

磁性液体のシミュレーション

■ 連絡先 小田竜樹(金沢大学自然科学研究科)

email: oda@cphys.s.kanazawa-u.ac.jp

■ 概要

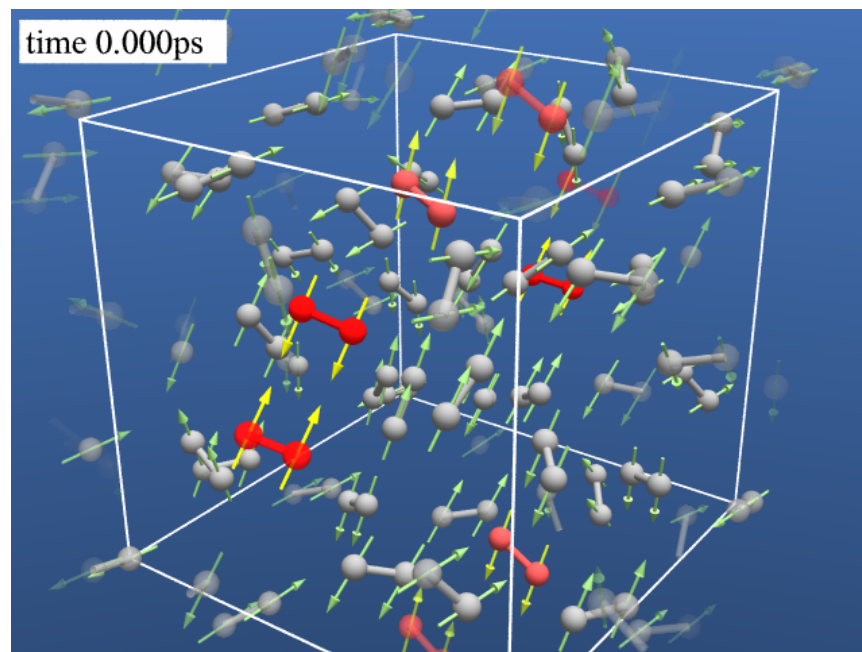
- 磁性液体である液体酸素の分子動力学シミュレーション(温度90K, -183°C)
- 分子磁性の効果も考慮した分子動力学
- ダンベルの形をしたものが分子を表しており、矢印が磁気方向を示している。
- 分子間距離が3.2 Å以内になった赤色ペアのスピンの磁気は、上向きスピンと下向きスピンのペアを作っているのが分かる。ペアを作るとき2つの分子は多くの場合長方形構造を作っている。timeラベルのpsは 10^{-12} 秒である。

■ アルゴリズム

- 非経験的分子動力学法(カー・パリネロ分子動力学)
- ノンコリニア磁性

■ 計算規模

- NEC-SX5の6ノードを用いて計算時間1ステップ33秒、56,000ステップ
- 使用メモリ 16GB
- 適用系は32分子、周期境界条件



■ どのようなことが期待されるか？

- 磁性体の量子シミュレーションの発展が期待される。
- 「液化された酸素(青色)」について、基礎科学の理解が進むと期待される。