

# ダイポール格子系のモンテカルロ計算

東京大学 物性研 富田 裕介<sup>1</sup>, 松下 勝義, 黒田 明義, 高山 一  
日立製作所 基礎研 菅野 量子

## 1 イントロダクション

ここ数年のナノテクノロジーの進展により、ナノサイズの磁性粒子を用いた磁気記憶素子の研究開発に関心が持たれている。これらの磁性粒子ではダイポール相互作用が支配的になるが、このような系の基礎的・系統的なシミュレーションはあまりなされていないように思われる [1]。最近、我々はダイポール格子系の相転移・臨界現象の理解に向けてモンテカルロ (MC) シミュレーションを行っているが、その過程で基底 (低温) 状態におけるダイポール配置がこれまで信じられてきた配置とは異なっていることが明らかになった。本稿では、MC シミュレーションによって得られた結果を示し、シミュレーション結果を再現する単純化されたモデルを提示する。単純化されたモデルとこれまで正しいと信じられてきた解析的計算の比較を行い、基底状態におけるダイポール配置を計算するにあたって何が重要なのかについて考察を行う。

## 2 Luttinger と Tisza の先駆的研究

1946 年、Luttinger と Tisza (LT) は 3 次元ダイポール格子系の基底状態について考察を行った [2]。彼らは  $2 \times 2 \times 2$  の単位立方格子にダイポール配置によって基底状態が敷きつめられる、つまり 2 格子分の並進対称性 ( $\Gamma^2$  対称性) を仮定し計算を行った。ダイポール相互作用によるエネルギーは 2 次形式で書けるため、ダイポール自身の自由度が  $O(3)$  対称性を持つにもかかわらず、基底状態のエネルギーの考察にはダイポール空間  $(\mu_x, \mu_y, \mu_z)$  それぞれの成分に対して、+1 あるいは -1 の 2 通りの配置を考えれば十分である。さらに  $\Gamma^2$  対称性を仮定することで 2 の 8 乗通りの配置のうち 8 つだけが基底状態として取りうる状態として残る。この 8 通りの配置は次のように定義できる。

$$A_{b_x b_y b_z}(l) = (-1)^{b_x l_x + b_y l_y + b_z l_z} \quad (b_x, b_y, b_z, l_x, l_y, l_z = 0, 1) \quad (1)$$

ここで  $b_x, b_y, b_z$  は 0 か 1 の定数で  $l = (l_x, l_y, l_z)$  は単位立方格子の格子点を表す。 $A$  は 8 次元のベクトルで、 $\mu_x, \mu_y, \mu_z$  の 3 成分のダイポールモーメントに対応してそれぞれ  $X, Y, Z$  と記述さ

<sup>1</sup> E-mail: ytomita@issp.u-tokyo.ac.jp

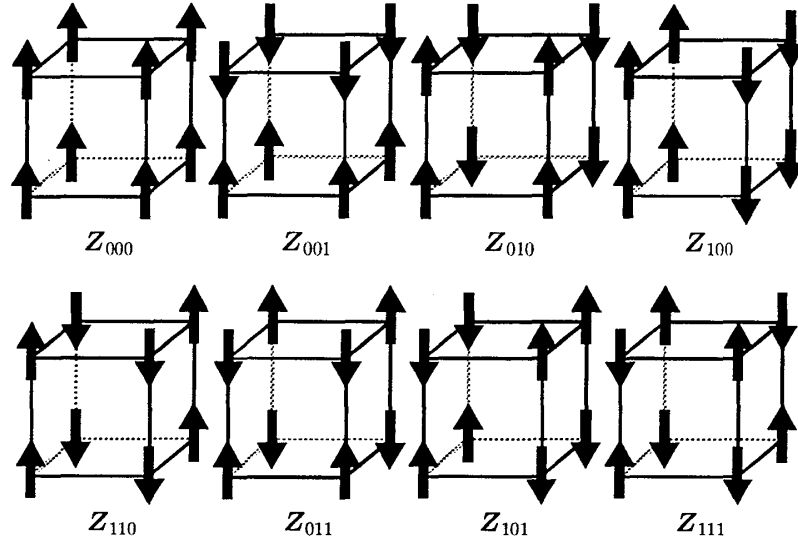


図 1:  $\Gamma^2$  対称性を仮定した場合、基底状態としてダイポール (の  $z$  成分) は、上の 8 通りのダイポール配置のうちのいずれかで敷きつめられる。

れる。図 1 に 8 つの基本配列を示す。単純立方格子において、LT は“反強磁性”配置、

$$aX_{011} + bY_{101} + cZ_{110} \quad (a^2 + b^2 + c^2 = 1) \quad (2)$$

が最もエネルギーが低いことを示した。Luttinger と Tisza が得た体心立方格子の最安定状態については、表 1 に記す。

### 3 計算結果

Luttinger と Tisza の結果の検証を行うため、十分低温における単純立方格子と体心立方格子について MC シミュレーションを行った。ハミルトニアンはシステムサイズ  $L$  の系に対して、

$$\mathcal{H} = \sum_{n_x, n_y, n_z} \sum_{i < j} \left[ \frac{\mu_i \cdot \mu_j}{(r_{ij} + nL)^3} - 3 \frac{(\mu_i \cdot (r_{ij} + nL))(\mu_j \cdot (r_{ij} + nL))}{(r_{ij} + nL)^5} \right] \quad (3)$$

表 1: 体心立方格子における最安定状態。格子点 (l.p.) と体心 (b.c.) の配置は交換可能。第 1 行目は条件  $a^2 + b^2 + c^2 = 1$ , 他の行は  $a^2 + b^2 = 1$  を満たす。

| at l.p.(b.c.)                    | at b.c.(l.p.)                    |
|----------------------------------|----------------------------------|
| $aX_{101} + bY_{110} + cZ_{011}$ | $bX_{110} + cY_{011} + aZ_{101}$ |
| $aX_{101} + bZ_{101}$            | $bX_{101} + aZ_{101}$            |
| $aY_{110} + bX_{110}$            | $bY_{110} + aX_{110}$            |
| $aZ_{011} + bY_{011}$            | $bZ_{011} + aY_{011}$            |

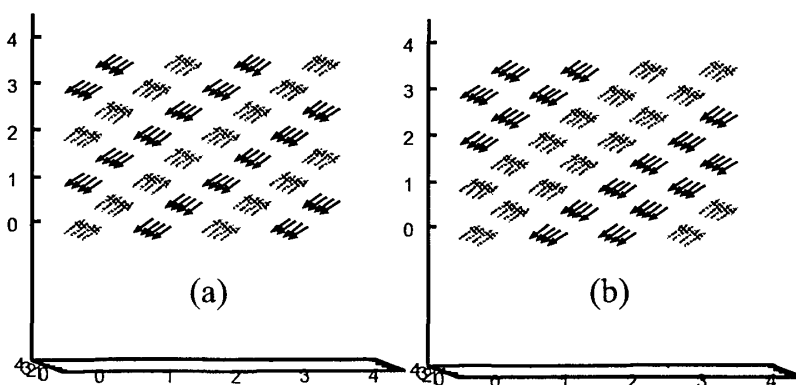


図 2: 体心立方格子 ( $L = 4$ ) の安定状態。(a) LT の結果を満たす状態。(b) MC シミュレーションから得られた状態。表 1 のいずれの状態にも当てはまらない。

となる。ダイポール系では長距離相互作用の減衰の仕方が  $r^{-3}$  なので、系の境界の張り合わせはシステムサイズを越える範囲のスピンの影響まで取り入れなくてはならない。我々は遠方のスピンによる影響を Ewald 法 [3, 4, 5] により取り入れた。

システムサイズ  $L = 2$  の系では、LT が予想したとおりの結果が得られた。また  $L = 4$  の単純立方格子でも同様の結果が得られた。一方、 $L = 4$  の体心立方格子では表 1 で表されるダイポール配置とは異なる安定状態を得た (図 2(b))。図 2(b) は、面内で向きの揃った層 (これから強磁性層と呼ぶ) を重ねた構造になっている。面内でダイポールの向きを揃えつつ、LT の結果に従うダイポール配置を作ることも可能であるが (図 2(a))、図 2(b) では強磁性層が 2 枚ずつ重なっているのに対し、図 2(a) の配置では強磁性層を 1 枚ずつ重ねた構造になっている。我々はシミュレーションで得られた結果を検証するため、強磁性層の厚みに対する系の内部エネルギーを計算した (表 2)。結果から、少なくとも  $L = 8$  までは強磁性層が厚いほどエネルギーが低くなり、その値として LT が計算したエネルギーよりも低いものが得られた。このことから、体心立方格子上のダイポール系に  $\Gamma^2$  対称性を仮定して基底状態を計算してはならないことが分かった。

我々はこの結果をより深く理解するため、単純化したモデルで低温におけるダイポール配置について考えることにする。3次元の問題に取り掛かる前に、より簡単な2次元の問題をまず扱うことにする。正方格子と三角格子における典型的な基底状態を図 3 に示す。ここで我々は次の仮定

表 2: 強磁性層の厚みに対する内部エネルギー依存性

| Thickness of FM layer | $L = 2$  | $L = 4$  | $L = 6$  | $L = 8$  |
|-----------------------|----------|----------|----------|----------|
| 1                     | -7.94368 | -7.94368 | -7.94368 | -7.94368 |
| 2                     | —        | -8.16968 | —        | -8.16968 |
| 3                     | —        | —        | -8.23896 | —        |
| 4                     | —        | —        | —        | -8.27087 |

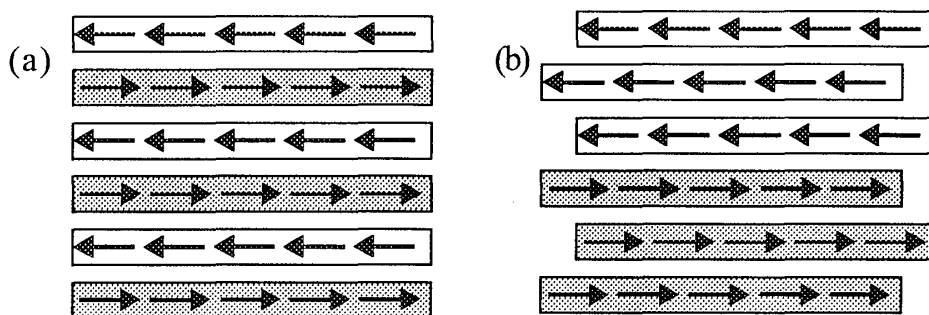


図 3: (a) 正方格子における典型的な基底状態の1つ。(b) 三角格子における典型的な基底状態の一つ。

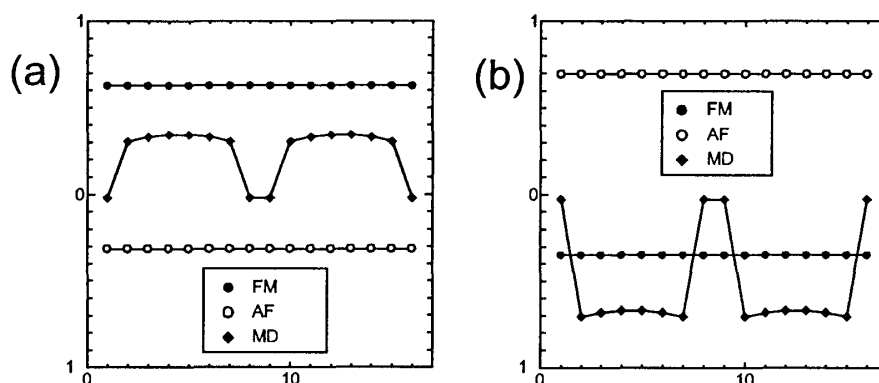


図 4: (a) 正方格子 ( $L = 16$ ) の各サイト (強磁性鎖) におけるエネルギー。横軸はサイトの位置、縦軸はエネルギーである。FM は強磁性的配置、AF は反強磁性的配置、MD は磁区的配置である。各配置に対するサイトあたりのエネルギーは、 $E_{FM} = 0.6256$ ,  $E_{AF} = -0.2906$ ,  $E_{MD} = 0.2385$  であった。(b) 三角格子 ( $L = 16$ ) の各サイトにおけるエネルギー。各配置におけるサイトあたりのエネルギーは、 $E_{FM} = -0.3488$ ,  $E_{AF} = 0.6955$ ,  $E_{MD} = -0.5233$  であった。

をする。1) 2次元ダイポール格子系の基底状態は向きの揃ったダイポール鎖 (以後、強磁性鎖と呼ぶ) の組み合わせで表される。2) 強磁性鎖は図 3 にあるように、右向きか左向きの 2 状態のみで、系には鎖間の相互作用しかないものとする。この仮定の下、系のハミルトニアンは以下のように書ける。

$$\mathcal{H} = \sum_{i \neq j} f(r_{ij}) \sigma_i \sigma_j \quad (\sigma = \pm 1) \quad (4)$$

つまり、モデルは長距離相互作用のある 1 次元イジングスピン鎖にマップされる。鎖間相互作用  $f(r)$  を  $L/2$  のカットオフのもと数値的に評価し、何通りかのスピン  $\sigma$  の配置におけるエネルギーを計算した。図 4 がその結果である。正方格子では反強磁性的配置がもっともエネルギーが低いのにに対し、図 4(b) において三角格子では左半分が上向き、右半分が下向きの磁区的配置のエネルギーが最も低くなっている。この違いは長距離相互作用  $f(r)$  の形から来ている。正方格子の  $f(r)$  は正で距離  $r$  とともに単調に減少している。一方で三角格子の  $f(r)$  は最近接相互作用だけが負で他は正である。そしてその大きさは距離  $r$  とともに単調に減少する。この結果から三角格子に

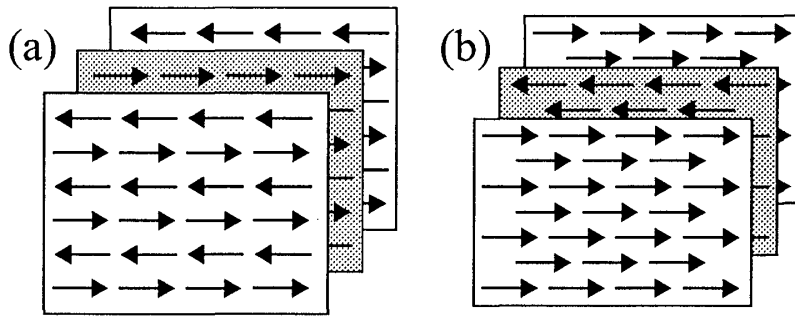


図 5: (a) 単純立方格子における基底状態の一つ。(b) 体心立方格子の (LT の結果に従う) 安定状態の一つ。

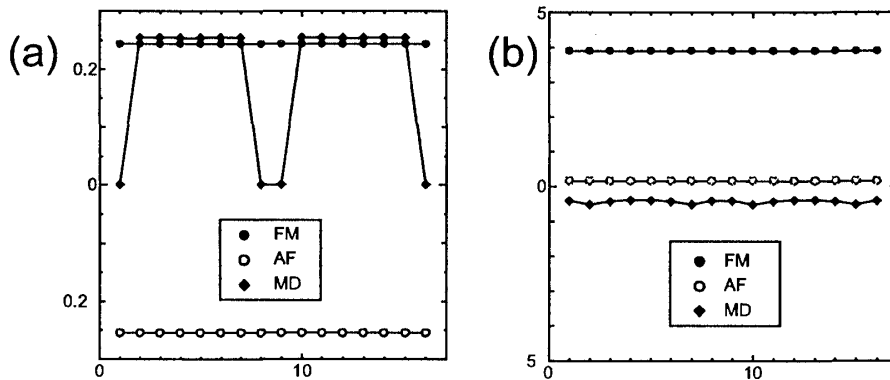


図 6: (a) 単純立方格子 ( $L = 16$ ) の各サイト (面内のダイポール) におけるエネルギー。FM, AF, MD の定義は2次元のときと同じ。サイトあたりのエネルギーは、 $E_{FM} = 0.2437$ ,  $E_{AF} = -0.2437$ ,  $E_{MD} = 0.1907$  であった。(b) 体心立方格子 ( $L = 16$ ) の各サイトにおけるエネルギー。サイトあたりのエネルギーは、 $E_{FM} = 3.9016$ ,  $E_{AF} = 0.1488$ ,  $E_{MD} = -0.4508$  であった。

おける磁区形成について次の考察が得られる。短距離の相互作用のみに着目すると強磁性的にスピンのなす配置が安定であるが、長距離力が反強磁性的であるために磁壁によるエネルギー損失があっても、その損失を上回る長距離相互作用によるエネルギー獲得があれば、系は磁区構造を形成する。

単純化されたモデルにより2次元のダイポール配置をよく説明できることがわかったので、今度はこの方法を3次元に拡張することを考える。単純立方格子と体心立方格子における典型的な安定構造を図5に示す。ここでは次の仮定を置くことにする。1) 面内のダイポール配置は固定されているとする。2) 面内のダイポール配置は図5に示すように2通りしかなく、系には面間の相互作用しかないものとする。この仮定の下、系のハミルトニアンは以下のように書ける。

$$\mathcal{H} = \sum_{i \neq j} f(r_{ij}) \sigma_i \sigma_j \quad (\sigma = \pm 1) \quad (5)$$

つまり、モデルは再び長距離相互作用のある1次元イジングスピン鎖にマップされる。2次元の場合と同様の解析を行った結果が図6である。単純立方格子では反強磁性的スピン配置が、体心立方格子では磁区的スピン配置がエネルギー的に安定であることが示された。体心立方格子の面間

相互作用  $f(r)$  が全て正（反強磁性的）であるにも関わらず、磁区構造を形成するのは注目に値する。これは、 $f(r)$  が上に凸で、距離  $r$  に対しゆっくり減衰することによる。つまり積分値として見たとき、短距離相互作用より中距離相互作用の方が大きいため、ある程度離れた位置に磁区があると、そこでまとめてエネルギーを獲得することができる。このエネルギー獲得を最大化しようとする、スピンの磁区を形成し、それらが交互に現れる構造が安定であると自然に帰結される。システムサイズが  $L = 16$  の系では磁区を上向き下向きそれぞれ1つずつ形成するのが最安定であったが、 $L = 64$  の系ではそれぞれ2つずつ形成するのが最安定であることを確認している。

## 4 まとめ

本稿では、正方格子および単純立方格子では“反強磁性”構造が安定であること、三角格子と体心立方格子では磁区構造が安定であることを示した。また、これまでは正しいと信じられてきた Luttinger と Tisza による  $\Gamma^2$  対称性の仮定は磁区構造が安定となる三角格子や体心立方格子には適用できないことを明らかにした。今後の課題として、面心立方格子の基底状態の計算や臨界温度、それぞれの格子に対する臨界指数の計算と比較による普遍性有無の確認などが残っている。

## 参考文献

- [1] S. Romano, Nuovo Cimento D **7** (1986), 717.
- [2] J. M. Luttinger and L. Tisza, Phys. Rev. **70** (1946), 954.
- [3] P. P. Ewald, Ann. Phys. (Paris) **64** (1921), 253.
- [4] H. Kornfeld, Z. Phys. **22** (1924), 27.
- [5] S. W. de Leeuw, J. W. Perram, and E. R. Smith, Proc. R. Soc. London Ser. A **373** (1980), 27, 57.