



弾性論の観点から議論を行う。

本論文の構成は以下のとおりである。

第1章においては、超イオン導電体の基礎的な事項と最近の研究例を説明した。加えて、結合揺らぎモデルを説明することでイオン伝導と結合性との関係について言及した。また、超イオン導電体を示す副格子融解と一般的な融解との関係を説明した。

第2章では、融解現象に関して、これまでに提案された有力なモデル、例えば Lindemann や Born のモデルなどを概説した後、第5章で使う結合軌道モデルと結合軌道パラメータについて説明した。

第3章では弾性的性質の基礎的な説明を行った。弾性スティフネス定数に関して述べた後、よく知られている弾性パラメータである体積弾性率や Poisson 比などの概要を説明した。多くの弾性パラメータが弾性スティフネス定数により表されるため、この物理量は重要である。

第4章では弾性パラメータの温度依存性についての研究結果を報告している。銀ハライドやアルカリ土類ジハライドなどのイオン導電体を示す特異性を、弾性スティフネス定数や Anderson-Grüneisen パラメータの温度依存性を計算することで調べた。その結果、これらの物質の高いイオン伝導度の一因でもある高い欠陥濃度は、弾性パラメータに強い温度依存性を与えることが分かった。

第5章では2元系化合物を中心にその結合性を議論した。Cauchy の関係は結合の中心力性を反映している。この Cauchy の関係からの逸脱の温度依存性を議論することで、AgCl, AgBr, NaCl の結合性に関する知見を得ることができた。また、結合のボンド伸縮・変角力定数と Phillips のイオン度との関係について、従来とは異なる結果を結合軌道モデルの観点から得た。これにより、従来の関係式ではよく再現することができなかつた超イオン導電体である Cu, Ag ハライドの振る舞いも再現することができた。

第6章では本研究のまとめと今後の展開について述べた。