

ポイント (12/09分)

- 内容：教科書 P113~P141。

5-3:常磁性体と関連するモデル

絶縁体中の原子各々が不対電子を一つずつもっているモデル。電子の運動の自由度はなく、スピン自由度 $\sigma = \pm 1$ のみが存在。1 スピンあたりのゼーマンエネルギーは、 $\vec{H} = (0, 0, H)$ に対し $E_{\sigma=+1}^{\text{Zeeman}} = -\mu_0 H$, $E_{\sigma=-1}^{\text{Zeeman}} = +\mu_0 H$ 。スピン間の相互作用まで考えたエネルギーは、

$$E_{(\sigma_i)_{i=1}^N} = - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} \sigma_i \sigma_j - \mu_0 H \sum_i \sigma_i. \quad (1)$$

$|J| \ll kT$ の場合

$|J| \ll kT$ の高温では相互作用はほとんど効かないので、 $J = 0$ の場合を考える。このときスピンは全て独立； $Z_N = Z_1^N$ 、モデルとしては最も単純。

$$Z_1 = e^{\beta\mu_0 H} + e^{-\beta\mu_0 H} = 2 \cosh(\beta\mu_0 H), \quad (2)$$

$$\langle \hat{m} \rangle_{\beta, H}^{\text{can}} = \frac{1}{N} \sum_{j=1}^N \langle \hat{\sigma}_j \rangle_{\beta, H}^{\text{can}} = \mu_0 \tanh(\beta\mu_0 H), \quad (3)$$

$$\sigma_{\beta, H}^{\text{can}}[\hat{m}] = \frac{\mu_0 \sqrt{1 - \{\tanh(\beta\mu_0 H)\}^2}}{\sqrt{N}} \propto \frac{1}{\sqrt{N}} \rightarrow 0, \quad (4)$$

$$\chi(\beta) = \frac{\partial}{\partial H} \langle \hat{m} \rangle_{\beta, H}^{\text{can}} \Big|_{H=0} = \mu_0^2 \beta = \frac{\mu_0^2}{kT}. \quad (5)$$

帯磁率 χ は $\chi \propto 1/T$ (Curie's law) のように振舞う。

$$F(\beta, H, N) = -\frac{1}{\beta} \log Z_N(\beta, H) = -NT \log \left(2 \coth \frac{\mu_0 H}{kT} \right), \quad (6)$$

$$S(\beta, H, N) = -\frac{\partial}{\partial T} F(\beta, H, N) = Nk \log \left(2 \coth \frac{\mu_0 H}{kT} \right) - \frac{N\mu_0 H}{T} \tanh \frac{\mu_0 H}{kT}. \quad (7)$$

F, S はともに $x = \mu_0 H/kT$ の関数になる。 $J = 0$ では系のエネルギースケールが β と $\mu_0 H$ (両方とも示強変数) しかないため、熱力学関数はその比 x (と N) にしか依存しなくなる。エントロピーが一定である準静的断熱過程では、 x を一定にする範囲でしか T, H は変化しない。 H を H_1 から H_2 に変化させると ($H_1 > H_2$)、系の温度は $T_1 \rightarrow T_2 \equiv (H_2/H_1)T_1 < T_2$ に下がる (断熱消磁)。モノによっては 10mK くらいまでは下がるらしい。

$J \neq 0$ の場合

スピンの隣同士で 2 個ずつ相互作用するモデル。(相互作用するスピンモデルとしてミニマルなモデル)

$$E_{(\sigma_i)_{i=1}^N} = -J \sum_{\langle i=1 \rangle}^{N/2} \sigma_{2i-1} \sigma_{2i} - \mu_0 H \sum_{j=1}^{N/2} (\sigma_{2j-1} + \sigma_{2j}) = \sum_{j=1}^{N/2} E_{\sigma_{2j-1} \sigma_{2j}}. \quad (8)$$

このモデルでは格子の形は重要ではない。 J の正負によって基底状態は異なる。

$$c(T) = \frac{d}{dT} \left(\frac{\langle \hat{H} \rangle_{\beta, H=0}^{\text{can}}}{N} \right) = \frac{J^2}{2kT^2} \left(\cosh \frac{J}{kT} \right)^{-2}, \quad (9)$$

$$\chi(\beta) = \frac{\partial}{\partial H} \langle \hat{m} \rangle_{\beta, H}^{\text{can}} \Big|_{H=0} = \frac{2\mu_0^2 \beta}{1 + e^{-2\beta J}} \quad (10)$$

帯磁率は J の正負によって、 $|J| > kT$ での定性的振る舞いが異なる。比熱はショットキー型となる。ショットキー型比熱は、(i) 局所的な励起の離散準位をもち、(ii) その準位の数有限であるような系に一般的に見られる。(例：核スピン、局在 f 電子系における結晶場分裂など。)

おまけ：いろいろな磁化曲線

[1] 相互作用のない大きさ S の古典スピン系 (常磁性体)：磁化曲線は式 (3) を一般化した Brillouin 関数 $B(x)$ で記述される； $m(T, H) = \mu_0 S B_S(\mu_0 S H / kT)$, $B_S(x) = ((2S + 1)/2S) \coth((2S + 1)x/2S) - (1/2S) \coth(x/2S)$. スピンは無限小の H で偏極するので、 $H > 0$ ならば $B(x) \neq 0$.

[2] $S = 1/2$ の 1 次元反強磁性 Heisenberg モデル：基底状態 (非磁性状態) からの励起は $E_k = (\pi J/2) \sin(ka)$ (des Cloizeaux-Pearson モード)。このバンド構造のために、磁化曲線はバンド端くらいの大きさの磁場 $\mu_0 H^* \simeq 2J$ で急に立ち上がる。ただし、実際の物質では H^* は巨大で実現は不可能。磁化率は $T = 0$ で有限の値をもつ (Bonner-Fisher 曲線)。

[3] $S = (\text{整数})$ の 1 次元反強磁性スピン系：基底状態 (非磁性状態) からの励起にエネルギーギャップ E_{gap} (Haldane gap) がある。このため、磁化はある臨界磁場 $\mu_0 H \simeq E_{gap}$ くらいまでゼロのまま。

[4] 磁化 m と $m + 1$ の状態間にエネルギーギャップがある系：ギャップの存在のために、磁化曲線が階段状になる (磁化プラトーの出現)。

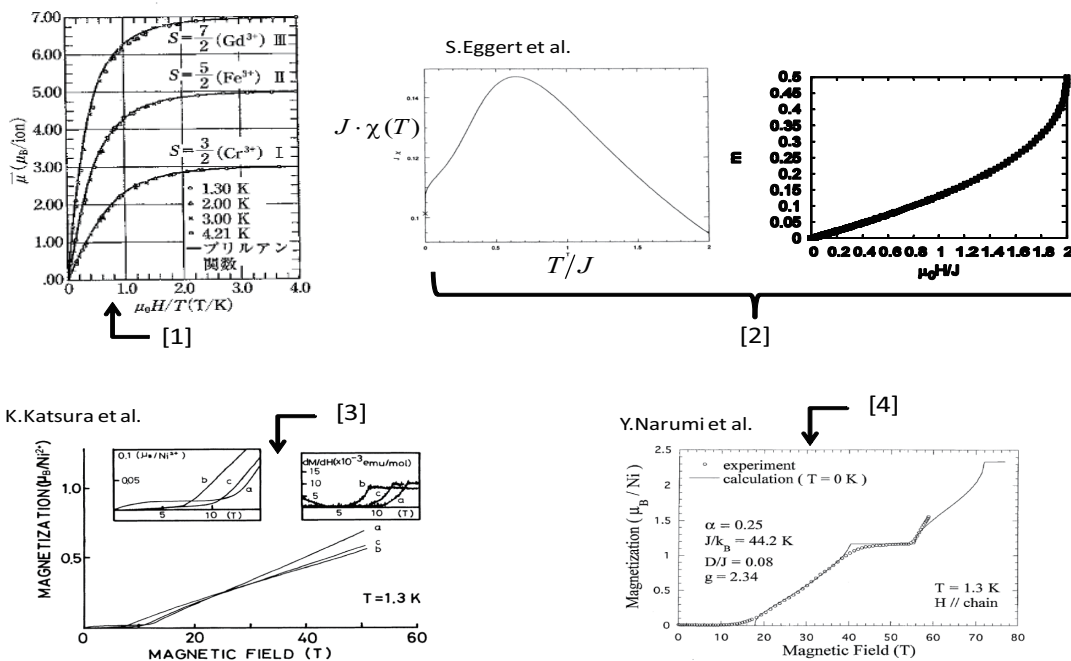


図 1: さまざまな系における磁化曲線。[2] に対しては帯磁率も示してある。