

2024 年度年次報告書

計測・解析プロセス革新のための基盤の構築

2023 年度採択研究代表者

只野 央将

物質・材料研究機構 磁性・スピントロニクス材料研究センター
グループリーダー

有限温度効果の導入で挑む第一原理物性予測の革新

研究成果の概要

相転移におけるスピン励起(マグノン)の効果を定量的に理解することを目的として、第一原理計算に基づくマグノン解析ソフトウェアの開発を行った。本手法では、OpenMX コードや SPR-KKR コードを用いて古典ハイゼンベルグ模型の交換結合定数 J_{ij} を導出し、さらに Holstein–Primakoff 変換を適用することでマグノン分散を求める。開発したソフトは単純な強磁性体だけでなく、複数の副格子を含む反強磁性体やフェリ磁性体に対しても機能することを確認した。

この手法を巨大磁気熱量効果を示す物質 Gd_5Ge_4 へ適用し、構造相転移温度付近で観測される巨大なエントロピー変化 ΔS の起源を解析した。 Gd_5Ge_4 は低温で強磁性相にあるが、約 25 K で反強磁性に相転移し、同時に結晶構造も変化する。そこで、低温相(強磁性)と高温相(反強磁性)それぞれに対してフォノンおよびマグノン計算を行い、それぞれの素励起によるエントロピー変化 ΔS_{ph} , ΔS_{mag} を定量計算した。その結果、構造相転移におけるエントロピー変化は主にスピン励起由来(ΔS_{mag})であり、フォノンによる寄与(ΔS_{ph})は限定的であるという新たな知見が得られた。さらに、これら両者を統合的に考慮することで、実験で観測される ΔS を定量的に再現することにも成功した。一方で、理論計算によって得られた構造相転移温度は、実験値に比べて大幅に過大評価される傾向があり、この点において完全な理解には至っていない。今後は、マグノンやフォノンの非調和性、さらにマグノン-フォノン相互作用の効果を取り入れることで、相転移温度の予測精度改善を試みる。