

研究プロジェクト名: KKRグリーン関数法によるホイスラー化合物の有限温度における電子状態計算

概要: KKRグリーン関数法に局所フォノンやマグノン効果を取り入れることで有限温度における様々なホイスラー化合物の電子状態の理論解析を行う。さらに線形応答理論を組み合わせて緩和時間近似を用いることなくスピン依存伝導やスピンゼーベック効果の定量的な議論を行う。

コアメンバー: 新屋ひかり(東北大通研)、福島鉄也(東大物性研)、真砂啓(阪大CSRN)、佐藤和則(阪大工)、吉田博(東大CSRN)

期待される研究成果: 従来、ホイスラー化合物に対する第一原理電子状態計算では絶対零度における物性を評価していたため、実験結果との比較が困難であった。本研究では第一原理計算手法であるKKRグリーン関数法にコヒーレントポテンシャル近似を用いて温度効果を取り入れることで物性値の定量的な議論を行い、実用化に資するスピントロニクス材料のデザインを行う。

H.Shinya, et al., Applied Physics Letters **117**, 042402 (2020).

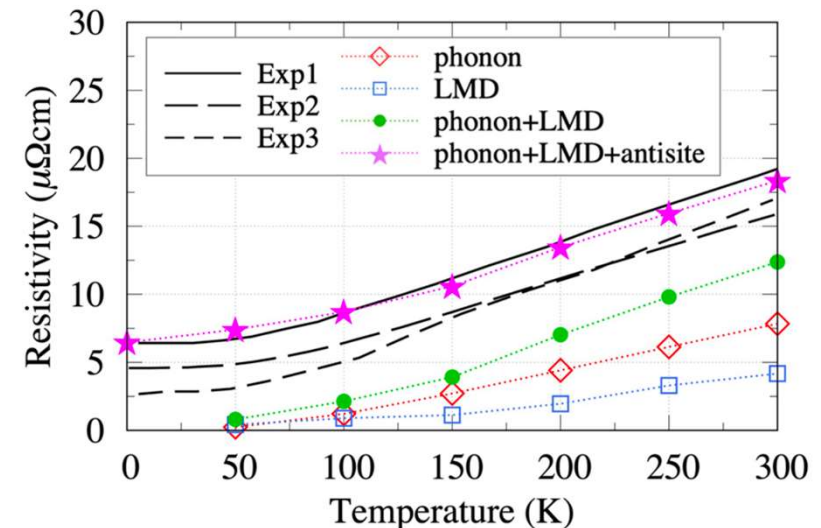


図: Co₂MnSiの電気伝導率

研究プロジェクト名: KKRグリーン関数法によるホイスラー化合物の有限温度における電子状態計算

概要: KKRグリーン関数法に基づく第一原理計算にフォノン-電子散乱とマグノン励起による温度効果を取り入れ、ホイスラー合金 Co_2MnSi の有限温度における電子状態の理論予測を行った。さらに線形応答理論により伝導特性を計算した。

研究成果(実施状況): 従来の第一原理計算では有限温度における物性値の定量的な予測は困難である。本研究ではKKRグリーン関数法にコヒーレントポテンシャル近似を用いて温度効果を取り入れた。 Co_2MnSi の場合、温度が上昇するとバンド状態にはフォノン-電子散乱過程による“ぼやけ”が生じ、ハーフメタルはマグノン励起により消失することがわかった。また、電気抵抗率を実験値と比較したところ、両方の温度効果を同時に考慮することが重要であることがわかった。

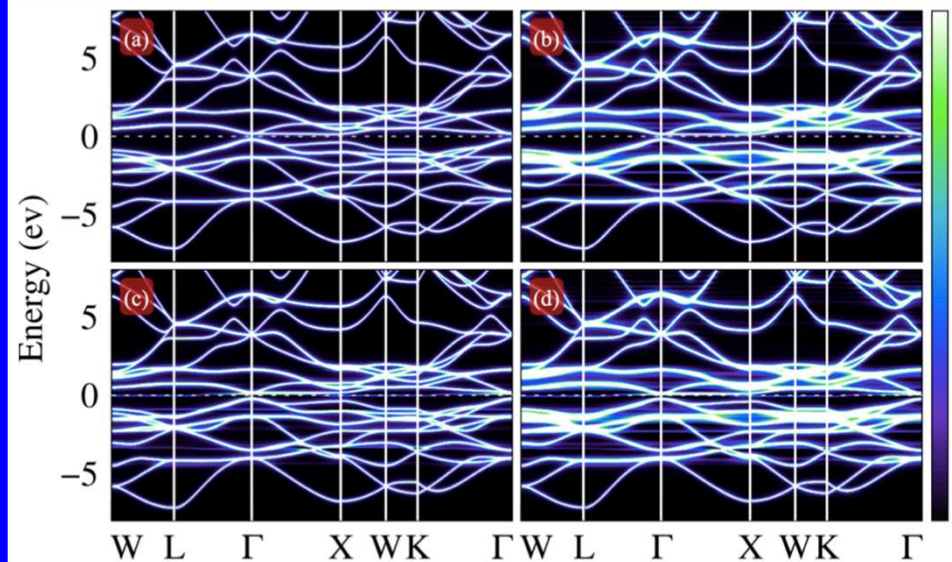


図: 得られたブロッホスペクトル関数。(a) 0 K、(b) フォノンを考慮 (300 K)、マグノンのみ考慮 (300 K)、両方を考慮 (300 K) した場合。

主要発表論文等: [1] H. Shinya, et al., to be submitted.

研究プロジェクト名: KKRグリーン関数法によるホイスラー化合物の有限温度における電子状態計算

概要: KKRグリーン関数法に局所フォノンやマグノン効果を取り入れることで有限温度における様々なホイスラー化合物の電子状態の理論解析を行う。さらに線形応答理論を組み合わせ、緩和時間近似を用いることなくスピン依存伝導やスピンゼーベック効果の定量的な議論を行う。

研究成果(実施状況): 従来の第一原理計算では有限温度における物性値の定量的な予測は困難である。本研究ではKKRグリーン関数法にコヒーレントポテンシャル近似を用いて温度効果を取り入れた。 Co_2MnSi では両方の温度効果に加え、アンチサイト欠陥による不純物散乱を同時に考慮することで実験値を再現することに成功した。

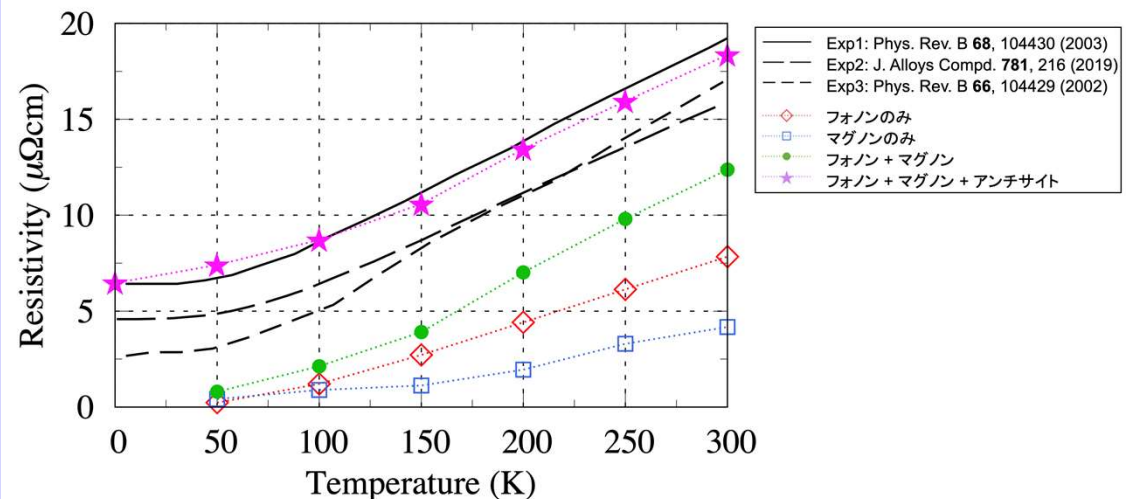


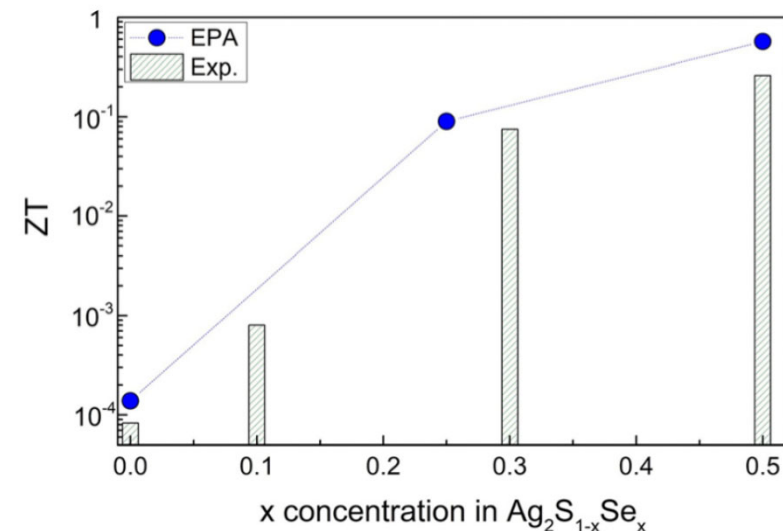
図: Co_2MnSi の電気伝導率

主要発表論文等: [1] H.Shinya, *et al.*, Applied Physics Letters **117**, 042402 (2020).

研究プロジェクト名: KKRグリーン関数法によるホイスラー化合物の有限温度における電子状態計算

概要: KKRグリーン関数法に局所フォノンやマグノン効果を取り入れることで有限温度における様々なホイスラー化合物の電子状態の理論解析を行う。さらに線形応答理論を組み合わせることで緩和時間近似を用いることなくスピン依存伝導やスピンゼーベック効果の定量的な議論を行う。

研究成果(実施状況): 熱電変換デバイスは長寿命や電力の安定供給など様々なメリットを持っており、エネルギーハーベスティングの新技术として期待されている。本研究では延性を示す $\text{Ag}_2(\text{S}, \text{Se})$ に注目し、フレキシブル熱電変換デバイスへの応用の可能性を調べた。 Ag_2S にSeを導入することによる欠陥特性やキャリア濃度増加の熱電特性への影響を議論した。なお、本研究では第一原理計算にボルツマン方程式を組み合わせることで計算を行った。



▲Seの濃度に対する熱電変換性能指数
[Appl. Phys. Lett. 120, 143903 (2022)]

主要発表論文等: [1] L. D. Anh, *et al.*, Nature Commun. 12, 4201 (2021), [2] H. N. Nam, *et al.*, Phys. Rev. B 105, 075205 (2022), [3] H. Naganuma, *et al.*, ACS Nano 16, 4139 (2022), [4] H. N. Nam, *et al.*, Appl. Phys. Lett. 120, 143903 (2022)