

以前に配った、英語で書かれている論文について書きます。一応ぼくなりの理解です。

準イジングモデル

この論文では、磁化を連続変数と見たとき、その時間発展の仕方を考える。

磁化を連続変数とみなすということは、あるサイト r における磁化をその付近のスピンへの向き具合の平均値として定義することである。よって、イジングモデルよりさらに進んでよりマクロな視点で物事を考えているということである。イジングモデルを各サイトに並べて考えていると思ってよい。各サイトには多くのスピが入っているということである。

以下に出てくる r, r' はベクトルだと思ってください。あと係数は正です。

自由エネルギー

自由エネルギーの形は

$$F = F_{ani} + F_J + F_{di} + F_{ex}$$

という形になっている。

$$F_{ani} = \alpha \int dr \left(-\frac{1}{2}m(r)^2 + \frac{1}{4}m(r)^4 \right)$$

最初の F_{ani} とは、相転移に関わる主要な部分である。自由エネルギーは最小になっていくわけであるが、この項は全サイトにおいて磁化が一定であるという条件を課したときに、ある温度（キュリー点）以上では $m = 0$ で最小となり、それ以下では $m \neq 0$ なる m で最小となる、という形をとっている。ただし、この形ではキュリー点より小さいある温度に固定されてしまっている。それについては、後で述べる（ランダウの自由エネルギー）。サイトによる磁化の変動というものを考慮していない項である。サイト付近のミクロな交換相互作用の効果はここに集約されている。なお、この部分は uniaxial anisotropy energy と呼ばれているが、uniaxial anisotropy はある一つの軸（ Z 軸とする）に異方性があることを言っている。今回の場合、スピが Z 軸に平行（正の向き）か反平行（負の向き）しかとらないことを言っている。つまり、 m は ± 1 の値をとる。

$$F_J = \beta \int dr \frac{1}{2} |\nabla m(r)|^2$$

次の F_J という項は磁化勾配による自由エネルギーの上昇を表している。こちらはサイトによる磁化の変動を考慮した項となっている。隣り合うサイトが同じ向きになろうとすることを意味しており、こちらも交換相互作用（ただし、サイト間の）である。

$$F_{di} = \gamma \int dr dr' m(r)m(r')G(r, r')$$

$$G(r, r') \propto |r - r'|^{-3}$$

3番目の F_{di} という項は、遠距離相互作用を表している。遠距離ではスピン同士の相互作用は、交換相互作用ではなく、スピが作る磁気双極子モーメント同士のクーロン相互作用が主となってくる。注意すべきことは、今考えている各サイトの距離は遠距離とみなしていることである。各サイトにおける磁化というものはすでに多くのスピンの平均値であるためであり、隣り合うサイト同士は何個ものスピを挟んでいると考えるこ

とができるからである。また、交換相互作用はスピンの向き（符号）が同じであれば、引力であったが、クーロン相互作用であれば、符号が同じであれば斥力となる。同じ向きの磁石が反発するのと同じことである。双極子なので

$$\frac{m(r)m(r')}{|r-r'|^3}$$

のように距離の 3 乗に反比例している。

$$F_{ex} = -h(t) \int dr m(r)$$

最後の項 F_{ex} は外部磁場との磁気的な相互作用である。イジングモデルの第二項とおなじ意味を持っていると考えてよい。 $m(r)$ は正の値をとりやすいということである。

各サイトの磁化の時間発展

$$\begin{aligned} \frac{\partial m}{\partial t} &= -L_0 \frac{\delta(F_{ani} + F_J + F_{di} + F_{ex})}{\delta m(r)} \\ &= L_0 \{ \alpha [m(r) - m(r)^3] - \beta \nabla^2 m(r) - \int dr' m(r') G(r, r') + h(t) \} \end{aligned}$$

時間発展の仕方はこの式によっており、そのため確率的要素はないことに注意してほしい。

なぜ時間発展がこの式によって与えられるかはまだ答えられないのでとりあえず、与えられた物だと思ってほしい。

実装

シミュレーションでは当然連続分布の表示はできないのでサイトは離散的になることに注意する。つまり、積分は和に、微分は差分となる。

論文では β や γ は決まった値（空間、時間的に）としている。 L_0 は 1 としている。

α については先ほどは定数のように書いていたが、サイトごとの何らかの異方性を考慮し、ランダム変数（空間的変動）としている。 α は

$$\alpha \rightarrow \alpha \lambda(r)$$

で置き換えられている。新しく出てきた α は定数である。 γ は正值ランダム変数である。 λ はいじってよいと思われるが、ガウス分布に従うように論文ではしている。 α の値はシミュレーションの途中では変更していない。論文では、いくつかの α についての結果が載せてある。

$h(t)$ は次の形

$$h(t) = h_{ini} - vt$$

をとり、時間的に変動していくものとしている。今回最も注目したいのが v である。 v が小さい時は外部磁場がゆっくりなくなっていく。 v が大きい時は急速に外部磁場がなくなっていく。論文では $h_{ini} = 1.5$ としている。

論文におけるシミュレーションは二種類（大きいのと小さいの）の v で行われている。初期状態 $t = 0$ はランダム（各サイト 1.0 から 1.1 の値）に与えられ、時刻 $t_0 = h_{ini}/v$ としたとき（つまり磁場が消える時刻を

t_0 とする) それ以降は $h(t) = 0$ として $2t_0$ までシミュレートしている。時間間隔は $\delta t = 0.1$ とし、サイトは 512×512 に並んでいて、格子周期的境界条件を課している。

補足事項 ランダウの自由エネルギー

$$F_{ani} = \alpha \int dr \left(-\frac{1}{2}m(r)^2 + \frac{1}{4}m(r)^4 \right)$$

の項について、普通はこの項は、

$$F_{ani} = \int dr \left(a\frac{1}{2}m(r)^2 + b\frac{1}{4}m(r)^4 \right)$$

という形にすることが多いです。ただし、

$$a = a_0(T - T_c)$$

ここで、 $m(r)$ が場所によらず一様な状況を考えてください。($m(r) = m$) このとき、 V を系の体積として、

$$F_{ani} = V \left(-\frac{1}{2}m^2 + \frac{1}{4}m^4 \right)$$

のようになります。この最小値を調べると、 $t > T_c$ では

$$m = 0$$

となり、 $t < T_c$ では

$$m = \sqrt{\frac{|a|}{b}}$$

で最小となります。

本文の F_{ani} では、 a と b を独立に動かせないで温度を変えることができないと書きました。