

逆ペロブスカイト型遷移金属窒化物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 antiperovskite-type transition-metal nitrides

東北大学工学研究科¹, 東北大学電気通信研究所²,東北大学スピントロニクス学術連携研究センター³○(M2)坪和 優佑^{1,2}, 辻川 雅人^{2,3}, 白井 正文^{2,3}Graduate School of Engineering, Tohoku Univ.¹,Research Institute of Electric Communication, Tohoku Univ.²,Center for Spintronics Research Network, Tohoku Univ.³○(M2)Yusuke Tsubowa^{1,2}, Masahito Tsujikawa^{2,3}, Masafumi Shirai^{2,3}E-mail : yusuke.tsubowa.s7@dc.tohoku.ac.jp

近年、自発磁化と温度勾配に垂直な方向に起電力が生じる異常ネルンスト効果(ANE)が高い変換効率を示す熱電効果として注目されている^[1]。しかし、実用化を可能にする特性を示す材料は未だ報告されてない。そこで本研究では、すでに ANE の実験報告^[2]のある γ' -Fe₄N に加え、これに原子置換を行った Fe₃CoN、Fe₃NiN を対象にして ANE の第一原理計算を行った。ANE の大きさを示す横ペルチェ係数 α_{xy} は次式から求められる。

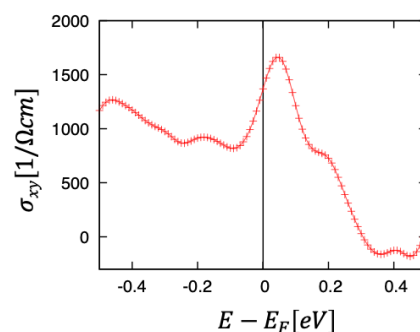
$$\alpha_{xy} = -\frac{1}{e} \int d\epsilon \frac{\partial f}{\partial \mu} \sigma_{xy} \frac{\epsilon - \mu}{T} \quad (1)$$

ここで e 、 ϵ 、 f 、 T 、はそれぞれ電気素量、単一電子エネルギー、フェルミ分布関数、絶対温度を表す。この式から、化学ポテンシャル μ 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大きな ANE が現れることが分かる。電子状態計算には QUANTUM ESPRESSO^[3]を、伝導特性の計算には wannier90^[4]と wannier tools^[5]を用いた。

式(1)により 300K における α_{xy} の値を求めたところ、Fe₄N が0.62A/(m・K)、Fe₃CoN が-3.12(A/m・K)、Fe₃NiN が-0.97A/(m・K)となり、Fe₃CoN が最も大きな α_{xy} を示すことが分かった。大きな ANE を示す材料として近年注目されている Co₂MnGa における α_{xy} の計算値は 2.0A/(m・K)^[6]であり、Fe₃CoN の値はこれを超える大きな値である。Fe₃CoN はフェルミ準位(E_F)近傍にトポロジカルな特異点を有しており、この特異点の存在が σ_{xy} を増大させ(Fig.1)、結果として大きな α_{xy} をもたらしたと考えられる。以上の結果から、遷移金属窒化物 Fe₃CoN は大きな ANE を示す有望な熱電変換材料であるといえる。講演では、遷移金属窒化物(Fe,Co)₄N における ANE の組成依存性についても議論する。

References

- [1] M. Mizuguchi and S. Nakatsuji, Sci. Technol. Adv. Mater. **20**, 262 (2019).
- [2] S. Isogami, *et al.*, Appl. Phys. Express **10**, 073005 (2017).
- [3] P. Giannozzi, *et al.*, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 395502 (2009).
- [4] A. A. Mostofi, *et al.*, Compt. Phys. Commun. **178**, 685 (2008).
- [5] Q.-S. Wu, *et al.*, Compt. Phys. Commun. **224**, 405 (2017).
- [6] S. N. Guin, *et al.*, NPG Asia Mater. **11**, 16(2019).

Fig.1 Energy dependence of σ_{xy} in Fe₃CoN