

第2回 磁性体のモデル

理学部 物理科学科 齊藤 国靖

2025 年 10 月 23 日

1 磁性体とは

外部磁場 $\mathbf{H}$ を印加すると磁化される物質を**磁性体**という。さらに、 $\mathbf{H}$ を取り去った後、磁化が元に戻るものを**常磁性体**、元に戻らないものを**強磁性体**という。強磁性体の磁化（**自発磁化**）が外部磁場を取り除いても残る要因は、沢山ある原子が相互作用することにより、原子のスピンが同じ向きを向く傾向があるからである。つまり、相互作用のない系は常磁性、相互作用のある系は強磁性をもつと考えられる。ところで、スピン $\mathbf{S} = (S_x, S_y, S_z)$ をもつ原子の**磁気モーメント**は

$$\boldsymbol{\mu} = g\mu_0\mathbf{S} \quad (1)$$

で与えられる [1]。ここで、 g は g -因子、 μ_0 はボーア磁子と呼ばれる定数である。このとき、外部磁場 $\mathbf{H}$ が印加されると、原子は**磁気エネルギー**

$$\epsilon = -\boldsymbol{\mu} \cdot \mathbf{H} \quad (2)$$

をもつ様になる。式 (2) は $\boldsymbol{\mu}$ と $\mathbf{H}$ の内積であるから、磁気モーメントあるいはスピン $\mathbf{S}$ の向きが外部磁場と同じ方向であれば、磁気エネルギーは最も低くなり、原子は安定であることが解る。以下では、原子同士の相互作用がない系（常磁性体）と相互作用がある系（強磁性体）のモデルについて説明し、それぞれの系で**磁化率の温度依存性**がどの様に予想されるか調べてみよう。

2 相互作用のない系

2.1 原子の磁気エネルギー

まずは相互作用しない N 個の原子からなる磁性体を考えよう。 z 軸に平行な外部磁場 $\mathbf{H} = (0, 0, H)$ を印加すると、式 (1), (2) より、原子 1 個の磁気エネルギーは

$$\begin{aligned} \epsilon &= -\mu_z H \\ &= -g\mu_0 H S_z \end{aligned} \quad (3)$$

となる。量子力学によると、 S_z の取り得る値（つまり固有値） m は $-S \leq m \leq S$ の範囲にあり*¹、全部で $2S + 1$ 個ある離散的な値

$$m = -S, -S + 1, \dots, S - 1, S \quad (4)$$

のいずれかである。そこで、式 (3) を改めて

$$\epsilon_m = -g\mu_0 H m \quad (5)$$

と書き、添え字 m によって磁気エネルギーが m に依存することを明記する。ところで、 m の最大値 S はゼロか自然数あるいは半整数なので、例えば $S = 1/2$ であれば、式 (4) より

$$m = \pm \frac{1}{2}$$

のいずれかとなる。このとき、式 (5) の磁気エネルギーも $\epsilon_m = \mp g\mu_0 H/2$ のいずれかであり、統計力学 A で学んだ二準位系の問題に帰着する。

2.2 原子の分配関数と磁気モーメント

式 (5) の磁気エネルギーは m の値によって決まるため、原子の微視的状态は m によって区別される。カノニカル分布を考えると、ある原子が m で定められた微視的状态をとる確率は

$$\begin{aligned} P_m &= \frac{e^{-\beta\epsilon_m}}{\sum_m e^{-\beta\epsilon_m}} \\ &= \frac{e^{\beta g\mu_0 H m}}{\sum_m e^{\beta g\mu_0 H m}} \end{aligned} \quad (6)$$

で与えられる。また、この原子の分配関数は全ての微視的状态 m について和をとり、

$$\begin{aligned} z &= \sum_{m=-S}^S e^{-\beta\epsilon_m} \\ &= \sum_{m=-S}^S e^{\beta g\mu_0 H m} \end{aligned} \quad (7)$$

となる*²。ここで、 m に関する和は式 (4) の $2S + 1$ 個の値に対して行う。さらに、式 (7) の対数を外部磁場の大きさ H で微分すると

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H} \ln z &= \frac{\partial}{\partial H} \ln \left(\sum_{m=-S}^S e^{\beta g\mu_0 H m} \right) \\ &= \frac{\frac{\partial}{\partial H} (\sum_m e^{\beta g\mu_0 H m})}{\sum_m e^{\beta g\mu_0 H m}} \\ &= \beta \frac{\sum_m (g\mu_0 m) e^{\beta g\mu_0 H m}}{\sum_m e^{\beta g\mu_0 H m}} \end{aligned}$$

*¹ S は S_z の固有値の最大値。

*² 統計力学 A（第 6 回）の表式に従い、原子 1 個の分配関数は小文字 z で表すことにする。

であるから、式 (6) を用いて

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} \ln z = \sum_{m=-S}^S (g\mu_0 m) P_m \quad (8)$$

と表される．式 (1) によると、原子の磁気モーメントの z 成分は

$$\mu_z = g\mu_0 m \quad (9)$$

なので、これを式 (8) の右辺に代入すると

$$\frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} \ln z = \sum_{m=-S}^S \mu_z P_m$$

となる．つまり、上式の右辺は μ_z の期待値（平均値）を表すから、次の関係式が成り立つ．

原子の磁気モーメントの平均値

$$\bar{\mu}_z = \frac{1}{\beta} \frac{\partial}{\partial H} \ln z \quad (10)$$

2.3 ブリュアン関数

式 (7) の原子の分配関数をさらに計算するため、無次元量

$$\eta \equiv \beta g\mu_0 H = \frac{g\mu_0 H}{k_B T} \quad (11)$$

を導入しよう．これは、外部磁場のエネルギー $g\mu_0 H$ と熱エネルギー $k_B T$ の比であり、磁気モーメントが外部磁場の向きに揃い易いかどうかを示す指標となる． η を用いると、式 (7) は

$$\begin{aligned} z &= \sum_{m=-S}^S e^{\eta m} \\ &= e^{-\eta S} + e^{-\eta(S-1)} + \dots + e^{\eta(S-1)} + e^{\eta S} \end{aligned} \quad (12)$$

となり、初項 $e^{-\eta S}$ 、公比 e^η 、項数 $2S+1$ の等比級数の和として表せる．そこで、

初項 a 、公比 r 、項数 n の等比級数の和

$$a \frac{r^n - 1}{r - 1}$$

を使うと、式 (12) は

$$\begin{aligned} z &= e^{-\eta S} \frac{(e^\eta)^{2S+1} - 1}{e^\eta - 1} \\ &= \frac{e^{\eta(S+1)} - e^{-\eta S}}{e^\eta - 1} \end{aligned}$$

と計算できる．さらに，分母と分子に $e^{-\eta/2}$ を掛けると

$$\begin{aligned} z &= \frac{e^{\eta(S+1/2)} - e^{-\eta(S+1/2)}}{e^{\eta/2} - e^{-\eta/2}} \\ &= \frac{\sinh[\eta(S+1/2)]}{\sinh(\eta/2)} \end{aligned}$$

となる．従って，原子の分配関数の対数は

$$\ln z = \ln \sinh \left[\eta \left(S + \frac{1}{2} \right) \right] - \ln \sinh \left(\frac{\eta}{2} \right) \quad (13)$$

で与えられる．

次に，式 (10) を使って原子 1 個の磁気モーメントの平均値を求めるため， H の微分を η の微分に変換し，

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial H} &= \frac{\partial \eta}{\partial H} \frac{\partial}{\partial \eta} \\ &= \beta g \mu_0 \frac{\partial}{\partial \eta} \end{aligned}$$

とする．これを式 (10) に用い，式 (13) を代入すると

$$\bar{\mu}_z = g \mu_0 \frac{\partial}{\partial \eta} \left\{ \ln \sinh \left[\eta \left(S + \frac{1}{2} \right) \right] - \ln \sinh \left(\frac{\eta}{2} \right) \right\}$$

となる．さらに，

双曲線関数の公式

$$\frac{d}{dx} \sinh x = \cosh x, \quad \coth x = \frac{\cosh x}{\sinh x}$$

を使って計算すると

$$\begin{aligned} \bar{\mu}_z &= g \mu_0 \left\{ \left(S + \frac{1}{2} \right) \frac{\cosh[\eta(S+1/2)]}{\sinh[\eta(S+1/2)]} - \frac{1}{2} \frac{\cosh(\eta/2)}{\sinh(\eta/2)} \right\} \\ &= g \mu_0 \left\{ \left(S + \frac{1}{2} \right) \coth \left[\eta \left(S + \frac{1}{2} \right) \right] - \frac{1}{2} \coth \left(\frac{\eta}{2} \right) \right\} \\ &\equiv g \mu_0 S B_S(\eta) \end{aligned} \quad (14)$$

となる．但し，

ブリュアン関数

$$B_S(\eta) \equiv \frac{1}{S} \left\{ \left(S + \frac{1}{2} \right) \coth \left[\left(S + \frac{1}{2} \right) \eta \right] - \frac{1}{2} \coth \left(\frac{\eta}{2} \right) \right\} \quad (15)$$

を定義した．ブリュアン関数は η の双曲線関数から成る複雑な形をしているが， η が大きい場合と小さい場合の漸近形は比較的簡単である．まず，双曲線関数は

$$\coth x \approx \begin{cases} 1 & (x \gg 1) \\ \frac{1}{x} + \frac{x}{3} & (x \ll 1) \end{cases} \quad (16)$$

と近似できるので^{*3}, $\eta \gg 1$ の場合,

$$\coth \left[\left(S + \frac{1}{2} \right) \eta \right] \approx 1, \quad \coth \left(\frac{\eta}{2} \right) \approx 1$$

となり, ブリュアン関数は

$$\begin{aligned} B_S(\eta) &\approx \frac{1}{S} \left\{ \left(S + \frac{1}{2} \right) - \frac{1}{2} \right\} \\ &= 1 \end{aligned}$$

となる. 一方, $\eta \ll 1$ の場合, 式 (16) を用いると

$$\begin{aligned} B_S(\eta) &\approx \frac{1}{S} \left\{ \left(S + \frac{1}{2} \right) \left[\frac{1}{\left(S + \frac{1}{2} \right) \eta} + \frac{1}{3} \left(S + \frac{1}{2} \right) \eta \right] - \frac{1}{2} \left[\frac{1}{\frac{\eta}{2}} + \frac{\frac{\eta}{2}}{3} \right] \right\} \\ &= \frac{1}{S} \left\{ \frac{1}{\eta} + \frac{1}{3} \left(S + \frac{1}{2} \right)^2 \eta - \frac{1}{\eta} - \frac{\eta}{12} \right\} \\ &= \frac{1}{3S} \left\{ \left(S + \frac{1}{2} \right)^2 - \frac{1}{4} \right\} \eta \\ &= \frac{1}{3} (S + 1) \eta \end{aligned}$$

となる. 従って, 次が成立する.

ブリュアン関数の漸近形

$$B_S(\eta) \approx \begin{cases} 1 & (\eta \gg 1) \\ \frac{1}{3} (S + 1) \eta & (\eta \ll 1) \end{cases} \quad (17)$$

図 1 は式 (15) のブリュアン関数を図示したもので, $S = 0.5 \sim 1.5$ と変化させたものを重ねてプロットしている。式 (17) の様に, いずれも $\eta = 0$ から直線的に増加し, $B_S(\eta) = 1$ に漸近する。

^{*3} 付録 A を参照.

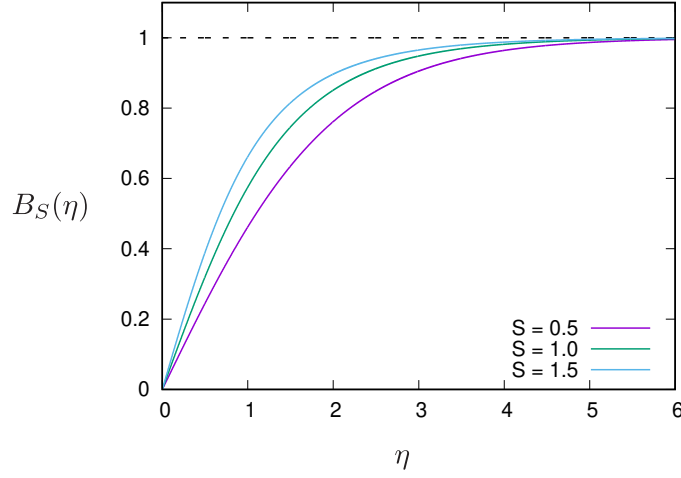


図 1：ブリュアン関数

2.4 磁化と磁化率

原子 1 個の磁気モーメントの平均値が式 (14) の様に求められたので，全原子の磁気モーメントすなわち**磁化**を計算することにしよう．磁性体内部に N 個の原子があるとすれば，磁化は

$$M_z = \sum_{i=1}^N \mu_{iz} \quad (18)$$

である．但し， μ_{iz} は i 番目の原子の磁気モーメントである．一方，単純な算術平均によって原子の磁気モーメントの平均値を与えると

$$\bar{\mu}_z = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \mu_{iz}$$

となる．よって，これを式 (18) に代入し，

$$M_z = N\bar{\mu}_z \quad (19)$$

が得られる．さらに，式 (14) を代入し，式 (17) の漸近形を用いると

$$\begin{aligned} M_z &= Ng\mu_0 S B_S(\eta) \\ &\approx \begin{cases} Ng\mu_0 S & (\eta \gg 1) \\ \frac{Ng\mu_0}{3} S(S+1)\eta & (\eta \ll 1) \end{cases} \end{aligned} \quad (20)$$

となる．ここで，式 (11) より， $\eta \gg 1$ の場合は $k_B T \ll g\mu_0 H$ なので，系は極めて低温である．このとき， M_z は各原子の取り得る磁気モーメントの最大値^{*4} $g\mu_0 S$ の N 倍で与えられるから，

^{*4} 式 (4), (9) より，原子の磁気モーメントは以下の範囲内である．

$$-g\mu_0 S \leq \mu_{iz} \leq g\mu_0 S$$

全原子のスピンが外部磁場と同じ方向に揃った状態であると考えられる。一方、 $\eta \ll 1$ の場合は $k_B T \gg g\mu_0 H$ であるから、系は極めて高温にある。このときの磁化を改めて書くと

$$\begin{aligned} M_z &= \frac{Ng\mu_0}{3} S(S+1)\eta \\ &= \frac{N(g\mu_0)^2}{3k_B T} S(S+1)H \end{aligned} \quad (21)$$

である。但し、 η の表式 (11) を代入した。ここで、**磁化率** χ を

$$M_z \equiv \chi H$$

によって導入し、式 (21) と比較すると

キュリーの法則

$$\chi = \frac{N(g\mu_0)^2}{3k_B T} S(S+1) \propto \frac{1}{T} \quad (22)$$

が得られる。この様に、磁化率が高温で温度に反比例することは、統計力学 A（第 3 回）の二準位系で得られた結果と同じである。

3 相互作用のある系

3.1 ハミルトニアン

前節では原子同士の相互作用がない系を扱ったが、ここでは相互作用を考慮した上で分配関数や磁化率を求める方法を紹介する。まず、 N 個ある原子に $i = 1, \dots, N$ までの番号を付け、式 (1) に倣って、 i 番目の原子の磁気モーメントを

$$\boldsymbol{\mu}_i = g\mu_0 \boldsymbol{S}_i$$

と表す。ここで、 $\boldsymbol{S}_i$ は i 番目の原子のスピンである。系に外部磁場 $\boldsymbol{H}$ が印加されると、 i 番目の原子は式 (2) と同じ磁気エネルギーをもつ様になり、 i 番目の原子のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_i^0 &= -\boldsymbol{\mu}_i \cdot \boldsymbol{H} \\ &= -g\mu_0 \boldsymbol{S}_i \cdot \boldsymbol{H} \end{aligned} \quad (23)$$

と表される。他の原子も同様に磁気エネルギーをもつため、全原子のハミルトニアンは

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_0 &= \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i^0 \\ &= -g\mu_0 \boldsymbol{H} \cdot \sum_{i=1}^N \boldsymbol{S}_i \end{aligned} \quad (24)$$

となる．さらに，原子同士，特に隣接する原子同士には交換相互作用が働くため，相互作用によるハミルトニアン

$$\mathcal{H}' = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n \mathcal{H}'_{ij} \quad (25)$$

が加わる．ここで， j に関する和は*i*番目の原子に隣接する n 個の原子に対するものであり， i と j について和を取るとき，同じペアが2回重複して数えられるため，全体を2で割っていることに注意しよう．また，右辺において， i 番目と j 番目の原子間の交換相互作用を表すハミルトニアンは

$$\mathcal{H}'_{ij} = -2J \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (26)$$

で与えられ， J は交換相互作用の強さを表す定数である．従って，相互作用のある系のハミルトニアンは $\mathcal{H}_0$ と $\mathcal{H}'$ を合わせて

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \mathcal{H}'$$

であり，式 (24)-(26) を全て代入すると次の様になる．

ハイゼンベルグ模型

$$\mathcal{H} = -g\mu_0 \mathbf{H} \cdot \sum_{i=1}^N \mathbf{S}_i - J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (27)$$

式 (27) のハイゼンベルグ模型において，外部磁場 $\mathbf{H}$ や原子のスピン $\mathbf{S}_i$ の方向は任意である．しかし，スピンの3成分を同時に扱うとなると，分配関数を含めた統計力学の計算は煩雑となり，初学者には不向きである．そこで，前節と同様，外部磁場の向きは z 軸に固定し，スピンの向きも大方 z 軸方向に平行であるとして，スピンの x, y 成分を無視する．これにより，式 (27) の内積を

$$\mathbf{H} \cdot \mathbf{S}_i = H S_{iz}, \quad \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \approx S_{iz} S_{jz}$$

と近似することができ，系のハミルトニアンは

イジング模型

$$\mathcal{H} = -g\mu_0 H \sum_{i=1}^N S_{iz} - J \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^n S_{iz} S_{jz} \quad (28)$$

になる．以下では，式 (28) のイジング模型について考えよう．

3.2 平均場近似

イジング模型の分配関数や磁化率を求めるには，式 (28) のハミルトニアンを用いればよいが，交換相互作用を表す右辺の第2項において， i と j など，異なる原子のスピン成分が混在してお

り、そのままでは扱いが難しい。従って、交換相互作用を近似的に表す方法が必要である。まず、式 (23), (26) を用いて i 番目の原子のハミルトニアンを抜き出して書けば

$$\mathcal{H}_i = \mathcal{H}_i^0 + \sum_{j=1}^n \mathcal{H}'_{ij} \quad (29)$$

となる。イジング模型では

$$\mathcal{H}_i^0 = -g\mu_0 H S_{iz}, \quad \mathcal{H}'_{ij} \approx -2J S_{iz} S_{jz}$$

と近似できるため、式 (29) を

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_i &= -g\mu_0 H S_{iz} - 2J S_{iz} \sum_{j=1}^n S_{jz} \\ &= -g\mu_0 \left(H + \frac{2J}{g\mu_0} \sum_{j=1}^n S_{jz} \right) S_{iz} \\ &= -g\mu_0 \left(H + \frac{2nJ}{g\mu_0} \bar{S}_z \right) S_{iz} \end{aligned} \quad (30)$$

と書くことができる。但し、

$$\bar{S}_z \equiv \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n S_{jz}$$

は S_{jz} の平均値である。さらに、**平均場***5

$$H_M \equiv \frac{2nJ}{g\mu_0} \bar{S}_z \quad (31)$$

を導入すると、式 (30) は次の様に書き換えられる。

$$\mathcal{H}_i = -g\mu_0 (H + H_M) S_{iz} \quad (32)$$

ところで、式 (31) の $\bar{S}_z$ は i 番目の原子に隣接する原子の平均スピン (の z 成分) として定義されているが、系全体が一様であれば、 i 番目の原子に限らず、任意の原子に隣接する原子の平均スピン (の z 成分) はどれも同じと考えるのが自然である。そこで、 $\bar{S}_z$ を 全原子のスピンの平均値の z 成分 と同一視すると、式 (31) の分子場 H_M は i 番目の原子とは完全に切り離され、全原子に共通の一定値とみなすことができる*6。このとき、式 (32) にある磁場の和

$$H_{\text{eff}} \equiv H + H_M \quad (33)$$

*5 分子場という場合もある。

*6 但し、隣接する原子の数 n も全原子に共通であるとする。

は定数であり，改めて式 (32) を書くと

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_i &= -g\mu_0 H_{\text{eff}} S_{iz} \\ \therefore \epsilon_i &= -g\mu_0 H_{\text{eff}} m_i\end{aligned}$$

となる．これは，相互作用のない系のエネルギーの表式 (3) または (5) と全く同じ形であり，前節と同じ手順により， i 番目の原子の磁気モーメントの平均値（の z 成分） $\bar{\mu}_{iz}$ を求めることができる．唯一の違いは，外部磁場の大きさを実効的な外部磁場の大きさ H_{eff} に置き換えることであり， $\bar{\mu}_{iz}$ は式 (14) と同様に

$$\bar{\mu}_{iz} = g\mu_0 S B_S(\eta) \quad (34)$$

で与えられる．但し，

$$\eta = \beta g\mu_0 H_{\text{eff}} = \frac{g\mu_0 H_{\text{eff}}}{k_B T} \quad (35)$$

は式 (11) で H を H_{eff} に置き換えたものである．一方，式 (1) より， $\bar{\mu}_{iz}$ は

$$\bar{\mu}_{iz} = g\mu_0 \bar{S}_{iz} \quad (36)$$

と書けるから，式 (34) より，次式が得られる．

$$\bar{S}_{iz} = S B_S(\eta) \quad (37)$$

3.3 自己無撞着方程式

式 (37) は i 番目の原子のスピンの z 成分の平均値であるが，その前に， i 番目の原子に隣接する原子の平均スピン（の z 成分） $\bar{S}_z$ を全原子のスピンの平均値（の z 成分）と同一視した．この仮定を基に導出した式 (37) は，当然，元の仮定と整合していなければならない．この様に，ある仮定の基に導出した結果が元の仮定と整合することを自己無撞着あるいはセルフコンシステントであるといい，いまの場合，式 (37) の $\bar{S}_{iz}$ と式 (31) の $\bar{S}_z$ が一致することが自己無撞着（セルフコンシステント）ということになる．式 (31) の平均場の表式から $\bar{S}_z$ を求めると

$$\bar{S}_z = \frac{g\mu_0}{2nJ} H_M$$

であるから，これを式 (37) と等しいとして

$$\begin{aligned}\bar{S}_{iz} &= \bar{S}_z \\ \therefore S B_S(\eta) &= \frac{g\mu_0}{2nJ} H_M\end{aligned} \quad (38)$$

が得られる．これを**自己無撞着方程式**という．また，式 (35) に (33) を代入すると

$$\begin{aligned}\eta &= \beta g\mu_0 (H + H_M) \\ \therefore H_M &= \frac{\eta}{\beta g\mu_0} - H\end{aligned}$$

となるので、これを自己無撞着方程式 (38) に代入すると

$$\begin{aligned} B_S(\eta) &= \frac{g\mu_0}{2nJS} \left(\frac{\eta}{\beta g\mu_0} - H \right) \\ &= \frac{1}{2n\beta JS} (\eta - \beta g\mu_0 H) \end{aligned}$$

となる。逆温度 $\beta = 1/k_B T$ を用いて、上式を改めて書くと次式が得られる。

$$B_S(\eta) = \frac{k_B T}{2nJS} \left(\eta - \frac{g\mu_0 H}{k_B T} \right) \quad (39)$$

3.4 磁化と磁化率

系の平均磁気モーメント（磁化）は

$$M_z = \overline{\sum_i \mu_{iz}} \quad (40)$$

で与えられるが^{*7}、和の平均は平均の和なので

$$\overline{\sum_i \mu_{iz}} = \sum_{i=1}^N \bar{\mu}_{iz}$$

であり、式 (40) は

$$\begin{aligned} M_z &= \sum_{i=1}^N \bar{\mu}_{iz} \\ &= g\mu_0 \sum_{i=1}^N \bar{S}_{iz} \end{aligned}$$

となる。但し、式 (36) を代入した。また、右辺の $\bar{S}_{iz}$ に式 (37) を代入すれば

$$\begin{aligned} M_z &= g\mu_0 \sum_{i=1}^N S B_S(\eta) \\ &= N g\mu_0 S B_S(\eta) \end{aligned} \quad (41)$$

となり、 η が求まれば、式 (41) によって磁性体の磁化を求めることができる。なお、 η を求めるには、式 (39) を η について解けばよい。これは、図 2 の様に η の 2 つの関数

$$y = B_S(\eta) , \quad (42)$$

$$y = \frac{k_B T}{2nJS} \left(\eta - \frac{g\mu_0 H}{k_B T} \right) \quad (43)$$

^{*7} 相互作用のない場合の式 (19) との違いに注意しよう。

を η - y 平面に描いたときの交点の η 座標で与えられる。

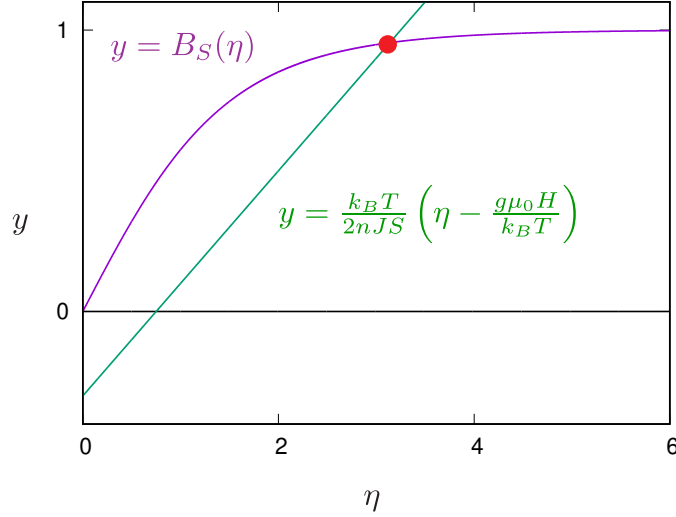


図 2：式 (42) と (43) のグラフ．赤丸は交点を表す．

3.4.1 自発磁化

外部磁場がゼロの場合 ($H = 0$), 式 (43) は

$$y = \frac{k_B T}{2nJS} \eta \quad (44)$$

となる．この関数は η に比例しており，式 (42) と (44) は $\eta = 0$ のとき共に $y = 0$ となって交わる．図 3 は式 (42) と (44) のグラフであり，両者の交点を赤丸で示してある．ここで，式 (44) の傾きがブリュアン関数の原点における傾きより大きければ，両者は $\eta = 0$ 以外で交わることはない（図 3 左）．一方，式 (44) の傾きがブリュアン関数の原点における傾きより小さければ，これらは $\eta \neq 0$ でも交わることになる（図 3 右）．つまり，

$$\frac{k_B T}{2nJS} < \left[\frac{d}{d\eta} B_S(\eta) \right]_{\eta=0} \quad (45)$$

であれば， $\eta = 0$ と $\eta \neq 0$ の 2 つの解が存在する． $B_S(\eta)$ の原点における傾きは $\eta \ll 1$ におけるブリュアン関数の漸近形から求めることができ，式 (17) より

$$\begin{aligned} \left[\frac{d}{d\eta} B_S(\eta) \right]_{\eta=0} &\approx \left[\frac{d}{d\eta} \frac{1}{3} (S+1) \eta \right]_{\eta=0} \\ &= \frac{1}{3} (S+1) \end{aligned}$$

となる．よって，条件式 (45) は

$$\frac{k_B T}{2nJS} < \frac{1}{3} (S+1)$$

$$\therefore T < \frac{2nJ}{3k_B} S(S+1) \equiv T_c \quad (46)$$

となり，磁性体の温度 T が**臨界温度**^{*8} T_c よりも低ければ， $\eta = 0$ の他に $\eta \neq 0$ の解が存在する．ブリュアン関数は $B_S(0) = 0$ であり， $\eta \neq 0$ に対して $B_S(\eta) \neq 0$ である．従って，式 (41) の磁化は $\eta = 0$ のとき $M_z = 0$ ， $\eta \neq 0$ のとき $M_z \neq 0$ である．この様に，温度が $T < T_c$ であれば，磁性体は外部磁場 H がなくても有限の磁化 ($M_z \neq 0$) を持つことができ，これを**自発磁化**という．

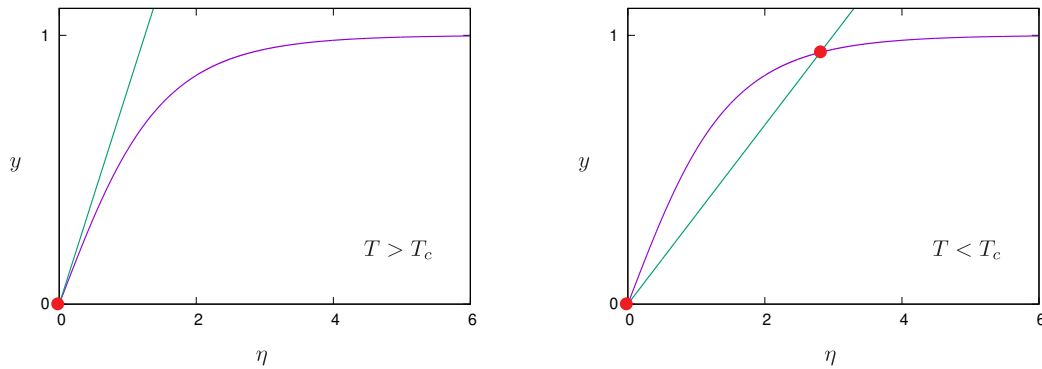


図3：式 (42) と (44) のグラフ．赤丸は交点を表す．

3.4.2 低温極限

η の1次関数である式 (43) または (44) の傾きは，絶対零度の極限 ($T \rightarrow 0$) で

$$\frac{k_B T}{2nJS} \rightarrow 0$$

となってゼロになる．このとき，外部磁場 H の有無に関わらず，図4の様に $\eta \neq 0$ の解は非常に大きくなり，交点におけるブリュアン関数は $\eta \gg 1$ の漸近形

$$B_S(\eta) \approx 1$$

で与えられる．従って，式 (41) の磁化は

$$M_z \approx Ng\mu_0 S$$

となり，温度が十分低ければ，全原子のスピンが一方向に揃うことが解る．

*8 キュリー温度ともいう．

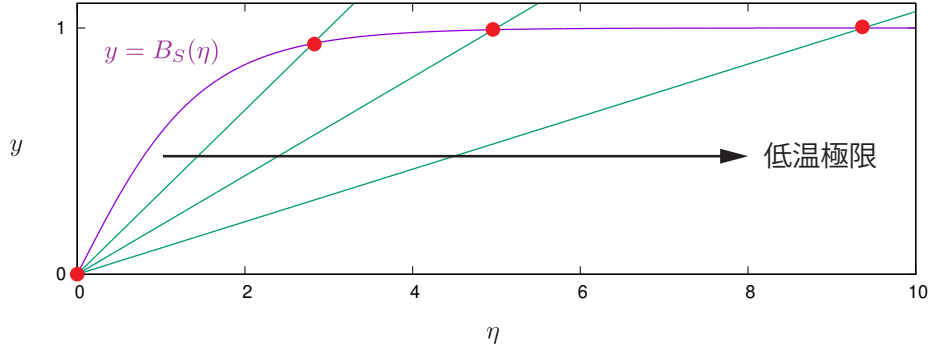


図 4：温度を下げたときのグラフ．赤丸は交点を表す．

3.4.3 高温極限

外部磁場が存在し ($H > 0$)，温度が臨界温度より高い状態 ($T > T_c$) を考えよう．温度が高く，熱エネルギー $k_B T$ が実効的な外部磁場のエネルギー $g\mu_0 H_{\text{eff}}$ よりも十分大きいとすると，式 (35) より $\eta \ll 1$ である．このとき，ブリュアン関数の漸近形は

$$B_S(\eta) \approx \frac{1}{3}(S+1)\eta$$

で与えられ，式 (39) は

$$\frac{1}{3}(S+1)\eta \approx \frac{k_B T}{2nJS} \left(\eta - \frac{g\mu_0 H}{k_B T} \right)$$

となる．これを

$$\frac{2nJ}{3k_B T} S(S+1)\eta = \eta - \frac{g\mu_0 H}{k_B T}$$

と式変形し，式 (46) の臨界温度 T_c の表式を用いると

$$\begin{aligned} \frac{T_c}{T}\eta &= \eta - \frac{g\mu_0 H}{k_B T} \\ \therefore \left(1 - \frac{T_c}{T}\right)\eta &= \frac{g\mu_0 H}{k_B T} \\ \therefore \eta &= \frac{g\mu_0 H}{k_B (T - T_c)} \end{aligned} \tag{47}$$

となる．一方，ブリュアン関数の漸近形を式 (41) の磁化に代入すると

$$\begin{aligned} M_z &\approx Ng\mu_0 S \times \frac{1}{3}(S+1)\eta \\ &= \frac{N(g\mu_0)^2}{3k_B (T - T_c)} S(S+1)H \end{aligned}$$

となる．但し，式 (47) を代入した．従って，磁化率 χ を

$$\chi = \frac{M_z}{H}$$

によって求めると

キュリー・ヴァイスの法則

$$\chi = \frac{N(g\mu_0)^2}{3k_B(T-T_c)} S(S+1) \propto \frac{1}{T-T_c} \quad (48)$$

が得られる。これは式 (22) のキュリーの法則とは異なり、 T ではなく臨界温度までの温度差 $T-T_c$ に反比例する。従って、イジング模型の分子場近似によって求めた磁化率は $T = T_c$ において発散する。

付録 A 双曲線関数の極限值

双曲線関数 $\coth x$ の極限值を計算する。まず、

$$\begin{aligned} \coth x &= \frac{\cosh x}{\sinh x} \\ &= \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}} \end{aligned} \quad (49)$$

であり、 $x \gg 1$ の場合、

$$e^x \gg e^{-x}$$

であるから、式 (49) は

$$\coth x \approx \frac{e^x}{e^x} = 1$$

となる。一方、 $x \ll 1$ の場合、指数関数をテイラー展開して

$$\begin{aligned} e^x + e^{-x} &= \left(1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \cdots\right) + \left(1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} + \cdots\right) \approx 2 + x^2 \\ e^x - e^{-x} &= \left(1 + x + \frac{x^2}{2} + \frac{x^3}{6} + \cdots\right) - \left(1 - x + \frac{x^2}{2} - \frac{x^3}{6} + \cdots\right) \approx 2x + \frac{x^3}{3} \end{aligned}$$

と近似できるから、式 (49) は

$$\begin{aligned} \coth x &\approx \frac{2 + x^2}{2x + \frac{x^3}{3}} \\ &= \frac{1}{x} \left(1 + \frac{x^2}{2}\right) \left(1 + \frac{x^2}{6}\right)^{-1} \end{aligned} \quad (50)$$

と変形できる。また、 $x \ll 1$ なので

$$\left(1 + \frac{x^2}{6}\right)^{-1} \approx 1 - \frac{x^2}{6}$$

と近似することができ，式 (50) は

$$\begin{aligned}\coth x &\approx \frac{1}{x} \left(1 + \frac{x^2}{2}\right) \left(1 - \frac{x^2}{6}\right) \\ &\approx \frac{1}{x} \left(1 + \frac{x^2}{3}\right) \\ &= \frac{1}{x} + \frac{x}{3}\end{aligned}$$

となる．但し， x^4 に比例する項を無視した．以上をまとめると

$$\coth x \approx \begin{cases} 1 & (x \gg 1) \\ \frac{1}{x} + \frac{x}{3} & (x \ll 1) \end{cases}$$

である．

参考文献

- [1] ライフ．統計熱物理学の基礎（中）．吉岡書店, 2008.