## 量子力学による金属腐食論(垭報) - Hopfield理論とマーカス理論による腐食電流密度の 理論式の誘導-

Metal Corrosion Theory by Quantum Mechanics. W

- Derivation of Mathematical Formula for Corrosion Current Density by Hopfield's

Theory and Marcus Theory −

島倉 俊明

## **Abstract**

A series of papers discusses a metal corrosion theory by using quantum mechanics, especially electron transfer theory during metal corrosion process. I have already proposed the theoretical equation by which we can calculate the value of corrosion current density, in the earlier papers. In this paper, the theoretical equation is derived by using Hopfield theory, Marcus theory, and solid state physics. By using the theoretical equation, we can calculate the corrosion current density of metals, however, this theoretical equation has weak points to calculate corrosion current density. I discuss the weak points in the latter part of this paper and define clearly the weak points. Tunneling effect plays a important role in the electron transfer processes of metal corrosion reactions. I will discuss the relationship between electron transfer phenomena and tunneling effect in the next paper.

キーワード:量子力学、腐食電流密度、金属腐食、Hopfield理論 、マーカス理論、固体物理学 Keywords: Quantum mechanics, Corrosion current density, Metal corrosion, Hopfield theory, Marcus theory, Solid State Physics

## 1. はじめに

これまでの一連の報告である「量子力学による金属腐食論」は、金属の腐食電流密度を理論的に算出できる理論式を誘導することを目的としている<sup>1-7)</sup>。先の報告(量子力学による金属

2024年6月12日受付 SHIMAKURA Toshiaki 元日本ペイント・サーフケミカルズ(株) 腐食論(Ⅲ報))において、Hopfieldの理論式(Yomosaの式とも呼べる)を誘導した<sup>7-8)</sup>。第Ⅲ報である本稿では、Hopfieldの式にマーカス理論を適用し、さらに固体物理学の知見を利用して腐食電流密度を求める理論式を誘導していく。ここで第Ⅰ報や第Ⅱ報において、筆者が提案した腐食電流密度を計算する理論式を示す<sup>1-2)</sup>。

$$i_{corr} = \frac{(2m)^{\frac{3}{2}}}{\pi \hbar^4} neV M^2 r_{min} C E_{FL}^{\frac{1}{2}} exp(-\frac{E - E_{FL}}{kT})$$
 (1)

上式の記号の内容は以下のとおりである。m: