

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 ふるうちり と 古内理人、教授 さかいとおる 坂井 徹

キーワード

フラストレーション、スーパーコンピュータ、反強磁性体

研究概要

物質の性質は、電子が持つ電氣的性質（電荷）のみならず、磁氣的性質（スピン）からも大きな影響を受ける。近年、スピントロニクスと呼ばれる分野の技術開発が注目を集めていて、その基盤となるのが、電子スピンの挙動に関する理解である。

現実の物質の中で、このスピンがどの状況でどのようにふるまい、そして、どのような性質を示すのかということには、未解明なままの部分が多く残っている。特に、隣接スピンの間に反強磁性的な相互作用（反対向きの方が低エネルギーとなる）が働く系で、相互作用ネットワークが図1のような三角形構造を含む場合、スピンの安定的な向きが定まらない「フラストレーション」と呼ばれる状況が発生する。この状況の下で生じる「磁化プラトー」、「磁化ジャンプ」などの異常量子現象の研究を現在推進している。

私の研究はフラストレーションを生じる系の中でも、盛んに研究されている三角形に起因する系ではなく、フラストレーションを生じさせる局所構造の辺の数の多い、五角形を基としたフラストレート系の研究を行っている。その物質の磁氣的性質、特に、磁場印加時に個々のスピンおよび系全体の磁化がどのような挙動を示すか、更にはスピン間の相互作用の大きさを変化させていく際にその挙動がどのように変化していくのかについて調べている。そのため、磁場の強さに応じた状態のエネルギーを評価するが、その計算には行列の数値対角化と呼ばれるアルゴリズムを採用している。この計算は膨大な計算資源を必要とし、スーパーコンピュータで実施している。

アピールポイント

本研究の対象である、絶縁性反強磁性体についての磁化プラトー、磁化ジャンプの性質が詳細に解明されれば、この現象を用いた新たな磁気デバイスの開発に繋がる可能性がある。また、フラストレーションの効果が超伝導の起源の一つとして考えられている「量子スピン液体」実現にも密接に関係していて、本研究の結果は超伝導関連の技術の進展に貢献しうる。

本研究では、図2などの五角形構造を含む格子系について、各大学が保有するスーパーコンピュータなどを用いてエネルギーを求め、磁化過程の解析を行っている。その磁化過程で現れる磁化プラトーや磁化ジャンプの発現状況を明らかにし、日本物理学会「2020年秋季大会」並びに「第76回年次大会（2021年）」で口頭発表を行った。

本研究の研究対象に関するエネルギーの評価のためにCPU時間、メモリ容量は膨大な量が要求されるため、個別に保有するレベルのコンピュータでは計算が実現不可能で、上述のスパコンでも実現可能な範囲は限られる。そのため、今年3月に稼働を開始した世界最速のスーパーコンピュータ「富岳」を利用して、「富岳」だからこそその結果を報告していきたい。そのような本研究は新技術の礎となっていくと考えられる。

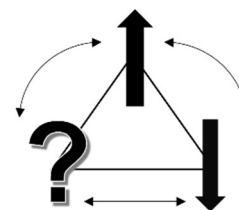


図1 フラストレーションの模式図。

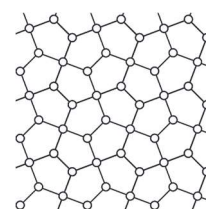


図2 五角形構造を含むカイロペンタゴン格子。