有限温度における双極子結晶の磁性

斎藤 吉彦 *

概要

2次元三角格子双極子結晶の磁性の温度依存性を平均場近似で与える。外磁場のない場合は強磁性相が2つあり、ある温度で自発磁場が消失する。有限の外磁場では、十分高温で反磁性となり、温度の増加とともに漸近的に反磁性が消失する。外磁場が弱い場合には絶対0度近傍であっても強磁性相以外に2つの反磁性相が存在するなど、外磁場の強さによって磁性は多様である。

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公開している。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。三角格子双極子結晶の基底状態が強磁性であることは知られているが[3)]、有限温度での振る舞いは未調査のままであった。これを調べた上で上記の転移を解説するのが科学館としての責務である。

そこで、2次元三角格子双極子結晶の有限温度における磁性について、平均場近似で数値計算を行なった。その結果、実在の強磁性体がキュリー温度で強磁性から常磁性へ相転移するのとは異なって、2次元三角格子双極子結晶は強磁性から反磁性へ転移することが分かった。また、外磁場の強さによって、多くて3つの相を示すなど多様な振る舞いが見られた。例えば絶対0度の近傍では、外磁場が弱ければ強磁性相以外に2つの反磁性相が存在する。

以下では、第2章で外磁場中での1個の双極子の振る舞いを考察し、これを基に自発磁化が生じる場合の計算結果を第3章以下で与える。すなわち、第3章で外磁場が0の場合を、第4章では外磁場が与えられた場合を、それぞれ有限温度下での磁性を平均場近似で与える。

なお、磁気双極子の運動を2次元結晶面内の運動として扱い、3次元的な議論は別の機会に行うこととする。

*大阪市立科学館 中之島科学研究所

2. 有限温度での磁気双極子の磁性

一様磁場 $\boldsymbol{H}$ の中に置かれた双極子モーメント $\boldsymbol{m}$ の磁気双極子は、次の運動方程式に従って振動あるいは回転運動を行う。

$$I\ddot{\theta} = -mH\sin\theta, \tag{1}$$

ここで、I は磁気双極子の慣性モーメント、θ は $\boldsymbol{H}$ と $\boldsymbol{m}$ がなす角の大きさである。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 (1) を基にしなければならない。この運動による磁気双極子モーメントの時間平均

$$\overline{m} = m\overline{\cos\theta} = m\frac{\displaystyle\int \cos\theta(t)dt}{\displaystyle\int dt} \tag{2}$$

は次のようにして数値的に求めることができる。ここで、$\overline{\cdots}$ は時間平均を意味する。(1) の両辺に $\dot{\theta}$ を掛けて時間積分すれば、

$$\frac{I}{2}\dot{\theta}^2 = mH(\cos\theta - 1) + \epsilon \tag{3}$$

ここで ϵ は磁気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。(3) より、

$$\dot{\theta} = \sqrt{\frac{2}{I}(mH(\cos\theta - 1) + \epsilon} \tag{4}$$

(4) を使って (2) の数値計算を行う。すなわち、(4) より

$$dt = \sqrt{\frac{I}{2mH}}\,\frac{d\theta}{\sqrt{\cos\theta - 1 + \epsilon/mH}} \tag{5}$$

なので、$\overline{\cos\theta}$ は ϵ/mH の関数となり、

$$\overline{\cos\theta} = f(\epsilon/mH) \tag{6}$$

と表すことができる。ここで、

$$f(x) \equiv \frac{\displaystyle\int_0^{\theta_{Max}} \frac{\cos\theta d\theta}{\sqrt{\cos\theta - 1 + x}}}{\displaystyle\int_0^{\theta_{Max}} \frac{d\theta}{\sqrt{\cos\theta - 1 + x}}}, \tag{7}$$

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

$\overline{\cos\theta}$ は磁気双極子モーメントの時間平均による減少率を表すもので、以下ではこのような量を「双極子率」と呼ぶことにする。数値計算した結果が Fig.1 で、$\epsilon/mH < 1.65$ で、磁気双極子の時間平均は磁場の方向を向き、$\epsilon/mH > 1.65$ で磁場と反対を向く。$\epsilon/mH = 2$ 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、$\epsilon \gg mH$ の場合はほとんど自由な回転運動になるので、双極子率は

$$\overline{\cos\theta} \sim \frac{mH}{4\epsilon} \tag{8}$$

となる。

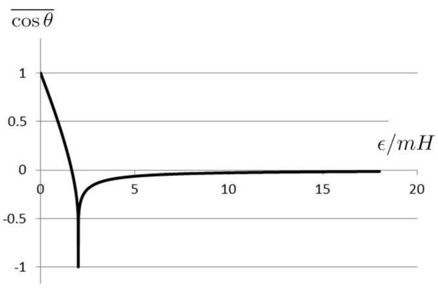


Fig.1　時間平均による双極子率

さて、磁気双極子モーメントの温度依存性はボルツマン分布を仮定すると (6) より

$$< m >= \frac{m}{kT}\int_0^{\infty} f(\epsilon/mH)\exp(-\epsilon/kT)d\epsilon \tag{9}$$

ここで、k はボルツマン定数で、$< \cdots >$ は熱平均を意味する。関数 $L(x)$ を

$$L(x) \equiv x\int_0^{\infty} f(\xi)\exp(-x\xi)d\xi \tag{10}$$

で定義すれば (9) は

$$< m >= m < \cos\theta >= mL(mH/kT) \tag{11}$$

となる。数値積分したのが Fig.2 で、下図に表したように原点近傍で双極子率がわずかに負の値をとり、$mH/kT < 0.026$ で反磁性となり、$mH/kT = 0.01$ で双極子率が最小値 $< \cos\theta >= -0.0025$ となる。この関数の特徴を描いたのが Fig.3 である。

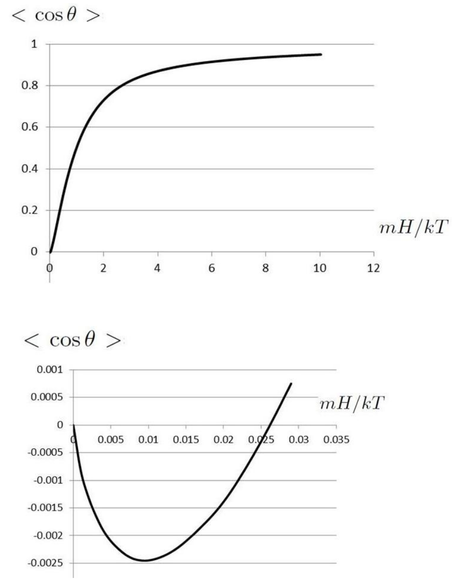


Fig.2　磁気双極子単体のボルツマン分布による双極子率

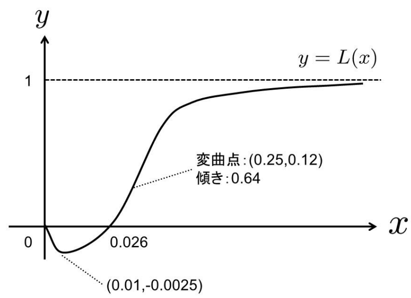


Fig.3　$y = L(x)$

多体系であっても、外磁場が十分強い場合は磁気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。自発磁化は磁気双極子同士の相互作用によるもので、以降はこの自発磁化の無視できない場合の計算結果を与える。

3. 自発磁化

2 次元三角格子の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あることが知られている[3]。したがって、原点に置いた磁気双極子に作用する磁場は、基底状態の時、

$$\boldsymbol{H}_0 = \sum_i \frac{\mu_0}{4\pi}\left(3\frac{(\boldsymbol{m}\cdot\boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{r}_i}{{r_i}^5} - \frac{\boldsymbol{m}}{{r_i}^3}\right) \tag{12}$$

で与えられる。ここで、$\boldsymbol{r}_i$ は原点を除いた各双極子 i の位置ベクトルである。格子間隔を a とすると、(12) の無限和は次のように有限値に収束する。

$$\boldsymbol{H}_0 = \frac{\alpha\mu_0\boldsymbol{m}}{4\pi a^3}, \tag{13}$$

ここで、$\alpha = 5.8$ である。無限系なので他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 $\boldsymbol{m}_i$ と書くと原点の双極子に作用する磁場は

$$\boldsymbol{H} = \sum_i \frac{\mu_0}{4\pi}\left(3\frac{(\boldsymbol{m}_i\cdot\boldsymbol{r}_i)\boldsymbol{r}_i}{{r_i}^5} - \frac{\boldsymbol{m}_i}{{r_i}^3}\right) \tag{14}$$

である。このような磁場をもとに各双極子の運動は (1) によって決まるが、それを厳密に求めるのは絶望的なので次のような平均場近似で系の熱的性質を調べる。

各双極子は系の温度 T で決まる自発磁場 $H_{in}(T)$ の作用で運動すると仮定する。ちなみに、$H_{in}(0) = H_0$ である。この仮定が矛盾しないためには、各双極子の磁気双極子モーメントをその熱平均 $< m > (T)$ とし、それによって生じる自発磁場が $H_{in}(T)$ に一致することが必要である。すなわち、(11) に $H = H_{in}(T)$ を代入したもの

$$< m > (T) = mL(mH_{in}(T)/kT) \tag{15}$$

と、(13) より

$$H_{in}(T) = \frac{\alpha\mu_0 < m > (T)}{4\pi a^3}, \tag{16}$$

とが両立しなければならない。この条件を満足する $< m > (T)$ と $H_{in}(T)$ を求めるのが平均場近似である。それをするには、

$$x = mH_{in}(T)/kT \tag{17}$$

$$y = < m > (T)/m \tag{18}$$

とおいて、(15)(16) を

$$y = L(x) \tag{19}$$

$$y = \frac{kT}{mH_0}x \tag{20}$$

と書き換え、Fig.4 のようにそれぞれのグラフの交点を求めたらよい。すなわち、ある温度以下では実線で示したように 2 点で交わり、温度が増せば直線 (20) の傾きが増し、$kT/mH_0 = 0.55$ で点線で示したように曲線と接する。その時の双極子率は $< \cos\theta > = 0.30$ である。それ以上の温度は解が存在しない。なお、原点は (17) より温度が無限大となるので、ここは解ではない。

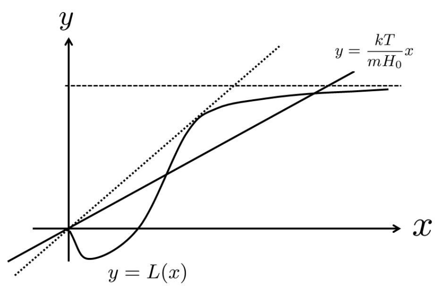


Fig.4　交点を求める

Fig.5 はこれらの交点から双極子率を温度の関数として求めた曲線である。交点が一般に 2 つあることから温度に関して 2 価関数となる。これら 2 つの関数に対して強磁性相が 2 種類あると解釈してよいであろう。ここで、双極子率の大きい方と小さい方とをそれぞれ強磁性相と希強磁性相と呼ぶことにする。強磁性相は絶対 0 度で基底状態となる相で、希強磁性相は絶対 0 度の近傍で、無限小の自発磁化のもとで無限時間をかけて大きく運動する状態を含むものである。それぞれは $kT/mH_0 = 0.55$ で一致し、それ以上の温度では強磁性相は存在しない。

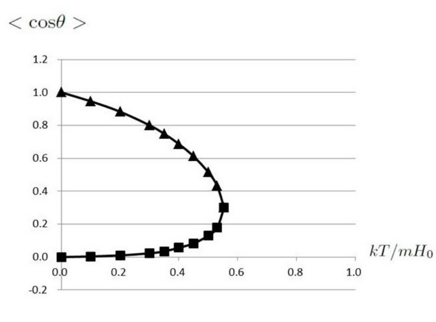


Fig.5　双極子率 - 温度曲線（$H_{ex} = 0$）

4. 有限外磁場での磁性

外磁場 H_{ex} が有限の場合は各双極子が磁場

$$H = H_{in}(T) + H_{ex} \tag{21}$$

による作用で運動するので (11) から

$$< m > (T) = mL(m(H_{in}(T) + H_{ex})/kT) \tag{22}$$

となる。したがって、

$$y = L(x + mH_{ex}/kT) \tag{23}$$

とし、これと (20) との交点を求めることで双極子率が得られる。(23) は (19) を mH_{ex}/kT だけ x 軸の負の方向へ平行移動したもので、H_{ex} が大きくなるとその移動量は大きくなるが、その一方で温度が高くなるとその移動量は小さくなる。Fig.6 から分かるように、外磁場が 0 でない限り、点線で示したように H_{ex} の任意の値に対して、y 軸の負の領域に交点がなくても、実線で示したように十分高い温度となれば移動量が小さくなり、必ず双極子率が負となる領域に交点が存在する。

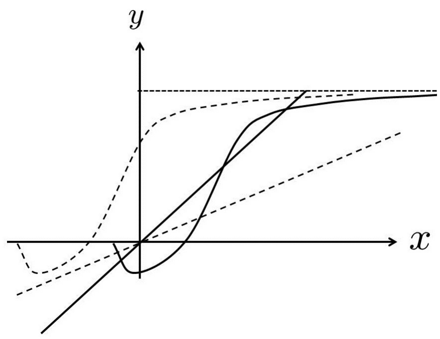


Fig.6　反磁性の解

すなわち、十分高い温度では必ず反磁性になることが分かる。交点が最大で 3 点あることに対応して、双極子率の温度関数は 3 価となる。したがって、前章で述べた強磁性相と希強磁性相の 2 つの相以外に反磁性相が存在するのである。また、希強磁性相は外磁場がない場合は強磁性相であったが、有限の外磁場では反磁性相から強磁性相に連続的に変化する相となる。

外磁場 H_{ex} の増加とともに 3 つの相は次のように変化する。外磁場と温度がそれぞれ 0 の極限では基底状態以外に双極子率が -0 で希強磁性相と反磁性相が一致する。外磁場が弱い場合は Fig.7 のように絶対 0 度で希強磁性相と反磁性相が双極子率が $-H_{ex}/H_0$ で一致する。H_{ex} が

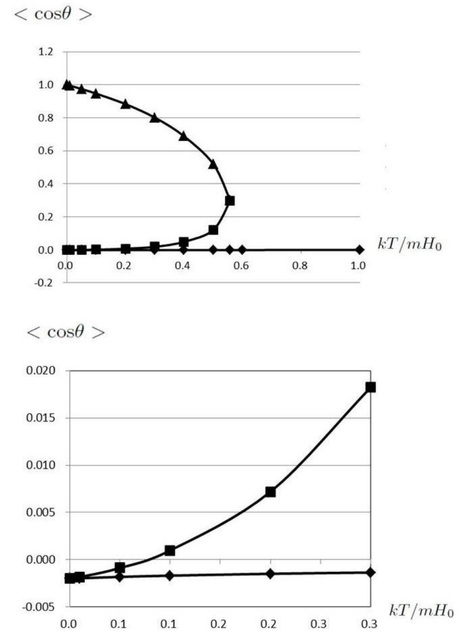


Fig.7　双極子率 - 温度曲線（$H_{ex} = 0.002H_0$）

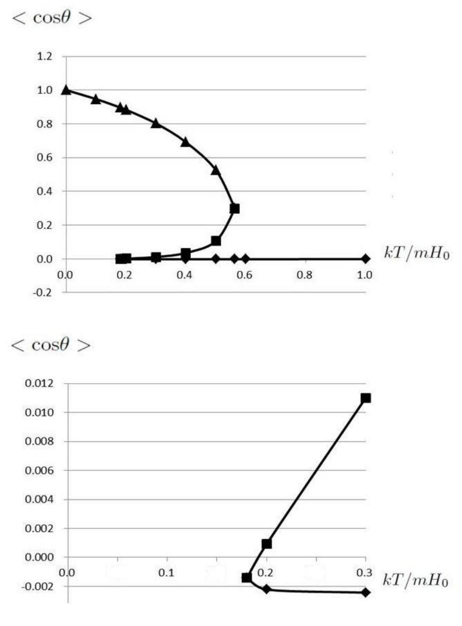
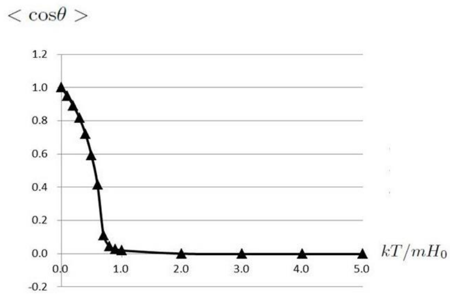


Fig.8　双極子率 - 温度曲線（$H_{ex} = 0.005H_0$）

$0.0025H_0{}^*$ を超えると Fig.8 のように、希強磁性相と反磁性相の一致点は高温部へ移動し、さらに H_{ex} が $0.036H_0{}^\dagger$ を超えると Fig.9 のように双極子率は温度の一価関数となり、強磁性から反磁性へ転移する連続した相になる。

*係数 0.0025 は $L(x)$ の最小値の絶対値

†$H_{ex} = 0.036H_0$ の場合、(20) と (23) が接するのは L の変曲点である。



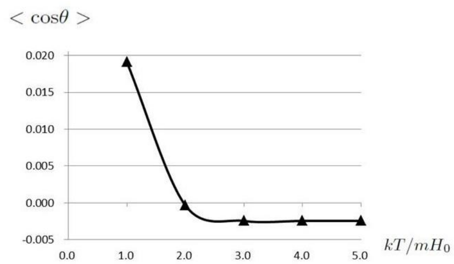


Fig.9　双極子率 - 温度曲線（$H_{ex} = 0.05H_0$）

いずれにしても反磁性相は高温で漸近的に消失する。

5. まとめ

2次元三角格子の磁気双極子結晶について、その磁性の温度依存性を平均場近似で調べた。その結果、次のような多様な磁性のあることが分かった。

1. 外磁場があれば必ず高温で反磁性であり、高温極限では反磁性が漸近的に消失する。
2. 外磁場がなければ強磁性相が2つあり、ある温度以上でこの強磁性相が一致しそれ以上では強磁性は消失する。
3. 外磁場が弱い場合は絶対0度の近傍でも強磁性相だけでなく反磁性相が2つある。この2つの反磁性相は絶対0度の極限で一致する。
4. 外磁場が上記の3より強くなると、双極子率-温度曲線は単純な1価の強磁性-反磁性曲線へと連続的に移行する。

本稿は計算結果のみの速報であり、物理的な議論は別の機会に行う。

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