モンテカルロ法による強磁性ヒステリシスの

平衡・非平衡シミュレーション

小石川尊信*・白根崇

Equilibrium and non-equilibrium simulation of ferromagnetic hysteresis using Monte Carlo method

KOISHIKAWA Takanobu* and SHIRANE Takashi

Equilibrium and non-equilibrium hysteresis of 3D Ising and Heisenberg model are studied using the Monte Carlo method at various temperatures. Hysteresis loops of equilibrium simulation show qualitative agreement with those of the static mean-field theory. In non-equilibrium simulation, squareness of the hysteresis loops is lower than that in equilibrium simulation, and the coercivities have non-zero values in the temperatures above the equilibrium Curie point.

Keywords: Hysteresis, Monte Carlo method, Ising model, Heisenberg model

1. はじめに

デバイス開発では設計段階において,回路シミュ レータによる性能予測が不可欠である。その際,デ バイスに含まれるインダクタやトランスなどの磁気 素子を形成するコア材料の磁気ヒステリシス特性を 精密に再現できる必要がある。磁気ヒステリシス特 性とは、キュリー温度未満の低温で、強磁性体に磁 場を逆方向も含め交互にかけたときの閉曲線を描く 磁化特性のことである。ヒステリシス特性は温度の 影響を受けやすく、より精密なヒステリシス計算に は温度を自然に扱う必要がある。現在、広く用いら れている SPICE などに実装されているヒステリシス モデルの多くは、便宜的な数学モデルや等価電気回 路から構成されており,自然な方法で温度効果を導 入することはできない[1], [2]。本論文では、温度を 自然に扱うことができる計算法として、モンテカル 口法に着目した[3]。モンテカルロ法は、統計力学に 基づく、乱数を用いたシミュレーション法である。 モンテカルロ法は、これまでのコンピュータ性能の 低さから、時間のかかる磁気ヒステリシス計算に使 用されている例はほとんどない。しかし、近年のコ

ンピュータ性能の向上により、ミクロな物質は扱え るようになってきている。本研究の目的は、Ising モ デルや Heisenberg モデルといった基本的な磁性体モ デルのヒステリシス特性を明らかにすることである。 Ising モデルは磁性体を記述する最も簡単なモデル であり、計算時間が短く、新たなアルゴリズムを考 えるときの基本的なモデルケースとして効果的であ る。また、Ising モデルは、非常に強い一軸異方性の ある磁性体のモデルと考えることができるため、そ の特性を調べることは重要である[4]。一方、より現 実的で様々な磁性体をシミュレートする際の基本と なるモデルである Heisenberg モデルについても計算 を行う必要がある。

本論文では、モンテカルロ法により、Ising モデル と Heisenberg モデルについて、さまざまな温度での 磁気ヒステリシス特性を計算した。両モデルとも、 準平衡掃引において、ヒステリシス特性が急激な変 化を示し、高速掃引において、緩やかな変化を示し た。また、準平衡掃引と比べて、高速掃引は、保磁 力が大きな値を示し、見掛け上のキュリー温度が上 昇するということがわかった。

^{*}本校専攻科電子システム工学専攻2年

2. Ising モデルと Heisenberg モデル

図1に Ising モデルの例を示す。Ising モデルは, 規則的に配置された空間格子上に粒子を固定し,そ のスピンは上向き,または下向きの二つの状態から なる。このように,本論文では,Ising モデルを含む 対象モデルの結晶構造は単純立方格子のみを扱い, 格子サイズ $N = 60^3$ とする。また,格子の境界条件 は周期的境界条件とする。計算では,上向きスピン を $\sigma_i = +1$,下向きスピンを $\sigma_i = -1$ と表す。このス ピンは,最隣接スピン(上下,左右,前後)とのみ 相互作用すると考え,その相互作用の強さをJで表 す。そして,モデルを記述するには,系全体のエネ ルギーを取り扱うハミルトニアン H が用いられる。 ハミルトニアンは次式で表される。

$$\mathcal{H} = -J\sum_{\langle i,j \rangle} \sigma_i \sigma_j - h\sum_i \sigma_i \qquad (1)$$

ここで、<(i,j>は最隣接格子対、hは磁場定数を表 す。第1項は交換エネルギー、第2項は磁場エネル ギーである。本論文では、強磁性体を対象としてい るため、隣り合うスピンの向きが同じとき、交換エ ネルギーが小さくなり、安定状態にならなければい けない。よって、相互作用定数Jは正とし、本論文 では特に、J=1とする。また、磁場エネルギーは、 磁場定数hとスピン σ_i の符号が等しいとき小さくな るので、スピンは磁場方向に揃うことで安定する。

図 2 に Heisenberg モデルの例を示す。Heisenberg モデルはスピンを 3 次元ベクトル表示したモデルで あり、スピンはあらゆる方向をとることができる。 計算では、スピンを $(S_i)^2 \equiv (S_i^x)^2 + (S_i^y)^2 + (S_i^z)^2 = 1 と$ して表す[5],[6]。また、このベクトルスピンの生成 には、Marsaglia の方法を用いた[7]。このスピンは、 Ising モデル同様、最隣接スピンとのみ相互作用する と考える。そして、Heisenberg モデルのハミルトニ アンは、(1)式より、次式に書き直される。

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j - h \sum_i S_i^z \qquad (2)$$

3. モンテカルロ法によるヒステリシス

モンテカルロ法は、磁性体モデルに対しては、ス ピン一つ一つの状態遷移(更新)を確率的にコント ロールするために用いる。この方法の最大の利点は、 確率計算に温度を導入することができ、熱揺らぎが 自然に取り込まれ、有限温度の性質が容易に調べら れる点にある。

スピンの状態更新は,系の全スピンを一度に更新



図1 Ising モデルの例(黒矢印:最隣接相互作用)



図 2 Heisenberg モデルの例 (黒矢印:最隣接相互作用)

するのではなく、ある一つのスピン S_i (Ising モデル では σ_i) に着目して、他のスピンは全て凍結された と仮定し、一つずつ更新していく。よって、状態更 新に必要なエネルギー計算では、系全体のエネルギ ーであるハミルトニアンを求める必要はなく、 S_i に 働く局所エネルギー E_i を計算すればよい。よって、 Ising モデルの場合、局所エネルギー E_i は、(1)式 より、次式で表される。

$$E_i = -\sigma_i \left(J \sum_{j \in \langle i, j \rangle} \sigma_j + h \right)$$
(3)

また、Heisenberg モデルの場合には、(2)式より、 次式で表される。

$$E_i = -JS_i \cdot \sum_{j \in \langle i, j \rangle} S_j - hS_i^z$$
(4)

よって、モンテカルロ法によるスピン更新は以下の ように行われる。

- 1) 一つのスピン S_i をランダムに選択。
- 2) S_iに働く局所エネルギー E_{il}を計算。
- 3) *S_i*をランダムに変化させ、更新候補とする。
- 4) *S_i*に働く局所エネルギー*E_{i2}*を計算。
- 5) エネルギー変化 dE = $E_{i2} E_{i1}$ を計算。
- 6) $dE \le 0$, または, $r \le \exp(-dE/2k_BT)$ であれば, 更新候補を採択。それ以外は,元の状態を保持。 ここで, $r \operatorname{tr} \in (0,1)$ 区間の一様乱数, k_B はボルツマ ン定数,T は温度である。計算では,擬似乱数の生 成に Mersenne Twister を用いた[8]。以上の操作を全 スピン数回実行することを 1MCS (モンテカルロス テップ) と呼ぶ。このようなスピン更新 (MCS) を 多数回実行することにより,温度や磁場などの特定 の条件下における平衡状態に遷移させることができ, 物理量を計算することができる。

モンテカルロ法を用いたヒステリシス計算の手順 を以下に示す。

1) 初期状態設定

換算温度 $2k_{\rm B}T/J$,最大磁場振幅 $h_{\rm max}$,交流磁 場周期 n を指定する。本論文では、Ising モデル について、 $h_{\rm max} = 6.0$, Heisenberg モデルについ て、 $h_{\rm max} = 2.0$ とする。交流磁場周期は両モデ ルとも、n = 400 とする。そして、系のスピン状 態をランダムに決定する。

2) 磁場 h の設定

磁場hを以下のような正弦波交流で変化させる。

$$h = h_{\max} \sin \frac{2\pi}{n} t \quad \left(t = 0, 1, 2, 3, \dots \frac{5n}{4} \right) \quad (5)$$

3) モンテカルロ法実行

スピン更新を 1500MCS 実行し、磁化 *M* を後半の 1000MCS 分計算して平均を求める。

$$M = \frac{1}{N} \sum_{i} \left\langle S_{i}^{z} \right\rangle \tag{6}$$

ここで、 $\langle \cdots \rangle$ は計算を実行したモンテカルロス テップによる平均を表す。また、 S_i^z は Ising モ デルの場合、 σ_i となる。終了したら、現在のス ピン状態を保持したまま、2)に戻る。

以上の2),3)の操作をt=5n/4となるまで繰り返

す。計算プログラムはC言語により作成した。

このように磁場を掃引させることを準平衡掃引と 名付ける。これに対し、3)について、スピン更新 を 1MCS 実行し、磁化 M を計算するように変更する 場合を高速掃引と名付ける。高速掃引では、系が平 衡状態に達する前に磁場を変化させるので、系の過 渡的なヒステリシス特性を調べることができる。

4. 計算結果と考察

図3に、Ising モデルの準平衡掃引における各温度 の磁化曲線を示す。横軸は換算磁場 h/J,縦軸は磁 $(M M_s c = M_s t =$ より、各値は無次元量に規格化されている。 $2k_{\rm B}T/J = 0.5$ において、磁化が正の方向に飽和した 状態で,磁場を最大磁場から徐々に減少すると, h/J ≈ -3.0 で磁化反転が起きる。次に、負の方向に 磁化が飽和した状態で、磁場を最小磁場から増加す ると、h/J≈3.0 で磁化反転が起きる。そして、正の 方向に磁化が飽和し、ループを描く。また、ヒステ リシス特性は急激な変化を示す。温度を増加すると, 保磁力が減少する。 $2k_{\rm B}T/J = 5.0$ では、自発磁化が 消失し、単一曲線になり、ヒステリシス特性が見ら れない。また、 $2k_{\rm B}T/J = 0.5 \sim 2.0$ では、ほぼ長方形 のヒステリシス特性を示す。よって、およそ $2k_{\rm B}T/J \leq 2.0$ では、保磁力のみわかればヒステリシ ス特性を長方形により近似可能であることがわかる。

Ising モデルは、上向きと下向きのスピンのみで構成されたモデルであり、非常に強い一軸異方性のある磁性体のモデルとして考えられる。一軸異方性のある磁性体の異方性方向と平行な方向に磁場を印加すると長方形のヒステリシス特性が得られることが知られており、計算結果は定性的に一致している[9]。

図4に、Ising モデルの高速掃引における各温度の 磁化曲線を示す。 $2k_{\rm B}T/J = 1.0$ において、磁化が正 の方向に飽和した状態で、磁場を最大磁場から徐々 に減少すると、 $h/J \approx -3.5$ で磁化反転が起きる。次 に、負の方向に磁化が飽和した状態で、磁場を最小 磁場から増加すると、 $h/J \approx 3.5$ で磁化反転が起きる。 そして、正の方向に磁化が飽和し、ループを描く。 また、準平衡掃引と比べて緩やかな変化を示す。温 度を増加すると、保磁力が減少する。しかし、 $2k_{\rm B}T/J = 11.0$ においても、自発磁化が完全には消失 せず、 $M/M_{\rm s} \approx 0.03$ の自発磁化を生じ、ヒステリシ ス特性を示す。

図 5 に、Heisenberg モデルの準平衡掃引における 各温度の磁化曲線を示す。 $2k_{\rm B}T/J = 0.25$ において、



図4 Ising モデルの高速掃引における各温度の磁化曲線 ($N = 60^3$)







図6 Heisenberg モデルの高速掃引における各温度の磁化曲線 ($N = 60^3$)

磁化が正の方向に飽和した状態で、磁場を最大磁場 から徐々に減少すると、 $h/J \approx -0.15$ で磁化反転が起 きる。次に、負の方向に磁化が飽和した状態で、磁 場を最小磁場から増加すると、 $h/J \approx 0.15$ で磁化反 転が起きる。そして、正の方向に磁化が飽和し、ル ープを描く。また、Ising モデルの準平衡掃引の結果 と同様に、急激な変化を示す。温度を増加すると、 保磁力が減少する。 $2k_{\rm B}T/J = 1.50$ では、自発磁化が 消失し、単一曲線になり、ヒステリシス特性が見ら れない。

図6に、Heisenberg モデルの高速掃引における各 温度の磁化曲線を示す。 $2k_{\rm B}T/J = 1.0$ において、磁 化が正の方向に飽和した状態で、磁場を最大磁場か ら徐々に減少すると、 $h/J \approx -1.1$ で磁化反転が起き る。次に、負の方向に磁化が飽和した状態で、磁場 を最小磁場から増加すると、 $h/J \approx 1.1$ で磁化反転が 起きる。そして、正の方向に磁化が飽和し、ループ を描く。また、Ising モデルの高速掃引の結果と同様 に、緩やかな変化を示す。しかし、その形状は異な るものである。温度を増加すると、保磁力が減少す る。しかし、 $2k_{\rm B}T/J = 3.5$ においても、自発磁化が 完全には消失せず、 $M/M_{\rm s} \approx 0.015$ の自発磁化を生 じ、ヒステリシス特性を示す。

図7に Ising モデルの保磁力の温度依存性を示す。 保磁力 h_c/J は,磁化曲線が磁化 $M/M_s = 0$ と交わる 2 点の換算磁場h/Jの大きさを平均したものである。 横軸は換算温度 $2k_{\rm B}T/J$ を示す。縦軸は保磁力 h_c/J を示す。準平衡掃引では、 $2k_{\rm B}T/J = 4.75$ で保磁力が 0 となる。よって、キュリー温度 $2k_{\rm B}T_C/J$ が 4.5~4.75 に存在することがわかる。この結果は、モンテカル ロシミュレーションですでに求められている Ising モデルのキュリー温度 $2k_{\rm B}T_C/J \approx 4.5$ の結果と一致 する[10]。高速掃引では、準平衡掃引と比べて、大 きな保磁力を示す。また、 $2k_{\rm B}T_C/J \approx 4.5$ において、 保磁力が 0 にならず、 $2k_{\rm B}T/J = 15.0$ においても $h_c/J \approx 0.11$ の保磁力を示す。

図8にHeisenberg モデルの保磁力の温度依存性を示す。準平衡掃引では、 $2k_{\rm B}T/J=1.5$ で保磁力が0となる。よって、キュリー温度が $1.25\sim1.5$ に存在することがわかる。この結果も、モンテカルロシミュレーションですでに求められている Heisenberg モデルのキュリー温度 $2k_{\rm B}T_{\rm C}/J\approx1.45$ の結果と一致する[11]。高速掃引では、準平衡掃引と比べて、非常に大きな保磁力を示す。また、Ising モデルの結果と同様に、 $2k_{\rm B}T_{\rm C}/J\approx1.45$ において、保磁力が0にならず、 $2k_{\rm B}T/J=6.0$ においても $h_{\rm c}/J\approx0.03$ の保磁力を示す。

このように、両モデルとも、準平衡掃引と比べて、 高速掃引での保磁力が大きな値を示し、見掛け上の キュリー温度が上昇した。このような振舞は、実験 的にも報告されている。Vertesy & Magni はガーネッ ト薄膜について[12], Schneider & Winchell は薄鋼ト ロイドについて[13],周波数を高くするほど、保磁 カが大きくなる現象を観測している。前者は磁壁移 動,後者は渦電流に起因している。また,理論的に も報告されている。Acharyyaは2次元 Ising 強磁性 体について,周波数を高くするほど,保磁力が大き くなることを計算により求めている[14]。一方, Shirakura, et al.は2,3次元 Ising 強磁性体について, 周波数を高くするほど,見掛け上のキュリー温度が 上昇することを計算により求めている[15]。本論文 においては,モデルについて,交換エネルギーと磁 場エネルギーのみの考慮であり,単磁区構造しか形 成せず,磁壁移動の効果とも考えられない。よって, モデルのスピンに直接起因する現象であると考えら れる。しかし,実験的に磁性体のスピンの保磁力を 測定することは,現在の技術では極めて難しく,我々 が知る限り,そのような実験報告はされていない。



図7 Ising モデルの保磁力の温度依存性



図8 Heisenberg モデルの保磁力の温度依存性

図9に、保磁力の温度依存性の両対数表示を示す。 ここで、*T*_{CI}、*T*_{CH}は順に Ising モデル、Heisenberg モデルのキュリー温度である。両モデルとも高速掃 引の保磁力が、温度が高くなるにつれて熱揺らぎの 効果が大きくなり、安定していないことがわかる。 両モデルの準平衡掃引の結果と高速掃引の結果がそ れぞれ、傾きがほぼ同じである領域が存在している。 これは、両モデルの間に共通の法則が成り立つ可能 性を示しているが、詳しい解析は今後の課題である。



図9 保磁力の温度依存性の両対数表示

5. まとめ

モンテカルロ法により, Ising モデルと Heisenberg モデルについて, さまざまな温度での磁気ヒステリ シス特性を計算した。両モデルとも, 準平衡掃引に おいて, ヒステリシス特性が急激な変化を示し, 高 速掃引において, 緩やかな変化を示した。しかし, 高速掃引における Ising モデルと Heisenberg モデル のヒステリシス特性の形状は大きく異なるものであ った。また、準平衡掃引と比べて、高速掃引は、保 磁力が大きな値を示し、見掛け上のキュリー温度が 上昇した。さらに、Ising モデルと Heisenberg モデル の保磁力の間に共通の法則が成り立つ可能性が示さ れた。

参考文献

- [1] F. Preisach, "Über die magnetische nachwirkung," Z. Phys, **94**, pp. 277-302 (1935).
- [2] D. C. JILES and D. L. ATHERTON, "Theory of Ferromagnetic Hysteresis," Journal of Magnetism and Magnetic Materials, **61**, pp. 48-60 (1986).
- [3] 鈴木伸夫,松原史卓:モンテカルロシミュレーションの磁性体研究への応用,日本応用磁気学会誌, 29-6, pp. 624-630 (2005).
- [4]芳田奎:磁性(岩波書店, 1991).
- [5] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, Monte Carlo Methods in Statistical Physics (OXFORD UNIVERSITY PRESS, 1999).
- [6] David P. Landau and Kurt Binder, A Guide to Monte Carlo Simulations in Statistical Physics (CAMBRIDGE UNIVERSITY PRESS, 2000).
- [7] G. Marsaglia, "CHOOSING A POINT FROM THE SURFACE OF A SPHERE," The Annals Mathematical Statistics, 43-2, pp. 645-646 (1972).
- [8] M. Matsumoto and T. Nishimura, "Mersenne Twister: a 623-dimensionally equidistributed uniform pseudorandom number generator," ACM Transactions on Modeling and Computer Simulation, 8, pp. 3–30 (1998).
- [9]近角聰信:強磁性体の物理(下)(裳華房株式会社, 1984).
- [10] 伊藤伸泰, 尾関之康: 非平衡緩和法, 固体物理, 36-12, pp. 839-850 (2001).
- [11] K. Chen, A. M. Ferrenberg and D. P. Landau, "Static critical behavior of three-dimensional classical Heisenberg models: A high-resolution Monte Carlo study," Phys. Rev. B, 48, pp. 3249-3256 (1993).
- [12] G. Vertesy and A. Magni, "Frequency dependence of coercive properties," Journal of Magnetism and Magnetic Materials, 265, pp. 7-12 (2003).
- [13] C. S. Schneider and S. D. Winchell, "Hysteresis in conducting ferromagnets," Physica B, 372, pp. 269-272 (2006).
- [14] M. Acharyya, "Comparison of mean-field and Monte Carlo approaches to dynamic hysteresis in Ising ferromagnets," Physica A, 253, pp. 199-204 (1998).
- [15] T. Shirakura, H. Kajitani and S. Inawashiro, "The phase transition of ferromagnets in an external AC field," J. Phys. C, 20, pp. 6061-6071 (1987).