

卒業論文概要書

Graduation Thesis Summary

Date of submission: 01 / 26 / 2026 (MM/DD/YYYY)

所属学科 Department	応用物理学科	氏名 Name	洲脇 諒大	学籍番号 Student ID number	1Y22B055-6
研究題目 Title	ルチル型 $\text{Nb}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_2$ 単結晶の作製と物性			指導教員 Advisor	勝藤 拓郎

1. 研究の背景と目的

NbO_2 はルチル型遷移金属酸化物であり、1080K以下で d^1 電子を持つ Nb^{4+} がc軸方向にdimerを組むことでspin singletを形成している[1]. Nb^{4+} を d 電子を持たない Ti^{4+} で置換した $\text{Nb}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_2$ ではdimerが解消され自由に動ける d^1 電子が生じるため、物性が変化することが期待される. $3d$ 軌道をもつ V^{4+} がdimerを組む $\text{V}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_2$ においては、自由スピン密度の x 依存性から、chain内でdimerが形成されることがわかっている[2].

本研究では $\text{Nb}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_2$ の単結晶を作製し、異方性を考慮した抵抗率・磁化率・光学測定を行うことでdimerと物性との関係を電子構造の観点から明らかにすること、そして $3d$ 軌道をもつ V^{4+} と $4d$ 軌道をもつ Nb^{4+} とではdimerの形成に違いがあるのかを調べることを目的とした.

2. 実験方法

Floating Zone 法を用いて $\text{Nb}_{1-x}\text{Ti}_x\text{O}_2$ ($x = 0, 0.33, 0.5, 0.67, 0.8$)の単結晶の作製をし、粉末X線回折により試料評価を行った. その後背面ラウエ法によって結晶軸の決定をした試料の電気抵抗率、磁化率、光学測定を行った.

3. 結果と考察

図1は電気抵抗率の温度依存性である. x の増加に伴い値は減少した. 図2は磁化率の温度依存性である. $x = 0.67$ までは x の増加に伴い値も増加したが $x = 0.8$ では減少している. これらの原因として、 Ti^{4+} の置換によってdimerが解消されることで d^1 電子がスピンを持つことが考えられる. 図3は磁化率から算出された自由スピン密度と、一本鎖、および二本鎖のモデルによるシミュレーションで得られた自由スピン密度の x 依存性である. 実験値から算出された値は二本鎖の値よりもさらに小さいことから、 $3d$ 軌道よりも広い $4d$ 軌道をもつ Nb^{4+} はchainだけでなくchain間でもdimerを組むことがわかった. 図4, 5はそれぞれ $x = 0, 0.67$ の光学伝導度スペクトルである. $x = 0$ ではa軸, c軸方向共に1.2eV付近に強度があり、これはNb-Nb dimer内の遷移であると考えられる. この結果は、chainだけでなくchain間でもdimerが存在することを示唆している. $x =$

0.67ではc軸方向の1eV以下に構造がある. これはNb-Ti間の遷移と考えられる.

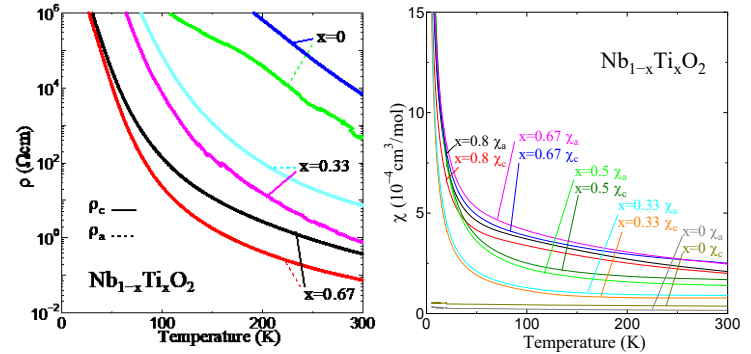


図1 電気抵抗率の温度依存性(左)

図2 磁化率の温度依存性(右)

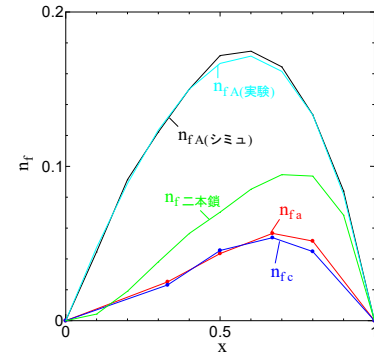


図3 自由スピン密度の x 依存性

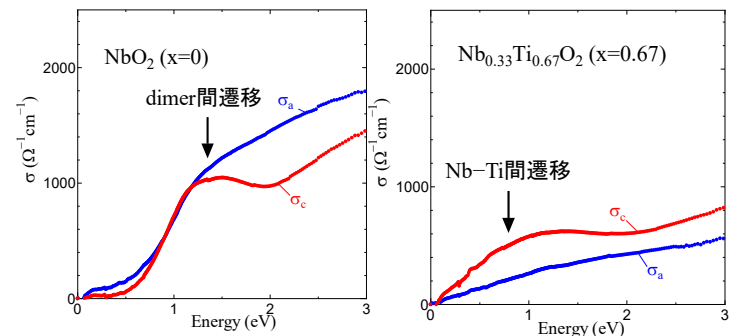


図4 $x = 0$ の光学伝導度スペクトル(左)

図5 $x = 0.67$ の光学伝導度スペクトル(右)

4. 参考文献

- [1] K. Sakata, J. Phys. Soc. Jpn. 26, 867 (1969); K. Sakata *et al.*, J. Phys. Soc. Jpn. 27, 506 (1969).
- [2] Z. Hiroi, Prog. Solid State Chem, 43, 47 (2015).