

ダイポール相互作用による秩序過程の数値計算 Computational Calculation of Ordered Structure under the Dipole Interaction

黒田 明義¹, 高山 一 東京大学物性研究所

1. はじめに

ダイポール相互作用は、相互作用の方向により極性が変化し、 $1/r^3$ の長距離に力が働く。そのため、その格子、流体系では方向に依存して競合が生じ、隣接相互作用からなる系とは全く異なる振る舞いをする。一般に格子系において正方格子では AF 的な振る舞いをし、最密充填構造では Ferro 的振る舞い[1,2]をされると言われ、磁性流体に代表される系では、鎖状構造[3,4]を取ると言われている。また磁場応答に関しては、ストライプ構造[5]や磁区[6]を生成するという報告がある。本研究は、このダイポール相互作用の特殊性に着目し、秩序状態並びに外場応答性について、計算機を用いた解析を行ったので報告する。

2. 計算手法

まず考える系として、以下の双極子ハミルトニアンで記述される粒子系の運動について考える。

$$H = J \sum_{i,j} \left(\frac{\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j}{r_{ij}^3} - 3 \frac{(\vec{S}_i \cdot \vec{r}_{ij})(\vec{S}_j \cdot \vec{r}_{ij})}{r_{ij}^5} \right). \quad (1)$$

今回は主に非格子系の流体系 MD の計算を主に遂行し、ダイポール相互作用に伴う自己組織化について調べた。計算には OCTA システムの中で、粗視 MD シミュレータである COGNAC[7]による解析を行った。ダイポール相互作用としては、カットオフを用いた Reaction Field 法(手法(1))並びに磁化に対する Ewald 法(手法(2))による計算を行った。また計算結果に関しては、物性研の松下勝義氏並びに菅野量子氏らによるモンテカルロ法並びに、式(2)に従う Landau-Lifshitz-Gilbert 方程式による格子系の計算などとの比較も行った。

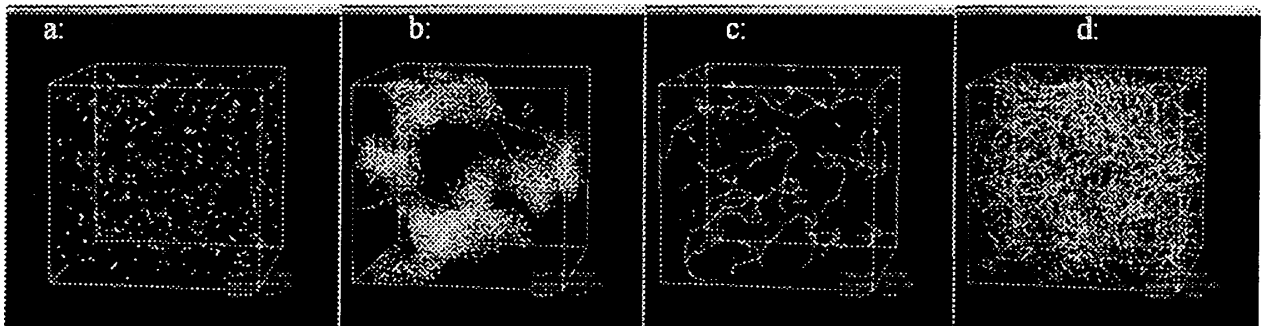


図1 ダイポール相互作用を持つ系の磁性流体計算のスナップショット. a,b: 手法(1)によるカットオフを含む計算. c,d: 手法(2)による長距離計算. a,c: 低密度サンプル. b,d: 高密度サンプル.

¹ kro@issp.u-tokyo.ac.jp

$$\begin{aligned} \frac{d\vec{S}_i}{dt} &= -\vec{S}_i \times \vec{H}_{eff,i} - \alpha \vec{S}_i \times (\vec{S}_i \times \vec{H}_{eff,i}) \\ \vec{H}_{eff,i} &= -\frac{dH}{d\vec{S}_i} + \vec{f}_i \end{aligned} \quad (2)$$

$$\langle \vec{f}_i(t) \rangle = 0, \quad \langle \vec{f}_i^\alpha(t), \vec{f}_i^\beta(0) \rangle = 2D \delta_{ij} \delta^{\alpha\beta} \delta(t)$$

3. 計算結果

まず格子を仮定しない MD による磁性流体のスナップショットを図 1 に示す。図 1-a は手法(1)による低密度計算, 図 1-b が同高密度計算の計算。図 1-c が手法(2)による低密度計算, 図 1-d は同高密度の計算例である。これらを見ると, どちらの場合も鎖状構造を形成するが, その形状並びに集合構造は計算手法や密度により全く異なることが分かる。カットオフを含む方法では, 遠距離まで引力的引き寄せ効果が十分働かない。このため低密度の場合は凝集前に自分自身で末端を処理し, 高密度の場合は螺旋構造の凝集構造を形成する。このような構造は今までに観測されていない構造である。それに対して Ewald 法を用いて長距離まで考慮すると, 低密度でも高密度でも環状構造は生成することなく鎖は成長した。相互作用の及ぶ範囲が異なるだけで秩序状態が変わるのは興味深い。生成する鎖状構造には柔軟性があり, 図 1-b にて観測される螺旋構造は, 境界形状を有限に固定された固体スピン系に生成する渦構造などと似ており, 両者を比較すると興味深い。次に隣接相互作用として AF になるように相互作用を入れた流体系のスナップショットを図 2 に示す。低密度のものが図 2-a であり, AF 状に横方向スタックした鎖状構造があらわれる。これは, 磁性流体の形状を円柱体にした場合のスタック構造[4]と類似した構造であり, ダイポール相互作用の異方性と隣接相互作用の競合の現れであろう。高密度状態である図 2-b は, 集合体として共連続構造を形成した。これは, 一般のダイポール系の凝集構造であるドロップレット+ブリッジ構造と異なる点も興味深い。この鎖構造の直線安定性や磁場応答についても報告する。

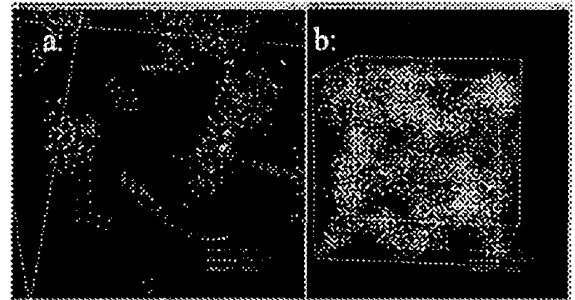


図2 AF な隣接相互作用を持つときのダイポール相互作用系の秩序構造. a:低密度サンプル. b:高密度サンプル.

参考文献

- [1] J. M. Luttinger and L. Tisza Phys. Rev., **70** (1946), 954-964.
- [2] J. F. Fernández and J. J. Alonso, Phys. Rev. B, **62-1** (2000), 53-56.
- [3] A. Ghazali, J. C. Lévy, Phys. Rev. B, **67** (2003), 064409.
- [4] S. C. McGrother and G. Jackson Phys. Rev. Lett., **76-22** (1996), 4183-4186.
- [5] G. Szabó and G. Kádár, Phys. Rev. B, **58-0** (1998), 5584-5587.
- [6] T. Koda, K. Shibasaki and S. Ikeda, Comp. Theor. Polym. Sci., **10** (2000), 335-343.
- [7] A. Aoyagi, F. Sawa, T. Shoji, H. Fukunaga, J. Takimoto and M. Doi, Comp. Phys. Comm., **145** (2002), 267.