

ペロフスカイト型ブロック層を持つ新超伝導体 $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{Pn}_2$ (Pn : As, P)

についての第一原理電子状態計算

First-Principles Electronic Structure of Superconductor $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{P}_2$: Comparison with LaFePO and $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{As}_2$

小杉太一¹、三宅隆^{1,2,3}、石橋章司^{1,3}

¹産総研ナノシステム、²JST-CREST、³JST-TRIP

T. Kosugi¹, T. Miyake^{1,2,3} and S. Ishibashi^{1,3}

¹Nanosystem Research Institute (NRI) "RICS", AIST, Tsukuba

²Japan Science and Technology Agency, CREST, Saitama

³Japan Science and Technology Agency, TRIP, Tokyo

鉄系物質での超伝導の転移温度は鉄層からのニクトゲン(Pn)原子の高さ h および Fe-Pn-Fe 結合角 α と相関があることが知られている[1]。超伝導に關与するのはフェルミ準位近傍の鉄の d 軌道であるため、 h の違いが d 軌道由来の電子状態に与える影響を調べるのが重要である。ペロフスカイト型のブロック層を持つ鉄系物質における超伝導も報告されている。本研究ではそれらのうちの $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{P}_2$ と $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{As}_2$ [2] の電子状態を密度汎関数理論に基づく第一原理計算 [3] で調べた [4]。 Γ の周りに、 $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{P}_2$ は三つ、 $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{As}_2$ は二つのフェルミ面を持つことが分かった [5]。フェルミ準位近傍の電子状態を調べるため、最局在ワニエ軌道による d 軌道模型のバンドのアンフォールディング [6] を行い 5 バンド模型を構成した。 $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{P}_2$ と $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{As}_2$ のそれぞれの構造に対し、化学組成を $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{P}_2$ あるいは $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2\text{As}_2$ にしたときの 5 バンド模型を構成した。その電子バンドの解析により、化学組成が違ってても構造が同じであればバンド構造は（特にフェルミ準位近傍で）かなり近いことが分かった。バンド構造の決定に大きく影響するのは隣接する鉄原子に局在した d_{xy} 軌道間の飛び移り積分である [5]。その値には構造の違いが組成の違いよりも大きく影響することが分かった。具体的には、 h の違いが飛び移り経路 Fe-Pn-Fe からの寄与に大きく影響する。 $\text{Ca}_4\text{Al}_2\text{O}_6\text{Fe}_2(\text{As}_{1-x}\text{P}_x)_2$ の x を変えたときの電子状態の系統的な変化も調べた。

[1] C. H. Lee, A. Iyo, H. Eisaki, H. Kito, M. T. Fernandez-Diaz, T. Ito, K. Kihou, H. Matsuhata, M. Braden, and K. Yamada: J. Phys. Soc. Jpn. 77 (2008) 083704.; Y. Mizuguchi, Y. Hara, K. Deguchi, S. Tsuda, T. Yamaguchi, K. Takeda, H. Kotegawa, H. Tou, and Y. Takano: Supercond. Sci. Technol. 23 (2010) 054013

[2] P. M. Shirage, K. Kihou, C. H. Lee, H. Kito, H. Eisaki, and A. Iyo: Appl. Phys. Lett. 97 (2010) 172506.

[3] <http://qmas.jp>.

[4] T. Kosugi, T. Miyake, and S. Ishibashi: J. Phys. Soc. Jpn. 81 (2012) 014701.

[5] T. Miyake, T. Kosugi, S. Ishibashi, and K. Terakura: J. Phys. Soc. Jpn. 79 (2010) 123713.

[6] K. Kuroki, S. Onari, R. Arita, H. Usui, Y. Tanaka, H. Kontani, and H. Aoki: Phys. Rev. Lett. 101 (2008) 087004.