

21. 層間架橋体中の原子・分子の熱的性質

森 安 嘉 貴

^4He と同じく H_2 も Bose 粒子であるから Bose 凝縮温度以下で超流動に成ると期待される。この温度は H_2 を理想 Bose gas とみなしたとき $T = 6.6 \text{ K}$ である。しかし我々は bulk H_2 の三重点は 13.8 K であることから 6.6 K では既に固体となっていることを知っている。そこで H_2 の Bose 凝縮実現の為には、何とかして凝固点を下げてやるための工夫が必要となる。以前より我々は狭い空間に閉じ込めた原子・分子が示す過冷却現象を利用して、 H_2 の Bose 凝縮→超流動を実現させる試みを続けてきた。狭い空間の極限としてゼオライト細孔に着目した実験を行ってきたが、狭過ぎる空間中では H_2 分子は明確な固体→液体転移（過冷却現象）を示さないことがわかっている。本研究では制限された空間 (Restricted Geometry) を層状物質中の二次元空間にまで拡張することによって過冷却現象を見いだすことを試みた。既知の ^4He に対する超流動転移もまたこの二次元空間内でどのような変化をみせるか調べてみた。

現在までに得られた比熱測定によれば、アルミナ架橋モンモリロナイト（層間距離 $9 \text{ \AA}$ ）中吸着水素 (H_2 , D_2) は $9 \text{ K} \sim 10 \text{ K}$ 近傍に比熱の山がみいだされ、固体から液体への融解を示すと考えられる。又同じモンモリロナイト中吸着 ^4He についても約 1.7 K に超流動転移らしき hump がみいだされている。

以上の結果を確認づける実験を行いつつあり併せて発表する予定である。

また、この発展として常磁性を示す O_2 を吸着させた場合の結果も併せて発表する予定である。

22. 超強磁場下での原子および1次元鎖状分子の基底状態

安 井 孝 俊

中性子星の表面では $B \gtrsim 10^{12} \text{ gauss}$ の超強磁場が存在すると考えられている。このような状況下での物質の状態については、1970年の Ruderman 以来、多くの研究がある。最近の

Jones の密度汎関数法による計算では、 $Z > 6$ で、孤立した原子の方が1次元鎖状分子よりエネルギーが低い。

ところが、このような超強磁場下においては、電子の軌道半径は通常の原子に比べて、 $1/20 \sim 1/200$ 倍になっており、相対論的補正であるスピン-軌道相互作用が、大きな寄与をもたらすはずであるが、いままでの計算においては、全く考慮されていない。

我々は、このスピン-軌道相互作用を考慮した原子と鎖状分子のエネルギーを計算することにより、あらためてこれらの安定性を議論する。

23. 水素結合型強誘電体のX線による研究

山 崎 達 夫

水素結合をもつ融電体の中には重水素置換により転移点 T_c が1.5倍近く上昇する、いわゆる同位元素効果を示す物質がある。これらの物質の相転移の機構に関して Slater による KH_2PO_4 の統計理論が発表されて後、水素結合線上でのプロトンの秩序・無秩序相転移が重要と考えられている。一方、同位元素効果は水素が酸素-酸素間の二極小ポテンシャルをトンネル運動する量子効果によると説明された。しかし最近になってトンネルモデルに疑問を示す実験が行なわれ、理論的な検討が必要となっている。従来の理論では重水素置換によって水素結合の距離、水素の存在位置、プロトン間の相互作用など変化しないと仮定しているため、質量のみがトンネル振動数を介して T_c の上昇に多大な影響を与えている。しかしながら、必ずしもこの仮定が成立していないことが Ichikawa によって指摘され、又、Matsushita, Matsubara により同位元素効果の源が質量の違いによる単純なトンネル効果のみでなく、トンネル運動に起因した酸素間の距離 $R_{\text{O}-\text{O}}$ の変化を通しての静的な相互作用の変化(幾何学的同位元素効果)にもよっていることが計算により示された。

我々は今までに $R_{\text{O}-\text{O}}$ が T_c に密接に関係するとする幾何学的同位元素効果の立場よりトンネル振動数が T_c に比べて十分に小さいといわれる $\text{KH}_3(\text{SeO}_3)_2$ (KTS) を用い T_c の圧力依存性を調べ、幾何学的効果の定性的な検証を行なった。今回はより定量的な説明を行なうために $R_{\text{O}-\text{O}}$ の圧力変化を直接構造解析により得ることを試みた。実験では試料をダイヤモンドアンビルセルによって加圧し、室温で四軸X線結晶解析装置を用い、最小二乗法によって構造の精密化を行なった。得られた結果で特に注目すべきことは、圧力を加えることによる格子の縮