

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: II. 最安定な酸素位置と電子状態密度

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, $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$: II. the Most Stable Site Positions for Oxygen and Electronic Density of States

by

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

(Received Jun. 18, 2019; Accepted Jul. 27, 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 the previous study, the magnetic stability of V and Fe in 21113V ($\delta = 0, 0.25, 0.50$) was theoretically verified on the density functional theory (DFT). In this study, we demonstrated the most stable site positions in the crystal structure including deficient oxygen. In $\delta = 0.25, 0.50$, the z position of oxygen is reproduced reported results, precisely. It is indicated that oxygen deficiency is inevitable in the reported 21113V with nominally $\delta = 0$ samples. The oxygen deficiency of the apical sites for the perovskite-related structure expands the lattice constant c . We also demonstrated the density of states (DOS) of 21113V. Fe in 21113V contributes to electrical conduction and V does not contribute to electrical conduction. Except for $\delta = 0$, V in 21113V exhibits the ferrimagnetic phase (Ferri.) with spontaneous magnetic polarization.

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

2009年, Zhuらは鉄系層状超伝導体 $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$ が $T_c^{\text{onset}} = 37.2$ K の超伝導転移を示すと報告した¹⁾. この化合物を化学組成比より 21113V と以後示す. 21113V は, 結晶中の V が反強磁性相 (AF), Fe が常磁性相 (PM) を示す δ の範囲において超伝導相を示す²⁾.

2010年, Nakamuraらは, 密度汎関数理論 (DFT) を用いて $\delta = 0$ における 21113V 中のバナジウム (V), 鉄 (Fe) の最

安定な磁気状態の理論値を導出した³⁾. さらに Nakamuraらは, $\delta = 0$ における電子状態密度 (Density of state: DOS) と V, Fe の部分電子状態密度 (projected density of state: pDOS) を報告した³⁾. この結果の DOS は V, Fe の pDOS の寄与が支配的である. しかしながら, Sr, As, O の pDOS の DOS への寄与と酸素欠損を含む結晶構造中の DOS, pDOS については報告されていない. そして, δ と「21113V 中の V, Fe の磁性相」の相関に関する理論的な解釈は未だ不明であった.

そこで既報⁴⁾にて, DFT 計算収束後の $\delta = 0, 0.25, 0.50$ における各磁性相と最安定磁性相とのエネルギー差 ΔE (meV (f.u.)^{-1}) を求め, 磁性相の安定性を比較した. この時, Fe の磁性相は stripe 型反強磁性相 (s-AF) とした.

同じく既報⁴⁾にて定義した V に対して c 軸と平行に結合する酸素 (以下, 頂点酸素と呼称する) にあたる O9, O10,

令和元年6月18日受付

* 慶應義塾大学理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