

課題名(タイトル):

高温量子スピンの数値的研究

利用者氏名:

○小野田繁樹

理研における所属研究室名:

古崎物性理論研究室

1. 本課題の研究の背景、目的、関係するプロジェクトとの関係

量子スピン液体は、非自明なトポロジ構造とゲージ構造、さらに、長距離量子エンタングルメントが発現する新奇な電子状態を示す磁性体として理論的に知られている。通常の強磁性体や反強磁性体のように、長距離磁気秩序は示さず、また、スピンから分化したスピノンと呼ばれる励起子をもつ。特に、量子スピンアイス系と呼ばれるパイロクロア構造をもつ磁性体群では、 $U(1)$ ゲージ構造を有し、磁化のモノポールを運ぶ準粒子励起を示す量子スピン液体の基底状態を示す場合が実現していることが、これまでの理論的研究から明らかになっている。パイロクロア型量子スピンアイス系のエネルギースケールは極めて低いが、スピネル系 Ir_2O_4 において室温のエネルギースケールを持った量子スピンアイス系が実現していることが我々の理論的研究から明らかになってきた。

本研究では、それを具体的実現するための現実的な物質科学的研究を、G19032に引き続き大規模第一原理計算に基づいて行う。特に、量子スピン液体と磁性ないバンド絶縁体との界面は、モノポール超流動流などの新しい現象を担う舞台となることが期待されており、 Ir_2O_4 とその関連絶縁体物質 ($ZnIr_2O_4$ など) との界面を第一原理計算によって実現し、その磁気的性質を解明する。

2. 具体的な利用内容、計算方法

課金制度の具体的な内容が不明瞭であったため、本年度は他の PC クラスタの利用をしながら簡易利用からスタートした。

OPENMX package を用いて Ir_2O_4 - $ZnIr_2O_4$ 超格子系の第一原理計算を推進してきた。前年度までに使用していた GWMPD システムから、BWMPDシステムに移行するための環境を整えた。また、昨年度から継続して、大規模超格子の構造最適化を高速化し、収束性を改善するためのコ

ード開発に大半を費やした。その結果、昨年度に比べて3倍以上加速することに成功した。

その後、開発したコードを用いて、6ノードを用いて MPI processes 数120、OpenMP Threads 数4で、構造最適化のための計算を進めている。c軸方向の格子定数20点ほどについて内部原子位置の最適化を行っている。採取的に、エネルギー的に最も安定となる構造を探し当てる。

3. 結果

報告書提出辞典で最適な結晶構造を最終決定するまでには至っていないが、完了までに要する時間を約 300~500kh と見積もることができた。

4. まとめ

$U(1)$ 量子スピン液体を実現する候補として知られているパイロクロア・スピネル系のうち、既存の候補物質よりエネルギースケールが2桁向上する潜在性をもつ Ir_2O_4 系に対して第一原理計算を行った。特に本研究では、この系が実際には薄膜として実現されることに着目し、関連物質との超格子系を取り扱った。結晶構造最適化まで数百kCPU時間というところまで辿り着いた。その完了後の磁性の精査、および、超格子パラメータを介した磁性のチューニングは、来年度に残された課題である。

5. 今後の計画・展望

上記の計算を年度末まで継続し、構造最適化の完了を目指す。時間が不足する場合には来年度に引き継ぐ。また、来年度早々には構造最適化を終え、強いクーロン相互作用を取り込んだ LDA+U 法による第一原理計算を推進し、磁気構造・スピン交換相互作用を解明するとともに、量子スピン液体実現に向けた構造のチューニングを行う。