

卒業論文概要書

Graduation Thesis Summary

Date of submission: 01/26/2026

所属学科 Department	物理学科	氏名 Name	大谷成実	学籍番号 Student ID number	1Y22A009-1
研究題目 Title	パイロクロア型 $Y_2Nb_{2-x}Ti_xO_7$ の作製と物性			指導教員 Advisor	勝藤拓郎

【 $Y_2Nb_2O_7$ の性質と目的】

パイロクロア型 $A_2B_2O_7$ の結晶構造をもつ $Y_2Nb_2O_7$ は、A サイトには Y^{3+} 、B サイトには $Nb^{4+}(4d^1)$ が配置する。 $s=1/2$ の Nb^{4+} が含まれているにも関わらず、磁化率から求めたキュリー定数は、Nb が各々 1 つずつスピンを持っている時に期待されるキュリー定数の 0.2% 程度である。すなわち、 $Y_2Nb_2O_7$ は非磁性絶縁体である。これは、2 つの Nb^{4+} でスピンシングレットを組んで、非磁性になっていると考えられる。このとき、Nb を $Ti^{4+}(3d^0)$ で置換すれば、シングレットが組めない Nb^{4+} に由来するスピンが現れると考えられる。しかし、Ti のドープ量と B サイトイオンあたりのスピンの関係を実験的に調べた先行研究によれば、 $x=0.5$ でスピンの量は最大となるが、その数は 5% 程度でことが分かっている。^[1]

これらの結果を踏まえて、Nb に Ti をドープしたときの、電子構造のドープ依存を見ることが本研究の目的となる。

【実験方法】

$Y_2Nb_{2-x}Ti_xO_7$ ($x=0 \sim 2$) を Floating Zone 法で Ar ガスと Ar+H₂ 7% ガス雰囲気下で作製した。作製した試料は、粉末 X 線測定を用いて確認した。一部の試料は背面ラウエ法による結晶性の確認と、エネルギー分散型 X 線分光法(EDX)による組成分析を行った。得られた試料については磁化測定を行い、また研磨して、回折格子・FT-IR 分光光度計を用いて光学反射率を測定した。

【実験結果と考察】

Ar ガス雰囲気下で作製した試料では $YNbO_4(Nb^{5+})$ が不純物として現れたが、Ar+H₂ 7% ガス雰囲気下で作製した試料では単相の $Y_2Nb_{2-x}Ti_xO_7$ の試料が得られた。しかし背面ラウエの結果、単結晶ではなかった。EDX で $x=1$ の試料の複数個所での組成分析を行ったが、試料内の組成のばらつきは小さかった。磁化率の測定結果を図 1 に示す。磁化率から求めたキュリー定数から求めた、B サイトイオン(Nb,Ti) 1 つあたりのスピンの数 N_s を図 2 に示す。同じドープ量 x でも試料によってばらつきが大きいことが分かる。赤実丸のデータは光学測定等に用いた試料である。これらの結果を先行研究と比較すると、 $x=0.5$ でのスピンの最大値の値は先行研究よりも少なくなっていることが分かる。Ti 置換以外

に酸素の欠損でもスピンが現れることがあるため、スピンの数が少ない方が欠損の少ない良い試料だと考えられる。

光学反射率の結果を図 3、光学反射率から求めた光学伝導度図 4 に示す。光学伝導度の 2 eV 付近の構造は x が小さくなるほど、すなわち Nb の数が増えるほど大きくなっている、Nb 間の遷移であると考えられる。

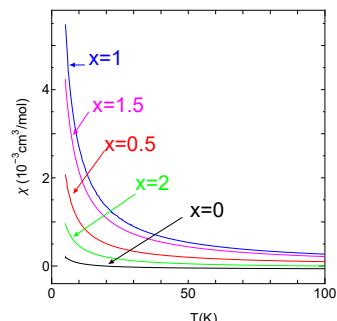


図 1. 磁化率のドープ量依存性

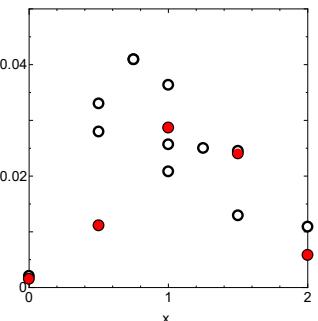


図 2. B サイトイオンあたりの自由スピンの数

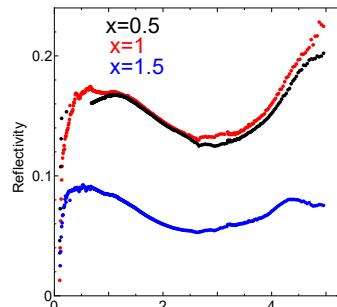


図 3. 光学反射率

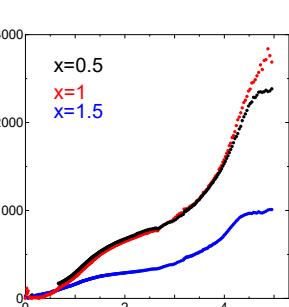


図 4. 光学伝導度

【参考文献】

- [1] H.Fukuzawa *et al.*, Phys. Rev. B 67, 054410 (2003).