

第一原理計算を用いた FePt, FePd 合金の異常ホール伝導度の規則度依存性

兵頭一茂, 小田洋平*, 佐久間昭正

(東北大, *福島高専)

First-principles study on the dependence of anomalous Hall conductivity on degree of order in FePt and FePd alloys

K. Hyodo, Y. Kota*, and A. Sakuma

(Tohoku Univ., *Fukushima National College of Technology)

はじめに

$L1_0$ -FePd, FePt 合金は価電子数・結晶構造の観点で類似の材料であるが, その異常ホール伝導度 (σ_{xy}) の起源は大きく異なるとされている. 実際に先行研究^{1),2)}において, FePt の σ_{xy} は電子の散乱を必要としない内因性機構が主要な起源であるのに対し, FePd の σ_{xy} は電子散乱から生じるサイドジャンプ機構が支配的であるという結果が得られている. これらの先行研究では, 内因性機構の σ_{xy} を理想的な結晶における第一原理計算の値とし, 電子散乱が起源の σ_{xy} をこの計算値と実験で得られた値との差として求めている. このような結果に対して, 計算からも電子散乱を考慮した電子状態から σ_{xy} を計算し, 散乱の効果を議論することが, σ_{xy} の理解を深めるために重要である.

以上の背景から本研究では, 電子散乱の強さを結晶の規則度で表現し, 不規則 2 元合金 FePt, FePd における σ_{xy} の規則度に関する依存性を調べた. また比較のため, σ_{xy} と併せて σ_{xx} についても計算を行った.

計算手法として局所スピ密度近似に基づいた強結合線形マフィンティン軌道法を用い, Fe サイトと Pd(Pt) サイトを不規則配列させた合金について異なる規則度での σ_{xy} を計算した. 不規則合金の電子状態は coherent-potential 近似から計算した. σ_{xx} 及び σ_{xy} の計算には Kubo-Streda 公式³⁾ の Fermi-surface 項を用いた.

結果および考察

Fig. 1(a) は FePt, FePd 合金における σ_{xx} の, 規則度 (S) 依存性の結果である. 両者の σ_{xx} は S の低下と共に共通して単調に低下し, 規則度の低下が散乱の増加として振る舞うことを確かめた. また, σ_{xx} の値については, 全ての S で FePd の方が FePt より 5 倍程度大きな値となっている.

Fig. 1(b) は二つの合金の σ_{xy} の S 依存性である. FePt の σ_{xy} は S の減少に伴う電子散乱の増加に対し, σ_{xx} とは逆に単調に増加する結果となった. また, FePd については $S = 1$ から 0.9 に規則度が低下した際, σ_{xy} は 4 倍程度に上昇し, 散乱により σ_{xy} が大きく増加した. 加えて, $S = 0.9$ の σ_{xy} は実験値¹⁾ $\sigma_{xy} = 806(\Omega^{-1}\text{cm}^{-1})$ にほぼ一致し, 有限の電子散乱を考慮することで実験値をよく再現できることが分かった. $S = 0.9$ から S がさらに低下すると, σ_{xy} は単調に減少していき, 最終的に $S = 0$ での σ_{xy} は $S = 1$ と比較して 2 倍程度大きな値となった.

結果として FePt, FePd について σ_{xy} の S 依存性を比較すると, FePd のみが $S = 0.9$ 近傍でピークを持つが, 両者とも $S = 1$ からの低下に対し σ_{xy} が増加することが明らかとなった. 講演ではさらに, それぞれの合金における σ_{xy} の規則度依存性の起源に関し, σ_{xx} の値や電子状態の観点から議論する.

References

- 1) K. M. Seeman *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **104**, 076402 (2010)
- 2) P. He *et al.*, *Phys. Rev. Lett.*, **109**, 066402 (2012)
- 3) P. Streda *et al.*, *J. Phys. C: Solid State Phys.*, **15**, L717 (1982)

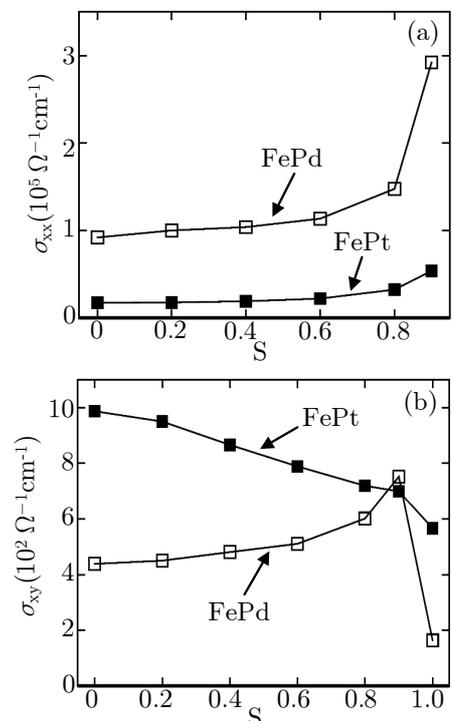


Fig. 1 calculated (a) σ_{xx} and (b) σ_{xy} values in FePd, FePt alloys as a function of long-range order parameter S