

第一原理計算による磁性熱電材料の探索**First-principles Materials Search of Thermoelectric Magnets****東大工¹, 理研 CEMS² °有田 亮太郎^{1,2}****Univ. Tokyo¹, RIKEN CEMS.², °Ryotaro Arita^{1,2}****E-mail: arita@ap.t.u-tokyo.ac.jp**

本講演では、19 世紀以来様々な強磁性体で観測されてきた異常ネルンスト効果に焦点をあて、これの第一原理物質探索に関する最近の我々の研究を紹介する。異常ネルンスト効果はゼーベック効果による熱電変換と比べ、温度差と垂直方向に発電し、大面積化やフレキシブル化が容易という利点をもつことから近年注目を集めている。

物質の輸送係数や応答関数を計算するには、その電子状態の特性を正確に反映した低エネルギー有効モデルの導出が重要である。その際、ブロッホ波動関数からワニエ関数へ基底を変換する必要がある[1]。このワニエ関数の導出は従来、エネルギーウィンドウや初期波動関数を手動で設定しながら行なっていたが、最近、これらを自動化し、輸送係数のハイスループット計算を行うスキームを作った。我々は中辻らの実験グループと共同で Co_2MnGa における巨大異常ネルンスト効果の発見とその発現機構の解明をしたが[2]、そこでの知見とこれまで構築してきた方法論を組み合わせ、1400 種類の強磁性体のネルンスト係数の自動計算を行い、 Fe_3Al および Fe_3Ga で巨大異常ネルンスト効果が発現することを見出した[3]。

このような熱電効果が反強磁性体でも実現するかという問題は非常に興味深い。我々は中辻らの実験グループと共同で、 Mn_3Sn について巨大な異常ネルンスト効果[4]や磁気光学カー効果[5]が発現することを見出している。 Mn_3Sn のような機能物性を示す反強磁性体は数多く存在すると期待されるものの、強磁性体に対して行ったような系統的な大規模探索はこれまでなされていない。例えば Fe_3Al や Fe_3Ga を凌駕する異常ネルンスト効果を示す反強磁性体の探索はデバイス開発の観点からも大変興味深く、数千単位の物質に対する計算に基づく理論探索が急務である。そのような機能性反強磁性体の探索には、与えられた結晶構造から磁気構造を正確に予測する方法論が鍵となるが、最近それに関する方法論開発を行なったので、それについての紹介も行いたい[6]。

[1] G. Pizzi *et al.*, J. Phys. Cond. Matt. 32, 165902 (2020).

[2] A. Sakai *et al.*, Nature Physics 14 1119 (2018).

[3] A. Sakai *et al.*, Nature 581, 53 (2020).

[4] M. Ikhlas *et al.*, Nature Physics 13 1085(2017)

[5] T. Higo *et al.*, Nature Photonics 12, 73(2018)

[6] M-T. Huebsch *et al.*, arXiv:2008.13669