

氏名(本籍)	しみず ひとし (京都府)		
学位の種類	博士(工学)		
学位記番号	博甲第1,526号		
学位授与年月日	平成8年3月25日		
学位授与の要件	学位規則第4条第1項該当		
審査研究科	工学研究科		
学位論文題目	AO-MO マッチング法による低エネルギーイオン・原子衝突過程の研究		
主査	筑波大学教授	理学博士	戸嶋 信幸
副査	筑波大学教授	理学博士	小川 泰
副査	筑波大学助教授	工学博士	常次 宏一
副査	国際基督教大学教授		
		工学博士	渡部 力
副査	お茶の水女子大学教授		
		理学博士	佐藤 浩史

論 文 の 要 旨

小さな核間距離では分子基底を大きな核間距離では原子基底を用いて緊密結合方程式を解き、適当な核間距離で解の接続を行なう AO-MO マッチング法により、イオンと原子の低エネルギー衝突における電子の組み替え反応を扱った理論研究である。この手法は以前に Kimura and Lin と Winter and Lane によってほぼ同時期に提唱され、数例の計算が報告されたが、原理的に優れた表現法でありながら余りにも膨大な数値計算を必要とするため、その後広く使われるに至らなかった。この原因は、原子基底と分子基底の両方のコードを必要とすることに加えて、異なる基底間の解の接続がかなり煩雑であることによる。本研究では、原子基底部分に有効ハミルトニアンを用いて、両基底を共通の二次基底で再展開する新手法の導入により、コードとマッチングの画期的な簡略化に成功し、実用化への道を開いた。今まで直接に解くことの難しかった多電子系の応用が期待される。本研究ではプロトタイプとして、ヘリウムイオンと水素原子の低エネルギー衝突を扱い、過去に存在する理論計算よりも高い精度の解を少ない基底で与えることを実証した。また、分子基底部分の散乱方程式の解法に斬新な区間透熱法を開発し、非断熱結合の特異性に伴う困難を解決している。

審 査 の 要 旨

原子基底展開においては併進運動を表す有効ハミルトニアンを導入して電子走行因子による数値計算上の困難を除去し、分子基底展開において区間透熱法を開発し非断熱結合の特異性による困難を除去した2点において、斬新な手法を開発しており画期的な理論研究として高く評価される。

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。