

スーパーコンピュータを活用した磁性研究

～多様な現象の起源たる量子効果の追求～

理学研究科 物質科学専攻

D1 古内理人、教授 坂井 徹、准教授 中野 博生

1.磁性 (磁氣的性質)

物質の持つ磁氣的性質(磁性)の中で特に有名なものは磁石に付着する鉄などが持つ**強磁性**である。絶縁体ではハイゼンベルク模型と呼ばれる模型で説明できる。

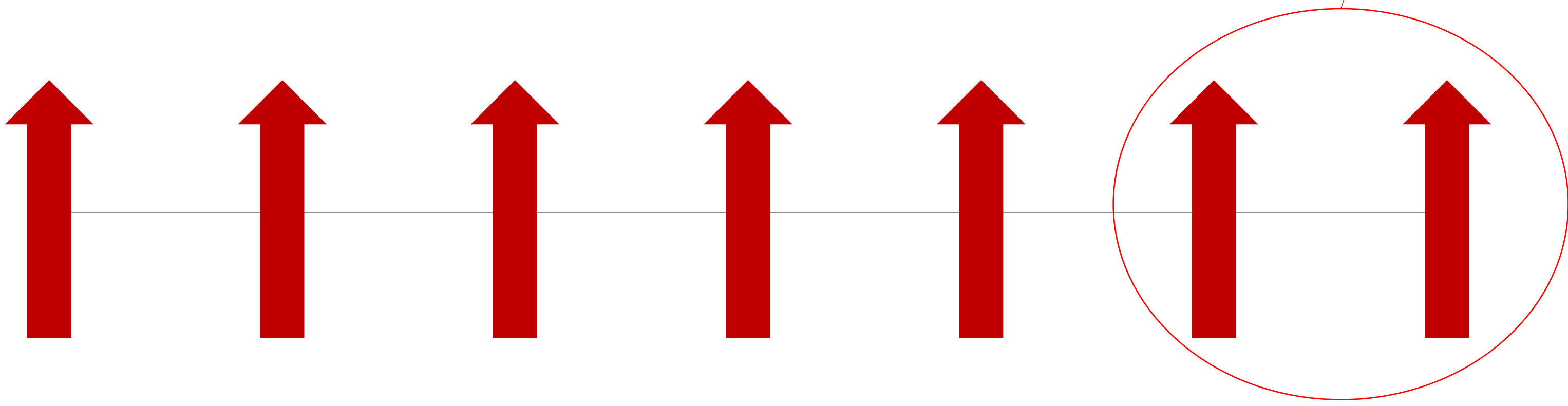


図1 強磁性のイメージ図。
矢印はスピンの向きのイメージ。

その他の性質に**反強磁性**がある。この模型の反強磁性を持つ物を**ハイゼンベルク反強磁性体**と呼ぶ。

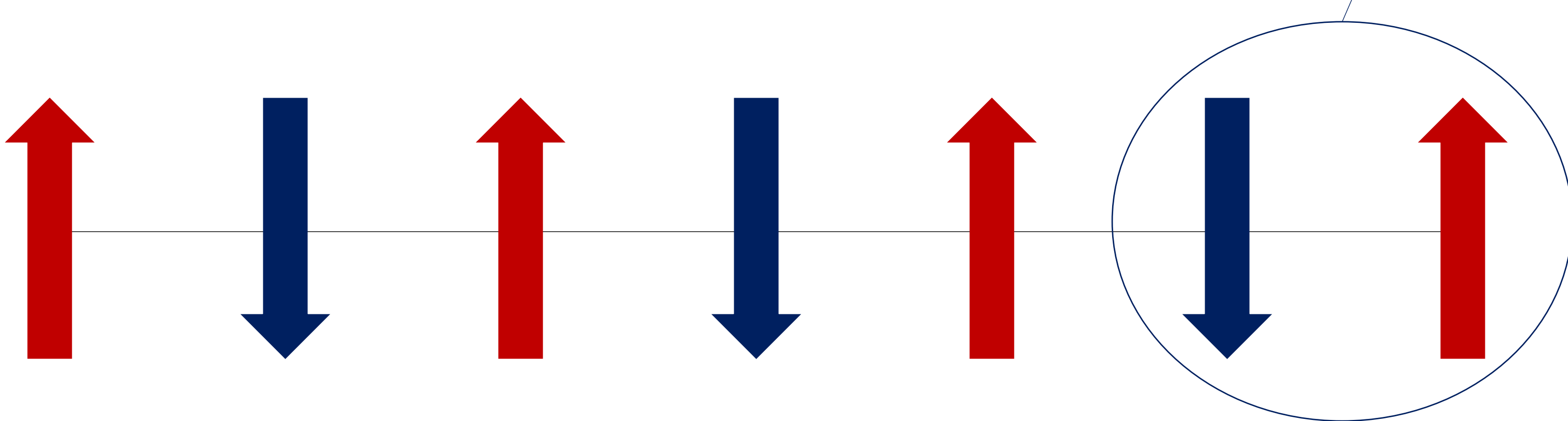


図2 反強磁性のイメージ図。
図1とは異なり向きが交互となる。

2.フラストレーション

反強磁性体の安定状態を考える。

明らかな安定状態

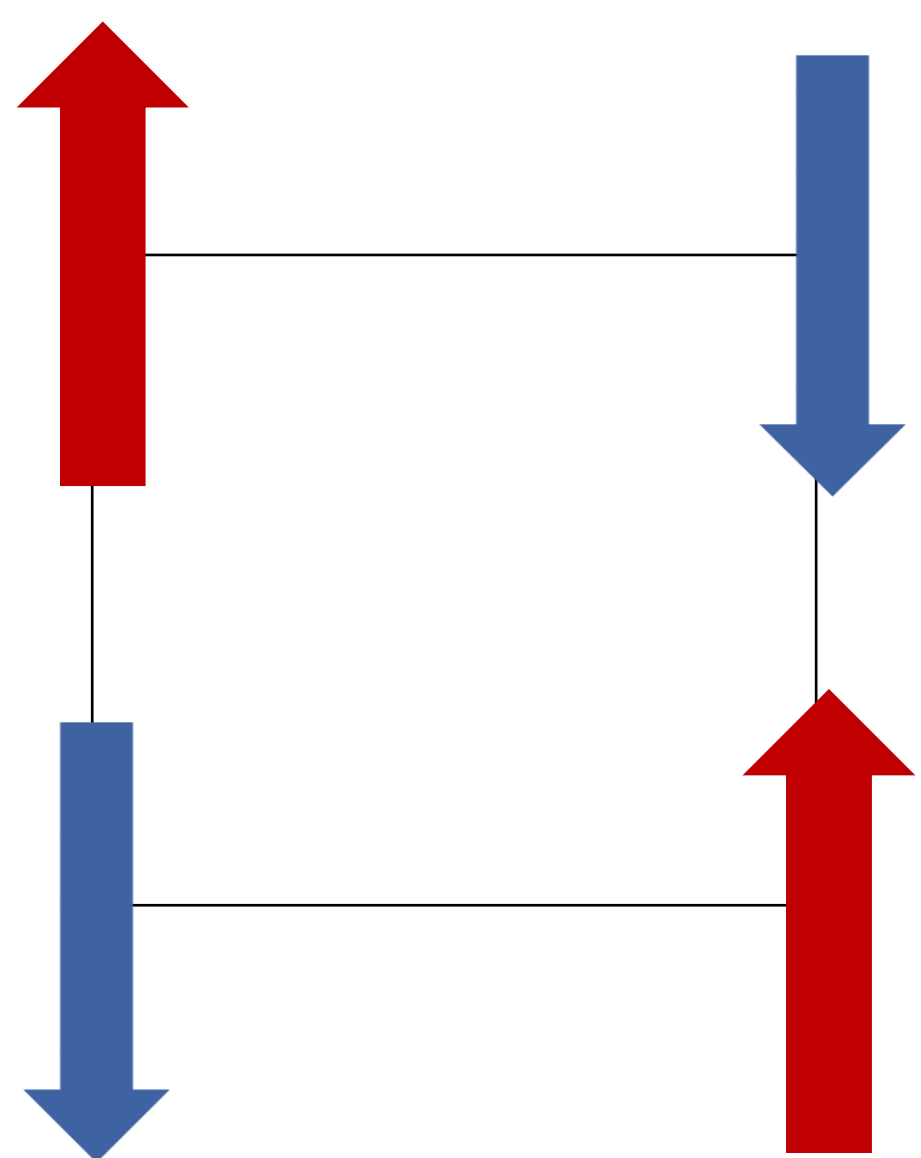


図3 四角形の局所構造

安定状態が取れない

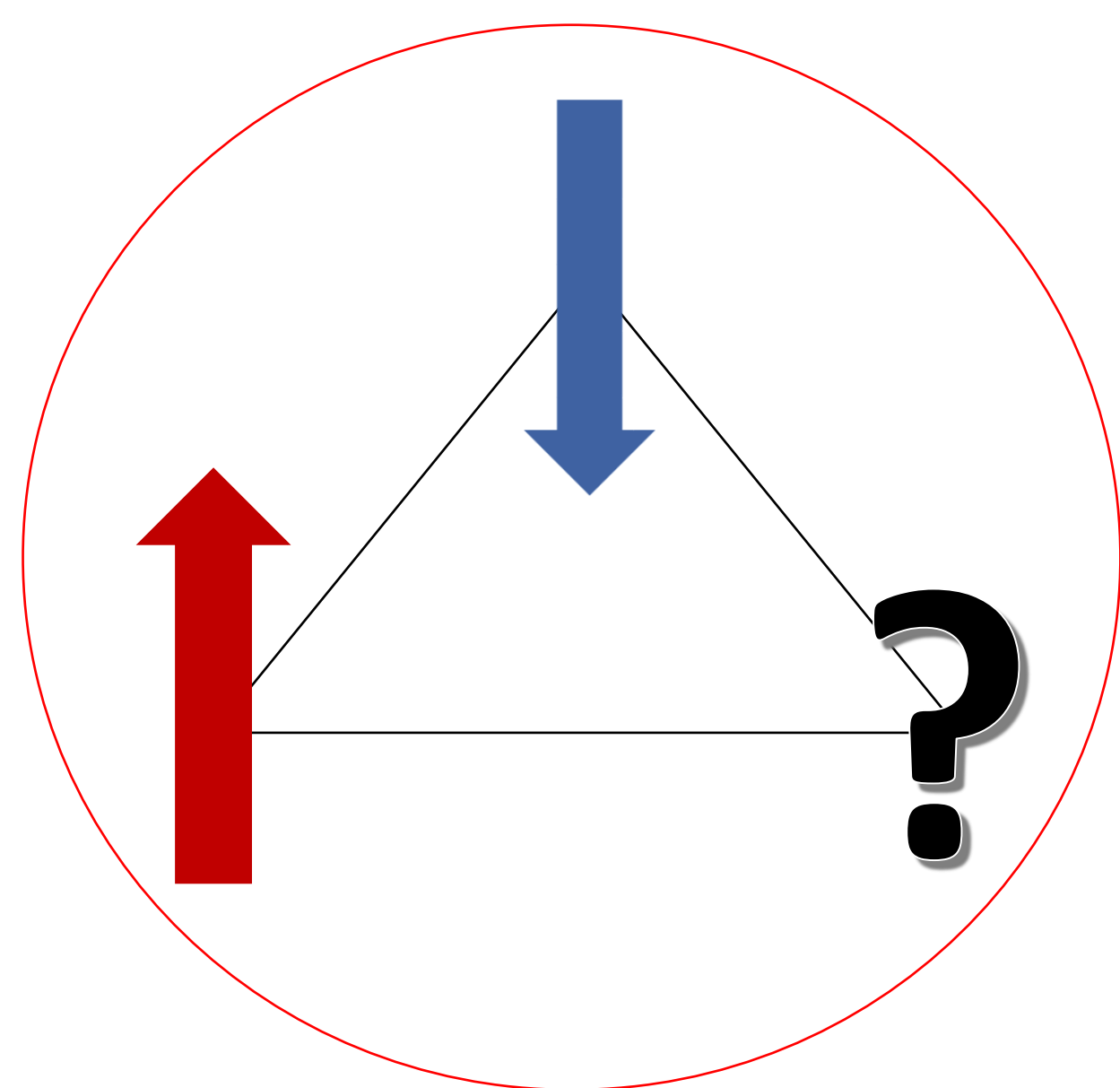


図4 三角形の局所構造

右側の状況を**フラストレーション**と呼ぶ。

3.特異な現象

フラストレーションを生じる系は磁場をかけた時の磁化の様子(磁化過程)で以下の様な**特異な現象**を示すことがある。

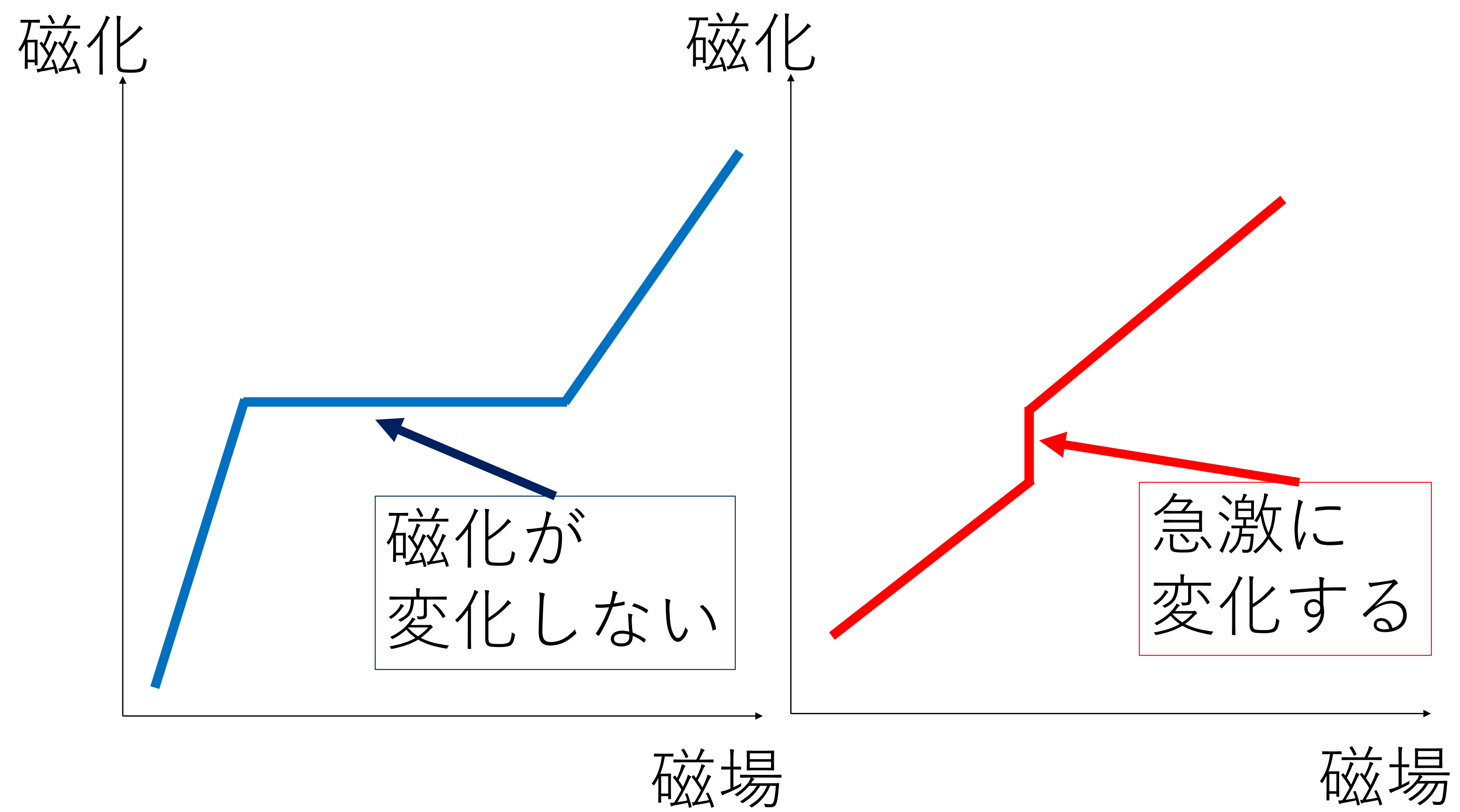


図4 磁化プラトー 図5 磁化ジャンプ

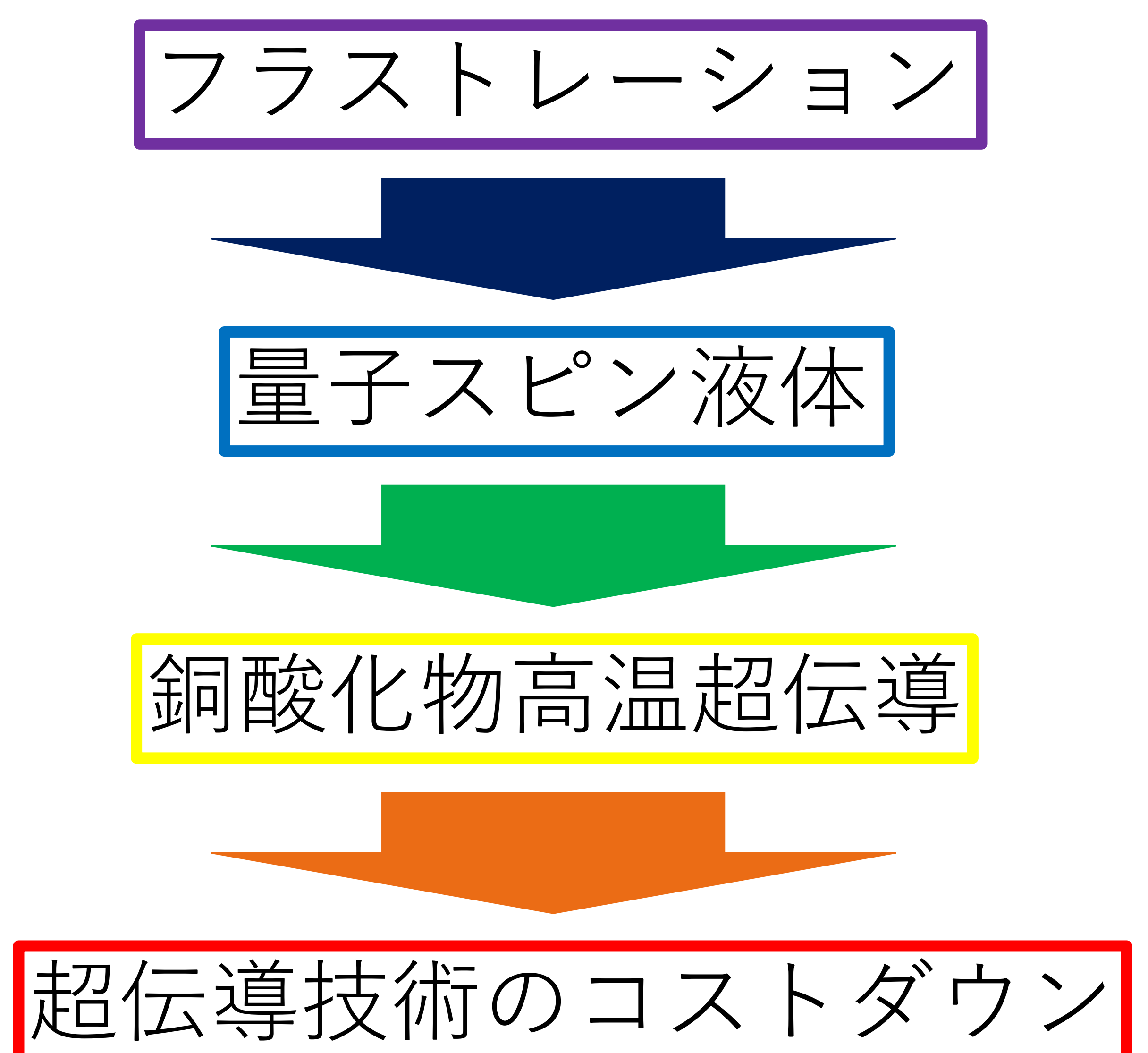
上記の現象は**新奇的な材料の発見**に繋がる。

例

- 磁場で電氣的性質を制御できる部品
- 磁場の影響で変化を起こさない部品

4.量子スピン液体

本研究が進めばより**高温の超伝導体探索**を効率よく進める**可能性**を持つ。



スーパーコンピュータを活用した磁性研究 ～多様な現象の起源たる量子効果の追求～

理学研究科 物質科学専攻

D1 古内理人、教授 坂井 徹、准教授 中野 博生

5.五角形格子

以下にフラストレーションを生じる代表的な三角形を含む格子を挙げる。

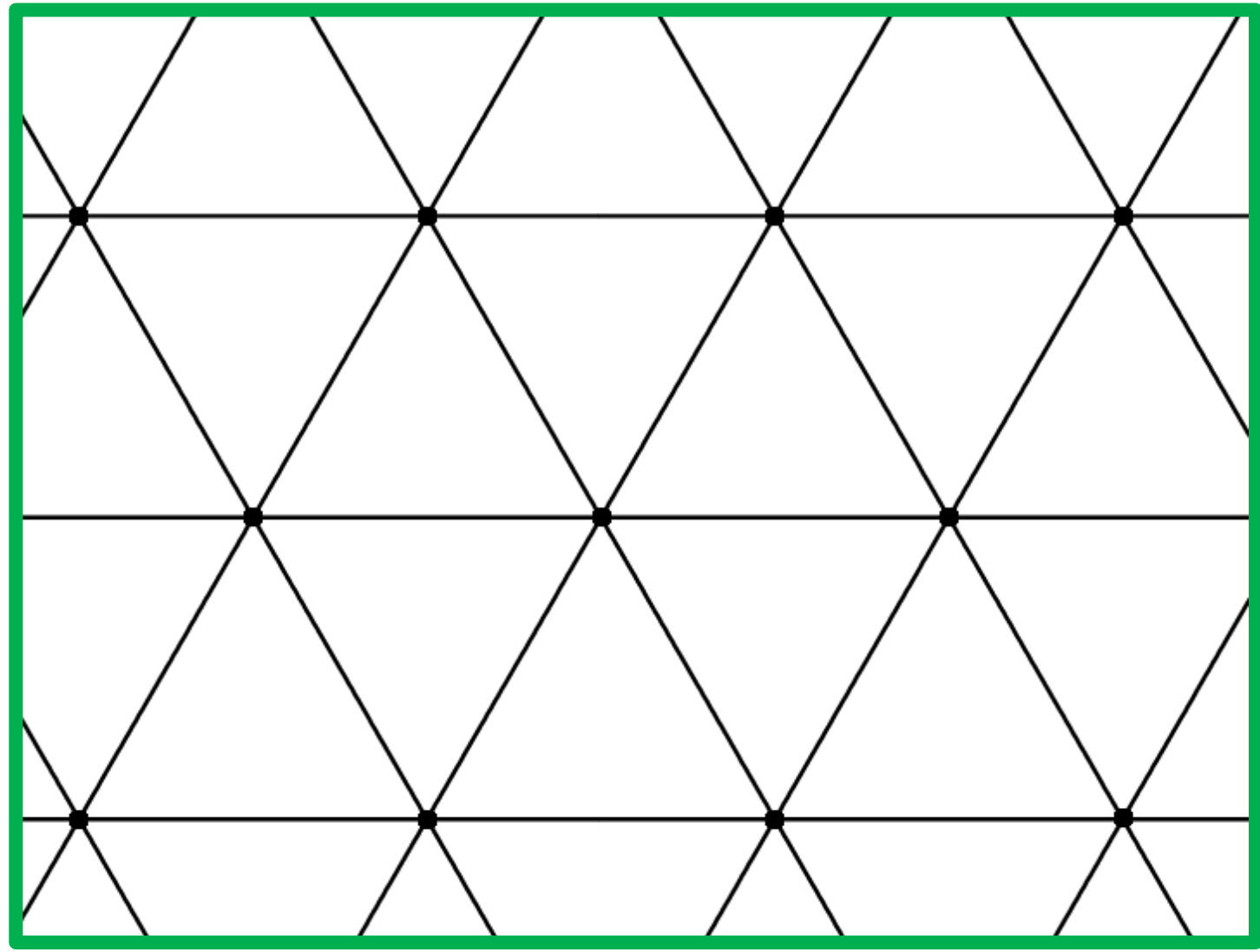


図7 三角格子

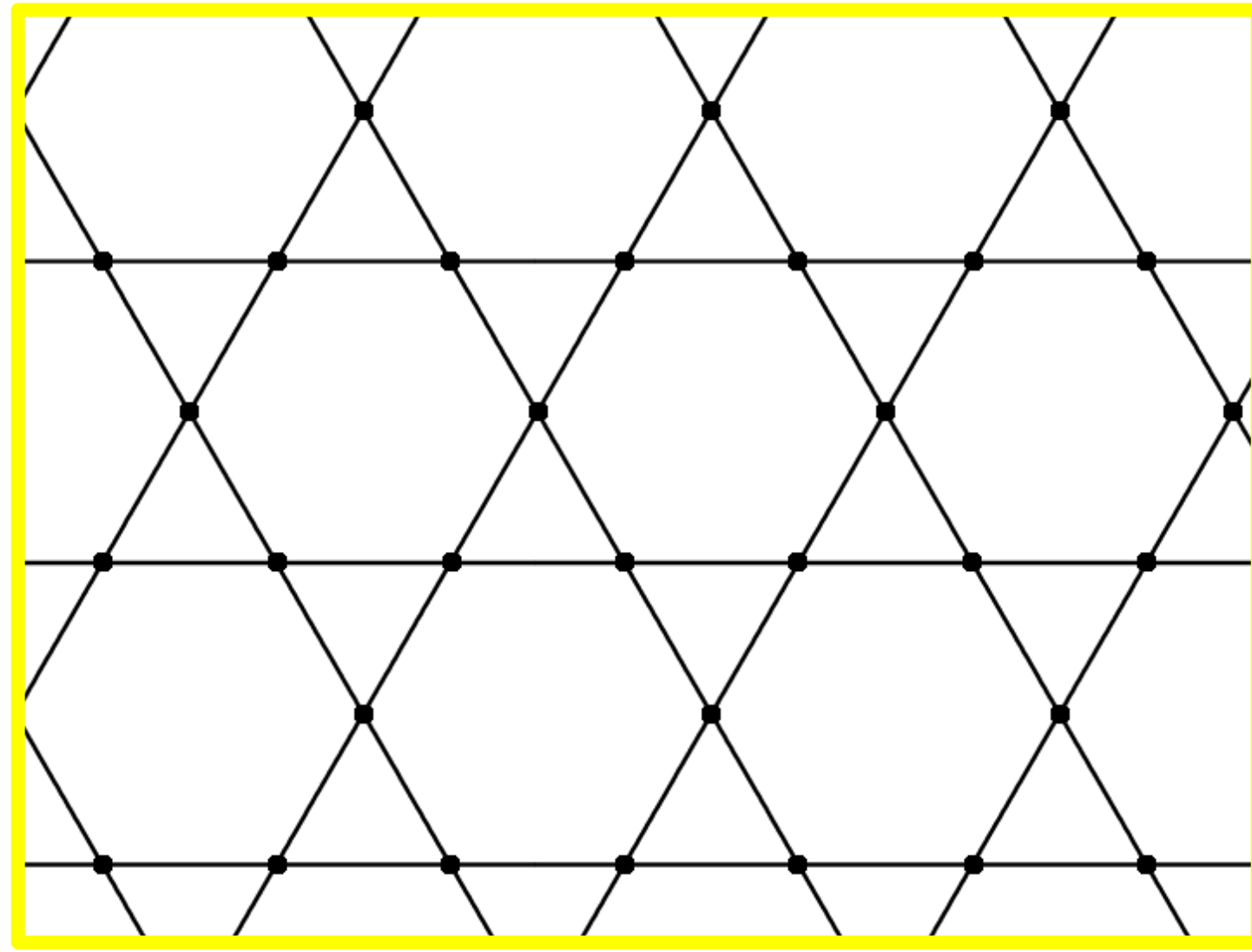


図8 カゴメ格子

五角形もフラストレーションを生じるが、カイクペンタゴン格子以外は報告が少数。我々は新たにフローレットペンタゴンと言う五角形で作られる格子を構成した。

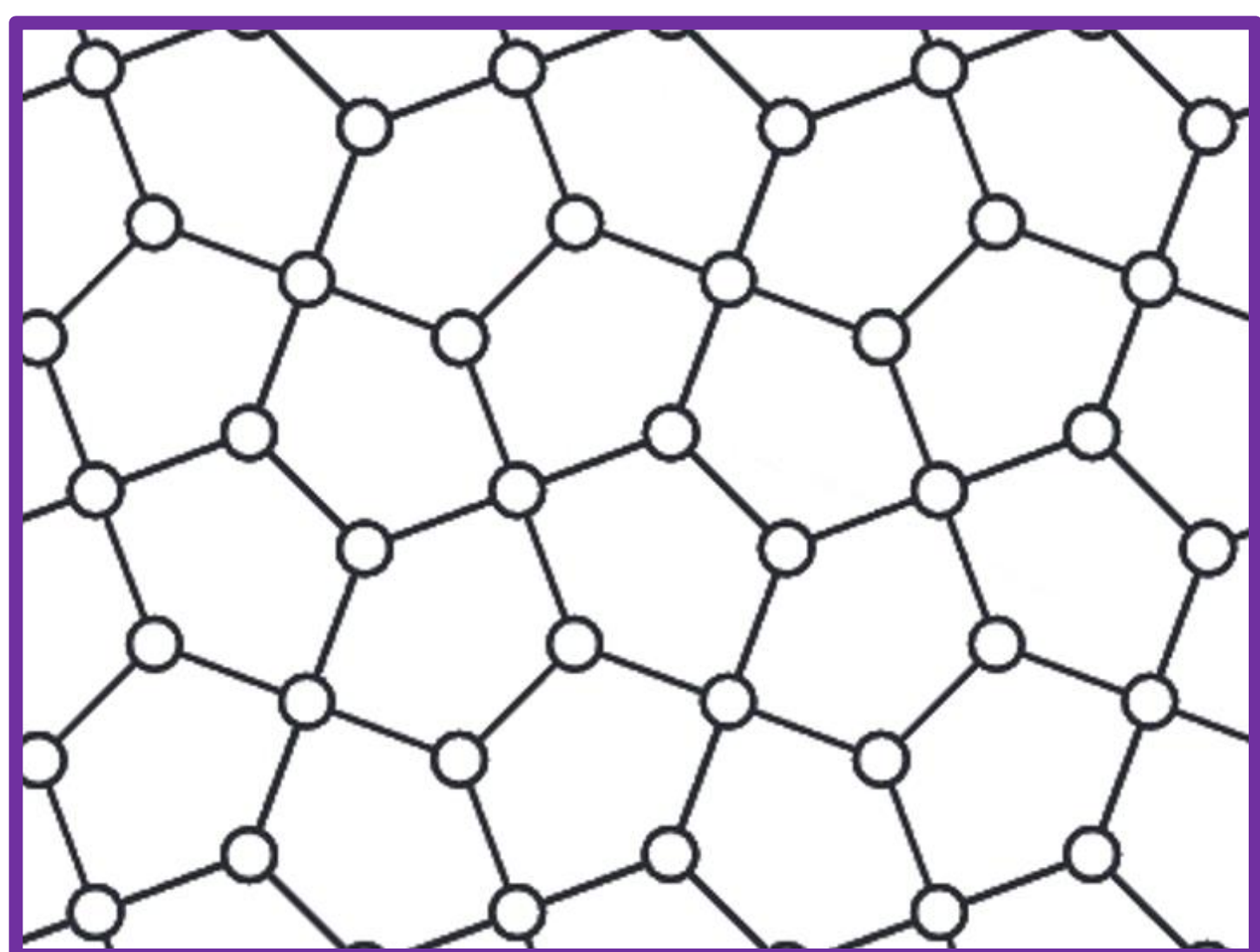


図9
カイク
ペンタゴン格子

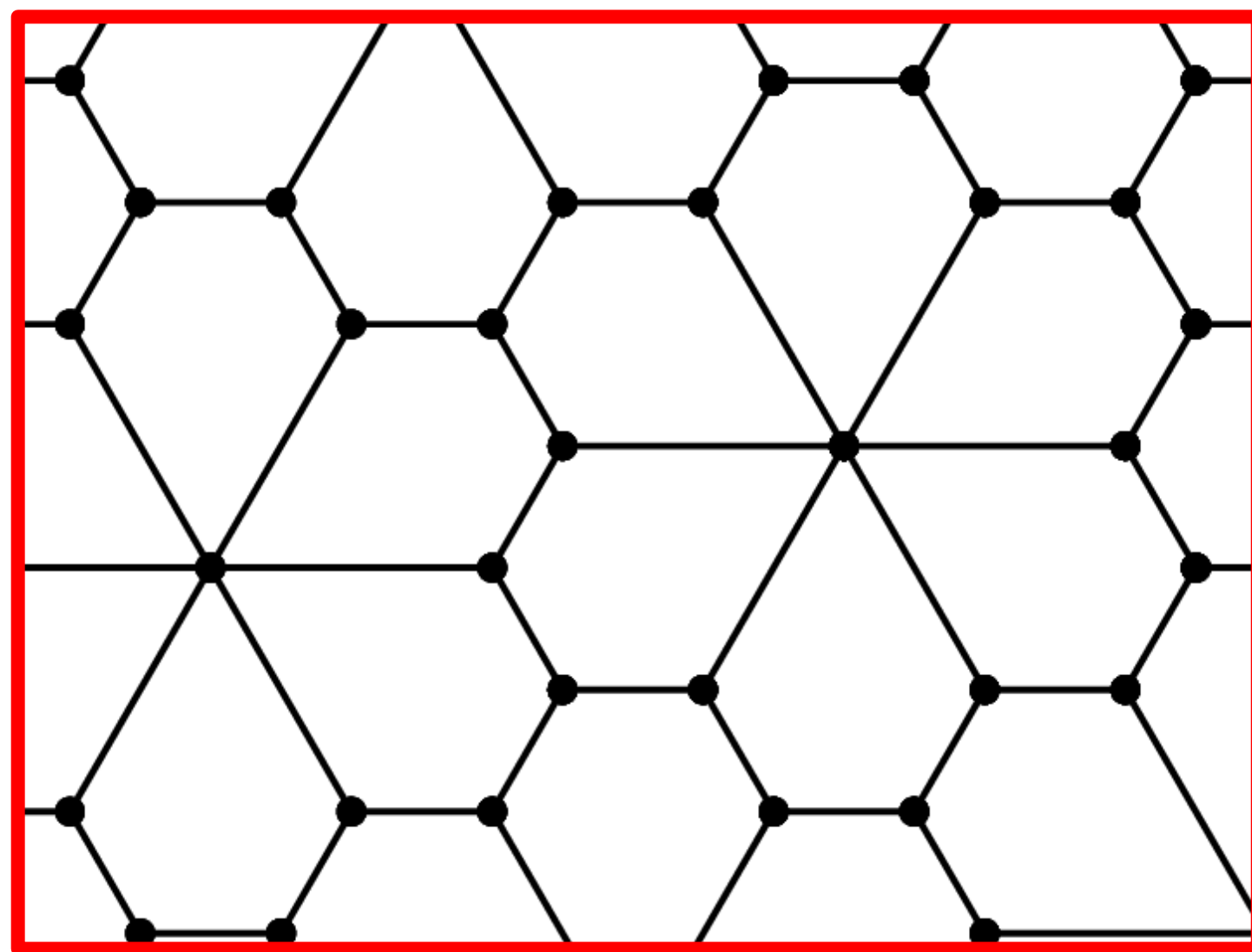


図10
フローレット
ペンタゴン格子

H Nakano, M Isoda, and T Sakai : JPSJ 83, 053702 (2014)

6.研究手法

本研究は数値対角化の方法を用いている。この方法は計算時間や計算するためのメモリが指数関数的に増加する。

15	205920
20	5912192
25	1.66E+08
30	4.96E+09
35	1.45E+11
40	4.41E+12
45	1.32E+14

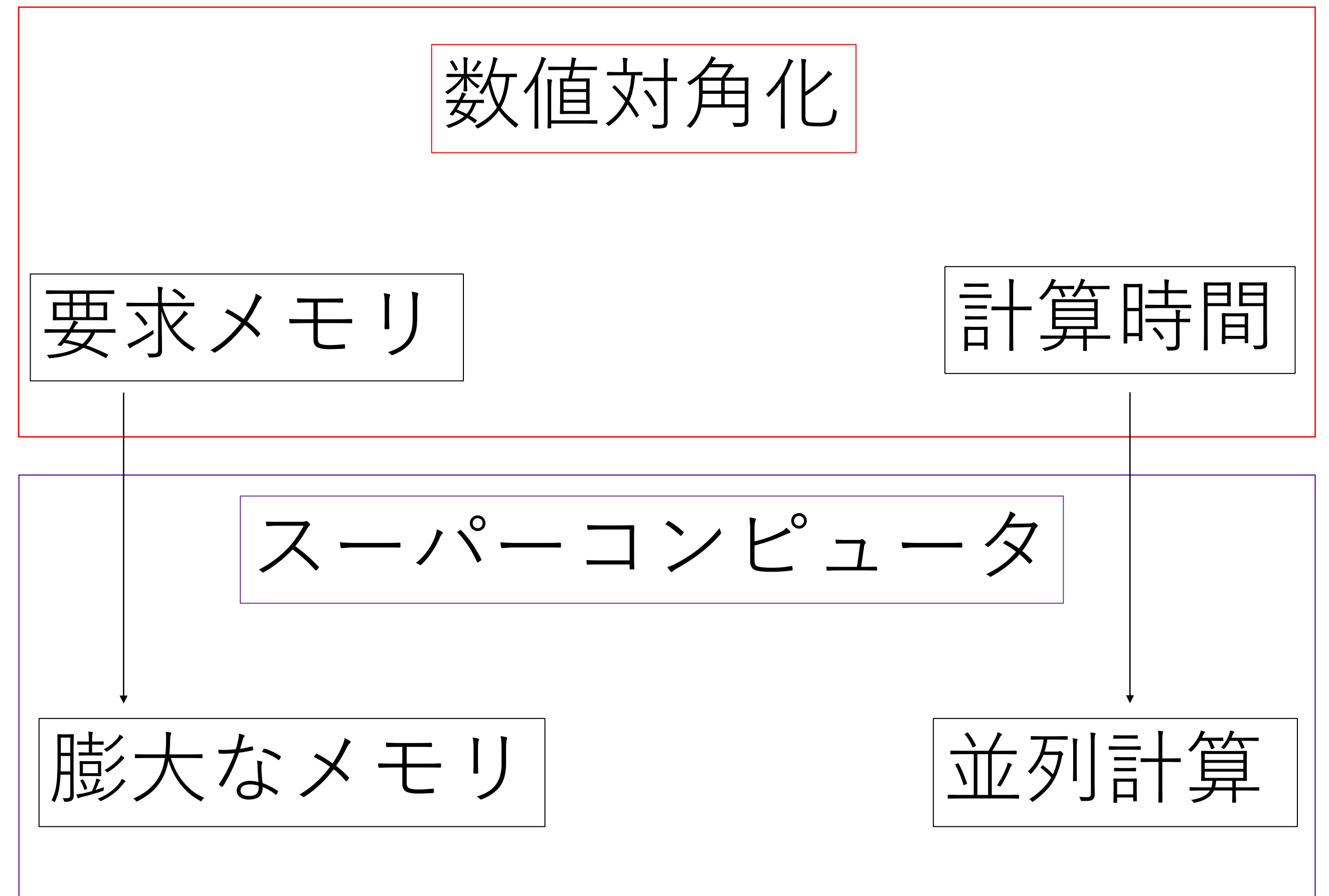
左がスピン数、
右が最大のメモリ容量

指数関数的な増加の
挙動が確認できる。

表1
メモリ容量(Byte)

7.スーパーコンピュータ

スピンの個数が多い系の計算にはスーパーコンピュータを用いる。



8.研究結果

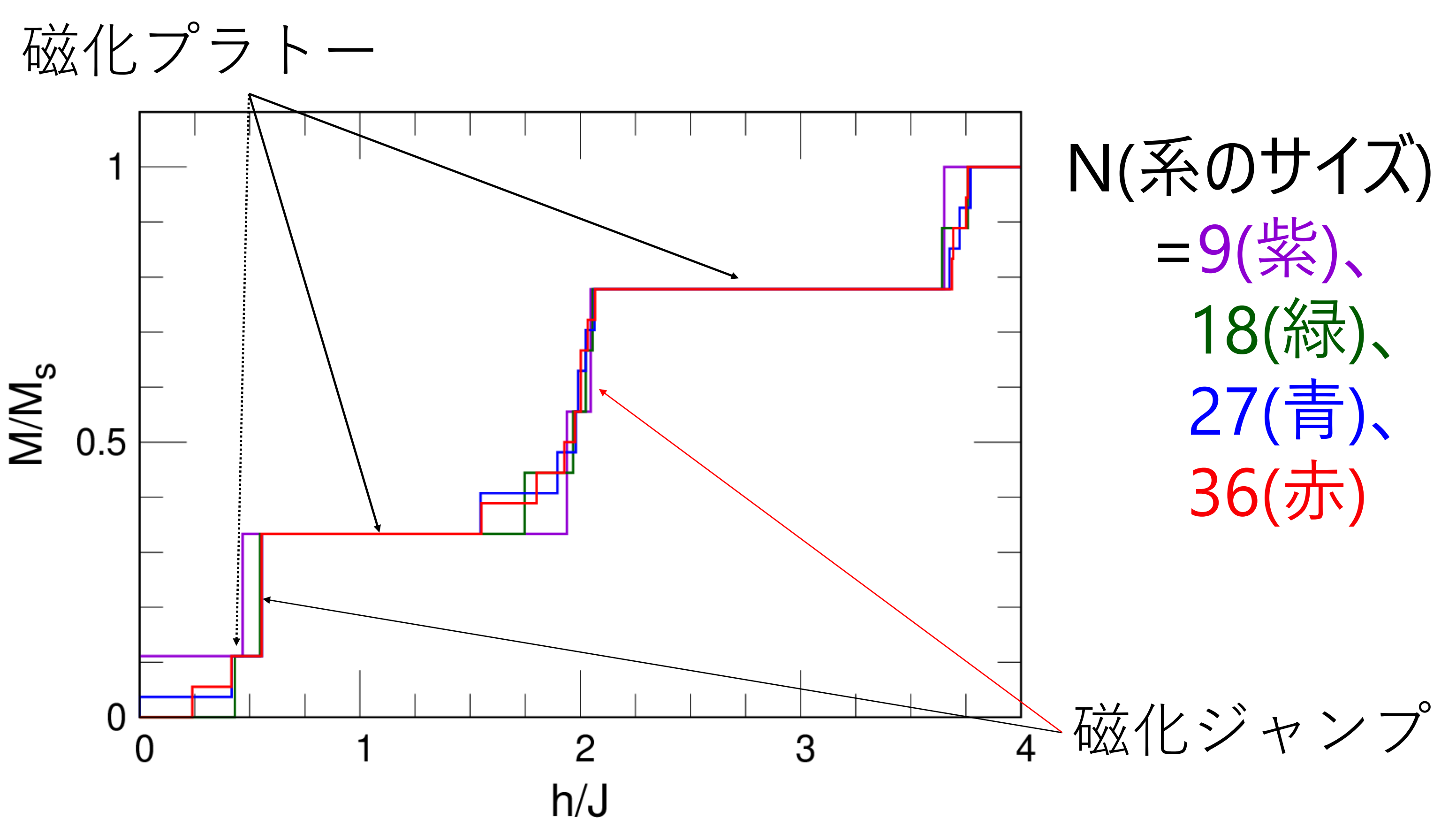


図11 フローレットペンタゴン格子上のハイゼンベルク反強磁性体の磁化過程

この系でも磁化プラトーや磁化ジャンプが観測できることを確認できる。

9.まとめ

- 1.本研究はフラストレーションと呼ばれる特殊な状況を取り扱っている。
- 2.新材料の発見、超伝導のコストダウンの可能性がある。
- 3.大きなサイズの計算にはスーパーコンピュータが必要である。