

氏名 _____ 谷口 祥 _____

主論文審査の要旨

イオン導電体におけるイオン伝導メカニズムや熱的振舞いを微視的な観点から明らかにすることは、基礎物性の立場からだけでなく、応用の面からも重要である。本論文では、エネルギー関連材料としての超イオン導電体に着目し、これらの物質が示す基礎物性を明らかにすべく行なわれた研究の成果がまとめられている。各章の内容は以下の通りである。

第1章では、本研究で主として取り上げられた物質であるペロブスカイト酸化物についての概要、イオン導電体での拡散や熱膨張など、後の章で用いる基礎的事項が紹介されている。

第2章では、ペロブスカイト型酸化物における熱膨張とイオン伝導の関係が化学結合論の観点から議論され、その理論的背景が明らかにされている。物質内の各結合の違いによって熱膨張率やイオン伝導度の大きさが決まり、更には、構造歪みの目安を与える許容因子や拡散の起こりやすさと関係する自由体積も結合間のイオン度の差と比例関係にあることが示されている。

第3章では、原子間ポテンシャルの観点から活性化エネルギーの理論的モデルを提案し、イオン導電体の熱膨張率とイオン導電率の具体的な結びつきが議論されている。また、モデルの妥当性を検証するため、実験結果との比較が行なわれ、ペロブスカイト型酸化物を始め、イオン導電性を示す様々な物質群が得られた理論式に従うことが示されている。モデルをもとに行なわれた実験値の解析から、原子の振動エネルギーは拡散の活性化エネルギーとほぼ同じ値をもつという興味深い結果を取り出している。

第4章では、イオン導電体における熱電効果を取り上げている。本研究で提案しているイオン導電体での輸送熱の理論的モデルによると、どのようなフォノンがイオンの拡散に寄与するかによって、輸送熱と活性化エネルギーの関係が決まる。モデルの妥当性はモデルからの予測を実験値と比較することで検証されている。

第5章では、ペロブスカイト型酸化物におけるイオン伝導と電子輸送特性の関係が議論されている。単純ペロブスカイト型酸化物で知られていた物質の分類法を複合酸化物に拡張し、イオン伝導を示す複合ペロブスカイトは、電子の局在・非局在性の境界線付近の非局在側に位置することを見出している。この結果は、複合ペロブスカイト酸化物における電子伝導の性質がイオン伝導に影響を及ぼすことを示唆している。

第6章では、本研究で行われた内容のまとめと、今後の研究で取り組むべき内容が述べられている。

論文審査の結果の要旨

審査委員会は学位論文提出者に対して、本論文の内容及び専門分野についての口頭試験を行った。その結果、論文提出者は当該研究分野について十分な知識、理解力及び研究遂行能力があることを認めた。ペロブスカイト型酸素イオン導電体に対する化学結合論に基づく研究は、これまでにない新しいアプローチであり、そこで得られたイオン伝導度と熱膨張率を関係付ける理論式は基礎物性の観点からも興味深い。イオン導電体における輸送熱に対する理論もイオン伝導とフォノンの関係について新しい知見を提供しており、今後の展開が期待される。論文提出者は審査付き論文4編を含む8編の論文を発表している。外国語については、英文による論文作成、9回の国際学会での発表、更には国際学会でのポスター賞を2回受賞していることから、十分な能力があると認められる。

以上の結果に基づき、最終試験は合格と判定した。

審査委員	理学専攻物理科学講座担当教授	安仁屋 勝
審査委員	理学専攻物理科学講座担当教授	市川 聡夫
審査委員	理学専攻物理科学講座担当教授	伊藤 喜久男
審査委員	理学専攻物理科学講座担当教授	下條 冬樹
審査委員	複合新領域科学専攻衝撃エネルギー科学講座担当教授	吉朝 朗