

氏 名 MIAO Ping

学位(専攻分野) 博士(理学)

学位記番号 総研大甲第 1713 号

学位授与の日付 平成26年9月29日

学位授与の要件 高エネルギー加速器科学研究科 物質構造科学専攻
学位規則第6条第1項該当

学位論文題目 Study on Metal-Insulator Transition of $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ using
Diffraction and X-ray Spectroscopy

論文審査委員 主 査 教授 大友 季哉
教授 神山 崇
教授 伊藤 晋一
教授 門野 良典
准教授 小野 寛太
教授 石垣 徹 茨城大学

(別紙様式 2)
(Separate Form 2)

論文内容の要旨
Summary of thesis contents

ペロブスカイト構造を有する遷移金属酸化物は、電荷、スピン、格子の間の強い相関に起因して超伝導や巨大磁気抵抗など、多様で興味深い物性を示すことが知られている。 $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ (R: ランタノイドまたはY) で表されるペロブスカイト型Co酸化物は、絶縁体- 金属転移や巨大磁気抵抗などの異常な電気抵抗や磁性を示すことから、その起源を解明すべく多くの研究が行われている。 $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ における絶縁体- 金属転移は、温度、圧力及びホール添加により生じる。 Co^{3+} が3つのスピン状態、すなわち、 $t_{2g}^6e_g^0$ (Low Spin state, LS)、 $t_{2g}^5e_g^1$ (Intermediate Spin state, IS)、 $t_{2g}^4e_g^2$ (High Spin state, HS) をとることが知られており、スピン状態の違いが絶縁体- 金属転移に大きく関わっていることが予想できる。しかし、絶縁相における結晶構造及び転移温度前後のスピン状態が決定されていない等、絶縁体- 金属転移のメカニズムは明らかにされていなかった。

本研究は、 $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ における絶縁体- 金属転移の起源を、試料合成を始めとして、高分解能中性子回折 (磁気構造解析を含む)、X線回折、電子線回折、X線吸収分光、X線光電子分光、比熱測定、電気抵抗測定、磁化測定を駆使して解明することを目的として行なわれた。本論文は、

- Chap. I. Introduction
 - Chap. II. Synthesis
 - Chap. III. Structural and Physical Properties (Structure Characterization, Specific Heat, Magnetic and Transport Properties, Electronic State)
 - Chap. IV. Data Analysis & Discussion
 - Chap. V. Conclusion
- から構成されている。

$\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5.52}$ については温度依存性、 $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ ($x = 0.52, 0.54, 0.62, 0.64, 0.74$) についてホールドープ効果を解析し、下記の理解が得られた。

1. 絶縁体- 金属転移における温度依存性、ホール依存性のどちらについても、 Pmma ($2a_p \times 2a_p \times 2a_p$) から Pmmm ($a_p \times 2a_p \times 2a_p$) へ結晶構造が転移することを初めて明らかにした。この転移は、電荷秩序により生じるものではなく、 Co^{3+} のスピン状態転移によるものであることも明らかにした。
2. Co^{3+} のスピン状態の転移は、LSからIS状態またはHS状態であることを明らかにした。HS状態により e_g 軌道に電子が入ることで、伝導電子の軌道が広がり、伝導バンドを形成すると理解できる。また、このスピン状態転移は、温度依存性、ホール依存性に共通している。

(別紙様式 3)
(Separate Form 3)

博士論文の審査結果の要旨
Summary of the results of the doctoral thesis screening

本論文においては、複雑な現象を中性子、電子線、X線のデータを丹念に解析し、 $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ における絶縁体-金属転移の構造的起源を初めて明らかにすることに成功した。本研究の成果は、 $\text{RBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ における絶縁体-金属転移メカニズムの一般的理解につながるものと思われる。今後、Co酸化物の物性研究の展開に貢献する成果となっており、博士論文として相応しい内容となっている。

予備審査および公開発表では英語で口頭発表が行なわれ、 $\text{PrBaCo}_2\text{O}_{5+x}$ における絶縁体-金属転移の何が明らかになったのかということについて、明瞭な説明がなされた。質疑応答にも的確に回答しており、研究内容及び該当分野について十分な理解と知識があることであると認められた。学位論文は英語で執筆され、発表も英語で行なわれており、英語の能力も十分である。審査時点において学位論文に関わる発表は行なわれていないが、別なテーマでの学会発表や論文発表は行なわれており、問題無く発表できると思われる。

以上より、審査員全員一致で、博士論文本審査合格と判定した。