二维晶格中 DM 相互作用产生的 Skyrmion 晶体

于鑫阳 18307110064 and 王思源 18307110050

(Dated: 2019.6.9)

本文采用蒙特卡洛方法，模拟了二维正方晶格中 DM 相互作用产生的 Skyrmion 晶体相的性质，并引入了描写海森堡相互作用各向异性的项。我们使用 uniform chirality（χ）和拓扑荷（Q）描写晶格的 skyrmion 密度，以此得到了该系统在零温和有限温情况下的相图。我们还使用了朗道-金兹堡理论对零温情况下相变曲线的方程进行了理论计算，在定性上得到了与模拟一致的结果。

I. 引言

由于海森堡（Heisenberg）相互作用和其它相互作用之间的竞争，在磁体中发现了许多非平凡的自旋纹理，例如磁畴 [7] 和磁泡 [9]，这在过去的几十年中引起了许多关注。近年来，一种由于海森堡相互作用和 Dzyaloshinskii-Moriya（DM）相互作用的竞争而产生的新的具有拓扑保护的自旋纹理 skyrmion（斯格明子）已经成为热点。

Skyrmion 是一种自旋纹理，其中自旋指向包裹球体的所有方向 [10]。它首先由 Skyrme 在 20 世纪 60 年代提出来解释核物理中重子的存在 [8]。然而，许多理论预测 Dzyaloshinskii-Moriya 相互作用也将导致凝聚态物质系统中产生称为 skyrmion 的准粒子激发 [2]。最近的实验表明它们存在于像 MnSi 这样的二维铁磁体中 [6]。由于它们在所谓的 MnSi 的 A 相中的稳定性，具有 skyrmion 的磁体被认为非常适合于数据存储和转移，并且具有自旋电子学的潜在技术应用 [10]。因此，研究正常相和有 skyrmion 的相（所谓的 skyrmion 晶体）之间的相变，以及外部磁场下的 skyrmion 响应动力学以便更好地操纵它们，是非常重要的。这篇论文中，我们在 100×100 的二维正方晶格上研究了有着如下包含了满足对称性的所有各向异性项的哈密顿量的自旋系统:

$$
\begin{aligned}
H = & -J\sum_{\langle i,j\rangle}\mathbf{S}_i\cdot\mathbf{S}_j \\
& -D\sum_i\left[(\mathbf{S}_i\times\mathbf{S}_{i+\hat{x}})\cdot\hat{x}+(\mathbf{S}_i\times\mathbf{S}_{i+\hat{y}})\cdot\hat{y}\right] \\
& -\mathbf{B}\cdot\sum_i\mathbf{S}_i \\
& +A_1\sum_i\left[(S_i^x)^4+(S_i^y)^4+(S_i^z)^4\right] \\
& -A_2\sum_i\left(S_i^xS_{i+\hat{x}}^x+S_i^yS_{i+\hat{y}}^y\right)
\end{aligned}
\tag{1}
$$

在其他参数给定时，随着外加磁场的增大，该系统一共会落入三个主要的相中，分别是螺旋自旋相 (helical spin/spiral spin,HS/SS)，skyrmion 晶体相 (SC) 和铁磁相 (FM)。采取周期性边界条件并通过标准的 metropolis 蒙特卡洛方法和退火算法，我们得到了不同 A_2 和 $\mathbf{B}$ 下系统的基态构型，并发现每个格点的磁化率以及拓扑荷密度都可以作为用来表示 skyrmion 密度的物理量。我们对比了这两种方法，并最终利用平均磁化率得到了体系的 A_2-B 相图及 $B-T$ 相图，同时计算了不同温度下磁矩，磁化率随外场的变化曲线。另外，我们还使用朗道-金兹堡理论和有限元方法对 SC-FM,SS-SC 相变线进行了理论计算。

II. 蒙特卡洛模拟

我们将 J 取为 1 作为能量的单位，并取 $D=\sqrt{6}$,$B=B\hat{z}$。我们首先研究了在 $T=0$ 时系统的相图。由于当 A_1 在一个较大的范围内变化时系统都处于相同的基态，不失一般性，我们将 A_1 取为 0.5。我们引入量 χ_i(local chirality) 来表示局域自旋排列的拓扑性质，它由下式给出:

$$
8\pi\chi_i=\mathbf{S}_i\cdot(\mathbf{S}_{i+\hat{x}}\times\mathbf{S}_{i+\hat{y}})+\mathbf{S}_i\cdot(\mathbf{S}_{i-\hat{x}}\times\mathbf{S}_{i-\hat{y}}) \tag{2}
$$

众所周知，在连续极限下，一个孤立的 skyrmion 将给出 $\chi=\sum_i\chi_i=1$，而对于不存在 skyrmion 的情况，这个值将是零 [3]，于是 χ 就表示了这个相的 skyrmion 密度。对于每一组 A_2 和 B，我们得到基态并计算 χ。得到的相图如图 1 所示，可以明显地看到三种不同的相的存在，并且 SC-FM 相变线近似为一条直线，即随着 A_2 的增加，发生 SC-FM 相变所需的磁场也近似线性地增加。这是由于 A_2 描述的是海森堡相互作用

中 xy 方向自旋分量的交换作用与 z 方向自旋分量的交换作用的不同程度，且 A_2 越大，xy 方向上的交换作用就越强，从而自旋更倾向于沿 xy 方向排列，导致使得自旋全部沿 z 方向排列以形成 FM 相所需的磁场变强。而在磁场很小时，系统处于 SS 相，它纯粹是由 DM 相互作用与海森堡相互作用的竞争而形成的。同样，由于 A_2 的增大会加强海森堡相互作用，可以看出 SS-SC 相变点处的磁场大小也是随着 A_2 的增加而缓慢增加。由此可见，相图的形态与定性的考虑是吻合的。

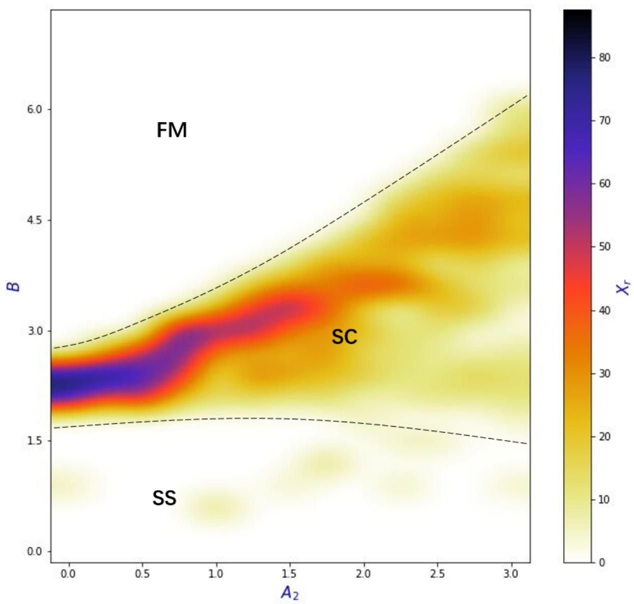

图 1. 在 $D=\sqrt{6}$，$J=1$ 情况下的零温 ($T=0.001$) 相图。我们一共测量了 7×25 个点，其中每一个点通过 2×10^5(每一个自旋被翻转的次数) 次蒙特卡洛退火降温至 $T/J=0.001$ 获得。图中的颜色反映了量 χ 的大小。

晶格的总拓扑荷 Q 按下式定义：

$$4\pi Q=\int \mathrm{d}^2 r\left(\frac{\partial \hat{\mathbf{n}}}{\partial x}\times\frac{\partial \hat{\mathbf{n}}}{\partial y}\right)\cdot\hat{\mathbf{n}} \tag{3}$$

其中 $\hat{\mathbf{n}}=\mathbf{M}/|\mathbf{M}|$ 为沿每个点磁矩方向的单位矢量。它也是一个可以描述 skyrmion 密度的不错参量。在离散情况下，我们可以用以下一系列公式计算它 [1]：

$$Q=\sum_{x^*} q(x^*) \tag{4}$$

其中 x^* 代表每一个正方形晶胞的中心。而 q 是拓扑荷密度：

$$q(x^*)=\frac{1}{4\pi}\{(\sigma A)(\mathbf{S}_1,\mathbf{S}_2,\mathbf{S}_3)+(\sigma A)(\mathbf{S}_1,\mathbf{S}_3,\mathbf{S}_4)\} \tag{5}$$

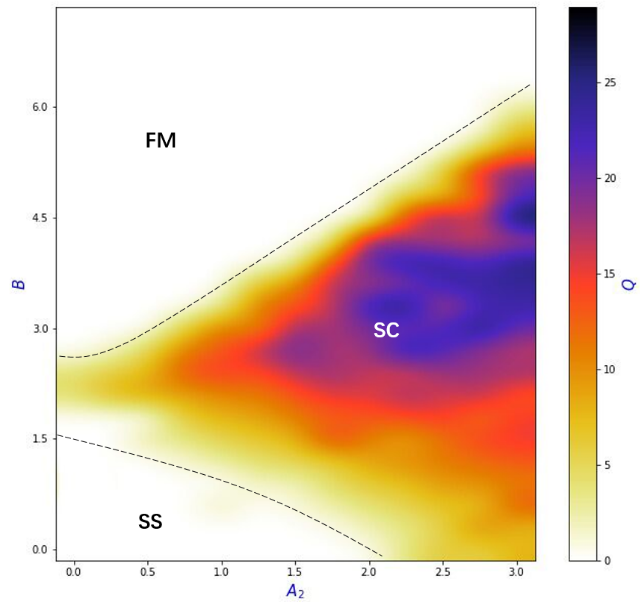

图 2. 在 $D=\sqrt{6}$，$J=1$ 情况下的零温 ($T=0.001$) 相图。我们一共测量了 7×25 个点，其中每一个点通过 2×10^5(每一个自旋被翻转的次数) 次蒙特卡洛退火降温至 $T/J=0.001$ 获得。图中的颜色反映了总拓扑荷 Q 的大小。

其中 $(\sigma A)(\mathbf{S}_1,\mathbf{S}_2,\mathbf{S}_3)$ 是由三个自旋张成的球面三角形的面积（区分正负号），它由下式给出：

$$\exp\left(\frac{1}{2}\mathrm{i}\sigma A\right)=\rho^{-1}\{1+\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2+\mathbf{S}_2\cdot\mathbf{S}_3+\mathbf{S}_3\cdot\mathbf{S}_1 + \mathrm{i}\mathbf{S}_1\cdot(\mathbf{S}_2\times\mathbf{S}_3)\} \tag{6}$$

其中

$$\rho\overset{\text{def}}{=}\{2(1+\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2)(1+\mathbf{S}_2\cdot\mathbf{S}_3)(1+\mathbf{S}_3\cdot\mathbf{S}_1)\}^{1/2}>0 \tag{7}$$

这需要除去 $(1+\mathbf{S}_1\cdot\mathbf{S}_2)(1+\mathbf{S}_2\cdot\mathbf{S}_3)(1+\mathbf{S}_3\cdot\mathbf{S}_1)<0$ 的情况，对于这种情况，我们就直接将 $q(x^*)$ 取为零。对于一个孤立的涡旋（vertex)，晶格的总拓扑荷为 $\pm 1/2$；对于一个孤立的 skyrmion，晶格的总拓扑荷为 1；对于螺旋自旋态和铁磁态，总拓扑荷将趋近于零。为了尽量使拓扑荷能够描述体系的 skyrmion 密度，经蒙特卡洛模拟后，对那些 $Q<0$ 的点，我们直接令 $Q=0$，而那些 $Q>0$ 的点则不作改变。得到的相图如图 2 所示。可见，对于 SC-FM 相变线，二种方法得到的结果是基本一致的。而对于 SS-SC 相变以及两者给出的 skyrmion 密度，两种方法得到的结果存在较大差异。我们将在理论部分继续研究两种方法产生不同结果的原因。

我们接下来研究了以温度 T 和磁场 B 作为参量

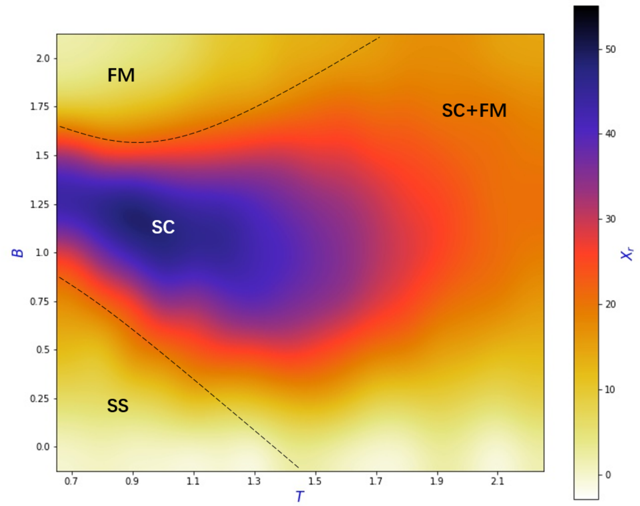

图 3. 在 $D=\sqrt{6}$，$A_1=0.5$，$A_2=0$ 和 $J=1$ 的条件下 T 和 B 的相图。根据 20×9 个数据点绘制，其中每一个点使用了 5×10^4(每一个自旋被翻转的次数) 次蒙特卡洛步。图中的颜色代表 χ 的值。两条虚线 SS-SC 和 SC-FM 的相变线。图中的黑色圆圈标出了 $\partial\chi/\partial B$ 发生突变的点，这些点是根据温度 T 给定时的 χ-B 图确定的。

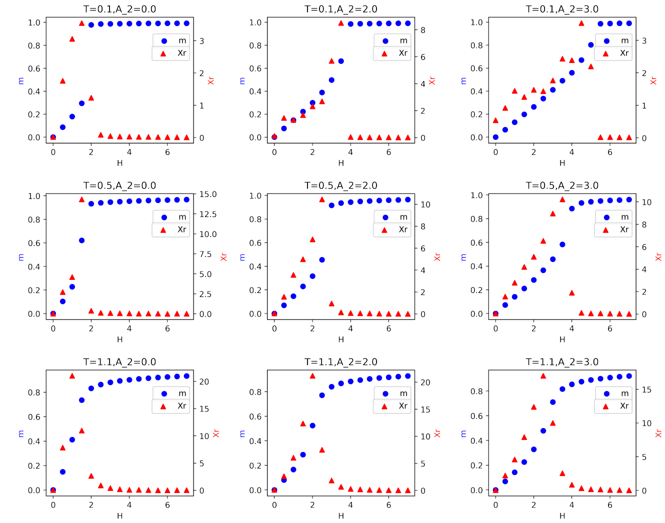

图 4. m-B（蓝色圆点）和 χ-B（红色三角形）图，图中的每个点都使用了 5×10^4(每一个自旋被翻转的次数) 次蒙特卡洛步。参量 D，J 和 A_1 均保持原来的值不作改变。

的相图。这时，我们将 A_2 取为零，保持 J、D 和 A_1 不变。仍然使用量 χ 来判断系统所处的相，得到的相图如图 3 所示。可见，skyrmion 在较大的一段温度范围内均存在，且在这样一段温度范围内，随着温度的升高，发生 SS-SC 相变和 SC-FM 相变所需的磁场均降低；而在温度升高到一定程度之后，SC 相消失。这说明，在温度较低时，热涨落有助于体系从 SS 相过渡到 SC 相，但当温度足够高，以至于热涨落足够剧烈时，有序的 SC 相和 SS 相均无法存在。 图 4 显示了当 T 和 A_2 固定时，平均磁化强度 m 和量 χ 是如何随 B 变化的。我们发现，对于不同的参数选择，曲线的性态基本一致，且量 χ 从有限值突变为零的点和平均磁矩 m 升高至 1 并保持不变的点基本相同，从而进一步证明了使用量 χ 判断 SC-FM 相变的有效性。从中可见，当其它各参量相同时，增大 A_2 或降低温度 T 可以使 skyrmion 在更大的磁场范围下存在。

另外，当 B 增加时，χ 总是先增加，在达到一个最大值后迅速下降到零。这种曲线的形态意味着 $\partial\chi/\partial B$ 发生了突变，这暗示了一种二级相变的发生。然而，如图 3 中的黑色圆圈所示出的，可以发现该转变既不是 SS-SC 相变也不是 SC-FM 相变（在 χ 恰好变为零的点处发生）。事实上，当固定 T 而在 B 增加期间，这个转变发生在 skyrmion 密度（即量 χ）达到其最大值的点。在所考虑的温度范围内 $(0.1<T<1.1)$，可以发现对于更高的温度，转变所需的 H 略微减小，而 $\chi_{\max}$ 的值则明显增加（注意图 4 中各图的 χ 轴的标度）。另外值得注意的是，χ-H 图线的形态非常类似于 λ-相变中的 C_V-T 图线。这样一种不寻常的相似性是值得进一步研究的。

III. 朗道-金兹堡理论计算

除了对系统进行蒙特卡洛模拟，我们还可以通过理论计算不同构型（螺旋自旋态，skyrmion 晶体态，铁磁态）对能量的贡献，从而确定系统在基态究竟处于哪一个相。文献 [5] 从自旋波以及 skyrmion 的理论解出发，通过变分分析严格地计算了在参数 D,J 给定时，三种构型的能量密度，获得了发生相变的临界磁场的理论结果。然而这篇文章中的哈密顿量并没有考虑 A_1，A_2 项。在这一部分，我们仿照文献 [5] 的思路，但考虑 A_2 项。我们将计算系统在不同 A_2 下发生 skyrmion 晶体-铁磁相和螺旋自旋态-skyrmion 相相变的临界磁场，并与前一部分中蒙特卡洛模拟所得的结果进行对比。

对于我们考虑的手性磁体，其离散版本的哈密顿量由式 (1) 描述，而其有效连续朗道-金兹堡自由能则

由下式给出：

$$
\begin{aligned}
\mathcal{F}[\mathbf{M}] = \int \mathrm{d}^2 r \Big\{ & \frac{J}{2}(\nabla\mathbf{M})^2 + \frac{D}{a}\mathbf{M}\cdot(\nabla\times\mathbf{M}) \\
& - \frac{1}{a^2}\mathbf{B}\cdot\mathbf{M} \\
& + \frac{A_1}{a^2}\left(M_x^4 + M_y^4 + M_z^4\right) \\
& - \frac{A_2}{2}\left[(\nabla_x M_x)^2 + (\nabla_y M_y)^2\right] \Big\}
\end{aligned} \tag{8}
$$

如果用球坐标 (θ,ϕ) 来表述 ($O(3)$ 表示)，则一个孤立的，在 $r=0$ 处与磁场反平行，在 $r=\infty$ 处与磁场平行的 skyrmion 是指局域自旋朝向满足 $\theta=\theta(r)$ 同时 $\phi=\varphi-\pi/2$，且满足边界条件 $\theta(0)=\pi$,$\theta(\infty)=0$ 的自旋构型 (其中 (r,φ) 是平面上的极坐标)。

为了能更清晰地观察 SC-FM 相变，我们将平面上所有自旋沿 z 方向的铁磁构型的自由能设为 0。在这个零点下，一个孤立的 skyrmion 的总自由能为:

$$
\begin{aligned}
F_{\mathrm{Sk}} = \int 4\pi r \mathrm{d}r \Bigg[& \left(\frac{1}{2}\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r} + d\right)^2 - d^2 \\
& + \frac{d}{r}\sin\theta\cos\theta + \frac{1}{4r^2}\sin^2\theta \\
& + \frac{A_2}{16}\left\{\frac{\sin^2\theta}{r^2} + \cos^2\theta\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r}\right)^2\right\} - b(\cos\theta - 1)\Bigg]
\end{aligned} \tag{9}
$$

我们在附录中将证明这个公式，其中参量定义为 $d=D/2$,$b=B/2$, 并默认 $J=1$。

在实际计算中，我们还仿照文献 [5] 引入了一个截断 R, 使 $r>R$ 时有 $\theta(r)=0$。截断 R 可以被视作这个被激发的 skyrmion 的半径，或者说是两个相邻 skyrmion 间距的一半。

给定一个截断半径 R，改变 $\theta(r)$ 的具体表达式，这个 skyrmion 的总自由能也会改变。对于处于基态的构型，自由能应极小，故我们可以通过对式 (9) 在边界条件 $\theta(0)=\pi$,$\theta(R)=0$ 下变分来获得在参数 d,b,A_2 和截断 R 给定时的使自由能极小的函数 $\theta(r), 0\le r\le R$ 的表达式和对应的自由能密度 $F_{\mathrm{sk}}/(\pi R^2)$。再改变截断半径 R，可以获得给定参数下最小的自由能密度。

变分可以通过求解自由能泛函的欧拉-拉格朗日方程来进行，同样也可以通过有限元方法进行。我们选择了有限元与蒙特卡洛混合的方法，将区间 $0\le r\le R$ 分成 100 个小区间，接着使用 metropolis 以及退火算法来改变每个区间上的函数值。在自由能密度 $F_{\mathrm{sk}}/(\pi R^2)>0$ 时，系统更倾向于形成铁磁相，反之，系统更倾向于形成 skyrmion 晶体相。故在参数 d 给定时，方程 $F_{\mathrm{sk}}/(\pi R^2)=0$ 确定了一条 (b,A_2) 曲线，它对应的就是我们在第二部分 MC 模拟中 B-A_2 相图中的 SC-FM 临界线。

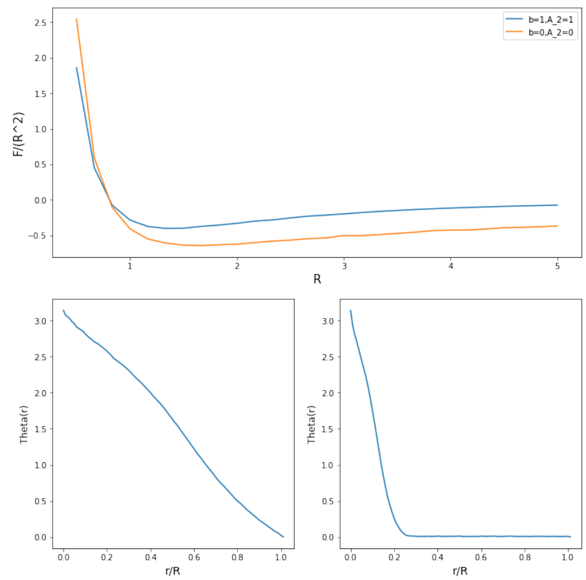

图 5. (i): 上图是变分后获得的自由能密度 $F_{\mathrm{sk}}/(\pi R^2)$ 与截断半径 R 的依赖关系的示意图，两条曲线分别对应参数 $(d,b,A_2)=(\sqrt{6}/2,1,1)$ 与 $(d,b,A_2)=(\sqrt{6}/2,0,0)$。可以看到随着参数 b,A_2 的增大，对应自由能密度极小值的截断半径 R 会逐渐减小。(ii): 左下与右下分别是函数 $\theta(r)$ 的示意图，两张图对应参数为 $(d,b,A_2)=(\sqrt{6}/2,1,1)$，对应截断半径为 $R=1.50$ 与 $R=8.00$

由图 6 可见，我们的理论结果与模拟结果在定性上符合得很好，B_c-A_2 几乎均呈线性关系。然而，理论结果给出的每个 A_2 下的临界磁场 B_c 都偏大一些，但偏差的值随着 A_2 的增大而逐渐减小。经过反复的模拟和对各个构型能量的考察，我们认为这一现象出现的原因是我们在 SC-FM 相变线附近的模拟数据并没有找到真正的基态。尽管我们的“基态”是通过 $2*10^5$ 个蒙特卡洛步从 T=2 逐渐降温到 T=0.001 得到的，但在 SC-FM 相变线附近，我们的系统及其容易直接落入铁磁态这一亚稳态，但这一铁磁态的能量却比 B 更小时的 skyrmion 态能量还大。（例如 $A_2=0, B=2.5$ 时 FM 态能量比 $A_2=0, B=1.8$ 时处于 SC 态的

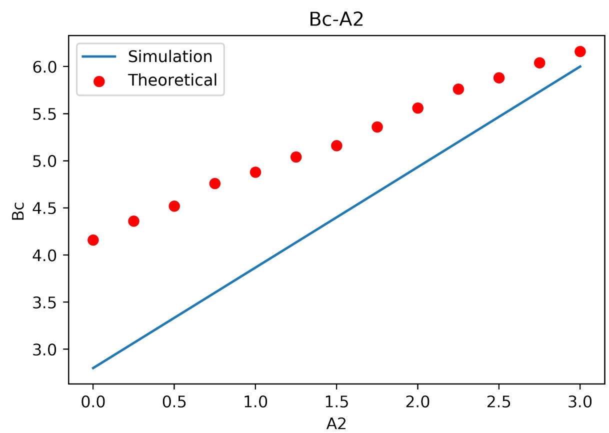

图 6. 红色散点是在参数 $d=\sqrt{6}/2$ 时，各个 A_2 所对应的临界磁场 B_c 的理论结果，几乎呈一直线；蓝色直线是我们在模拟部分通过 MC 方法获得的 B_c-A_2 相图上的 SC-FM 相变线。

系统能量还高，但如果 $A_2=0, B=2.5$ 时系统处于与 $A_2=0, B=1.8$ 时相同的构型，系统的能量会更低，即 $A_2=0, B=2.5$ 时 FM 态并非基态）在模拟 SC-FM 相变线附近的基态时，我们选取了各种不同的降温方式，但系统都不能轻易地脱离铁磁态，不过随着 A_2 增大，系统逐渐能落入正确的基态中，因而理论与模拟的偏差也在减小。与之相对的是，在 SS-SC 相变线附近，系统有时也会落入不同“基态”，但我们的模拟数据表面此时系统落入亚稳态的概率很低，通过多次模拟，并比较系统在给定参数下不同构型的能量，我们可以判定系统是否处于真正的基态。

当然，我们还可以通过变分分析来计算 SS-SC 相变线，具体的实现方法是类似的：假设 SS 态中的自旋波沿 $\hat{y}$ 方向传播，则局域自旋满足 $\phi=0, \theta=\theta(y)$。我们同样引入一个截断 l, 它可被看作自旋波波长的一半，则函数 $\theta(y)$ 满足的边界条件为:$\theta(0)=\pi, \theta(l)=0$。再根据式 (8), 我们可以获得一列自旋波的自由能（同样将 FM 态设为 0）:

$$F_{\mathrm{ss}}=\frac{2JL}{\ell}\int_0^{\ell} dy\left[\left(\frac{1}{2}\frac{d\theta}{dy}+d\right)^2-d^2-\beta(\cos\theta-1)\right] \tag{10}$$

其中 L 是自旋波在 $\hat{x}$ 方向的长度（L 的值无关紧要，因为我们只关心自由能密度），值得注意的是该自由能是与 A_2 无关的。在经过相同的有限元退火步骤后，我们发现在参数 $d=\sqrt{6}/2, J=1$ 时，使自由能极小的截断 $l=1.27$，与磁场 B 无关。这一模拟结论与自旋波的理论波长 $l=D/2J=1.225$[4] 符合的相当好。接着，通过比较 skyrmion 晶体态与螺旋态的自由能密度，即 $F_{\mathrm{sk}}/(\pi r^2)$ 与 $F_{\mathrm{ss}}/(lL)$, 我们就可以确定系统的基态处于哪一相。两者相等时确定的 (b, A_2) 即为 SS-SC 相变线。我们取得的结果如图 7: 可见，我

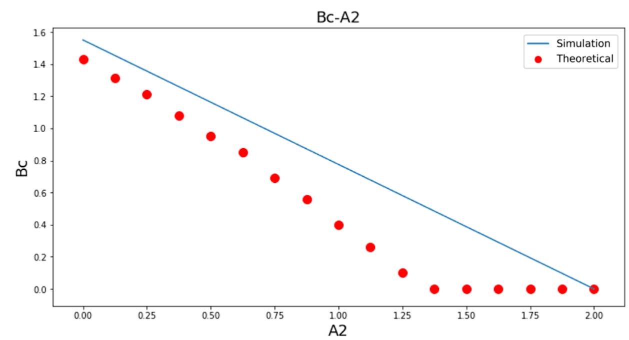

图 7. 红色散点是 SS-SC 相变线的理论结果，蓝色直线是根据拓扑荷判断的模拟相变线

们的理论 SS-SC 相变线和根据拓扑荷判断的模拟相图符合得很好，即随着 A_2 的增大，发生 SS-SC 相变的临界磁场在不断减小，且在 A_2 超过一个临界值后，体系的严格基态就不再是螺旋自旋态，而是 skyrmion 晶体态了。一个随之而来的问题是：为什么 χ 和拓扑荷在描述 SS-SC 相变线时取得了定性上截然不同的结论呢？我们发现原因是：对于在 SS-SC 相变线附近的基态，自旋波与 skyrmion 同时被激发，此时 skyrmion 的形态与纯的 skyrmion 晶体相中的 skyrmion 差异较大，而通过对各个构型单独的考察，我们发现 χ 只在判断形态较完美的 skyrmion 时才比较准确。这导致在同时存在两种激发时，χ 的判断为不存在 skyrmion，而拓扑荷则认为存在 skyrmion。两者给出的 skyrmion 密度的相对大小的不同也是由相同的原因造成的。此外，我们理论研究的是单独存在的 skyrmion 激发与自旋波激发，对两者混合态的研究有待进一步完善。

IV. 结论

我们在 100×100 的二维正方晶格上研究了 DM 相互作用和各向异性海森堡相互作用的相互竞争而产生的 skyrmion 晶体的特性。采用参量 χ 和拓扑荷 Q 得到了零温和有限温的相图，证实了 skyrmion 晶体能够在较大的温度、磁场范围内稳定存在，从而为 skyrmion

晶体进一步的实际应用提供了理论基础。我们还使用朗道-金兹堡理论对 skyrmion 晶体相和铁磁相、螺旋自旋态和 skyrmion 晶体相之间在零温下的转变曲线进行了理论计算，在定性上得到了与模拟相同的结果。

V. 致谢

感谢陈焱老师在课堂上的悉心教导，以及为我们提供科研体验的机会。

[1] B Berg and Martin Lüscher. Definition and statistical distributions of a topological number in the lattice o (3) σ-model. *Nuclear Physics B*, 190(2):412–424, 1981.

[2] A Bogdanov and A Hubert. Thermodynamically stable magnetic vortex states in magnetic crystals. *Journal of magnetism and magnetic materials*, 138(3):255–269, 1994.

[3] Su Do Yi, Shigeki Onoda, Naoto Nagaosa, and Jung Hoon Han. Skyrmions and anomalous hall effect in a dzyaloshinskii-moriya spiral magnet. *Physical Review B*, 80(5):054416, 2009.

[4] Jung Hoon Han. *Skyrmions in condensed matter*, volume 278. Springer, 2017.

[5] Jung Hoon Han, Jiadong Zang, Zhihua Yang, Jin-Hong Park, and Naoto Nagaosa. Skyrmion lattice in a two-dimensional chiral magnet. *Physical Review B*, 82(9):094429, 2010.

[6] A Neubauer, C Pfleiderer, B Binz, A Rosch, R Ritz, PG Niklowitz, and P Böni. Topological hall effect in the a phase of mnsi. *Physical review letters*, 102(18):186602, 2009.

[7] UK Rößler, AN Bogdanov, and C Pfleiderer. Spontaneous skyrmion ground states in magnetic metals. *Nature*, 442(7104):797, 2006.

[8] Tony Hilton Royle Skyrme. A unified field theory of mesons and baryons. *Nuclear Physics*, 31:556–569, 1962.

[9] AA Thiele. Steady-state motion of magnetic domains. *Physical Review Letters*, 30(6):230, 1973.

[10] XZ Yu and Y Onose. Nkjhp an jh han, y. matsui, n. nagaosa, and y. tokura. *Nature*, 465:901, 2010.

附录 A: 对公式 (9) 的推导

公式 (9) 中，与 A_2 无关的几项，可以从文献 [5] 中直接找到，此处略去其推导。本文中新考虑的以 A_2 为系数的那一项则推导如下：

我们取 $|\mathbf{M}|=1$，那么：

$$\begin{aligned}\mathbf{M}&=(\sin\theta\sin\varphi,-\sin\theta\cos\varphi,\cos\theta)\\&=\left(\sin\theta\frac{y}{\sqrt{x^2+y^2}},-\sin\theta\frac{x}{\sqrt{x^2+y^2}},\cos\theta\right)\end{aligned}$$

于是可以算得：

$$\partial_x M_x=\cos\theta\cos\varphi\sin\varphi\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r}-\frac{\sin\theta\sin\varphi\cos\varphi}{r}\tag{A1}$$

$$\partial_y M_y=\frac{\sin\theta\sin\varphi\cos\varphi}{r}-\cos\theta\sin\varphi\cos\varphi\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r}\tag{A2}$$

这样我们就得到：

$$\begin{aligned}&(\partial_x M_x)^2+(\partial_y M_y)^2=\sin^2\varphi\cos^2\varphi\\&\times\left[\left(\cos\theta\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r}-\frac{\sin\theta}{r}\right)^2+\left(-\cos\theta\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r}+\frac{\sin\theta}{r}\right)^2\right]\\&=2\sin^2\varphi\cos^2\varphi\\&\times\left[\cos^2\theta\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r}\right)^2-2\frac{\sin\theta\cos\theta}{r}\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r}+\frac{\sin^2\theta}{r^2}\right]\end{aligned}\tag{A3}$$

将这一项对 r 和 φ 积分：

$$\begin{aligned}&\int r\mathrm{d}r\mathrm{d}\varphi\left\{-\frac{A_2}{2}\left[(\partial_x M_x)^2+(\partial_y M_y)^2\right]\right\}\\&=\int 4\pi r\mathrm{d}r\left\{-\frac{A_2}{16}\left[\cos^2\theta\left(\frac{\mathrm{d}\theta}{\mathrm{d}r}\right)^2+\frac{\sin^2\theta}{r^2}\right]\right\}\\&+\int_0^\pi 4\pi\left[-\frac{A_2}{16}\sin\theta\cos\theta\right]\mathrm{d}\theta\end{aligned}\tag{A4}$$

由于上式中最后一项对 θ 的积分是零，我们就得到了 (9) 式中关于 A_2 的那一项。

附录 B: 螺旋自旋 (SS) 相以及 skyrmion 晶体 (SC) 相的示意图

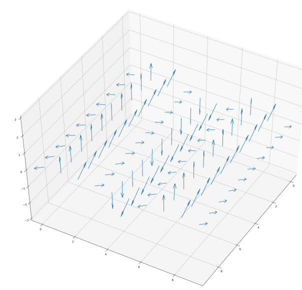

图 8. 模拟得到的螺旋自旋态构型的示意图

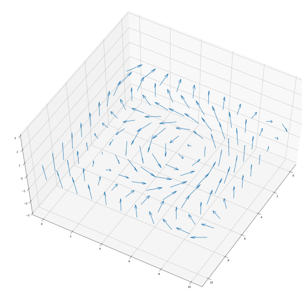

图 9. 模拟得到的一个孤立 skyrmion 的示意图

附录 C: 组内贡献

1. 于鑫阳：代码，相图模拟，理论. 60%
2. 王思源：代码 debug，相图模拟，论文排版. 40%