

方位磁石結晶の有限温度における磁性

斎藤 吉彦 大阪市立科学館 中之島科学研究所

2次元三角格子方位磁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-常磁性転移を導くが、これは直感的に期待される強磁性-反磁性転移に反する結果である。後者は直感的に期待される強磁性-反磁性転移を導く。前者は純粋に古典力学的な原理だけによるものではなく量子論的な原理に依拠するものであり、後者は古典力学的原理の徹底を試みるが論理の飛躍を含む議論である。古典的対象である方位磁石結晶の扱いに明確な原理はないと考えられる。

1. はじめに

著者は方位磁石を用いて強磁性を示す教具を考案した¹⁾²⁾。これは方位磁石を構成子とする2次元三角格子結晶で、強磁性体の可視的モデルとして大阪市立科学館で展示している(図1)。そして、この展示を使って強磁性体の強磁性-常磁性転移についての解説も行なっている(図2)。本稿では磁石の大きさを無視した双極子結晶を近似モデルとして考察する。

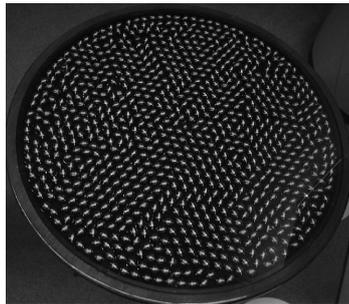


図1. 2次元三角格子方位磁石結晶の展示。方位磁石の向きの揃った小集団が形成されている。いわゆる強磁性体の磁区が確認できる。

三角格子双極子結晶の基底状態は強磁性である。このことは既に知られたことであり³⁾、著者達も同じ結論を得ている²⁾。一方で、強磁性-常磁性転移などの有限温度での振る舞いについては、これまで調査しないままだった。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、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は大阪市立科学館にとって重要な課題であり、同時に展示の価値を高めるための大事な仕事である。

まず考えられるのが統計力学による考察である。文献4)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

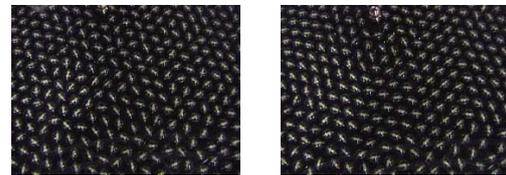


図2. 強磁性-常磁性転移のデモンストレーション。[1] 磁石で外から方位磁石集団をかく乱すると、[2] しばらくすると各方位磁石が静止し磁区が生成される。前者を高温での常磁性状態、後者を低温での強磁性状態と対応付けた解説をしている。

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。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で正当化されることを基礎的としており、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。じつさい、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、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ことで容易に理解できる。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磁場と反対向き、高温で反磁性ということが直感的に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つの処方方で求める。2章ではその一つの処方方として、統計力学に従い、文献4)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

“Finite Temperature Magnetism of a Magnetic Compass Crystal” Yoshihiko Saito

数をかけて熱平均することで、2章の結果に反して直感的に期待される強磁性-反磁性転移を得る。4章で両者の違いについて議論する。

2. 統計力学による考察

文献4)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。文献5)で示したように、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、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正当化される。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

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

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。

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

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

としたものである。これを

$$\bar{m} = mL_{2D}(mH/kT) \quad (3)$$

と記す。

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⁾³⁾。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

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

で与えられる。ここで、 \mathbf{r}_i は原点を除いた各双極子 i の位置ベクトル、 \mathbf{m} は各双極子の双極子モーメントである。 \mathbf{H}_0 と \mathbf{m} は平行で、(4)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。

$$\mathbf{H}_0 = \frac{\alpha \mu_0 \mathbf{m}}{4\pi a^3}, \quad (5)$$

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 \mathbf{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 \mathbf{m}_i と書くとして双極子 j に作用する磁場は

$$\mathbf{H}_j = \sum_{i \neq j} \frac{\mu_0}{4\pi} \left(3 \frac{(\mathbf{m}_i \cdot \mathbf{r}_{i,j}) \mathbf{r}_{i,j}}{r_{i,j}^5} - \frac{\mathbf{m}_i}{r_{i,j}^3} \right) \quad (6)$$

である。ここで、 $\mathbf{r}_{i,j} = \mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j$ 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次に示す平均場近似で双極子結晶の自発磁場を求める。

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。

このような状況は(5)より

$$\mathbf{H}_{in}(T) = \frac{\alpha \mu_0 \bar{\mathbf{m}}(T)}{4\pi a^3} \quad (7)$$

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、 $\bar{\mathbf{m}}(T)$ は各双極子の双極子モーメントの熱平均である。 $\bar{\mathbf{m}}(T)/m$ は飽和磁化を単位とした磁化なので、これを磁化と呼ぶことにする。ちなみに、 $H_{in}(0) = H_0$ 、 $\bar{\mathbf{m}}(0) = m$ 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

$$\bar{\mathbf{m}}(T) = mL_{2D}(mH_{in}(T)/kT) \quad (8)$$

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(7)と(8)から決まる $\bar{\mathbf{m}}(T)$ と $H_{in}(T)$ を解とするのである。

この条件から得た温度に対する磁化曲線が図3(左)である。 $kT/mH_0 = 0.5$ を越えると解がない。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

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_{in}(T) + \mathbf{H}_{ex} \quad (9)$$

による作用で運動するので(8)に代わって、

$$\bar{\mathbf{m}}(T) = mL_{2D}(m(H_{in}(T) + H_{ex})/kT) \quad (10)$$

が要求される。外磁場 H_{ex} が0でなければ必ず解が存在し、外磁場の方向へ磁化されるのである。ただし、キュリー点を越えると急激に磁化は小さくなる。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3(右)である。

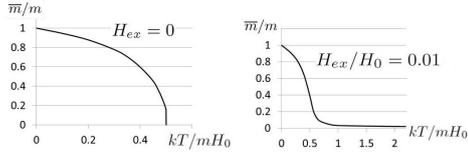


図 3. 統計力学による磁化曲線

3. 時間平均による考察

前章の結果に反して、第 1 章で述べたように古典的運動の時間平均による考察から双極子は高温で反磁性になることが予想される。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 \mathbf{H} の中に置かれた双極子モーメント \mathbf{m} の双極子のエネルギー保存則は

$$\epsilon = \frac{I}{2}\dot{\theta}^2 - mH(\cos\theta - 1) \quad (11)$$

である。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、 I は双極子の慣性モーメントである。この運動による双極子モーメントの時間平均

$$\langle m \rangle = m \langle \cos\theta \rangle = m \frac{\int \cos\theta(t) dt}{\int dt} \quad (12)$$

は数値的に求めることができる。 $\langle \dots \rangle$ は時間平均を意味し、

$$\langle \cos\theta \rangle = f(\epsilon/mH) \quad (13)$$

と表すことができる。数値計算した結果が図 4 である。

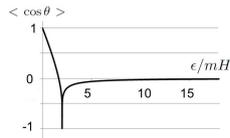


図 4. 単位モーメント当たりの双極子モーメントの時間平均

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 (13) より

$$\begin{aligned} \bar{m} &= \frac{m}{N} \left(\int_0^{2mH} f(\epsilon/mH) \exp(-\epsilon/kT) d\epsilon \right. \\ &\quad \left. + 2 \int_{2mH}^{\infty} f(\epsilon/mH) \exp(-\epsilon/kT) d\epsilon \right) \quad (14) \end{aligned}$$

ここで N は規格化定数

$$N = kT(1 + \exp(-2mH/kT)) \quad (15)$$

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

$$\begin{aligned} L_R(x) &\equiv \frac{x}{1 + e^{-2x}} \left(\int_0^2 f(\xi) \exp(-x\xi) d\xi \right. \\ &\quad \left. + 2 \int_2^{\infty} f(\xi) \exp(-x\xi) d\xi \right) \quad (16) \end{aligned}$$

で定義すれば (14) は

$$\bar{m} = m \overline{\cos\theta} = mL_R(mH/kT) \quad (17)$$

となる。数値積分したのが図 5 で、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。

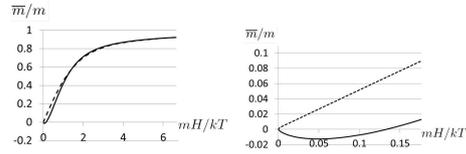


図 5. 双極子の磁化曲線

この場合も、前章と同じ方法、平均場近似で議論することができる。 L_{2D} を L_R と置き換えたらいのである。すなわち、(7) と

$$\bar{m}(T) = mL_R(m(H_{in}(T) + H_{ex})/kT) \quad (18)$$

とから、図 6 から図 9 のように外磁場の増加に伴って変化する磁化曲線が求まる。温度と外磁場に対して一般には 3 つの解があり、それらは磁化が、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 6 から図 8 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。

$H_{ex}/H_0 > 0.15$ 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 9 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 -0.013 とつた後は漸近的に 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。

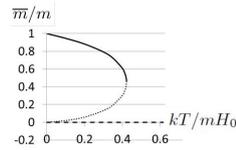


図 6. 時間平均による磁化曲線 ($H_{ex} = 0$)

文献 4) 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

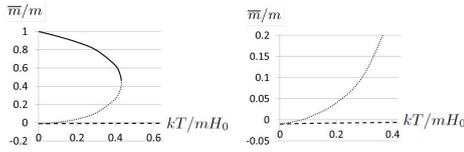


図 7. 時間平均による磁化曲線 ($H_{ex} = 0.01H_0$)

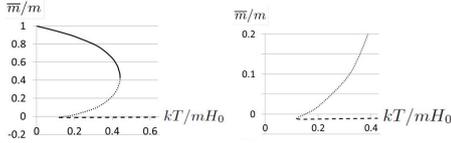


図 8. 時間平均による磁化曲線 ($H_{ex} = 0.02H_0$)

解が安定で B 解が不安定となる。しかし、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。

文献 5) で示したように、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が、それは状態数の数え上げに対応する位相空間による積分により得られるものである。これは量子力学における不確定性関係により正当化されるのである。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、純粋に古典力学が対象とするものである。したがって、量子力学に依拠した統計力学で記述できるかどうかは疑わしい。高温で反磁性という直感的な考察とも矛盾するので、疑念がさらに深まるのである。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⁶⁾。

時間平均による方法は、(14) 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。これは次に述べるように論理的に飛躍のある計算である。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与えるもので、系のあるエネルギーが実現する確率はそのエネルギーの固有状態の数にボルツマン係数をかけたものに比例することに基づくものである。これは熱浴およびそれと熱平衡にある小さな

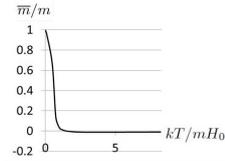


図 9. 時間平均による磁化曲線 ($H_{ex} = 0.2H_0$)

系とを合わせた全系に対して等重率の原理とエネルギー保存則から導かれるもので、全系の状態数を数え上げることと温度の定義から演繹される⁷⁾。そして、温度の定義は

$$\frac{\partial S(E)}{\partial E} = \frac{1}{T} \quad (19)$$

で与えられる。ここで $S(E)$ は熱浴のエントロピーで、エネルギー E で決まる状態数の対数で与えられる。温度も量子力学的なもののようなものである。したがって、3章で用いた時間平均による方法は統計力学の法則を慣例的に使用したもので、根拠が乏しいと思われる。

しかし、考察するための理論がない場合は飛躍した議論を避けることができない。そして飛躍した議論が新しい発見につながるが多々存在し、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。ただし、どのような飛躍をしているのか、検討しておくことは必要であろう。

以上のことから、方位磁石集団の磁性に対して温度依存性を厳格に議論することはできそうにないが、図 4 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。

温度依存性を考察するには、そもそも古典的な系に対して温度をいかに定義するか、これが問題であると考えられる。

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。また、本研究をまとめるにあたり、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。

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) V.M. Rozenbaum, V.M. Ogenko, and A. A. Chuiko : Sov.Phys.Usp. 34(1991) 883
- 4) 近角聡信: 強磁性体の物理 裳華房(1978)
- 5) 斎藤吉彦: 物理教育に投稿中 (2015年9月1日)
- 6) 田崎晴明: 統計力学 1 倍風館(2014)
- 7) 鈴木増雄: 統計力学 岩波書店(1994)