

強磁性イジング薄膜のくりこみ変換

神戸大 理 豊 永 昌 彦*

要 約

強磁性イジング薄膜の臨界温度を, Migdal-Kadanoff くりこみ群的近似を用いて計算する。sc 格子の場合, 層の数が n 枚の薄膜の臨界温度を T_{nc} とするとき T_{2c} , T_{3c} , T_{5c} , T_{9c} , T_{17c} , ……の間の関係を調べた。

§ 1. ハミルトニアン

磁氣的相転移現象を理論的に調べるのに, くりこみ群的近似が有力な方法であることは良く知られている。¹⁾ くりこみ群的方法の中で, 最も使いやすいものの一つに, Migdal-Kadanoff (MK) の近似がある。²⁾ 本研究では, MK 近似を強磁性イジング薄膜の臨界現象の研究に応用することを試みる。我々が考えるハミルトニアン H は, 次である。

$$\begin{aligned} H &= -\mathcal{H} / kT \\ &= K_b \sum \sigma_i \cdot \sigma_j + K_s \sum \sigma_l \cdot \sigma_m \end{aligned} \quad (1)$$

但し, $K = J_b / kT$, $K_s = J_s / kT$ 。 J_b は, 内部スピンに関する相互作用, J_s は, 表面スピンに関する相互作用であるが, 正確な定義は, 以下の節で与える。和 $\sum$ は, 最隣接スピン対について行なうものとする。

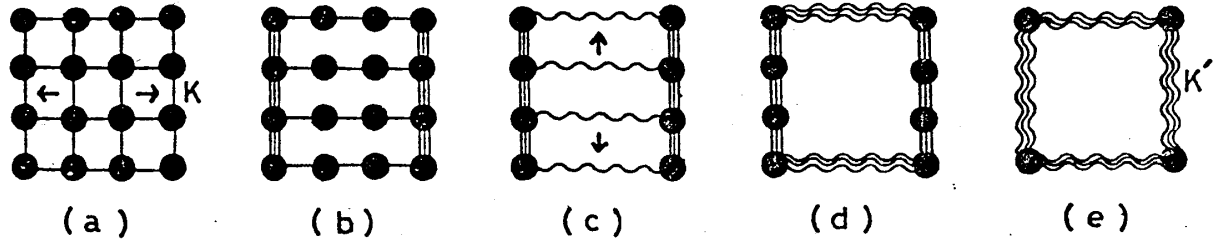
§ 2. MK 法, bond-moving, decimation, bond-dividing

本節では, sc 格子に話を限って考察を行なう。まず無限に広がった結晶格子について, 従来の方法に従って²⁾ MK 法の説明を行う。

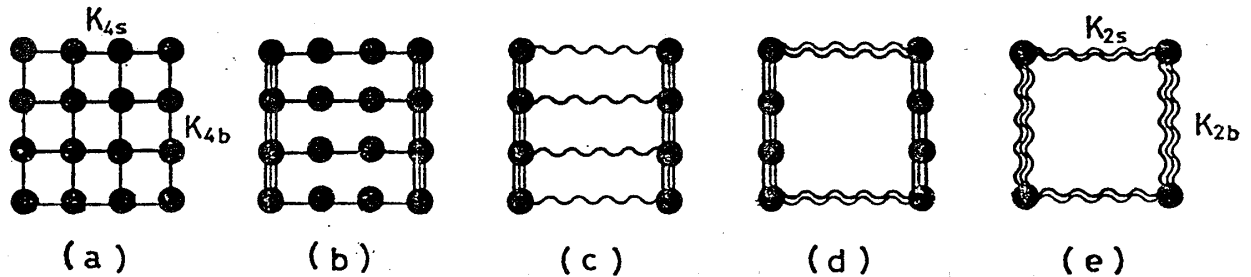
今の場合 K_b のみで K_s はない。スケール因子 r が 3 の時には, 第 1 図に示される様に MK 変換は行われる。

図 1 の (a) $\rightarrow$ (b) は bond-moving. 縦の bond が 3 本になっているのは, 外枠の外部の bond

*) TOYONAGA Masahiko



第1図 scale因子3のMK変換



第2図 $n=4$ の薄膜のMK変換

からの寄与を考慮したもの。

(b) $\rightarrow$ (c) は, decimation. (c) $\rightarrow$ (d) は bond-moving. (d) $\rightarrow$ (e) は decimation. (e) の縦の結合と横の結合の大きさは違う筈だが, 等しいと近似する。そう仮定すると新しい格子は元の格子と同じ形をしているので, 次の Recursion-Equation.

$$K' = \frac{9}{2} \ln \left(\frac{e^{3K} + 3e^{-K}}{3e^K + e^{-3K}} \right) \equiv G_3(K) \quad (2)$$

で, $K' = K$ において固定点即ち臨界点が求められる。臨界点では, correlation length が無限大であるから, 全スピンは, 殆ど平行になり, 従って bond-moving を行ってもよい。実際, 臨界点に話を限れば, bond-moving という操作は, 誤った結論には導かないという事が知られている。³⁾

次に層の数の n が4の薄膜を考える。表面は xy 面に平行で, 表面スピン間の相互作用のみが K_s で, それ以外のスピン間相互作用は K_b とする。この時のMK変換は, 第2図に示される。第2図で4枚の層をもつ薄膜のものである事をはっきりさせるために K_{4b} , K_{4s} と書いておく。(e) で横方向の bond が2本しかないのは枠の外部からの寄与が無いからで, 又, 枠の内部の横方向の2本の bond を1本ずつ上と下へ bond-moving させた理由は, 変換後の格子(2層の薄膜)が上下対称になるようにしたからである。

即ち,

$$K_{2b} = G_3(K_{4b}) \quad (3a)$$

$$K_{2s} = \frac{1}{3} G_3(K_{4s}) + \frac{1}{3} G_3(K_{4b}) \equiv F_3(K_{4s}, K_{4b}) \quad (3b)$$

(3a) と (3b) は, 2層薄膜の臨界温度曲線 ($K_s - K_b$ 曲線) がわかれば 4層薄膜の $K_s - K_b$ 曲線がわかる事を意味する。また, n 層薄膜の分配関数を $Z_n(K_{ns}, K_{nb})$ と表現すると,

$$Z_4(K_{4s}, K_{4b}) = \text{Tr} e^{H(K_{4s}, K_{4b})} \quad (4)$$

である。但し Tr は, n 層薄膜の全スピンについての和をとることを意味する。

MK変換を施すと,

$$\begin{aligned} Z_4(K_{4s}, K_{4b}) &= \text{Tr} e^{H(K_{4s}, K_{4b})} \\ &\simeq \text{Tr} \text{Tr} e^{H(K_{4s}, K_{4b})} \\ &= (e^{x_b})^{\frac{N}{4}} \cdot (e^{x_s})^{\frac{2N}{9}} \text{Tr} e^{H(K_{4s}, K_{4b})} \\ &= e^{\frac{N}{4}x_b + \frac{2}{9}Nx_s} Z_2(K_{2s}, K_{2b}) \end{aligned} \quad (5)$$

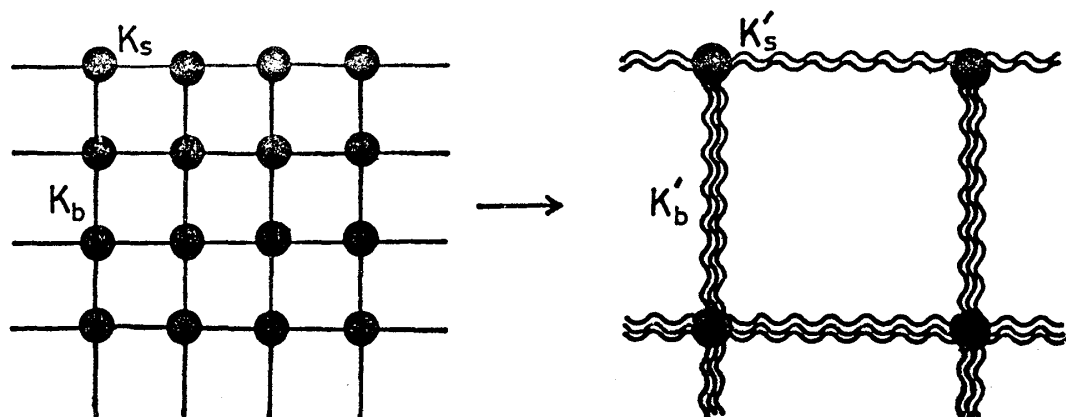
ここで x は, 以下に与えられる K の関数である。

$$x = \frac{1}{2} \ln [(e^{3K} + 3e^{-K}) \cdot (e^{-3K} + 3e^K)] \quad (6)$$

n は 4層薄膜の全スピン数を示し, $K_{4s} = 0$, $K_{4b} = 0$ ($T \rightarrow \infty$) とおくと (5) の右辺は, 2^N となり, 状態数は保存されている。

この様に 4層薄膜は, MK変換によって 2層薄膜に変換される。(5) の式の中の K_{2s}, K_{2b} は臨界温度と考えてもよい。一般の温度の時には, 4層薄膜の熱力学量と 2層薄膜のそれとの間の関係を与えるのが (5) 式ということになる。

(001) 面を表面とする半無限結晶を次に扱う。もし第 2 図に示される様な bond-moving を考えるなら, 表面近くの MK変換は第 3 図の様になるが, K'_s と K'_b は, K_s と K_b の関数として,

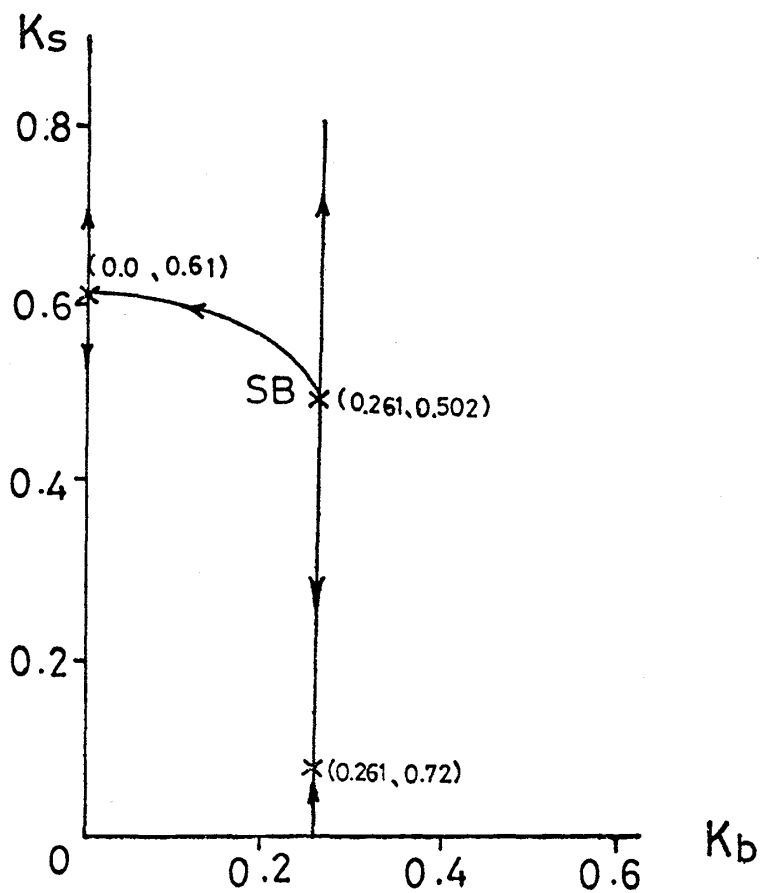


第3図 半無限格子表面に於けるスケール因子3のMK変換

$$K'_b = G_3(K_b)$$

$$K'_s = F_3(K_s, K_b) \quad (7)$$

で与えられ, (7)式より半無限結晶の磁氣的相図(第4図)を求めることができる。フロー

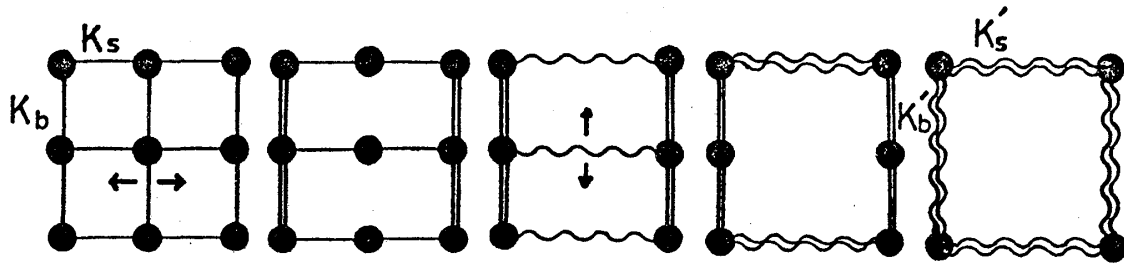


第4図 $n = \infty$ に於ける $K_b - K_s$ 曲線

ダイアグラムは矢印で、又、固定点を×印で示す。図中の SB は、 surface bulk multicritical point と言われるもので、⁴⁾ この理論では、 K_s/K_b の値が、1.93 のときに SB 多重点が表われている。

bond-moving のさせ方によって結論が変化する様にみえるが、bond-moving は、それ程任意には出来ない。

スケール因子 r が 2 の MK 変換を考えよう。くりこみ群の考え方は site スピンをブロックスピンの置き換え、もとのハミルトニアンをブロックスピンの有効相互作用に置きかえるのであるから、ブロック内のスピン全体を平均的なものと考えなければならない。従って bond-moving は対称性を考えて実行するのが自然である。又、bond-moving と decimation という操作で全内部エネルギーが一定という条件のもとで行われなければならない。この二つの条件を満たすには、 $r=2$ について、第 5 図の様式の変換（内部のタテの bond を $\frac{1}{2}$ ずつ右左に分割して移動



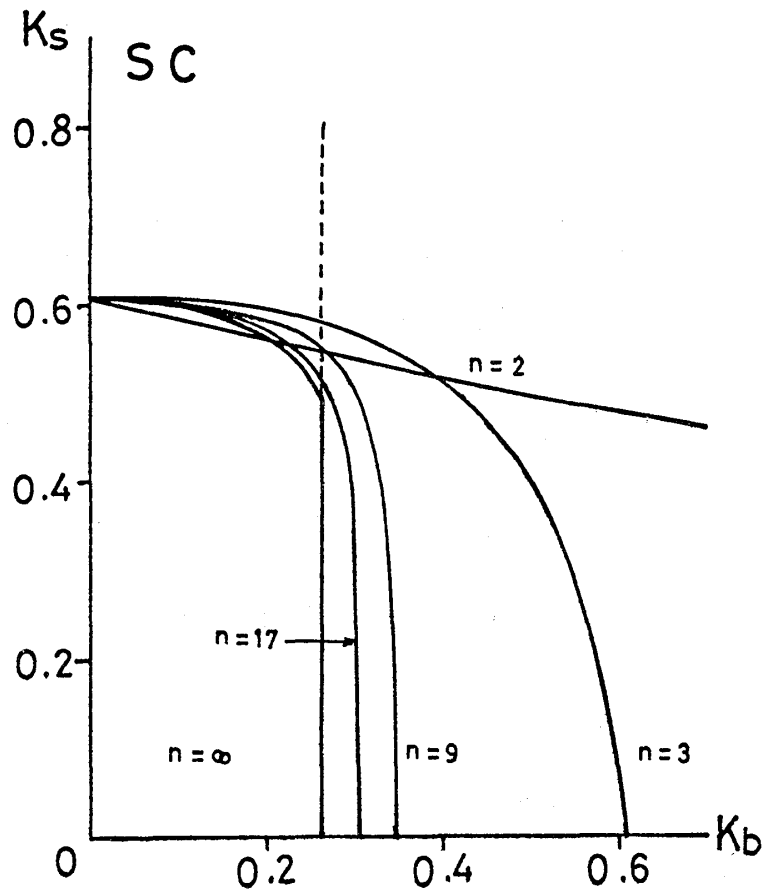
第 5 図 $n=3$ より $n=2$ への MK 変換

させる。bond-dividing and moving) を行えばよい。この bond-dividing 及び bond-moving の考え方を利用すれば、スケール因子 $r=2$ の場合も $r=3$ の場合と同様に計算ができて、3 層薄膜は、2 層薄膜に変換される。又、5 層薄膜も、同じ様に 3 層薄膜に変換される。つまり、2 層薄膜の臨界温度曲線がわかれば 3 層薄膜の臨界温度が、又、5 層薄膜の臨界温度がわかる。更に、9 層、17 層、……薄膜のそれもわかる。

$$\begin{cases} K_{3b} = 2 \ln (\cosh 2K_{2b}) \equiv 2G_2(K_{2b}) \\ K_{3s} = G_2(K_{2s}) + \frac{1}{2} G_2(K_{2b}) \equiv F_2(K_{2s}, K_{2b}) \end{cases} \quad (8)$$

$$\begin{cases} K_{5b} = \frac{3}{2} G_2(K_{3b}) \\ K_{5s} = F_2(K_{2s}, K_{2b}) \\ \vdots \end{cases} \quad (9)$$

第6図に2層薄膜の臨界温度曲線を, Bethe-Peierls 型近似を用いて求め, それを用いて(8), (9)…により (K_{3s}, K_{3b}) , (K_{5s}, K_{5b}) , (K_{9s}, K_{9b}) …を計算した。半無限結晶の時には, $K_b' = G_2(K_b)$ となり, SB 多重点は $K_s/K_b = 1.92$ の時に現われる。この K_s/K_b は, スケール因子 r が2でも3でもそれ程変わらない。

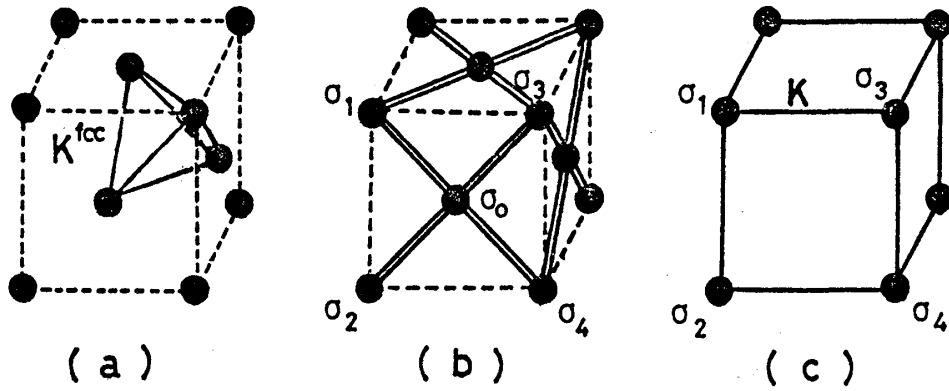


第6図 $n = 2 \sim \infty$ に於ける $K_b - K_s$ 曲線

§ 3. fcc格子とbcc格子の薄膜

(A) fcc 格子

Casher⁵⁾ 等は, fcc 格子のくりこみ計算で, 直観的で簡単な近似を考察し, 非常に良い結果を得た。その考え方は次の通りである。まず fcc の cubic cell を考えると, スピン間の相互作用は第7図(a)の中の実線で示される。それを(b)図の様に cubic cell の面にのみ bond が存在するよう bond-bending を行う。そうしてから σ_0 と $(\sigma_1 + \sigma_2 + \sigma_3 + \sigma_4)$ の間の相互作用を $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3$ と σ_4 の間の相互作用で表わして, 隣接スピンのそれに近似する。但し, その際に全内部エネルギーが不変であるという条件は, 残しておく。結局 fcc 格子のハミルトニアンは, sc 格子



第7図 fcc格子のdecimation及びbond-dividingによるsc格子への変換

の相互作用で書ける。表面スピン間の結合を K_s^{fcc} それ以外の結合を K_b^{fcc} とするとbond-bendingを行った fcc 格子の表面結合 $K_s'^{\text{fcc}}$ は、 $K_s^{\text{fcc}} + \frac{1}{2} K_b^{\text{fcc}}$ で $K_b'^{\text{fcc}}$ は $2K_b^{\text{fcc}}$ となる。面心スピンについて decimation したあとは、表面スピン間の結合 K_s でそれ以外の結合 K_b がそれぞれ下で与えられる sc 格子になる。

$$K_s = \frac{3}{8} \ln \left\{ \cosh 4 \left(K_s^{\text{fcc}} + \frac{1}{2} K_b^{\text{fcc}} \right) \right\} + \frac{3}{16} \ln \left(\cosh 8 K_b^{\text{fcc}} \right)$$

$$K_b = \frac{3}{4} \ln \left\{ \cosh 8 K_b^{\text{fcc}} \right\} \quad (10)$$

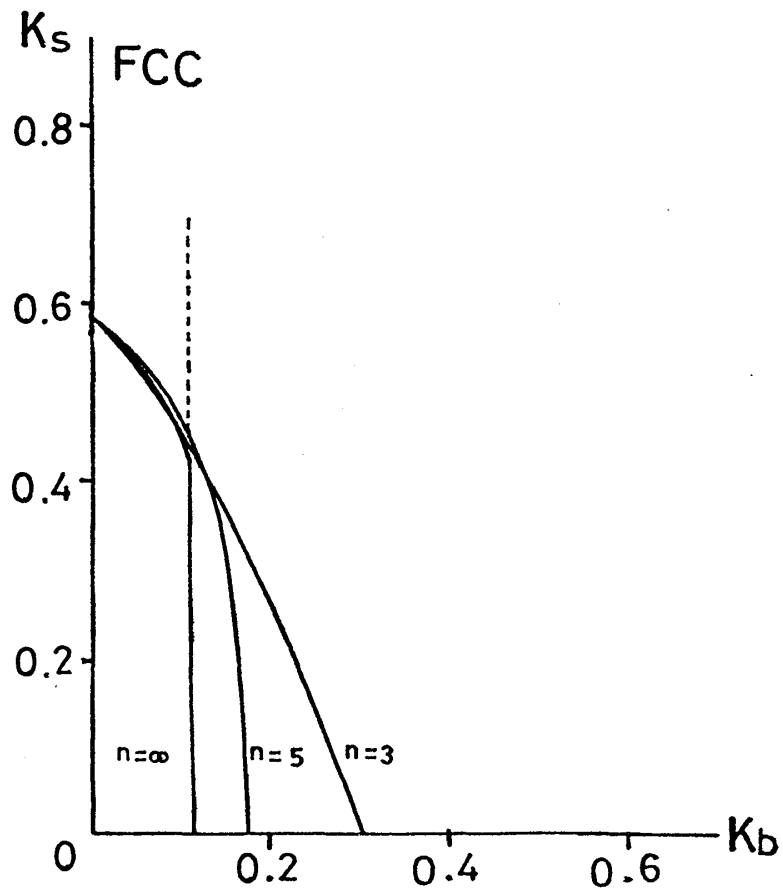
(10) 式と第6図から $K_s^{\text{fcc}} - K_b^{\text{fcc}}$ 曲線を計算すると第8図のようになる。但し、第8図中の数 n は fcc に関する層数で、fcc の3枚は、sc の2枚に相当する。半無限 fcc 格子の表面臨界温度 K_s^{fcc} が K_b^{fcc} が大きくなるにつれて sc に比べ急速に大きくなるのは、表面スピンの4個の内部スピンと結合していることを反映する。(sc 格子のそれは、1個。)

(b) bcc 格子

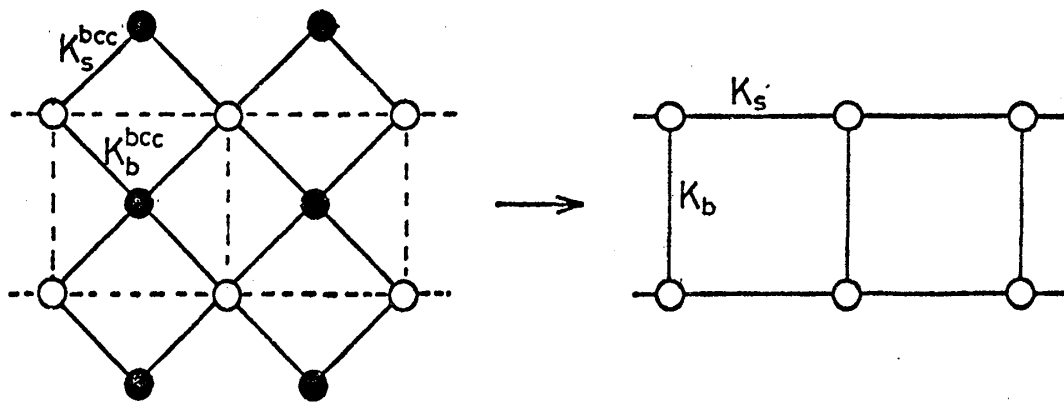
bcc 格子の場合に Casher 等の考え方を応用する。bcc の体心スピンを decimate すると corner スピン間の、2体、4体、6体、8体の相互作用が出てくる。4体以上の相互作用を無視して nn 間の相互作用 K_b をもつ sc 格子に変換する。その K_b の中に正確な臨界値 0.221 を代入すると bcc の臨界値 K_b^{bcc} は、0.166 となり、これは、正確な値 0.157 にかなり近い。(001) 面をもつ bcc 5 層薄膜を、第9図に平面的に示す。体心スピン (●印) を decimate して、2層 sc に変換する。

$$f(K) = \ln(\cosh 6K) + \ln(\cosh 4K) + \frac{1}{4} \ln(\cosh 8K) - \ln(\cosh 2K)$$

$$f_s = \frac{3}{8} \ln \cosh(4K_b^{\text{bcc}}) + \frac{7}{48} f(K_b^{\text{bcc}})$$



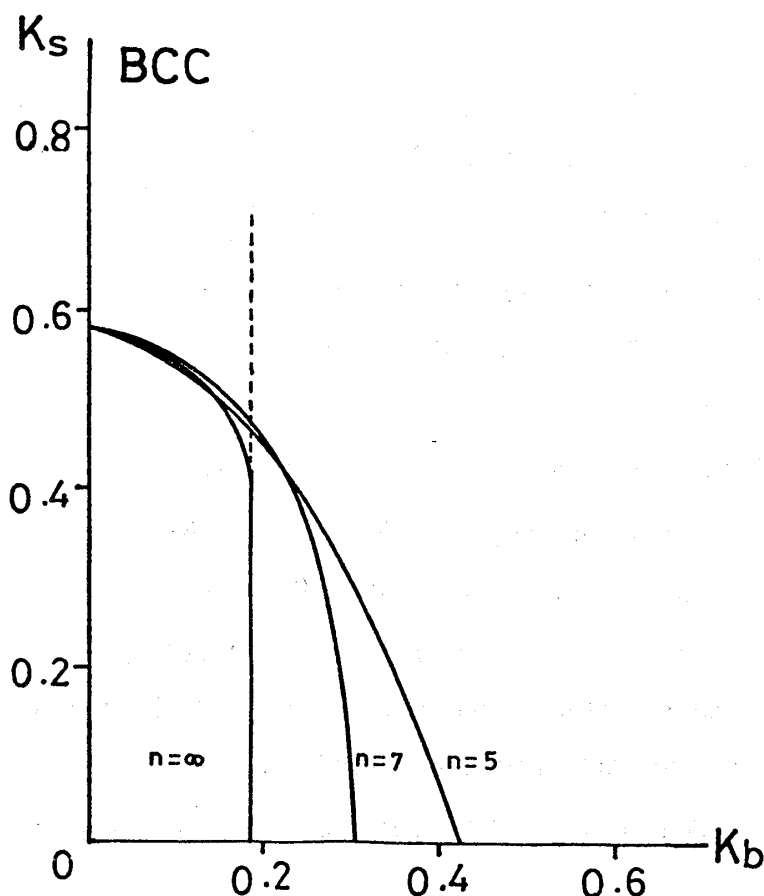
第8図 fcc格子の薄膜 $n = 3 \sim \infty$ の $K_b - K_s$ 曲線



第9図 bcc格子のdecimationによる sc格子への変換

$$K_b = \frac{7}{24} f(K_b^{\text{bcc}}) \quad (11)$$

Cornerスピンの(○印)をdecimateして、3層薄膜に変換すると、3種類の相互作用が出てき

第10図 bcc格子の薄膜 $n = 5 \sim \infty$ の $K_b - K_s$ 曲線

て，うまく計算できない。bccの相図を第10図に示す。

§ 4. おわりに

イジング磁性薄膜の臨界温度の理論を展開してきたが，2層薄膜の臨界点を計算する有力な方法が今のところない。勿論，Niemeijer van Leeuwenの方法を使えば計算できるが，木に竹を継いだ様な話になる。言い忘れたが，イジング薄膜の臨界点の計算にNiemeijer van Leeuwen⁶⁾の方法を応用したNoolandiらの理論があり，⁷⁾ そこでは， $K_s = K_b$ で層の数 n が大きい時の T_c の n 依存性について議論している。

Suzuki-Takano⁸⁾の方法を用いれば，Heisenberg型磁性薄膜(sc格子)の T_c も計算できることを強調しておく。

xy 型スピン平面の固定点がKosterlitz-Thouless order⁹⁾の臨界点だと仮定すれば，その n -dependenceを調べるのは，興味のあることであろう。

最後に，M1の時にこの研究課題を与え，その後も御指導頂いた永井旺二郎先生に深く感謝いたします。

参 考 文 献

- 1) 鈴木増雄 ; 固体物理 11 (1976) 252, 551
H. J. Maris and L. P. Kadanoff; J. Am. Phys. 46 (1978) 652
- 2) A. A. Migdal; Zh. Eksp. Teor. Fiz. 69 (1975) 1457
L. P. Kadanoff; Ann. Phys (N. Y.) 100 (1976) 359
鈴木増雄 ; 固体物理 14 (1979) 723
- 3) L. Turban; J. Phys. C, Solid State Phys. 12 (1979) 4245
- 4) T. W. Burkhardt and E. Eisenriegler; Phys. Rev. B17 (1978) 318
- 5) A. Casher and M. Schwartz; Phys. Rev. 18B (1978) 3440
- 6) Th. Niemeijer and J. M. J. Van Leeuwen; Physica 71A (1974) 17
- 7) L. G. Dunfield and J. Noolandi; Solid State Commun 32 (1979) 441
- 8) M. Suzuki – H. Takano; Phys. Letters 69A (1979) 426
- 9) J. M. Kosterlitz – D. J. Thouless; J. Phys. C; Solid State Phys. 6 (1973) 1181