

氏名	尾崎芳昭 おざきよしあき
学位の種類	理学博士
学位記番号	理博第 662 号
学位授与の日付	昭和 56 年 3 月 23 日
学位授与の要件	学位規則第 5 条第 1 項該当
研究科・専攻	理学研究科化学専攻
学位論文題目	固体 CH_4 相 II における中性子散乱の理論的研究

論文調査委員 (主査) 教授 山本常信 教授 辻川郁二 教授 恩地 勝

論文内容の要旨

本論文は、固体メタン相 II における微分中性子散乱断面積と全中性子散乱断面積を計算し、その結果を実験と比較し、結晶中におけるメタン分子の回転的秩序構造を明らかにすることを試みたものである。

微分断面積については、種々の入射エネルギーと温度に対し、散乱角の函数として散乱スペクトルを計算している。全断面積は、入射エネルギーと温度の函数として求めている。

プロトンによる中性子散乱は、普通、非干渉性であるため、実験結果の解析にさしたる困難はない。メタンの場合には、同一分子内に 4 個のプロトンがあり、それらのスピン状態と分子回転がパウリの原理により強く結合しているため、散乱は干渉性のものが主となり、慎重な理論的取扱いを必要とする。申請者は、このことを逆に利用して、綿密な計算を行って、メタン結晶相 II における回転的秩序構造と中性子散乱スペクトルとの関係を詳細にあげき出している。

さらに、まだ観測されていない高い励起回転状態についても、微分断面積測定最適条件を求めてその結果を予言している。全断面積についても、従来の実験が技術上の困難のために不十分な点を指摘し、新しい実験を提案してその結果を予言している。

参考論文はいずれもメタン分子の回転トンネル準位に関する理論的研究である。

論文審査の結果の要旨

メタン分子は 4 個のプロトンを含み、正四面体の対称性をもっている。これが結晶内でどのような回転運動を行うか、そのためどのような相転移がおこるかということが、過去 50 年にわたって実験・理論の両面から執拗に追求されて来た。最近 10 年間に、その理解は飛躍的に深まり、相 I と相 II の構造は概ね明らかにされるに到った。その過程で、中性子散乱の実験は、メタン分子内のプロトンの運動を直接観測する手段として格別重要な意義をもった。申請者は、専ら理論の側から、相 II における中性子散乱のスペクトルを詳細に計算し、従来の実験結果を再現し、結晶中の分子の回転運動を明らかにする上で決定的な役割を果たした。

のみならず、申請者は、一層正確な情報を得るための最適の実験条件を求め、その結果を予言している。このように、本論文は、分子結晶の分野において、固体メタンを最も深く理解された物質の一つに仕上げの上で極めて重要な貢献を行っている。同時に、中性子散乱断面積の絶対測定の実験技術を開発する上で有用な基準系を提供したことも、今後の中性子散乱研究の発展に寄与するものである。よって、本申請論文は理学博士の学位論文として価値あるものと認める。