

# 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

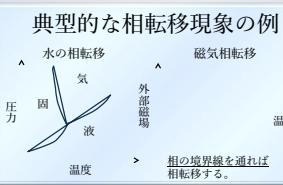
### スピンという概念→強磁性体のモデリング→相転移のシミュレーション

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。

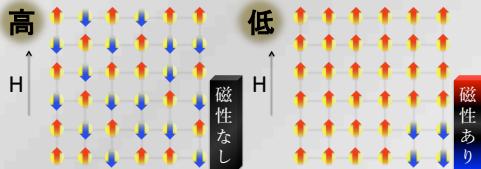
### Ising model - 古典的なモデル

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

系の電子は、スピンという自由度を±1/2のスカラー値として持ち、+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、 $s_i$ はサイト*i*の電子のスピン。 $\langle i,j \rangle$ は最近接格子点対。結合定数J、g因子g、ボア磁子 $\mu_B$ 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。

- 系のスピンが揃っているほどエネルギーが低い。
- 外部向きと一致していて外部磁場が大きい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

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

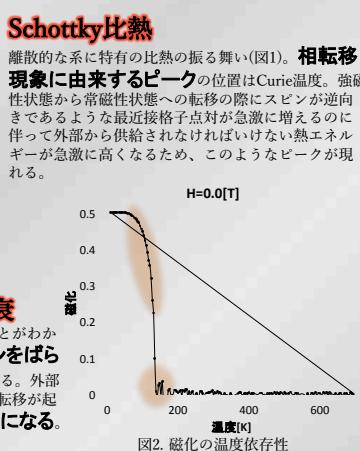
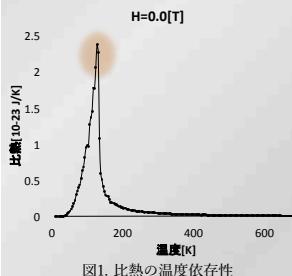
量子力学ではエネルギーもスピンも演算子として扱われ、その固有値が測定値として観測される。Isingモデルにおけるエネルギーがハミルトニアンに、スピン $s_i$ がスピン演算子 $\hat{S}_i$ に、磁場 $H$ がベクトルになっている。モデリングしている性質はIsingモデルと同じだが、Heisenbergモデルはより多くの情報を持った。

## 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。

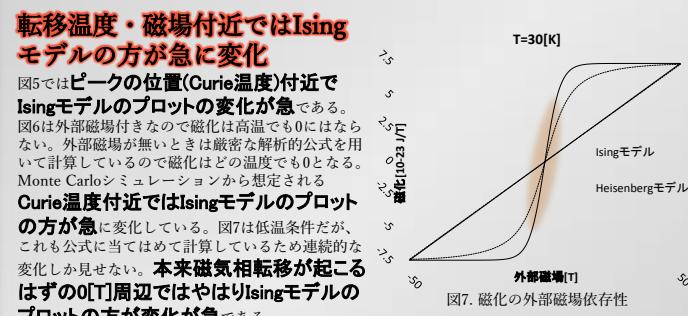
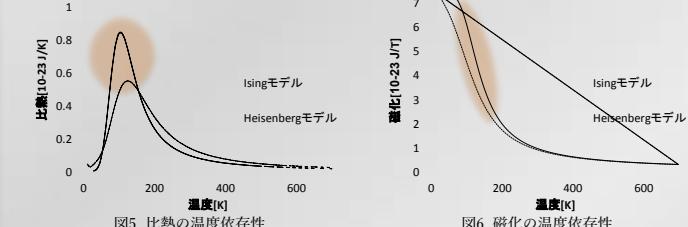
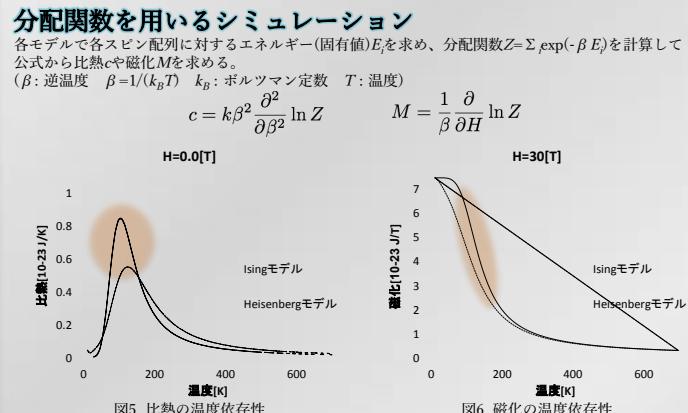
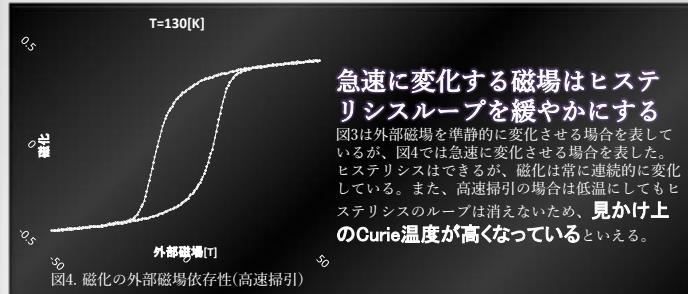
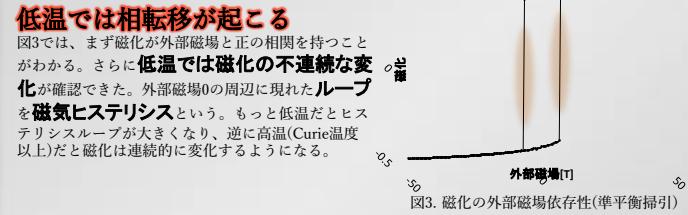
### Ising model のMonte Carloシミュレーション

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。



### 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に、Curie温度で磁化が0になる。



## 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。