

# 層状化合物超伝導体 $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$ の非経験的な磁気構造

藤乗優治郎, 中西愛, 神原陽一  
(慶應大学)

Magnetic Quantum phase transition of a superconducting layered compound,  $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$

Y. Tojo, M. Nakanishi, Y. Kamihara  
(Keio Univ.)

## 緒言

ペロブスカイト型構造を示す酸化物は、酸素欠損の量や構成元素により、その電氣的/磁氣的性質が大きく変わることが知られている。一方、混合(複合)アニオン化合物と呼ばれる化合物は、透明酸化物伝導体<sup>1</sup>、光触媒材料<sup>2</sup>、および高温超伝導<sup>3</sup>のような多様な機能性を示すことが近年知られている。2009年に鉄系高温超伝導体の一つとして報告された  $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$ <sup>4,5</sup> は、ペロブスカイト関連  $\text{Sr}_2\text{VO}_{3-\delta}$  層と PbO 型 FeAs 層が互いに積層した混合アニオン層状化合物(Mixed anion layered compounds: MALC)である。 $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$  の磁性は、単位格子中に磁気イオンを2種類含むため、複雑である。 $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$  のような MALC の磁性等の機能性解釈には、計算機科学によるサポートが必須である。本報告は非経験的な電子状態と、実験で得られた電子磁気状態相図を比較検討し、 $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$  における酸素欠損由来の磁気量子相転移の詳細を明らかにする。

## 方法

Projected Augmented Wave (PAW)法<sup>6,7</sup>による電子状態計算コード Vienna Ab-initio Simulation Package (VASP)を用いて非経験的な計算を行った。基本単位包の  $a, b$  軸を  $45^\circ$  回転してそれぞれ  $\sqrt{2}$  倍に拡張した  $a', b'$  軸を基本並進ベクトルとした拡張単位包(Super cell)を仮想結晶とした。欠損の生じる酸素サイトは、内部構造緩和後に内部エネルギーが最小値( $\Delta E = 0$ )となる構造として定義した。

## 結果と考察

$\delta = 0, 0.25, 0.5$  の磁性相を非経験的に求めた。 $\delta = 0.25$  の場合、酸素欠損の導入された Supercell は12種類存在する。 $\delta = 0.25$  の場合、Fe の磁気秩序はストライプ型の反強磁性相(s-AF)を仮定し、V の磁気秩序は反強磁性相(酸素欠損のある場合は、フェリ磁性相)を初期値として使用し、最安定な酸素欠損位置を得た。酸素欠損位置による内部エネルギーの変化を Fig. 1 に示す。酸素欠損の導入とともに、V と Fe の磁気モーメントはいずれも増加することが非経験的に示された。この計算結果は、実験で得られた相図と定性的には矛盾しない。

## 参考文献

- 1) 平松秀典, 神原陽一, 透明酸化物機能材料の開発と応用 監修 細野秀雄, 平野正浩 (CMC 出版, 東京, 2006) p. 71-93
- 2) A. Ishikawa, et al, J. Am. Chem. Soc. 124, 13547 (2002).
- 3) 神原陽一, 低温工学 52, 383-388 (2017).
- 4) X. Zhu, et al, Phys. Rev. B 79, 220512 (2009).
- 5) Y. Tojo, et al, arXiv:1802.03907 (2018).
- 6) P. E. Blöchl, Phys. Rev. B 50, 17953-17979 (1994).
- 7) G. Kresse and D. Joubert, Phys. Rev. B 59, 1758 (1999).

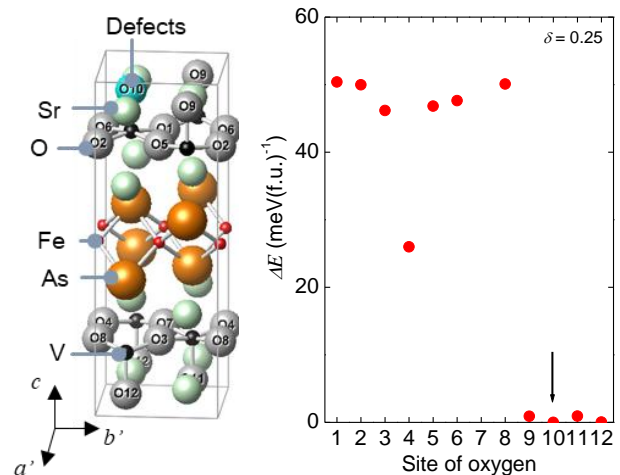


Fig. 1 The left shows a supercell structure of  $\text{Sr}_2\text{VFeAsO}_{3-\delta}$ . The right shows  $\Delta E$  versus several site of oxygen deficiency.