

相転移と磁石とシミュレーションと

1 相転移と

身の回りのものの中には、非常に多数の構成要素からなっているものがあります。ところで、例えば水は、氷(固体)、水(液体)、水蒸気(気体)のように、温度や圧力などの巨視的な変数を指定することで異なる状態を取ります。このような状態を相といいます。

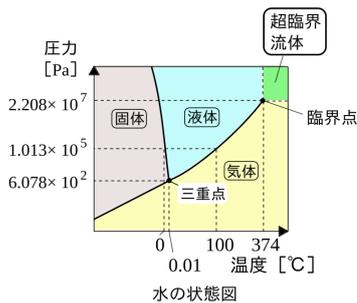


図 1: 水の三態 (wikibook より引用。)

水を温めると水蒸気に変化したり、氷に圧力を加えると水に変化したりといった、巨視的な変数を変化させることにより、相が変化する現象を相転移といいます。この相転移という現象は物理の中に広く見つけられます。例えば、磁石を温めるとくっつかなくなる現象や、鳥が群れを成す現象も相転移であると言えます。

2 磁石と

ご存じのように、磁石は例えばもう一つ磁石を近づけると、引き付けあったり、反発しあったりします。磁石がこのような状態にあるとき、強磁性相にあるといいます。これを温めると、磁石がくっつかなくなることが知られています。^{*1}このような、くっつかなくなった状態を常磁性相といいます。

このような磁石の起源は、スピンという自由度に由来します。これは、(本当に)ざっくりといえば、各原子に磁石が対応していることとってください。強磁性相ではスピンの向きがそろい、常磁性相ではスピンの向きが無秩序になっている状況に対応します。

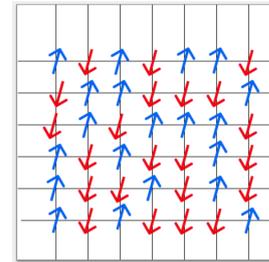


図 2: 磁石の模型 (Ising model)

この磁石を簡略化したモデルの中でも有名なものに、Ising model があります。これを近似を入れて解くと、磁化(どのくらい磁石の性質を持つか)の温度依存性は、以下のように表せます。

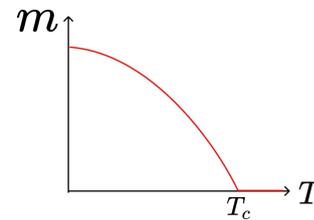


図 3: 磁化の温度依存性 (外部磁場なし)

このふるまいが変わる点を臨界点といいます。

3 シミュレーションと

平衡状態においては、ある状態の出現確率は、その状態のエネルギーを E としたときに $e^{-\beta E}$ に比例することが知られています。この分布をカノニカル分布といいます。 $(\beta = \frac{1}{k_B T}$ は逆温度。) すべての配位についてこれを計算するには、膨大な計算量がかかってしまいます。そこで、演示のシミュレーションでは、マルコフ連鎖モンテカルロ法によってスピンを更新し、計算をしています。これは、ある確率分布から次の確率分布を生成して、長時間極限を取った時にカノニカル分布に収束するようにして、ボルツマン因子が大きい配位を重点的にサンプリングします。

参考文献

- [1] 高橋和孝、西森秀稔、相転移・臨界現象とくりこみ群、丸善出版

*1 ご自宅でもバーナーなどがあれば十分確かめられます。また、NIMS の YouTube チャンネルにもこの実験の動画があります。