

# 強磁性体内部における量子スピン系モデルのシミュレーション

明治大学総合数理学部現象数理学科  
4年1組51番

指導教員：池田 幸太

## 1. 序論

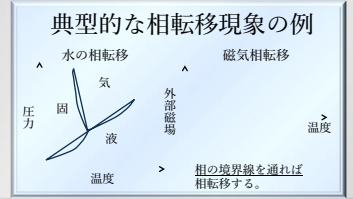
スピンという概念→強磁性体のモデリング→相転移のシミュレーション

粒子数Nの大きい多体系は、温度や外部磁場などの変化によって物理量が不連続に変化する相転移と呼ばれる現象を起こすことがある。

強磁性体の相転移は電子のスピンを用いて説明できる。

強磁性体の古典的なモデル(Isingモデル)と量子力学的なモデル(Heisenbergモデル)

Isingモデルは系のエネルギーをスピンで表す。Heisenbergモデルは系のハミルトニアンをスピン演算子で表す。



## 2. 目的

本研究では絶縁性強磁性体内部の電子のスピン系を立方格子として扱う。

IsingモデルのMonte Carloシミュレーション

まずはIsingモデルのMonte Carloシミュレーションによって強磁性体の性質を定性的に説明し、モデルの妥当性を検証。

IsingモデルとHeisenbergモデルの分配関数を用いたシミュレーション

次にIsingモデルとHeisenbergモデルの分配関数を求めて物理量を計算し、両者を比較する。

## 3. モデル

本研究で扱うモデルでは、磁性体内部の立方格子点上に並ぶ電子のなす系を考える。

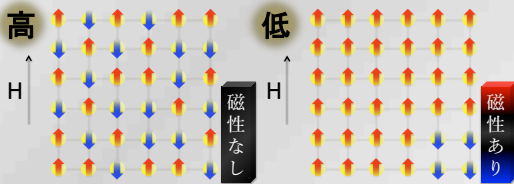
Ising model - 古典的なモデル -

$$E = -J \sum_{\langle i,j \rangle} s_i s_j - g\mu_B H \sum_i s_i$$

系の電子は、スピンという自由度を±1/2のスカラ値として持ち、+の場合は上向き、-の場合は下向きと呼ばれる。Eは系のエネルギー、s<sub>i</sub>はサイトの電子のスピン。<i,j>は最近接格子点対。結合定数J、g因子g、ボーア磁子μ<sub>B</sub>は全て正定数。Hは外部磁場。

以下の性質をモデリングしている。

- ・系のスピンの揃っているほどエネルギーが低い。
- ・外部向きと一致して外部磁場が大きいくほどエネルギーが低い。
- ・系の熱はスピンはばらつかせる効果がある。



Heisenberg model - 量子力学的なモデル -

$$\hat{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_i \cdot \hat{S}_j - g\mu_B H \cdot \sum_i \hat{S}_i$$

量子力学ではエネルギーもスピンも演算子として扱われ、その固有値が測定値として観測される。Isingモデルにおけるエネルギーがハミルトニアンに、スピンス<sub>i</sub>がスピン演算子S<sub>i</sub>に、磁場Hがベクトルになっている。モデリングしている性質はIsingモデルと同じだが、Heisenbergモデルはより多くの情報を扱う。

## 4. 方法・結果

本研究では上記の2つのモデルに従って、周期境界条件を用いて以下のシミュレーションを行う。

Ising model のMonte Carloシミュレーション

各温度・磁場中において系のスピンを1つずつ確率的に反転する操作を繰り返してから求められる系のエネルギーの分散に比例する量として比熱を計算する。磁化(系がどの程度磁石になっているかを表す量)は全スピンの平均として計算する。

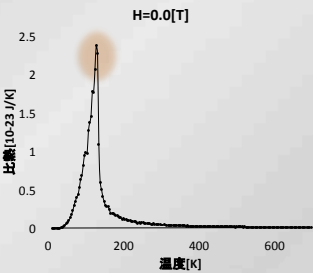


図1. 比熱の温度依存性

### Schottky比熱

離散的な系に特有の比熱の振る舞い(図1)。相転移現象に由来するピークの位置はCurie温度。強磁性状態から常磁性状態への転移の際にスピンの向きが逆向きであるような最近接格子点対が急激に増えるのに伴って外部から供給されなければならない熱エネルギーが急激に高くなるため、このようなピークが現れる。

### 温度上昇とともに磁化は減衰

図2より、磁化は温度上昇とともに減衰することがわかる。これは熱エネルギーが高いとスピンをばらつかせる効果が大きくなることに由来する。外部磁場0の場合では強磁性状態→常磁性状態の相転移が起こるため、Curie温度で急激に磁化が0になる。

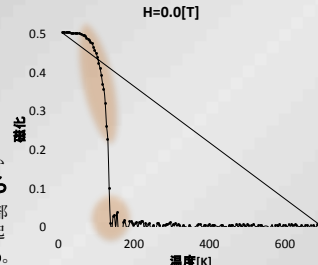


図2. 磁化の温度依存性

### 低温では相転移が起こる

図3では、まず磁化が外部磁場と正の相関を持つことがわかる。さらに低温では磁化の不連続な変化が確認できた。外部磁場0の周辺に現れたループを磁気ヒステリシスという。もっと低温だとヒステリシスループが大きくなり、逆に高温(Curie温度以上)だと磁化は連続的に変化するようになる。

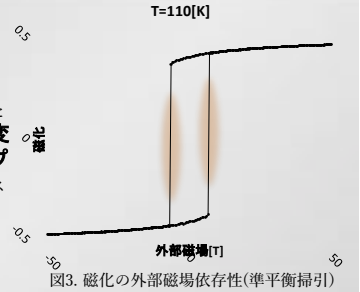


図3. 磁化の外部磁場依存性(準平衡掃引)

### 急速に変化する磁場はヒステリシスループを緩やかにする

図3は外部磁場を準静的に変化させる場合を表しているが、図4では急速に変化させる場合を表した。ヒステリシスはできるが、磁化は常に連続的に変化している。また、高速掃引の場合は低温にしてもヒステリシスのループは消えないため、見かけ上のCurie温度が高くなっているといえる。

図4. 磁化の外部磁場依存性(高速掃引)

### 分配関数を用いるシミュレーション

各モデルで各スピン配列に対するエネルギー(固有値)Eを求め、分配関数Z=Σexp(-βE)を計算して公式から比熱cや磁化Mを求める。

(β: 逆温度 β=1/(k<sub>B</sub>T) k<sub>B</sub>: ボルツマン定数 T: 温度)

$$c = k\beta^2 \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \ln Z \quad M = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} \ln Z$$

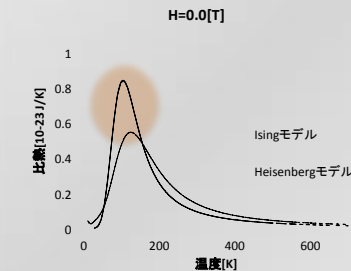


図5. 比熱の温度依存性

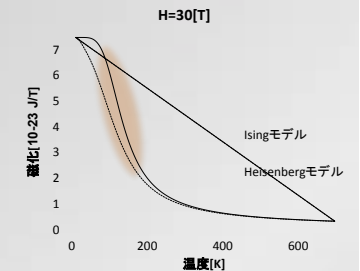


図6. 磁化の温度依存性

### 転移温度・磁場付近ではIsingモデルの方が急に変化

図5ではピークの位置(Curie温度)付近でIsingモデルのプロットの変化が急である。図6は外部磁場付きなので磁化は高温でも0にはならない。外部磁場が無いときは厳密な解析的公式を用いて計算しているので磁化はどの温度でも0となる。Monte Carloシミュレーションから想定されるCurie温度付近ではIsingモデルのプロットの方が急に変化している。図7は低温条件だが、これも公式に当てはめて計算しているため連続的な変化しか見せない。本来磁気相転移が起こるはずの0[T]周辺ではやはりIsingモデルのプロットの方が変化が急である。

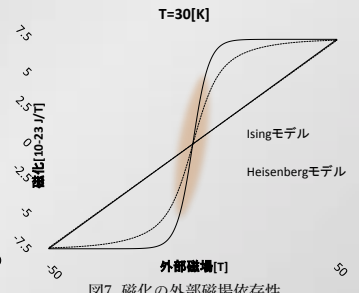


図7. 磁化の外部磁場依存性

## 6. 結論

強磁性体の性質を再現できた

IsingモデルのMonte Carloシミュレーションによって強磁性体の性質を再現した。Schottky比熱、温度上昇に伴う磁化の減衰、磁気相転移によるヒステリシスなどが見られた。

転移点付近でのIsingモデルとHeisenbergモデルの振る舞いが違う

分配関数を用いたシミュレーションにより、パラメータが現実には相転移現象が起こるとみられる所にあるときはIsingモデルの方がパラメータの変化に敏感であることがわかった。