

氏 名	吉 沖 周 三 よし おき しゅう ぞう
学位の種類	工 学 博 士
学位記番号	工 博 第 514 号
学位授与の日付	昭 和 52 年 7 月 23 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 5 条 第 1 項 該 当
研究科・専攻	工 学 研 究 科 原 子 核 工 学 専 攻
学位論文題目	PSEUDOPOTENTIAL APPROACHES TO PROBLEMS OF LATTICE VACANCIES IN METALS (金属中の格子空孔問題に対する擬ポテンシャル法の適用)

論文調査委員 (主査) 教授 兵藤知典 教授 片山泰久 教授 高村仁一

論 文 内 容 の 要 旨

本論文は、アルカリ金属 (Na と K) の点格子欠陥のうち、空孔を形成するエネルギーを擬ポテンシャル法を用いて計算するに際し、3次の摂動までを考慮することの重要性を指摘したものであり、本文4章及び付録より構成される。

第1章は序論である。金属中の空孔に伴う物理的性質の研究には2つの主な方法がある。その一つは電子論であり他は実効イオン間ポテンシャル論である。後者の立場に立って金属の空孔問題を取扱かう方法の一つに擬ポテンシャルを用いる方法がある。本章で著者はこれらの研究の概要を述べると共に、本研究において、擬ポテンシャルの第3次の摂動の項まで計算し、第2次までの計算値に比較し、よりよい結果を得たことの概要を述べている。

第2章では、空孔の周囲の格子緩和及びそれに伴うエネルギーの減少に対し著者が行なった格子静力学の方法による研究を述べている。この方法はこれまで孤立した点欠陥、即ち空孔と格子間原子に対してのみ適用されていたが、複空孔にも適用しうることを示した。即ち1つの空孔及び複空孔の周囲の格子緩和の計算式を、体心立方格子及び面心立方格子について導き、格子緩和、緩和エネルギー及び緩和体積が計算された。空孔による格子歪みが物理量に与える影響の例として電気抵抗をとり上げ、擬ポテンシャル法を用いて計算した。計算結果は歪みの効果が大であることを示しており、欠陥に付随する物理量の計算において、歪みの効果を正しく評価することが必要であると結論している。

第3章では、擬ポテンシャルと摂動の3次の項までを用いて、空孔形成エネルギーが求められており、本論文の主要部をなすものである。Na と K のようなアルカリ金属の点欠陥の形成を擬ポテンシャル法で論ずる場合、今までハイネ・アバレンコフ型とアッシュクロフト型ポテンシャルで2次の摂動まで計算がなされていた。著者はこれらのポテンシャルの3次の摂動までを考慮に入れた式を導き、平衡格子定数と体積弾性率からパラメータを決定したことについて述べている。これらを用いて Na と K の空孔形成エネルギーを計算した。計算上の問題点と計算結果が示され、ハイネ・アバレンコフ型ポテンシ

シャルを用いた計算結果の方法が、アッシュクロフト型ポテンシャルを用いた計算結果より実験値とよりよく一致することを示した。また2次の摂動までの計算結果と3次までの計算結果を比較することにより、3次の項の寄与が無視し得ない事を示している。

第4章は結語である。ハイネ・アバレンコフ型ポテンシャルで計算したKの空孔形成エネルギーは実験値とよく一致した。Naでは、これは実験値より若干大となった。アッシュクロフト型ポテンシャルを用いた計算値は、これより実験値からのはずれが大きかった。また摂動の第3次の項の空孔形成エネルギーへの寄与を詳細に検討した結果、第3次の項の寄与は、Naで41% Kで25%であることを明らかにしている。また本研究で空孔エネルギーの計算には、ポテンシャルの型の選択が重要であることを指摘している。この種の問題は、2パラメータのハイネ・アバレンコフ型ポテンシャルの方がアッシュクロフト型ポテンシャルよりよい結果が得られることを示していると結論している。

附録A, B, Cは本文中の式の煩雑さをさけるため、力とハミルトニアンを展開を此处へ移し記述したものである。

論文審査の結果の要旨

金属中の格子空孔に関する諸問題を理論的に取扱う場合、電子論とイオン間ポテンシャル論との立場があり、それぞれ長所を有している。著者は格子空孔に関する諸問題のうち空孔形成エネルギーに着目し、イオン間のポテンシャル論によって、アルカリ金属 (Na と K) を対象にしてこれを計算しようとした。得られた主な成果は次の通りである。

1、著者は空孔形成エネルギーを擬ポテンシャル法を用いて計算した。この方法の利点は、自由電子ガスへのイオンの効果を摂動として取扱いうること、及び原子のどのような配置に対しても系のエネルギーを構造因子を通して決められることである。このポテンシャルは完全な格子のみでなく、欠陥を有する格子にも使用しうる。

2、格子静力学の方法を用いて、単一の空孔及び複空孔に対し、格子緩和、緩和エネルギー、体積緩和を計算した。これらの結果より、この方法は複空孔に対しても使用しうることを示した。

3、空孔による格子歪みが物理量に与える影響の例として、電気抵抗をとり上げ、擬ポテンシャル法で点欠陥に伴う格子歪みによる電気抵抗の変化を計算した。この結果、歪みの効果が大であることを指摘し、欠陥に付随する他の物理量への歪みの影響も大であろうと推定している。

4、著者は擬ポテンシャルと摂動の3次の項まで用いて空孔エネルギーを計算した。ハイネ・アバレンコフ型ポテンシャルとアッシュクロフト型ポテンシャルとを用いて計算した結果、前者のポテンシャルを用いた計算の結果が実験値と良い一致を示した。このことは空孔に関する計算にはポテンシャルの選択が重要であることを示している。

5、空孔形成エネルギーに対し第3次の項の寄与を求めたところ、Naに対し41%、Kに対し25%であり、第3次の項の寄与はかなり大であることが判明した。

以上を要するに、本論文は金属結晶学で最も基本的な格子欠陥の一つである点欠陥に着目し、単一格子空孔と複空孔により誘起される格子歪みと内部エネルギーの変化を、アルカリ金属 (Na と K) につい

て擬ポテンシャルを用いて計算をしたものであり，その結果が実験値とよく一致することを示したばかりでなく，この種の計算に対し，ポテンシャルの型と摂動の項の選択の指示を与えたもので学術上，實際上寄与するところが少なくない。

よって，本論文は工学博士の学位論文として価値あるものと認める。