

## 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: III. 準安定磁性相を考慮した電子磁気状態相図との比較

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, $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$ : III. Comparison between Electronic and Magnetic Phase Diagrams and Results of Computational Chemical Analysis Considering Metastable Magnetic Phases

by

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

(Received Jun. 26, 2019; Accepted Aug. 20, 2019)

**Abstract**

Theoretical magnetic phase diagrams of V and Fe in  $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$  (21113V) ( $\delta = 0, 0.25, 0.50$ ) are verified on density functional theory (DFT). Theoretical magnetic phases of V are antiferromagnetic phases for  $\delta = 0$  and ferrimagnetic phases (Ferri.) for  $\delta = 0.25, 0.50$ . The Ferri., whose spontaneous magnetization ( $M_S$ ) depend on their formation energies, show the largest  $M_S$  for  $\delta = 0.25$  with the second lowest formation energy. The stable magnetic phases of Fe in 21113V are stripe-type antiferromagnetic phases (s-AF), although the magnetic phase of Fe shows almost the same formation energy between s-AF and paramagnetic phases (PM) for  $\delta = 0.25$ . The magnetic phases are qualitatively consistent with the experimental magnetic phases of 21113V, although quantitative differences between measured element specific magnetic moments and theoretical ones appear. The differences are probably improved by application of a larger super cell and / or treatment of coherent potential approximation for oxygen deficiency.

**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  $T_c^{\text{onset}} = 37.2\text{ K}$  の超伝導転移を示すと報告した<sup>1)</sup>. この化合物を化学組成比より 21113V と以後示す. 2019年, 我々は既報<sup>2)</sup>にて, 21113V の結晶中のバナジウム (V) が反強磁性相

(AF), 鉄 (Fe) が常磁性相 (PM) を示す  $\delta$  の範囲において, 21113V は超伝導相 (SC) を示すことを実験的に明らかにした.

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 V, Fe の最安定な磁性相を導出した<sup>3)</sup>. しかしながら,  $\delta$  と「21113V 中の V, Fe の磁性相」の関係に対する理論的な解釈は未だ不明であった.

我々は既報<sup>4)</sup>にて, Fe の磁性相を stripe 型反強磁性相 (s-AF) に制限した拡張単位胞 (super cell) に対して, 化学組成毎に DFT 計算収束後の「V の示す複数の磁性相の各内部エネルギーから最安定磁性相の内部エネルギーを引くことで求めた内部エネルギー差 ( $\Delta E$ )」を求め, 21113V の磁性相の安定性を定量的に明らかにした. その結果, V の磁性

令和元年6月26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  
kamiyara\_yoichi@keio.jp  
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