

2021 年度

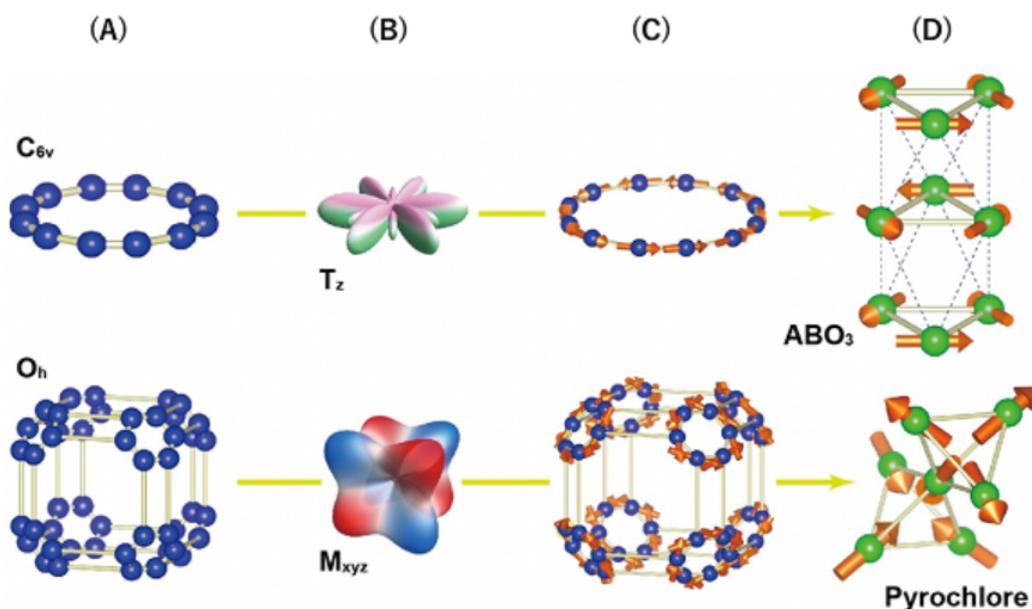
- 理論計算による高効率な磁気構造予測手法の開発に成功

東京大学大学院新領域創成科学研究科博士後期課程学生の Marie-Therese Huebsch、同大学大学院工学系研究科物理工学専攻助教の野本拓也、教授の有田亮太郎（理化学研究所チームリーダー）、東北大学金属材料研究所計算材料学センター准教授・大阪大学大学院基礎工学研究科スピントロニクス学術連携研究教育センター招へい准教授の鈴木通人らの研究グループは、さまざまな磁性体が示す複雑な磁気構造を、高精度で効率よく理論予測できる計算手法の開発に成功しました。これは、スピン密度汎関数理論と呼ばれる計算手法と、同研究グループが提案したクラスター多極子理論に基づいた成果で、既存の手法に比べて約 30 分の 1 程度の計算コストで磁気構造を予測することができます。本研究成果は、理論主導に基づく新規磁性体探索に有効で、次世代型磁気デバイス素子の開発に向けた磁性材料設計への貢献が期待されます。

本研究の成果は 2021 年 2 月 16 日に Physical Review X に掲載されました。

・プレスリリース本文[PDF: 541KB]

(リンク先: [tohokuuniv_press20210218_02web_theory.pdf](https://tohokuuniv.press.20210218_02web_theory.pdf))



クラスター多極子を用いた磁気構造表現の概念図。仮想クラスターと呼ばれる特殊な原子

配列 (A) と連続空間における多極子の概念 (B) を組み合わせることで (C)、元の結晶における磁気構造 (D) を表現します。結晶のもつ対称性によって異なったクラスター多極子