強磁性規則合金 Fe_3–Sn における異常ネルンスト効果の第一原理計算

First-principles calculation of anomalous Nernst effect in ferromagnetic ordered alloy Fe_3-Sn

東北大学電気通信研究所 [1]，東北大学スピントロニクス学術連携研究教育センター[2]

○(M1)渡辺 康平 [1]，辻川 雅人 [1,2]，白井 正文 [1,2]

Research Institute of Electric Communication, Tohoku Univ.[1],

Center for Spintronics Research Network, Tohoku Univ.[2]

°(M1) Kohei Watanabe[1], Masahito Tsujikawa[1,2], Masafumi Shirai[1,2]

E-mail: kohei.watanabe.p7@dc.tohoku.ac.jp

近年、自発磁化と温度勾配に垂直に起電力が生じる異常ネルンスト効果が注目されており、Fe-Sn 系規則合金薄膜においても大きな異常ネルンスト効果が生じることが実験的に報告された[1]。

異常ネルンスト効果の大きさを示す熱電テンソルの横成分 α_{xy} は式(1)から求められる。この式より、化学ポテンシャルμ_0付近での異常ホール伝導率 σ_{xy} がエネルギーの関数として著しく変化している材料において異常ネルンスト効果は大きく現れる。

$$\alpha_{xy} = -\frac{1}{e}\int d\mu \, \frac{\partial f}{\partial \mu_0}\sigma_{xy}(\mu)\frac{(\mu-\mu_0)}{T} \tag{1}$$

ここで、e、f、T はそれぞれ電気素量、フェルミ分布関数、絶対温度である。本研究では強磁性規則合金 Fe_3Sn の異常ネルンスト効果を、第一原理計算に基づいて調べた。電子状態計算には Quantum ESPRESSO[2]を、伝導特性の計算には PAOFLOW[3]を用いた。ここでは Fe_3Sn の安定構造である六方晶 $D0_{19}$ 構造と、比較のため立方晶 $D0_3$ 構造に対して計算を行った。

各構造における Fe_3Sn の σ_{xy} のエネルギー依存性を Fig. 1 に示す。300 K における α_{xy} は $D0_{19}$ 構造で 2.024 $\mathrm{Am^{-1}K^{-1}}$、$D0_3$ 構造で 1.453 $\mathrm{Am^{-1}K^{-1}}$と求まった。強磁性体である bcc Fe の α_{xy} の計算値は 0.154 $\mathrm{Am^{-1}K^{-1}}$であり、Fe_3Sn は Fe よりも 1 桁程度大きな α_{xy} の値を取ることが分かった。これは Fe の σ_{xy} はμ_0付近であまりエネルギーに依存していないのに対して、Fig. 1 に見られるように Fe_3Sn ではエネルギーの増加につれて σ_{xy} が顕著に減少しているためである。以上の結果から、Fe_3Sn では Fe よりも磁化が小さくなるにも関わらず、異常ネルンスト効果が大きく現れることが計算により示された。

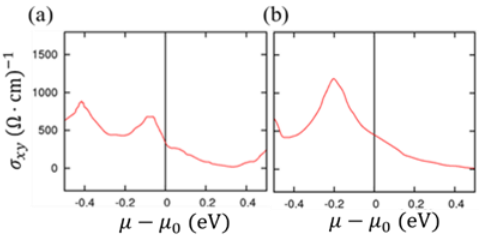

Fig.1 Energy dependence of σ_{xy} in Fe_3Sn
(a) $D0_{19}$ structure, (b) $D0_3$ structure

本研究を進めるにあたり、未発表の実験データを提供していただいた東北大学金属材料研究所の水口将輝氏に感謝します。

References

[1] M. Mizuguchi, *et al.*, MMM 2019, Las Vegas, Nevada, USA, Nov 2019.

[2] P. Giannozzi, *et al.,* J. Phys. Condens. Matter **21**, 395502 (2009).

[3] M. B. Nardelli, *et al.,* Comput. Mater. Sci. **143**, 462 (2018).