

| | |
|---------|---|
| 氏名 | 高橋和廣 |
| 授与した学位 | 博士 |
| 専攻分野の名称 | 理学 |
| 学位授与番号 | 博乙第2925号 |
| 学位授与の日付 | 平成7年9月30日 |
| 学位授与の要件 | 博士の学位論文提出者 (学位規則第4条第2項該当) |
| 学位論文題目 | Frenkel-Kontorova 模型に関する統計力学的研究 - 1次元超イオン導電体への応用 - |
| 論文審査委員 | 教授 田中 基之 教授 山寄比登志 教授 町田 一成 教授 平松 惇 教授 永原 賢 |

学位論文内容の要旨

超イオン導電体は、結晶格子を形成する枠組イオンとその格子間を拡散する可動イオンから成る。これらの特徴をもつ1次元超イオン導電体は、可動イオン-格子イオン相互作用を周期ポテンシャル(周期 b)で近似し、可動イオン間(平均距離 a)の相互作用を調和振動子で近似したFrenkel-Kontorova(FK)模型で記述される。このFK模型の理論的研究は、Beyeler, Geisel, 石井等により行われてきたが、ミスフィットを有するFK模型($a \neq b$)の理論的研究は、高温領域以外では十分に行われていないのが現状である。

本研究では、(1)可動イオン鎖間の相互作用を導入したFK模型に基づいてイオン配置を考察し、電子回折法により得られている $K-Mg$ プリデライトのイオン配置を再現することにより、この超イオン導電体の鎖間相互作用の大きさを見積もった。(2)1次元FK模型の高温における性質をキュムラント展開およびベッセル関数展開を用いて考察し、従来の高温展開理論の結果と比較検討した。また、(3)FK模型についてモンテカルロシミュレーションを行い、ミスフィットを有するFK模型の従来の研究では十分になされていなかった低温を含む広い温度領域での熱的性質を、種々のミスフィットおよびイオン間相互作用の大きさについて考察した。比熱には2つの温度にピークがあることを見だし、その低温側ピークの物理的原因を詳しく調べた。静的構造因子については、X線散漫散乱の実験結果にほぼ一致する結果が得られ、このときのパラメータの値から可動イオン間相互作用および枠組イオンの作るポテンシャルの大きさを見積もることができた。

論文審査結果の要旨

1次元超イオン導電体と呼ばれる物質は、結晶格子を形成するトンネル状の枠組イオンとその中を1次的に拡散する可動イオンから成る。これらの物質は、Frenkel-Kontorova (FK) 模型と呼ばれるモデルにより理論的にも研究されてきた。この模型では、可動イオンが枠組イオンから受ける作用を周期ポテンシャルで近似し、可動イオンを互いに結合した調和振動子で近似するが、この模型に関する理論的研究は、可動イオン間の平均距離と周期ポテンシャルの周期が異なるミスフィットの場合については、高温領域以外ではまだ十分に行われていない。

本論文では、FK模型の熱的性質を、ミスフィットのある場合を中心に統計力学的手法により詳細に考察し、以下に示す成果を得ている。

1) FK模型の可動イオン鎖間にも相互作用を導入することにより、可動イオンの粒子配置をミスフィットの場合について考察した。その結果、1次元超イオン導電体プリデライトについて実験で得られている可動イオンの配置に関する結果を再現することができ、また、可動イオン鎖間の相互作用の大きさが可動イオン間の相互作用の約 $1/50$ であることを見積ることができた。

2) FK模型の高温における熱力学的性質を考察する Schneider-Stoll による従来の方法をミスフィットのある場合に拡張し、自由エネルギーの高温展開を単純化する新しい有効な方法を導入することにより、展開の6次の項まで正確に求めた。得られた結果は、FK模型に関する近似理論の結果を評価する際に一つの基準を与えるものである。

3) ミスフィットを有するFK模型について、モンテカルロ法によるシミュレーションを行い、低温を含む広い温度領域にわたって、この模型の示す比熱、静的構造因子、可動イオンの粒子分布などを考察した。その結果、比熱には2つのピークがあることを見出し、その低温側のピークは、可動イオンの配列に生じる欠陥によるものであることが判明した。また、静的構造因子に関するシミュレーションの結果をプリデライトの実験結果と比較することにより、可動イオン間の相互作用および枠組イオンのつくるポテンシャルの大きさがそれぞれ 1.4eV 、 0.36eV であることを見積った。

このように、本論文では、FK模型の熱的性質に関して新たな知見を得ており、とくに、比熱に2つのピークが存在することを初めて示した成果は高く評価でき、この分野の今後の研究に大きく貢献するものと認められる。以上、本論文の内容、論文発表会、参考論文を総合的に審査した結果、本論文は博士(理学)学位論文に値するものと認定する。