

超イオン導電体の格子気体モデル

発表者： 國仲 竜太 ， 鈴木 健太 指導教員： 與那城 勝邦

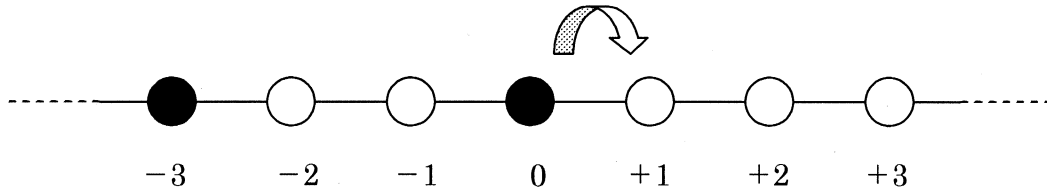
通常、金属や半導体では電子やホールが動き回り、イオンや原子などは不動で物質の骨格を形成している。ところが、沃化銀の高温相 (α -AgI) などはその中の銀イオンなど特定のイオンの動きが、固体中でありながら溶液中のイオンの動きに匹敵するほど速い。このような性質を持つ物質を超イオン導電体という。

超イオン導電体のイオン伝導を理解するため、Mahan は格子気体モデルを導入した。格子気体モデルは超イオン導電体の結晶構造に基づいている。格子気体モデルはイオンの有無をそれぞれスピンの上向き、下向きに対応させたとき、数学上 Ising モデルと同等である。可動イオンの占める格子点が網目状に存在するとして固体を描く。せいぜい一つのイオンが与えられた格子点を占めることができ、最近接の格子点のイオン同士だけが互いに相互作用する。また、イオンの移動を起こさせるためにホッピング項を導入する。それはあるイオンの格子点位置から隣の格子点へのイオンのジャンプを表す。

1次元の格子気体モデルのハミルトニアンは

$$H = \frac{U}{2} \sum_{j,\delta} n_j n_{j+\delta} + t_0 \sum_{j,\delta} c_{j+\delta}^+ c_j$$

で与えられる。



第一項は最近接格子点間のイオン同士に働く斥力相互作用で、第二項は j 番目の格子点から $j+\delta$ 番目の格子点へのイオンのホッピング項である。

ここで、 U は斥力相互作用エネルギー、 t_0 はホッピングの遷移エネルギー、 c_j^+, c_j は

j 番目の格子点におけるイオンの生成、消滅演算子、 $n_j = c_j^+ c_j$ は数演算子であり、そ

して δ についての和は最近接格子点間についてとる。

このハミルトニアンから格子気体モデルの大正準分配関数を、磁場があるときの1次元 Ising モデルの正準分配関数を用いて表し、転送行列の方法により分配関数や統計平均を計算する。そして、スピンの統計平均、磁化、濃度の関係について議論する。