【85】

氏　名（本　籍）	阿部秀典（あべひでのり）（岩手県）
学位の種類	理学博士
学位記番号	博乙第138号
学位授与年月日	昭和58年3月25日
学位授与の要件	学位規則第5条第2項該当
審査研究科	物理学研究科
学位論文題目	Molecular Exciton States of Solid Carbon Dioxide （固体無水炭酸の分子励起子状態）
主　査	筑波大学教授　理学博士　尾中龍猛
副　査	筑波大学教授　理学博士　中村正年
副　査	筑波大学教授　理学博士　新井敏弘
副　査	筑波大学教授　理学博士　坂柳義巳

論文の要旨

簡単な分子の電子状態は，分光学でよくしらべられている。しかし，低温になって，それが固体になった場合の電子状態は，分子間の相互作用によって変わり，全く新しい様相を示す場合がある。相互作用の比較的弱い分子結晶の場合でも多くの変化が見られる。無水炭酸（炭酸ガス）は，基底状態で，OCOの直線分子であり，その電子雲は米俵状をしていると考えられている。低温では固化して，いわゆるドライアイスになるが，その単結晶は立方晶形であり，単位胞に4個の分子が含まれ，それぞれ立方体の異なる対角線の方向を向いている。

著者は，シンクロトロン放射光を光源として，真空紫外領域にある固体無水炭酸の基礎吸収を測定し，多くの吸収帯を観測した。そして，そのエネルギー位置や形，強度を求め，それらを自由分子の吸収帯と比較して，その対応をつけ，固化することによって，どのような変化を生ずるかを明らかにした。特に自由分子で見られる許容遷移$X^1\Sigma_g^+ \rightarrow {}^1\Sigma_u^+$，${}^1\Pi_u$が固体中で励起子吸収帯となり，3個のピークを持つことを発見した。自由分子で2個の吸収帯であったものが，固体中で3個のピークになるのは，単位胞内にある分子間の相互作用による，いわゆるDavydov分裂である。著者は群論による量子力学的な計算を駆使して，吸収帯の位置，強度に関して，実験結果をよく説明できる理論を作り上げた。この際，電子の波動関数が局在していると仮定した双極子近似では，実験結果を十分説明できず，励起状態の波動関数を広げて直接相互作用を計算して，漸く実験と一致する結果を得た。また，励起子帯以外の多くの吸収帯についても，自由分子のエネルギー状態やX線電子分

光で得た結果明らかになった内殻準位と比較して，それぞれ合理的に同定している。

審　査　の　要　旨

気体ガスを固化した場合の変化は，稀ガスや，アントラセン等の分子結晶でよく調べられている。固体無水炭酸の場合，比較的簡単な分子で，しかも単位胞に4個もの分子を含む複雑な構造であることに特徴と研究の困難さがあった。しかし，著者は，分子の電子状態に対する深い知識と，固体電子論に関する理論計算能力を利用して，この問題を解決することができた。簡単な分子の複雑な構造の電子状態を解明できることは，この方面の研究に新しい分野を開拓したものであり，その意義は高く評価される。又，この研究で示した著者の研究者としての能力も，十分評価されてよいものである。

よって，著者は理学博士の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。