

## 研究論文

複合アニオン層状化合物超伝導体  $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$  における

## 元素選択的な磁性相の計算化学的検証: I. 酸素欠損位置と最安定磁性相

藤乗優治郎\*, 中西 愛\*, †神原陽一\*

**Computational Chemical Analysis on Element-Specific Magnetic Phases in a Mixed Anion Layered Compound Superconductor,  $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$ : I. Sites for Deficient Oxygen and the Most Stable Magnetic Phases**

by

Yujiro TOJO\*, Manami NAKANISHI\* and †Yoichi KAMIHARA\*

(Received Jun. 18, 2019; Accepted Aug. 6, 2019)

**Abstract**

$\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$  (21113V) is a mixed anion layered compound containing a perovskite-related vanadium (V) oxide blocking layer in a unit cell. In 2019, electronic and magnetic phase diagrams as a function of oxygen deficiency ( $\delta$ ) on superconducting 21113V were experimentally demonstrated. In this study, the magnetic stability of V and Fe in 21113V ( $\delta = 0, 0.25, 0.50$ ) was theoretically verified on density functional theory (DFT). The deficient oxygen in apical sites of the perovskite-related structures is more stable than other deficient oxygen sites. The most stable magnetic phase of V in 21113V of  $\delta = 0$  is “antiferromagnetic ordered phase between two ferromagnetic V magnetic mono-layers” (A-AF). The A-AF of V transfers to ferrimagnetic ordered phases (Ferri.) in  $\delta = 0.25, 0.50$ . Theoretical magnetic ordered phases are qualitatively consistent with experimental electronic and magnetic phases for 21113V, although the quantitative differences between theoretical element-specific spin magnetic spin moments and experimental ones should be discussed in later reports.

**Keywords:** Mixed anion layered compounds,  $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$ , Electronic and magnetic phase diagram, Oxygen deficiency, Density functional theory

## 1. 緒言

2006年, 鉄 (Fe) の  $d$  電子が電気伝導を担う複合アニオン層状化合物 (Mixed anion layered compounds : MALC)  $\text{LaFePO}$  において, 超伝導相が 4 K 以下で報告された<sup>1)</sup>. 純 Fe, 及び Fe の化合物は最もよく知られた磁石 (強磁性体, フェリ磁性体) であるにも関わらず,  $\text{LaFePO}$  中の Fe の電

子相は, 高圧力下や金属化合物中にてイオンとしての局在磁気モーメント (電子のスピン分極) を失うと超伝導相が安定となる<sup>2)-5)</sup>.  $\text{LaFePO}$  の超伝導相の発見は, 高圧下の純 Fe と似た超伝導相が複合アニオン層状化合物において生じること示した最初の例である.

2006年以降, 結晶学的類似の鉄化合物における超伝導相は, “Iron-Based Layered Superconductor” (鉄系層状超伝導体, 又は省略された俗称として鉄系超伝導体) と呼ばれる. 2008年, Fe とヒ素 (As) を含む化合物が 26 K の超伝導転移温度 ( $T_c$ ) を示し, 同一試料のオンセット温度 ( $T_c^{\text{onset}}$ ) は 30 K を超える<sup>6)</sup>と報告された. その後現在まで, 日本, 米国, 中国, ドイツ, 英国で新たな鉄系層状超伝導体を探索する研究競争は続く<sup>7)-10)</sup>.

令和元年 6 月 18 日受付

\* 慶應義塾大学工学部物理情報工学科, 慶大スピントロニクス研究開発センター: 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1 TEL 045-566-1611 FAX 045-566-1587

CSRN, Department of Applied Physics and Physico-Informatics, Faculty of Science and Technology, Keio University, Yokohama, Kanagawa 223-8522, Japan

† : 連絡先/Corresponding author kamihara\_yoichi@keio.jp