

強相関材料の物性解明を目指した大規模数値シミュレーション

工学研究科 材料デザイン分野 鈴木 隆史



キーワード

数値シミュレーション, 統計力学, 量子力学, 固体物理

研究概要

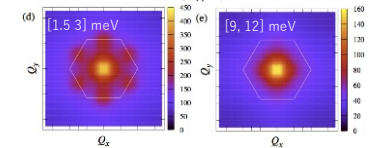
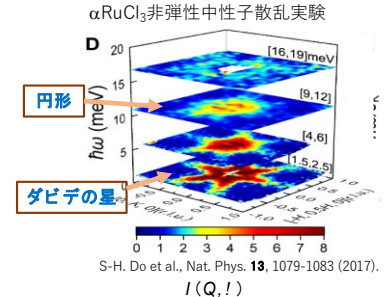
我々の研究室では物性物理の基礎と応用に関する理論研究を行っています。近年、物質科学の分野では理論と実験の緊密な協力が高温超伝導や巨大磁気抵抗など数多くの興味深い現象の解明に寄与してきました。加えて急速に発展を遂げたコンピュータによる数値シミュレーションが欠かせない研究ツールになりつつあります。我々の研究対象は、1) 強く相互作用をする電子系、2) 磁場中の低次元量子スピン系、3) トポロジカル磁性体、などの強い相関効果・量子効果が働く系です。我々の研究室では、これらの系で現れる多彩な現象の裏に潜む物理を解析計算や数値シミュレーションで解明することを目指しています。最近では、4d, 5d遷移金属化合物で期待されるトポロジカル磁性体の物性解明や、マテリアルデザインを目指した研究を進めています。

アピールポイント

強い相関効果・量子効果が働く系で現れるおもしろい物理現象をミクロスコピックな観点から解明するため、量子力学・統計力学に基づく解析計算だけではなく、富岳をはじめとするスーパーコンピュータを用いた大規模数値計算、機械学習を目的に応じて使い分けながら進めています。

応用分野

- ・遷移金属酸化物・希土類化合物における新奇量子秩序相の解明とその物性評価
- ・量子モンテカルロ法による量子磁性体の磁性評価

TS et al., Phys. Rev. B **97**, 134424 (18).

(左)実験結果、(右)提案模型に対する数値計算結果。
実験結果を定量的に再現する磁気模型の提案に成功