Osaka University Knowledge Archive

Title	オルソーパラ混晶水素系の理論的研究
Author(s)	三島, 彰
Citation	大阪大学, 1987, 博士論文
Version Type	
URL	https://hdl.handle.net/11094/35381
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。

Osaka University Knowledge Archive : OUKA

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

Osaka University

【46】

氏名・(本籍)	三島　彰（みしま　あきら）
学位の種類	工学博士
学位記番号	第　7752　号
学位授与の日付	昭和62年3月26日
学位授与の要件	基礎工学研究科物理系専攻 学位規則第5条第1項該当
学位論文題目	**オルソーパラ混晶水素系の理論的研究**
論文審査委員	(主査) 教授　中村　傳 (副査) 教授　望月　和子　　教授　朝山　邦輔　　助教授　松浦　基浩 助教授　宮城　宏

論文内容の要旨

固体水素混晶系は強い量子効果とfrustrationを持った系として，非常に興味深い性質を持っている。long range orderの消える臨界濃度X_cの60%はPercolation limitの20%に比して非常に大きく，他の希釈系と大きな違いを持っている。本研究は，この固体水素混晶系の性質を理論的に解明するために行われた。

この論文の第一部では低温相に対する研究を行った。有限系に対してまず最初に，乱れた格子上でのself consistentな準古典的分子配向を，繰り返し法によりいくつかの濃度のサンプルに対し求めた。次に量子効果を取り入れる為，この準古典的基底状態からの素励起を考えた。調和近似によって永年方程式を導き，この方程式を数値的に対角化することによって固有値から素励起スペクトラムを求めた。その結果よりband gapが零になる濃度60%が実験によって得られた臨界濃度X_cと良く一致していることが分かった。この様に古典的には安定な上で求めた分子配向が，不安定になることからlong range orderの安定性に対し量子効果が重要な役割を果たしていることが分かった。更に，固有関数を使ってlocal order parameter，NMR line shape，緩和時間などを求め，水素混晶系の持つ分子の向きと形（＝分子の平均的角度分布）の二重のrandomnessが量子効果によることを示した。

第二部では，高温相に対して高温展開による研究を行った。この方法を水素系に適用する際起こる，相互作用がそれぞれの分子の向きだけでなく分子間の相対位置ベクトルによるという，特有の困難を計算機を使って克服する方法を示す。この方法を使ってBerlinsky and Harrisの自由エネルギーの展開の5次の係数の誤りを示し更に6次，7次の係数を与えた。更にこの係数を使って次に続く幾つかの係数を予測した。これより，この展開が転移点の遙か高温で発散していることが分った。このため複素平

面上の特異点を避け実軸上で解析接続を行う為Padé近似を用いた。

得られたエントロピーやそれを積分して得られた比熱は，非常に低温まで実験と良い一致が得られた。

第三部では，第一部で取り入れられていなかった非調和効果を２次摂動で取り入れ，低温相の自由エネルギーを与え第二部の高温相の自由エネルギーと併せて移転温度を与えた。

論文の審査結果の要旨

固体水素は高温側では六方稠密構造をとるが，オルソ水素濃度が55％以上の系では低温で立方稠密の秩序構造に転移する。この相転移に焦点をおいて，本論文は固体オルソーパラ水素混合系の統計力学的研究をおこなったものである。

本論文の前半は低温相の研究であるが，乱雑分布の混合系の解析的研究はあまりあてにはならない。そこで著者は有限数のオルソ，パラ分子からなる混晶をコンピューターに作らせ，その古典的最低配置，励起スペクトル及び励起状態を求めた。またこれらの結果を使ってＮＭＲの実験結果を論じた。

論文の後半では高温展開法によって無秩序相の自由エネルギーを求めた。膨大な数のグラフをコンピューターによって処理することにより，比較的に多くの展開項を評価でき高温展開における級数の発散点を推定することができた。またPadé近似によって著者の得たエントロピー，比熱は無秩序相のほとんど全域で実験と一致している。

このようにして低温，高温の両側で求めた乱雑分布混晶系の自由エネルギーから，著者は転移温度，転移の消失する臨界濃度を評価し，実験とかなり合う結果を得ている。学位論文に値するものと考える。