

## 研究論文

鉄系超伝導体  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  中の磁気モーメント消失に関する計算化学的検証

金安航大\*, 日比野拓\*, 的場正憲\*, †神原陽一\*

Computational Chemical Analysis on Quenching of Spin Polarization  
in an Iron-Based superconductor,  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ 

by

Kodai KANEYASU\*, Taku HIBINO\*, Masanori MATOBA\* and †Yoichi KAMIHARA\*

(Received Jun. 9, 2017; Accepted Jul. 13, 2017)

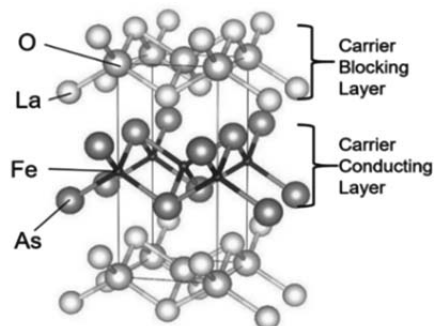
## Abstract

Layered mixed-anion compounds with ZrCuSiAs-type structure exhibit various electronic functional properties such as p-type semi-conducting properties, high thermoelectric performance, and high superconducting transition temperature ( $T_c$ ) superconductivity. After the discovery of an iron-based superconductor,  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  with  $T_c$  at 26 K, the mixed anion compounds have been expected as mother compounds for novel superconducting materials. In  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ , the appearance of superconducting phases is simultaneously occurred with quenching of spin polarization in Fe ions. In this study, density functional theory (DFT) calculation of  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  ( $x = 0.000-0.125$ ) was performed by using Vienna *Ab-initio* Simulation Package (VASP) code. Our calculation roughly reproduces Ishibashi's report, which demonstrates the most stable antiferromagnetic phase with stripe magnetic ordering in orthorhombic  $\text{LaFeAsO}$ , and experimental magnetic phase in  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ . Theoretical spin polarization of Fe almost disappears at  $x \geq 0.042$  in  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ . These results are consistent with electronic magnetic phase diagrams for  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$ .

**Keywords:** Iron-Based superconductor, Density functional theory, Antiferromagnetic ordering, Magnetic moment, spin polarization,  $\text{LaFeAsO}$ ,  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$

## 1. 緒言

2008年に、層状混合アニオン化合物  $\text{LaFeAsO}$  の酸素サイトへFを部分置換した  $\text{LaFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  が超伝導転移温度( $T_c$ ) = 26 K の高温超伝導体であると報告された<sup>1)</sup>。鉄(Fe)の単体は常圧下で強磁性相を示す。そのためFeは超伝導と相性が悪いと信じられていた。そのような迷信を破ったことから、この報告は注目を集め、その後多くの鉄系超伝導体と呼ばれる新材料が報告された。一連の鉄系高温超伝導体の  $T_c$  は、常圧下のバルク材料としては、 $\text{SmFeAsO}_{1-x}\text{F}_x$  において銅酸

Fig. 1 Crystallographic structure of  $\text{LaFeAsO}$ <sup>1)</sup>.

平成 29 年 6 月 9 日受付

\* 慶應義塾大学理工学部物理情報工学科: 神奈川県横浜市港北区日吉 3-14-1

TEL 045-566-1611 FAX 045-566-1587

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

化物系に次ぐ 58.1 K の比較的高温まで上昇している<sup>2)</sup>。

$\text{LaFeAsO}$  の結晶構造を Fig. 1 に示す。 $\text{LaFeAsO}$  は、電気伝導を担う FeAs 層とキャリア供給層である LaO 層が互いに積層した構造をとっており、結晶系は  $c$  軸に長い正方晶