 0.15$ で (0.62,0.16) となり、$H_{ex}/H_0 > 0.15$ でB解は存在しなくなる。B解とC解の共有解は、$H_{ex}/H_0 < 0.013$ の場合 $(0, -H_{ex}/H_0)$ と下方へ移動し、$0.013 < H_{ex}/H_0 < 0.15$ では H_{ex} の増加とともに右上方向へ移動する。$H_{ex}/H_0 = 0.15$ で3つの解が (0.62,0.16) で共有し、ここでA解とC解が接続する。$H_{ex}/H_0 > 0.15$ でB解は存在せず、A解とC解の区別ができなくなる。磁化曲線は図12のように絶対0度での飽和磁化が温度とともに減少し、磁化が最小値を -0.013 とった後は漸近的に0に近づく。いずれにせよ任意の外磁場に対して十分高温ならば反磁性となる。

ここで3つの解について定性的な考察を行う。A解は、絶対0度の飽和磁化の状態、すなわち双極子の向きが全

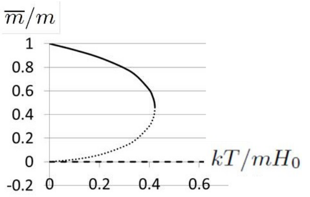


図 9. 時間平均による磁化曲線 ($H_{ex} = 0$)

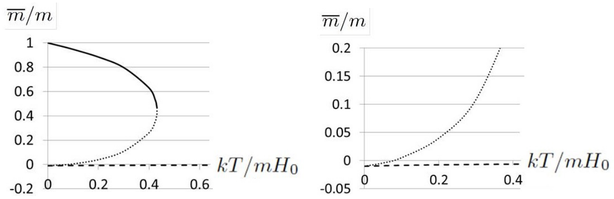


図 10. 時間平均による磁化曲線（$H_{ex} = 0.01H_0$）

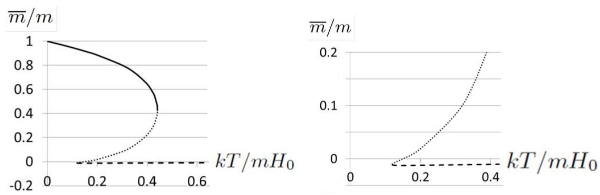


図 11. 時間平均による磁化曲線（$H_{ex} = 0.02H_0$）

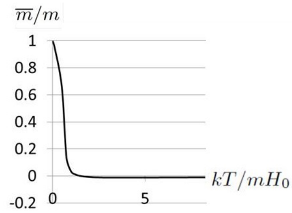


図 12. 時間平均による磁化曲線（$H_{ex} = 0.2H_0$）

て同方向に揃って静止した状態から温度が増すとともに双極子の熱運動で磁化が小さくなり強磁性が弱まるという常識的な状況を反映したものと考えられる。B 解と C 解の原点近傍、すなわち絶対 0 度近傍で外磁場が弱い場合は、各双極子が外磁場をほとんど打ち消しながら非常に低速で運動している状態であり、実現するのは極めて困難のように思われる。C 解の高温極限は、各双極子の熱運動が激しいので、それぞれの生じる磁場は打ち消し合い、各双極子は外磁場だけによる熱運動に近づくと考えられる。したがって、これは (29) の高温極限にほとんど等しいものであろう。強い外磁場の場合は、双極子同士の相互作用が無視できるので磁化曲線は (29) から直接図 12 のようになることが理解できるであろう。文献 7) の 126 ページには解の安定性の議論が与えられているが、これに従うと A 解と C 解が安定で B 解が不安定となる。しかし、上述のように C 解の低温で弱外磁場の場合の安定性を理解するのは困難である。

4. まとめ

大阪市立科学館に展示されている方位磁石集団の解説を確実なものにするため、2 次元三角格子双極子結晶の有限温度での磁性について 2 つの方法による考察を試みた。一つはランジュバン理論に基づくもので、もう一つは双極子の運動の時間平均によるものである。前者の場合は通常の強磁性体のように強磁性-常磁性転移が示された。後者の場合は、低温では強磁性、高温では反磁性となるのが安定と考えられる。次に議論するように、どちらが正しいか結論するのは困難である。

ランジュバン理論は付録で示したように、統計力学における位相空間の積分で角運動量積分を実行することで導かれる。すなわち、ランジュバン理論に基づく 2 章の計算結果は統計力学における正当な計算である。しかし、位相空間による積分は状態数の数え上げに対応するもので、量子力学における不確定性関係により意味づけすることができる。古典統計力学は量子統計力学の古典的極限、すなわちプランク定数を 0 に近づける極限で定式化できるのである。本稿のそもそもの目的は量子力学が対象とする分子集団による磁性ではなく、方位磁石集団の磁性を知ることであり、巨視的な磁石を対象としている。したがって、量子力学に依拠した統計力学で得られた結論には疑念が生じる。エルゴード仮説により古典的扱いを正当化する立場もあるが、それは今日では的を外した議論とされている[8]。

時間平均による方法は、(26) で仮定したように時間平均した物理量にボルツマン係数をかけることで熱平均が得られるとしたものである。しかし、そもそも熱平均とはカノニカル分布によって系の物理量を平均するもので、(26) はこの物理量ではなく時間平均したものをさらに平均していることに注意が必要である。付録に与えた (41) はカノニカル分布の積分変数を変換したもので、(26) と似た表現である。これが古典的運動の時間依存を陽にした場合のボルツマン係数の正当な扱いである。時間平均による方法は、統計力学の処方を慣例的に拡大使用したのであって、根拠が不明である。また、ボルツマン係数は熱浴およびそれと熱平衡にある小さな系、対象とする系とを合わせた全系の状態数を数え上げることから導出される。すなわち対象とする系、今の場合は古典的な双極子系の状態数を数え上げる必要がある。これは統計力学による処方で述べたように量子力学によって意味づけられるものである。

以上のように、統計力学による処方も、時間平均によ

る処方も理論的に厳格なものではない。しかし、考察するための理論がない場合は上記のように飛躍した議論を避けることができない。実験事実がその正否を決めるのである。飛躍した議論が新しい発見につながることが多々存在し、例えば、古典電磁気学から飛躍したボーア仮説など、多くの歴史的発見はそのようなものである。もし、古典的な双極子系が実際に存在すれば、本稿の議論は現実的なものになるかもしれない。

ただし、図5から「低エネルギーで強磁性、高エネルギーで反磁性」は確かなことであろう。本物の方位磁石集団でこれを確認するのは非常に困難であるが、まずは高速回転する磁石が反磁性であることを確認したいと試みているところである。

以上のような結論を背景に、方位磁石集団を用いて強磁性の普及に努めているところである。

南部陽一郎先生には自発的対称性の破れが表れる方位磁石結晶の普及に、何度も励ましていただいた。本稿で行った考察のきっかけも南部先生の質問からである。亡き南部先生にこの場を借りて厚く御礼申し上げる。草稿を読んでいただき、また改訂時にも貴重なコメントをいただいた高橋憲明先生に御礼申し上げる。

付録

ここでは2次元ランジュバンの理論 (2) の意味を考察する。(2) は統計力学におけるカノニカル分布

$$\overline{m} = m\frac{\displaystyle\int_0^\pi d\theta \int dp_\theta \cos\theta \exp\Big(-\frac{\epsilon}{kT}\Big)}{\displaystyle\int_0^\pi d\theta \int dp_\theta \exp\Big(-\frac{\epsilon}{kT}\Big)} \tag{36}$$

を仮定し、p_θ について積分することで得られる。ここで p_θ は θ に対する角運動量

$$p_\theta \quad = \quad I\dot{\theta} \tag{37}$$

で、ϵ は外磁場 H に置かれた双極子の全エネルギー

$$\epsilon = \frac{{p_\theta}^2}{2I} + mH(1-\cos\theta) \tag{38}$$

である。このような位相空間での積分は、不確定性関係で状態数の数え上げに対応させることができるもので、双極子という純粋に古典的な運動だけに根拠を持つものではない。

(36) の位相空間での積分を、全エネルギー ϵ が一定とした θ に関する周回積分と ϵ による積分に変換すると

$$\overline{m} = m\frac{\displaystyle\oint_\epsilon d\theta \int d\epsilon \frac{I}{p_\theta}\cos\theta \exp\Big(-\frac{\epsilon}{kT}\Big)}{\displaystyle\oint_\epsilon d\theta \int d\epsilon \frac{I}{p_\theta} \exp\Big(-\frac{\epsilon}{kT}\Big)} \tag{39}$$

となる。(37) より

$$d\theta\frac{I}{p_\theta} = \frac{d\theta}{\dot{\theta}} = dt \tag{40}$$

となるので、

$$\overline{m} = m\frac{\displaystyle\oint_\epsilon dt \int d\epsilon \cos\theta(\epsilon, t) \exp\Big(-\frac{\epsilon}{kT}\Big)}{\displaystyle\oint_\epsilon dt \int d\epsilon \exp\Big(-\frac{\epsilon}{kT}\Big)} \tag{41}$$

となる。時間平均によって熱平均を仮定した (26) とカノニカル分布による (41) が似た形であることが分かる。しかし、規格化の方法が根本的に異なるので、全く違う結果を与えるのである。

量子力学的には (41) の ϵ による積分はエネルギー固有状態に関する足し算を意味する。固有状態に対応する周期が意味を持たないとして時間積分を無視すると

$$\overline{m} = m\frac{\displaystyle\sum_i < \cos\theta >_i \exp\Big(-\frac{\epsilon_i}{kT}\Big)}{\displaystyle\sum_i \exp\Big(-\frac{\epsilon_i}{kT}\Big)} \tag{42}$$

が得られる。ここで $< \cdots >_i$ は固有状態 i に対する期待値である。これは量子統計力学の熱平均そのもので、位相空間での積分が量子力学的なものであることが裏付けられる。

このようにランジュバン理論は統計力学によって演繹されるものである。3次元の場合も少々複雑になるが、2次元の場合と同様の方法で導くことができる。

参考文献

1) 斎藤吉彦：物理教育**53**(2005) 103-108
2) 斎藤吉彦，西松毅：近畿の物理教育**14** (2008) 2-7
3) 斎藤吉彦，他：大阪市立科学館ミニブック「結晶」(2014)
4) V.M. Rozenbaum, V.M. Ogenko, and A. A. Chuiko : Sov.Phys.Usp. 34(1991) 883
5) 西松毅：http://loto.sourceforge.net/compasses/
6) K. De'Bell, A.B.MacIsaac, I.N. Booth, and J. P. Whitehead Phys. Rev.B 55 15108 (1997)
7) 近角聡信：強磁性体の物理　裳華房(1978)
8) 田崎晴明：統計力学 1　倍風館(2014)