

## アナターゼ型 $Ti_{1-x}Nb_xO_2$ (TNO)薄膜の電子状態

Electronic properties of anatase  $Ti_{1-x}Nb_xO_2$ (TNO) thin films

東大院理<sup>1</sup>, KAST<sup>2</sup>, 東大院工<sup>3</sup> ○一杉太郎<sup>1,2</sup>, 神坂英幸<sup>3</sup>, 山下晃一<sup>3</sup>, 山田直臣<sup>2</sup>, 古林寛<sup>2</sup>, 中尾祥一郎<sup>2</sup>, 能川玄之<sup>1</sup>, 植田敦希<sup>1</sup>, 鶴浜哲一<sup>1</sup>, ホアン ゴク ラン フン<sup>1</sup>, 島田敏宏<sup>1,2</sup>, 長谷川哲也<sup>1,2</sup>

Univ. of Tokyo, Dept. Chemistry<sup>1</sup>, KAST<sup>2</sup>, Univ. of Tokyo, Dept. Chemical System Engineering<sup>3</sup> T. Hitosugi<sup>1,2</sup>, H. Kamisaka<sup>3</sup>, K. Yamashita<sup>3</sup>, N. Yamada<sup>2</sup>, Y. Furubayashi<sup>2</sup>, H. Nogawa<sup>1</sup>, S. Nakao<sup>2</sup>, A. Ueda<sup>1</sup>, T. Tsuruhama<sup>1</sup>, N. L. H. Hoang<sup>1</sup>, T. Shimada<sup>1,2</sup>, T. Hasegawa<sup>1,2</sup>

[hitosugi@chem.s.u-tokyo.ac.jp](mailto:hitosugi@chem.s.u-tokyo.ac.jp)

**はじめに:** 我々の研究グループでは、アナターゼ型  $Ti_{1-x}Nb_xO_2$ (TNO)薄膜が非常に良い透明導電性を有することを報告してきた(表参照)。この TNO 薄膜( $x = 0.06$ )は、遷移金属酸化物としてトップレベルの高電気伝導性を示し、その電子状態は非常に興味深い。そこで、本研究では TNO 薄膜の電子状態に着目し、実験と計算の両面から考察を行った。

**結果:** 本講演ではエピタキシャル薄膜とガラス上多結晶薄膜に共通して得られた知見をまとめ、以下の項目に関する考察を報告する。

- バンド描像として、Nb 不純物バンドから励起された電子が伝導電子となるモデルよりも、Nb は Ti や O と非常に強く混成し、一体となった伝導バンドを形成するモデルが妥当である。
- 高電気伝導性と酸素欠損の有無には強い相関がある。Nb ドーピングの効果を引き出し、高電気伝導率を実現するためには酸素欠損の制御が非常に重要である。以上の観点を軸に、TNO 薄膜の物性を議論していく。

結晶構造	Anatase	Anatase	Anatase
成膜方法	PLD	PLD	スパッタ
基板	SrTiO <sub>3</sub> LaAlO <sub>3</sub>	ガラス	ガラス
結晶状態	epitaxial	polycrystal	polycrystal
抵抗率	$2 \times 10^{-4} \Omega\text{cm}$	$5 \times 10^{-4} \Omega\text{cm}$	$8 \times 10^{-4} \Omega\text{cm}$

表: 我々の研究グループの TNO 薄膜に関する研究のまとめ。いずれの薄膜も可視光透過率は 60-80%程度である。組成はすべて  $x = 0.06$ 。