

氏名(本籍)	藤 久 裕 司 (愛媛県)				
学位の種類	博 士 (工 学)				
学位記番号	博 甲 第 1107 号				
学位授与年月日	平成 5 年 3 月 25 日				
学位授与の要件	学位規則第 5 条第 1 項該当				
審査研究科	工 学 研 究 科				
学位論文題目	Structural Study of Pressure-Induced Molecular Dissociation in Solid Halogens (固体ハロゲンにおける圧力誘起分子解離の結晶学的研究)				
主 査	筑波大学教授	理学博士	浅 野	肇	
副 査	筑波大学教授	理学博士	岡 崎	誠	
副 査	筑波大学教授	工学博士	若 槻	雅	男
副 査	筑波大学助教授	理学博士	大 嶋	建	一
副 査	東京大学教授	理学博士	藤 井	保	彦

論 文 の 要 旨

ダイヤモンド・アンビル・セルと放射光X線回折を用いて、固体ハロゲン (I_2 , $I\text{Br}$, Br_2) の高压下での結晶学的研究を行い、これらの系での圧力誘起金属化および分子解離に関する以下の結論を得た。

(1) ヨウ素 (I_2) が33~50K低温で、24GPaの圧力で分子一単原子の相転移、いわゆる分子解離を生ずることを見出した。一方、室温ではこの転移は21GPaに確認された。この事実は、4 Kでのメスバウアー効果の測定から30GPaまで分子解離を生じないとする誤った推測を否定するものである。

(2) 臭素 (Br_2) の分子解離を80GPaに見出した。39GPaに分子解離をもつ臭化ヨウ素 ($I\text{Br}$) のデータと総合して、これらの分子解離に先だって3つの系の結晶構造に経験的なスケーリング則を見出した。すなわち、3つの系の結晶学的パラメータは固体状態における分子間結合距離によってスケールされる。

(3) ヘルツフェルトの基準をヨウ素と臭素に適用して、構造パラメータのスケーリングと同様、金属化の過程も分子間結合距離でスケールされることを見出した。

(4) ヨウ素の圧力誘起金属化の過程での電子の非局在化を直接見るために、マクシマム・エントロピー法により電子密度分布を決定し、0.6GPaで最近接分子間に電荷分布の存在を示す有望な結果が得られた。

審 査 の 要 旨

本論文は、高圧下のX線回折という実験的困難を克服して、貴重な実験データを提供している。また、研究計画の立案からはじまって、結果の解釈、考察に到るまで、著者の意図する物理の感じられる論文である。

よって、著者は博士（工学）の学位を受けるに十分な資格を有するものと認める。