問題 3

[1]

スピン $S = 1/2$ を持つ孤立磁性原子について、考える。
z 方向に弱い磁場 B を印加した状況下での孤立磁性原子のエネルギーは、

$$-g\mu_B \boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} = -g\mu_B S_z\, B \tag{1}$$

となる。ただし、g, μ_B, S_z はそれぞれ g 因子、ボーア磁子、スピンの z 成分である。

a) ある離散的な値 A の統計平均 $\langle A\rangle$ は

$$\langle A\rangle = \frac{\sum_j A_j \exp(-E_j/k_BT)}{\sum_j \exp(-E_j/k_BT)} \tag{2}$$

で与えられるので、磁化 M の統計平均を求めたい場合は、

$$A = -g\mu_B S_z,\ E = -g\mu_B S_z B \tag{3}$$

とすればよい。ただし、S_z のとりうる量子状態は、$S_z = \pm 1/2$ である。
b) 具体的に磁化の統計平均 $\langle M\rangle$ を求めておく。以下では $\beta = 1/k_BT$ としている。

$$\begin{aligned}\langle M\rangle &= \frac{\sum_j M_j \exp(-\beta E_j)}{\sum_j \exp(-\beta E_j)}\\ &= \frac{g\mu_B}{2}\frac{\exp(\beta g\mu_B B/2) - \exp(-\beta g\mu_B B/2)}{\exp(\beta g\mu_B B/2) + \exp(-\beta g\mu_B B/2)}\\ &= \frac{g\mu_B}{2}\tanh\left(\frac{\beta g\mu_B B}{2}\right)\\ &\simeq \frac{g\mu_B}{2}\frac{\beta g\mu_B B}{2}\end{aligned} \tag{4}$$

ここで $g\mu_B B \ll k_BT$ とした。

$$\therefore\ \chi \quad = \frac{\langle M\rangle}{B} = \frac{g^2\mu_B^2}{4k_BT} \propto T^{-1} \tag{5}$$

以上からキュリーの法則が導かれた。

[2]

強磁性体について、平均場近似のもとで考える。周期的に並んでいるスピン $S = 1/2$ の磁性原子が隣接する他の原子と交換相互作用 J を介して影響しあっているとする。
ある原子に注目し、そのスピン S に関するエネルギーは、次のように表すことができる。

$$J\boldsymbol{S}\cdot\sum_j \boldsymbol{S_j} - g\mu_B\boldsymbol{S}\cdot\boldsymbol{B} = JS_z\sum_j S_{z_j} - g\mu_B S_z\, B \tag{6}$$

ここで、$\sum_j$ は隣接する原子すべてについての和である。第 1 項に対して平均場近似を行う。すなわち

$$JS_z \sum_j S_{z_j} \quad = -g\mu_B S_z B_m \tag{7}$$

これは、隣接する他の原子からの影響を、S_z の熱平均値 $\langle S_z \rangle$ に比例した分子場 B_m に置き換えるということを意味している。
l 個の原子が隣接しているとして、

$$B_m = -\frac{J}{g\mu_B} \sum_j S_{j_z} = -\frac{Jl}{g\mu_B} \langle S_z \rangle \equiv -\alpha \langle S_z \rangle \tag{8}$$

これによってエネルギーは、簡単な１つの孤立原子と同様な表式で表すことができる。

$$-g\mu_B S_z (B + B_m),\ B_m = -\alpha \langle S_z \rangle \tag{9}$$

a) 低磁場における磁化 $M = -g\mu_B \langle S_z \rangle$ は、前問の B を $B + B_m$ に置き換えれば得られる。

$$\therefore \langle M \rangle = \frac{g\mu_B}{2} \tanh\left(\frac{\beta g\mu_B (B + B_m)}{2}\right) \simeq \frac{g\mu_B}{2} \frac{\beta g\mu_B (B + B_m)}{2} \tag{10}$$

b) 上記の磁化 M の自己無撞着方程式を解くと

$$M = \frac{g\mu_B}{2} \frac{\beta g\mu_B (B - \alpha \langle S_z \rangle)}{2} \tag{11}$$

$$\therefore\ M \quad = \frac{g\mu_B}{2} \frac{\beta (g\mu_B B + \alpha M)}{2} \tag{12}$$

$$\therefore\ \frac{M}{B} \quad = \frac{g^2 \mu_B^2}{4k_B} \Big/ \left(T - \frac{g\mu_B \alpha}{4k_B}\right) \tag{13}$$

よって、

$$C = \frac{g^2 \mu_B^2}{4k_B}, \Theta = \frac{g\mu_B \alpha}{4k_B} \tag{14}$$

とすれば、キュリー・ワイスの法則が導かれる。

$$\chi = \frac{C}{T - \Theta} \tag{15}$$

c) ワイス温度 Θ は、

$$\Theta = \frac{Jl}{4k_B} \tag{16}$$

と表されるので、交換相互作用の大きさ J の１乗の比例していることが分かる。

[3]

巨視的には非磁性物質であっても、磁性不純物を含んでいる。低温ではその効果が効いてくるので磁化率が上昇する。