

研 究 主 論 文 抄 録

論文題目                    固体中のイオン拡散と非線形光学定数の相関に関する研究  
(A study on the correlation between the ionic diffusion and the  
nonlinear optical constants in solids)

熊本大学大学院自然科学研究科                    理学専攻                    物理科学講座  
( 主任指導    安仁屋 勝 教授 )

論文提出者                池田 祥典  
(Shosuke Ikeda)

主論文要旨

イオン導電体におけるイオン伝導メカニズムと光学的性質の相関を明らかにすることは、学術面と応用面の双方でとても重要である。固体中のイオン伝導を化学結合論の観点から説明する結合揺らぎモデルによると、イオン伝導では原子周りの電子雲の変化のしやすさ、あるいは電子分極が重要な役割を果たす。このモデルによって、イオン伝導における光学的性質の重要性が示唆されている。一方、イオン導電体の光学的性質についてはこれまでに多くの議論がなされてきた。しかしながら、光学的性質の一つである非線形光学現象とイオン伝導の関係についての議論は全く行われていない。そこでこの論文では、固体中のイオン拡散と非線形光学現象についての相関を調べることで、未だ十分な理解が得られていないイオン伝導をより深く理解すると共に、新しい学術研究の領域を拓くことを目指す。この研究は固体中のイオン拡散によって光学的性質を操作する、またはその逆の操作を行うことでイオン導電体の新たな側面を取り出せることを示している。従って、ここで得られた知見はイオン導電体の新しい応用にもつながる可能性がある。各章の内容は、以下の通りである。

第1章では、非線形光学定数とイオン導電体についての基礎的な内容とこれら二つの現象をつなぐと考えられる結合揺らぎモデルについて説明する。

第2章では、非線形光学定数を見積もる際に用いられる次の4つの理論、Miller 則、結合軌道論、Boling-Glass-Owyoung のモデル、Sheik-Bahae の式を用いてイオン導電体の非線形光学定数について議論を行う。それぞれの理論において、イオン伝導しやすい状況と非線形光学定数を上昇させる要因に多くの類似点があることを示し、二つの現象にどのような相関があるのかを提案する。

第3章では、固体の力学的性質から見積もられる非線形電気感受率のモデルを用いて議論を行う。まず、このモデルから導出される非線形電気感受率と結合軌道論から算出され

る非線形光学定数に相関があることから、このモデルで光学的性質を議論することの有用性を示す。次いで、モデルにおいて二重井戸ポテンシャルを考えることで、イオン伝導に必要な活性化エネルギー $E_a$ と非線形電気感受率の相関を明らかにする。これらの議論から、イオンが熱活性化し易い状況と物質が大きな非線形光学定数を持ち得る状況が相関を持つことを示す。一方、AgCl、AgBr、NaCl、KClの非線形感受率の温度依存性を比較し、AgClとAgBrの温度依存性が大きいことを示す。この結果は、AgClやAgBrにおいて、結合が揺らぎやすい状況が形成されていることを反映している。

第4章では、カルコゲナイドガラスにおいて、ガラス形成液体の粘性挙動から見積もられる構造単位間の結合の揺らぎと非線形光学定数の相関について議論を行う。平均電気陰性度と結合強度—配位数揺らぎモデルを用いた議論を行うことで、高い周波数領域で短距離構造に大きな影響を受ける非線形光学定数と、低い周波数領域で中距離構造に影響を受ける構造単位間の結合の揺らぎが相関を持つことは矛盾しないことを明らかにする。また、構造単位間の揺らぎとフラジリティーの相関から、三次の光学感受率はフラジリティーと相関を持つことが示唆されることを示し、いくつかの酸化物ガラスでこの予測を確認する。

第5章では、本研究で行われた内容のまとめと、今後の研究の展望について述べる。