

MASAMUNE-IMR

Materials science Supercomputing system for Advanced Materials simulation towards Next-generation frontiers in Materials Research

スパコンプロフェッショナル Supercomputer Professional

No. 22

日時

令和元年 **6月25日** (火)
14:00~15:30

場所

金属材料研究所
2号館 1階ラウンジ

※ お申込みは不要です。当日はお気軽にご参加ください。

「第一原理計算に基づく磁性体物性予測」



東北大学大学院理学研究科 物理学専攻 准教授

是常 隆 先生

近年、ワイルド点やベリー曲率といったバンドのトポロジカルな性質に着目した研究が盛んに行われている。強磁性体においては、これらは異常ホール効果や異常ネルンスト効果といった物理量につながる事が知られている。このバンドのトポロジカルな性質は第一原理的に得られたバンド構造を有効模型化することで、効率的に計算することが可能となる。

本講演では、まず、強磁性体と同じ対称性をもつ反強磁性体Mn₃Snでの異常ホール効果や異常ネルンスト効果の計算例を紹介する。さらに、この有効模型化を結晶構造データベースに適用して得られた有効模型データベースやそれを用いた解析についても紹介する。

■ 主催



CCMS
東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター
Center for Computational Materials Science

東北大学 金属材料研究所 計算材料学センター

■ 協賛



計算物質科学
人材育成コンソーシアム



ポスト「京」萌芽的課題
「基礎科学の挑戦」

■ 「MASAMUNE-IMR」は国立大学法人東北大学の登録商標です