

氏名 (本籍)	吳 有 紅 (中華人民共和国)
学位の種類	博士 (工学)
学位記番号	甲第 29 号
学位授与年月日	平成 7 年 3 月 24 日
専 攻	電子情報システム工学専攻
学位論文題目	High-pressure Properties of Dense Methane and Its Some Halogen Derivatives
学位論文審査委員	(主査) 教授 清水 宏 晏 (副査) 教授 安田 直彦 教授 仁田 昌二

論文内容の要旨

ダイヤモンド・アンビル・セル超高压発生装置を用い、 CH_4 、 CD_4 、 CH_3F 、 CH_2F_2 、 CHF_2Cl 、 CHF_3 、 CF_4 、 CH_3I と CD_3I の超高压ラマン散乱測定と CH_2F_2 の超高压赤外吸収測定を室温において行い、これらの分子性物質の圧力誘起の相転移、分子振動の圧力依存性等を明らかにしている。以下にその成果をまとめる。

① CH_4 と CD_4 の超高压ラマン散乱測定をそれぞれ約18と13GPaまで行い、 CH_4 の液相-固相Iと固相I-固相VIIの相転移圧力はそれぞれ約1.70と5.57GPaで、 CD_4 のそれらはそれぞれ約1.60と5.33GPaであった。

② CH_3F の超高压ラマン散乱測定を約12GPaまで行い、液相-固相Iと固相I-固相IIの相転移圧力はそれぞれ約2.75と3.63GPaであった。CF伸縮振動 ν_3 モードは大きな双極子-双極子及び転移双極子-転移双極子(TD-TD)相互作用のため、液相において大きな負の圧力依存性を示し、二つの固相において縦波光学(LO)モードと横波光学(TO)モードに分裂した。また、同じ対称性を持つ ν_1 (A_1)と $2\nu_5$ (A_1)モード、 ν_4 (E)と $2\nu_5$ (E)モードとのフェルミ共鳴が観測された。

③ CH_2F_2 の超高压ラマン散乱と超高压赤外吸収の測定をそれぞれ約29と13GPaまで行い、液相-固相I、固相I-固相II、固相II-固相IIIと固相III-固相IVの相転移圧力はそれぞれ約2.63、3.82、5.90と8.20GPaであった。CH逆伸縮振動 ν_6 モードは大きなTD-TD相互作用のため、全ての相においてLOとTOモードに分裂した。

④ CHF_2Cl の超高压ラマン散乱測定を約15GPaまで行い、液相-固相の相転移圧力は約3.49GPaであった。 CHF_2Cl の固相において、2本の格子振動モードが観測された。

⑤ CHF_3 の超高压ラマン散乱測定を約10GPaまで行い、液相-固相の相転移圧力は約2.46GPaであった。メタンのフッ化物、特に CHF_3 のCH伸縮振動モードは他の分子内振動モードに比べ、もっとも大きな圧力依存性を示す。

⑥ CF_4 の超高压ラマン散乱測定を約18GPaまで行い、液相-固相I、固相I-固相IIと固相II-固相IIIの相転移圧力はそれぞれ約1.90、2.68と3.51GPaであった。

⑦ CH_3I と CD_3I の超高压ラマン散乱測定を約12GPaまで行い、これらの物質の液相-

固相の相転移圧力はそれぞれ約0.90と0.80 GPaであった。固相において、 CH_3I と CD_3I のラマンスペクトルには共に4本の格子振動モードが観測され、水素の同位体効果より、これらのモードの帰属を行った。

論文審査の結果の要旨

ダイヤモンド・アンビル・セル超高压発生装置を用い、 CH_4 、 CD_4 、 CH_3F 、 CH_2F_2 、 CHF_2Cl 、 CHF_3 、 CF_4 、 CH_3I と CD_3I の超高压ラマン散乱測定と CH_2F_2 の超高压赤外吸収測定を室温において行い、これらの分子性物質の圧力誘起の相転移、分子振動の圧力依存性等を明らかにしている。得られた成果は以下のものである。

特に、1) CH伸縮振動 ν_1 モードの圧力依存性を、フッ素原子Fの大きな電気陰性度を考慮して、その結合力を議論して解明している。2) モード間の圧力誘起のフェルミ共鳴を観測し、詳細な考察を行い、分子ダイナミクスに言及している。3) これらの系に特有のLO-TO分裂の解明を行っている。4) 最後に、これらの系の超高压物性を総合的に考察・議論している。

以上のように、本論文はハロゲン化メタン系分子性固体の超高压力下における物性を、主として高圧ラマン及び赤外分光を用い、システマティックに研究しており、たいへん貴重なものである。よって本論文は博士(工学)の学術論文として価値あるものと認める。