

「分子結晶における相転移と分子運動」

上記題目の研究会が1970年7月20日から22日まで、京大基礎物理学研究所で行われた。プログラムは下記の通りである。内容を以下に簡単に報告する。なお大変有意義な研究会であったので、引き続き研究会を持ちたいとぞんでいる。

世話人 伊藤光男  
片岡洋右  
中村 伝  
本間重雄  
山本常信

プログラム

(第1日)

- 簡単な分子結晶における相転移 中村 伝 (阪大基礎工)
- 固体水素における libron 本間重雄 (名大工)
- 固体水素における基底状態に関する諸問題 宮城 宏 (阪大基礎工)
- 分光学的方法から見た分子結晶における分子運動  
伊藤光男 (東北大理)

(第2日)

- ハロゲン化水素固体の相転移  
(序論, 構造分析) 星 埜 禎 男 (東大物性研)  
(分光学) 伊藤光男 (東北大理)  
(熱測定と Resonance) 千原秀昭 (阪大理)  
(理論) 花村 栄 一 (東大物性研)
- 熱測定・Resonance から見た分子結晶における相転移と分子運動  
千原秀昭 (阪大理)

基礎研究会報告

(第3日)

- 固体メタンにおける相転移 片岡洋右 (京大理)
- 分子間相互作用と結晶場 安田秀雄 (京大理)
- 希ガス固体中の  $\text{CH}_3\text{D}$  の赤外線吸収 西山賢一 (京大理)
- 固体メタンにおける赤外線吸収の問題点 西山賢一 (京大理)
- Angular Relaxation 清水博 (九大薬)
- 固体メタンにおける NMR の  $T_1$  の解析 岡田謙吉 (京大理)
- 固体水素における NMR の  $T_1$  浜重一朗 (阪大基礎工)
- Theory of Translational and Orientational Melting with Application to Liquid Crystals 小林謙二 (東大物性研)

# 簡単な分子結晶の相転移

阪大基礎工学部 中村 伝

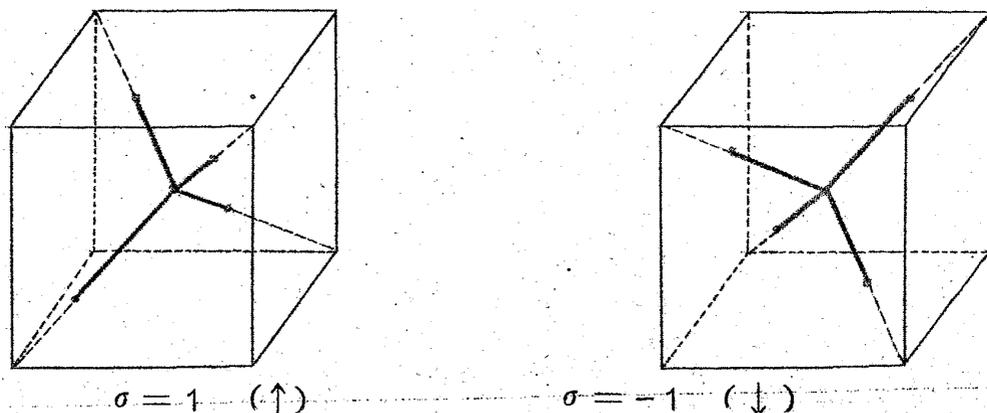
筆者の目にとまった2, 3のトピックを選んで解説致しました。それらの要点のみを書きとめて置きます。

## [1] 固体酸素の磁性

興味の内容は磁性です。Kanda, Haseda & Otsuq, Brovic-Romanov et al によって磁化率の測定が、1954年に報じられていましたが、その後研究は途絶えておりました。しかし、最近5年間に $\alpha$ ,  $\beta$ 相の結晶構造、磁気構造の知見が蓄積され、光学吸収の測定と相まって固体酸素の磁性の全貌はまもなく確立されるかに見えます。

現在 $\alpha$ 相のスピン超格子構造はかなり明かですが、 $\beta$ 相で磁気超格子は無いかのようにです。 $\alpha$ 相の赤外吸収測定は反強磁性共鳴吸収の線と identify されるものを見つけています。これと optical "double transition" spectrum のデータの間の矛盾のない説明が反強磁性共鳴線の identification を裏書きしております。

## [2] 4面体分子と hyperpolarizability



たとえば  $\text{NH}_4\text{Cl}$  の phase II, III では  $\text{NH}_4$  基は上の2つの配向のどちらかだけをとると信じられています。それを図の下に記したように Ising

中村 伝

spin に対応させたとき、たとえば  $\text{NH}_4\text{Cl}$  の phase III は ferro です。

しかし光学的に上記 2 つの状態は実際には見分けられません。しかし hyperpolarizability では区別がでてきます。図の上下に沿うた辺を z 軸にとりますと、電場  $F_x$ ,  $F_y$  によって z 方向に誘起される電気モーメントは

$$\mu_z = \beta \circ F_x F_y$$

と書けます。かようにして非線形光学散乱による 4 面体分子の相転移の研究が可能になり、いまおこなわれています。<sup>\*</sup>

### 〔3〕 固体水素の研究の新しい局面

水素分子の電気 4 極子能率が proton の zero-point motion による proton charge の分布を考慮することで約 20% 大きくなるということで、これは相互作用定数を約 40% 以上も増大させますので、これまで実験と合っていると考えられたものが、実は再検討を要するという状況になりました。

もう一つは、夢物語だけに登場するかに見えた、ほとんど 100% に近いオルソ水素、パラ重水素ができるようになって新しい実験が出てきました。

オルソ水素、パラ重水素の単結晶をつくるのに成功したとき、おそらくは最後の研究の段階を迎えることになるでしょう。

---

\* ) この研究に注意を喚起された伊藤順吉先生に感謝します。