



Title	固体水素及び重水素の基底状態及び素励起についての理論的研究
Author(s)	宮城, 宏
Citation	大阪大学, 1970, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/30374
rights	
Note	著者からインターネット公開の許諾が得られていないため、論文の要旨のみを公開しています。全文のご利用をご希望の場合は、大阪大学の博士論文についてをご参照ください。

The University of Osaka Institutional Knowledge Archive : OUKA

<https://ir.library.osaka-u.ac.jp/>

The University of Osaka

氏名・(本籍)	みやぎひろし 宮城宏
学位の種類	理 学 博 士
学位記番号	第 2093 号
学位授与の日付	昭和45年6月16日
学位授与の要件	学位規則第5条第2項該当
学位論文題目	固体水素及び重水素の基底状態及び素励起についての理論的研究
論文審査委員	(主査) 教 授 金森 順次郎 (副査) 教 授 川村 肇 教 授 伊達 宗行 助教授 山田 安定 助教授 三輪 浩

論 文 内 容 の 要 旨

電氣的4極子-4極子相互作用をとり、 $J=1$ 分子の最低エネルギーの配置はPa構造であると仮定して、高濃度の固体オルソ水素及びパラ重水素の基底状態及び素励起についての研究がなされた。

$K=0$ ライブラレーション・モードが正確に研究された。その結果は、オルソ水素及びパラ重水素について観測されたSilvera達の5本のラマン散乱データのうちの低振動数の3本の線とかなりよく合うことが示された。残りの2本の線は、2個のライブラレーション波の励起過程によるものであることが指摘された。

基底状態エネルギー及びオーダー・パラメーターへの量子効果が、摂動による方法とライブラレーション波による方法とで調べられ、両方法による結果が一致することが示された。

非常に低濃度の $J=0$ 分子を含むオルソ水素及びパラ重水素の基底状態が研究された。2個の $J=0$ 分子間の有効相互作用が与えられた。基底状態エネルギーの $J=0$ 分子の濃度による展開式がその濃度の2乗までえられた。その結果はJarvis達による $(\partial P / \partial T)_V$ の観測から実験的にえられる基底状態エネルギーと比較され、かなりよい一致が得えた。

最後に、他の分子間力(バレンス力及びディスページョン力)の効果が調べられた。その結果、これらの相互作用は電氣的4極子-4極子相互作用だけを考えたときの最低エネルギーの配置であるPa3構造をますます安定化させることが示された。オーダーリング・エネルギーへのそれらの相互作用の寄与は、オルソ水素及びパラ重水素において、各々4極子相互作用の寄与の、大体6%及び10%であることが示された。

論文の審査結果の要旨

固体水素および固体重水素は、1°K 附近で分子の方向が一定の秩序配列をとる状態へ相転移することが近年明かになってきた。本論文はこの秩序状態に関する種々の問題を理論的に研究しそれぞれについてかなり明確な答えを与えている。

通常の水素分子は、回転角運動量 J の大きさが 1 のオルソ水素と 0 のパラ水素の 2 種類に区別される。オルソ水素への変換は固体水素でも十分に遅いので、固体水素の試料はオルソ水素、パラ水素を一定の比率で含んでいると考えてよい。近年ほとんど 100% オルソ水素の試料もえられるようになっている。上記の相転移はオルソ水素の回転状態が一定の秩序をもつことであり、オルソ水素分子間の電氣的 4 重極相互作用がその主な原因であること、また秩序状態の結晶構造（面心立方格子）、分子の配列等がいくつかの実験的、理論的研究によってこれまでに明かにされている。本論文では、まず基底状態と考えられる Pa3 構造（ α -nitrogen 構造）を仮定し、電氣的 4 重極相互作用の非対角行列要素による摂動を、エネルギーについては 3 次の摂動まで、分子の方向の秩序配列の程度をあらわす $J_z^2 - 1$ （ z は分子の方向）の平均値については 2 次の摂動まで計算し、結果として基底エネルギーへの零点振動の寄与は約 4 %、上記秩序パラメーターへの補正は約 2 % であるという結論をえた。次に基底状態に対する素励起として libration wave を計算するための新しい formalism を展開し、励起エネルギーを具体的に計算する。この結果はラマンスペクトルの実験結果と比較されるものであるが、とくに固体重水素については満足すべき一致を見ている。さらにパラ水素の分子が少量存在するときの基底状態のエネルギーの変化をパラ水素分子の濃度 c について c^2 の頃まで計算する。これは $(\partial P / \partial T)_V$ の測定の解析からえられる実験データと比較することができる。結果は c の 1 次の頃については満足すべきものであるが、 c が大きくなるにつれて c^3 あるいはそれ以上の頃が重要になることを示している。本論文では最後に、電氣的 4 重極相互作用以外の原因から起る異方的相互作用とくに valece interaction および dispersion force の基底状態のエネルギーへの寄与を詳細に調べている。これは現在なお Pa 構造が最低のエネルギーの状態であることについて若干の疑問が提出されているので、これらの相互作用が種々の構造のエネルギーにどのような寄与をもつかを明かにするためである。結論は Pa3 構造がこれらにより、より安定化することがわかった。

本論文は精力的な計算によって、固体水素および固体重水素の秩序状態の性格をいくつかの角度から明らかにしたものであって、今後の研究にとって理論的基準ないしは指針を与えるものである。その内容は理学博士の学位を授与するに充分なものであると認められる。