

Skymion回転運動の分子動力学を用いたシミュレーション

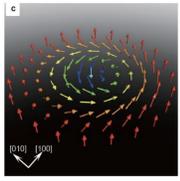
物理工学科四年 鈴木泰成、森川生

背景・目的

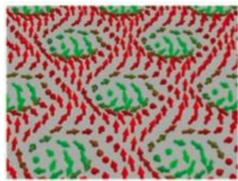
Skymion: 複数のスピンの渦のような構造を形成することで、一つの「粒子」とみなせるもの



Skymionが三角or正方格子状に整列した「Skymion結晶」が理論的に予言される



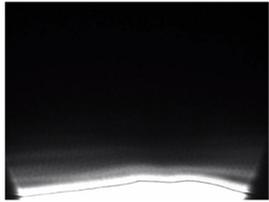
Skymion



Skymion結晶

S. Muhlbauer et al. Science 323, 915 (2009).

ローレンツ透過型電子顕微鏡で結晶の実空間での可視化が実現



X. Yu, Tokura et al, unpublished

→結晶全体の時計回り方向の回転運動が観測され
フーリエ変換によってその回転対称性も確認される

Skymionの運動方程式を分子動力学的に解くことで、Skymionの運動をsimulation
→回転運動は再現できるか？

運動方程式・simulation概要

$$\text{スピン系のLagrangian } L = \frac{hS}{2\pi a^3} \int dr (\cos\theta - p)\dot{\phi} - V$$

ここで θ, ϕ は (x, y) におけるスピンの向きを決定

これにSkymion解 $\phi = q \tan^{-1} \frac{y-Y}{x-X} + \frac{\pi}{2}$, $\theta = \pi - f(r)$, $p = -1$

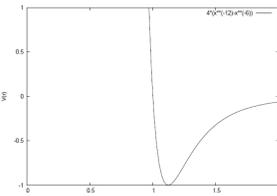
を代入(X, Y はSkymionの中心)すると $L = \frac{hSdq}{2\pi a^3} (Y\dot{X} - X\dot{Y}) - V$

これをEuler-Lagrange方程式に代入すれば

以下のSkymionの運動方程式が得られる

$$\frac{dx_i}{dt} = \frac{\partial V(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N)}{\partial y_i}$$

$$\frac{dy_i}{dt} = -\frac{\partial V(x_1, \dots, x_N, y_1, \dots, y_N)}{\partial x_i}$$



これを差分化

- ・粒子間ポテンシャルはLennard-Jonesポテンシャルと仮定
- ・配置は三角格子、自由境界条件
⇒初期の粒子間隔を変えてみる
- ・五月祭展示で使用した粉体simulationプログラムを用いて実装

系の特異性

外力のない正しいシミュレーションではポテンシャルの総和(系の全エネルギーに対応)が時間保存するはずである (simulationの妥当性のcheck point)

分子動力学の誤差を抑制する手法として、例えばスケールングを用いようとしてもポテンシャルは位置の関数なのでスケールングすることはできない

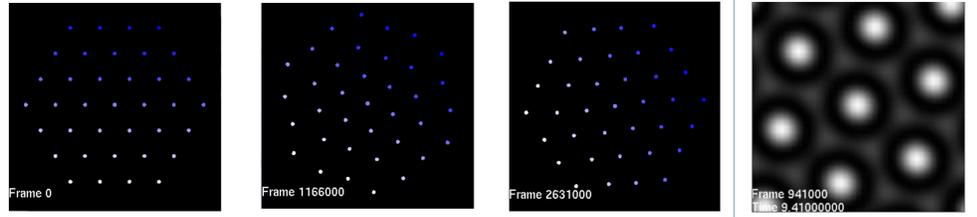
特異性: スケールングの容易な「運動エネルギー」という概念は存在しない!

誤差を極力抑えるため、ステップを細かくし、高次まで考慮するような計算をするしかない

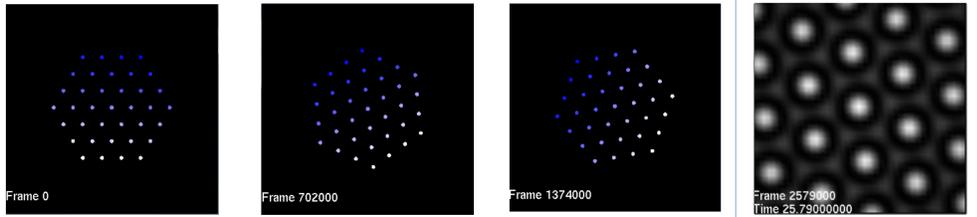
→ $dt = 10^{-5}$ で4次のルンゲ=クッタ法を用いた

simulation結果・考察

粒子間隔大 (時計回りに回転している)

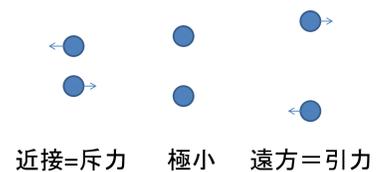
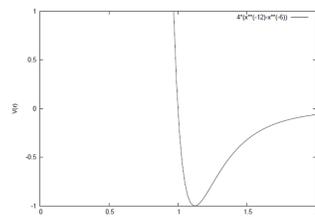


粒子間隔小 (反時計回りに回転している)



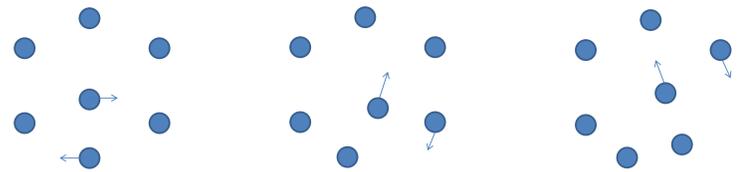
回転の向きは初期配置の粒子間隔の大小によって変わる!

ポテンシャルの傾きの正負に応じて2粒子はどちらかの向きに回転する



反時計回り 時計回り

例えば初期状態で、引力が斥力に比べ優位であるような広い間隔を設定したと仮定すると



→このように全体として時計回りの向きが有意になると思われる

回転の向きは引力が支配的か斥力が支配的かで決定
↓逆に実験結果から
実験系の粒子間ポテンシャルは引力が支配的と考えられる

まとめ

Skymionの運動を分子動力学を用いてsimulationした (4次のルンゲ=クッタ法@ Lennard-Jonesポテンシャル)

simulationの妥当性を「系のエネルギー=ポテンシャル総和が一定」から判断(skymion方程式の特異性)

実験事実である「回転運動」が見られた

Skymionの運動方程式から回転運動の方向について定性的考察を行い、引力が支配的な状況か斥力が支配的な状況かで回転方向が変わることが分かった