

## 奥地利 Graz 大学利用 NAG 算法库 求解磁性奈米结构的自旋电子学 (Spintronics) 问题

Christian Ertler 与 Walter Pötz 教授是奥地利格拉兹大学 (Karl-Franzens University Graz) 理论物理研究所理论固态物理组团队的成员。他们研究的主要课题是探索奈米结构中的传输现象，尤其是自旋现象，这将有助于未来自旋电子的应用。

自旋电子学是当前相当热门的研究课题，2007 年诺贝尔物理学奖正是授予巨磁电阻 (自旋相关传输效应) 的发现，此发现能大大提升现今计算机的硬盘储存功能。自旋电子学试图利用所谓的自旋电子 (这是一个量子力学的角动量，给定一个磁矩，能够只在两个相反的方向移动) 来储存或处理资讯。我们期盼自旋电子学能够提供创新的功能，大幅提升资讯科技的性能。

### 面临挑战

此计划是要明确地厘清奈米结构中磁性与传输性质的交互作用。此种结构是由只有几个奈米 ( $10^{-9}$  m) 厚度的不同材质堆积而成。如果一个外部电源导入到此结构中，其中的粒子 (通常是电子) 便会开始移动。在小尺寸的结构里，粒子的移动被称之为量子理论。

尤其我们对结构做进一步的研究后，将某些层以带有磁性原子的材质进行结合。电子拥有磁矩，称之为自旋 (spin)，其会朝向两个相反的方向移动。现在，流动电子的自旋可以与磁性原子交互作用，从而导致了结构中有趣的磁性与传输性质的交互作用。一个电子移动到整个结构中的机率，主要与电子的自旋方向有关。这实现了自旋电子的装置，将能够提出比目前的电子设备更多新的功能以及更好的性能。

此计划还提出了一些标准，但却是一些复杂的数值问题，例如：微分方程求解、非线性与线性方程求解、逆矩阵与适应性积分等问题。

“我们很快意识到，自己撰写需要的程序是相当耗时的。我们正需要容易使用的函数、经过完整验证以及具有高精确度的算法库。同时我们也希望这些函数能够提供最高性能的计算能力。我们发现 NAG 算法库就是最好的解决方案 – 它是值得我们信赖的算法库。出色的使用文件让函数很容易就能使用。”

Christian Ertler  
理论物理研究所  
Graz 大学

## 解决方案

“我们很快意识到，自己撰写需要的程序是相当耗时的。我们正需要容易使用的函数、经过完整验证以及具有高精确度的算法库。同时我们也希望这些函数能够提供最高性能的计算能力。我们发现 NAG 算法库就是最好的解决方案 – 它是值得我们信赖的算法库。出色的使用文件让函数很容易就能使用。”

奥地利格拉兹大学理论物理研究所的 Christian Ertler 与 Walter Pötz 使用 NAG 算法库开发出一个模拟的工具，用来探索在磁性奈米结构中的传输现象。透过 NAG 算法库，他们很有效率的解决了量子传输问题。他们预测与时间相关的一些现象，例如：稳态直流偏压的电流与磁性振荡应该是存在的。在结构中的铁磁性 (ferromagnetism) 能够透过外部偏压来控制。

这个研究的成果已在物理期刊中刊载，并于 2010 年 10 月于比萨的国际计算电子学研讨会中提出。