

# 修士論文概要書

## Master's Thesis Summary

Date of submission: 01 / 06 / 2025

|                            |                                    |                           |                  |                       |                 |
|----------------------------|------------------------------------|---------------------------|------------------|-----------------------|-----------------|
| 専攻名(専門分野)<br>Department    | 物理学及応用物理学専攻                        | 氏 名<br>Name               | 吉村 綾太            | 指 導<br>教 員<br>Advisor | 勝藤 拓郎 印<br>Seal |
| 研究指導名<br>Research guidance | 複雑量子物性研究                           | 学籍番号<br>Student ID number | CD<br>5323A076-1 |                       |                 |
| 研究題目<br>Title              | NaCl 型 $V_{1-x}Nb_xO$ における絶縁体-金属転移 |                           |                  |                       |                 |

### 1. 研究背景・目的

VO は NaCl 型構造を有し、ランダムな V および O の欠損を持つ不安定化合物である[1]。酸素含有量の増加と共に電気抵抗率は増加し、磁化率は Curie-Weiss 則に従うようになることが報告されている。近年  $K_2CO_3$  を添加した Floating Zone 法によって cm オーダーの単結晶の作製が可能になったことが報告されており、酸素含有量が多いところでは Mott 絶縁体となることが明らかになっている[2]。一方、NbO は同じ NaCl 型結晶構造を有するが、規則的な Nb と O の欠損を持つ金属である。この物質の角度分解光電子分光の結果は、Nb と O が規則的に欠陥した場合のバンド計算と一致することが報告されている[3]。本研究では Mott 絶縁体である VO と金属である NbO の混晶系を作成し、絶縁体-金属転移の性質を調べることを目的とした。

### 2. 実験方法

$V_{1-x}Nb_xO$  バルク試料 ( $x = 0, 0.1, 0.2, 0.3, 0.4, 0.5, 0.6, 0.7, 0.9, 1.0$ ) の作製にあたり、原料( $V, V_2O_5, Nb, Nb_2O_5$ )を化学量論比に基づき秤量、混合を行い Ar+H<sub>2</sub>7%雰囲気下で Floating Zone 法によって作成した。XRD, 背面ラウエ法, TGA, ICP-OES によって試料評価を行い、電気抵抗率、磁化率、光学反射率の測定を行った。

### 3. 実験結果・考察

すべての  $x$  で  $V_{1-x}Nb_xO$  の単相試料が作製できたが、 $0.3 \leq x \leq 0.6$  の範囲では単結晶ではなかった。

XRD の結果より求めた格子定数の Nb ドープ量依存性を図 1(a)に示す。Vegard 則に従っていないが、これはイオンの欠損率  $\delta$  が  $x = 0.5$  付近で飽和することによって由来すると考えられる。電気抵抗率  $\rho(T)$  の結果を図 1(b)に示す。 $x=0.3$  付近で  $d\rho/dT < 0$  から  $d\rho/dT > 0$  に変化しており、絶縁体-金属転移が起こっていることが分かった。逆帯磁率  $1/\chi(T)$  の結果を図 1(c)に示す。 $x \leq 0.5$  では Curie-Weiss 的な振る舞いを示しているが、 $x \geq 0.6$  で磁化率が急激に低下して金属的な Pauli 常磁性に変化する様子が分かった。 $x \leq 0.5$  の振舞いのばらつきは酸素含有量に由来していると考えられる。また、 $x < 0.6$  では 6K 以下で磁化率の ZFC と FC の分岐が確認できた。光学反射率スペクトルに Kramers-Kronig 変換を行い導出した光学伝導度スペクトル  $\sigma(\omega)$  を図 1(d)に示す。絶縁体的な VO と金属的な NbO の光学伝導度スペクトルの間を  $x$  の増加とともに連続的に変化して、 $x > 0.7$  では大きな Drude 成分が現れることが分かった。

これらの実験結果から、 $V_{1-x}Nb_xO$  において  $x < 0.3$  では Mott 絶縁体であり、 $0.3 \leq x \leq 0.6$  では金属状態と絶縁状

態を共存する”汚い”金属状態となり、 $0.7 < x$  では金属状態であることが分かった。

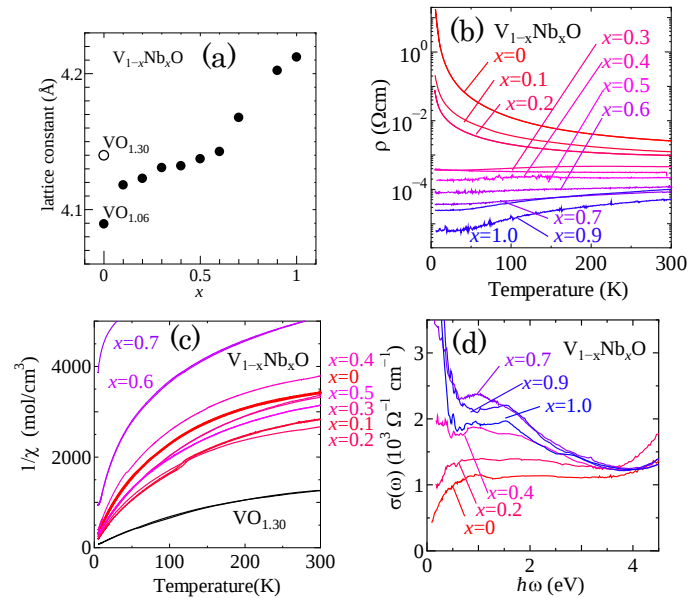


図 1.  $V_{1-x}Nb_xO$  の(a)格子定数の Nb ドープ量依存性, (b)電気抵抗率  $\rho$  の温度依存性, (c)逆帯磁率  $1/\chi$  の温度依存性, (d)光学伝導度スペクトル

### 参考文献

- [1] M. D. Banus, *et al.*, Phys. Rev. B 5, 2775(1972)
- [2] T. Yoshida, *et al.*, Phys. Rev. Mater. 7, 014412 (2023)
- [3] A. K. Efimenko, *et al.*, Phys. Rev. B 96, 195112 (2017)

### 研究業績

- (1)[論文] T. Yoshida, K. Akimoto, A. Yanagida, S. Yano, H. Matsumoto, T. Iwata, R. Yoshimura, and T. Katsufuji, Phys. Rev. Materials 7, 014412 (2023)
- (2)[講演] 吉村綾太他, 「NaCl 型  $V_{1-x}Nb_xO$  における絶縁体-金属転移」, 日本物理学会 2024 年秋季大会, 17aE307-11, 北海道大学, 2024 年 9 月
- (3)[講演] R. Yoshimura, *et al.*, "Insulator-Metal transition in  $V_{1-x}Nb_xO$  with a NaCl structure", 70 years of the Tanabe-Sugano diagrams, PS5, Waseda University, Tokyo, Japan, September 2024