

氏名(本籍)	福 <sup>ふく</sup> 田 <sup>だ</sup> 宏 <sup>ひろし</sup> (東京都)
学位の種類	工学博士
学位記番号	博甲第660号
学位授与年月日	平成元年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	低エネルギーイオン・原子衝突の理論的研究
主査	筑波大学教授 理学博士 石原武
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 井上雅博
副査	理化学研究所主任研究員 工学博士 渡部力

### 論 文 の 要 旨

低エネルギーイオン・原子衝突過程は通常、原子核の相対運動を古典的に扱い電子の波動関数は分子軌道で展開するといういわゆる半古典的 PSS 法によって理解される。核の運動も量子論的に扱わなければならないような極低エネルギー領域では未だ確立された理論手法はなく、断面積の信頼できる計算例は皆無である。本論文は、小林らによってミュオニック原子過程の研究で導入された新しい断熱基底展開法を、通常の原子の場合に特有ないくつかの問題点を解決することにより、この極低エネルギーにおけるイオン・原子衝突過程に適用したものである。本論文においては数値例として水素原子と $\alpha$ 粒子の電荷移行過程が取り上げられている。これは、量子論的 PSS 法がこの系に対して低エネルギー極限で偽結合項の困難がなく信頼出来る結果を与えるので、結果の比較に有用である。

第1章は序論であり、PSS 法の問題点と、小林の展開法でそれがどのように解決されているかが述べられている。また後者をイオン・原子衝突の問題に適用する際の問題点と本論文のアウトラインが述べられている。

第2章2A節では半古典的 PSS 法の概観に続いてその適用限界が議論される。PSS 法の最大の困難である偽結合項、即ち無限遠で消えない結合項は電子走行因子 (ETF) を含む分子軌道を用いることによって除かれることが示される。また、断面積の計算値の古典軌道依存性から、 $\alpha$ 粒子の入射エネルギー $0.5\text{keV}$ 以下では半古典論が適用出来ないことが推論される。

第2章2B節では核の相対運動も量子論的に取り扱った PSS の定式化を行い、具体例について結合項の漸近形が示される。これにより、偽結合項に2種類あり、1つは分子軌道を定義する換算質

量を正しい解離極限を与えるように修正することによって除かれるが他方を除くには相対運動を記述する座標が遠方でヤコビ座標になるように取らなければならないことが示される。小林の展開法ではチャンネル毎に正しいヤコビ座標が用いられているためそのような困難は存在しない。

第3節3A節では展開基底の選び方が議論される。ミュオニック原子の場合と異り多数の状態の結合を考慮する必要があるが、この展開法は2つの完全系からそれぞれいくつか基底関数を選んで全波動関数を展開するものであるから選ばれた基底の独立性に特に注意が必要である。基底を定義する2中心問題はそれぞれ1つの任意に選べる電荷パラメータを含む。著者は相関図の電荷パラメータ依存性を調べた結果、水素原子に相関する規定関数については核間を除くクーロン相互作用を消去し、イオンに相関する基底についてはイオン・原子間のクーロン相互作用を相対座標の逆2乗の項まで消去するようにとるのが最も有効であることを推論している。

第3章3B節は動径波動関数を求める方法についてである。上に述べたようにチャンネル毎に定義された2つの異なる動径座標に対して断熱的な基底関数で全波動関数が展開されているので、その展開係数としての動径波動関数の満足する方程式は連立微積分方程式となり直接数値的に解くことは困難である。そこで著者は電子と核の質量比が小さい事を利用した次の様な解法を考案した。積分項に含まれる未知動径関数の引数を方程式の独立変数のまわりでテーラー展開し有限項で打ち切ると、動径波動関数の高階導関数を質量比程度の摂動として含む微分方程式が得られる。これを次の様にして2階微分方程式に帰着させる。(1) テーラー展開を0次で打ち切った2階微分方程式を用いて摂動項の高階導関数をすべて2階導関数までで表わす。(2) こうして得られた新しい2階微分方程式を用いて(1)と同じ操作を行う。(3) この操作を、得られる2階微分方程式の形が変化しなくなるまで繰り返す。この2階微分方程式を解くことによってもとの高階微分方程式の物理的境界条件を満足する解が求められることが簡単な例題で示されている。

第3章3C節では動径微積分方程式にJWKB近似を適用することによって、小林の展開法が半古典論の成立するエネルギー領域でETFを含むPSS法に一致することが示される。

第4章には計算結果が示される。微積分方程式の数値解については、テーラー展開は2階まで、2階微分方程式を作る繰り返しも3回程度で収束しており、収束性は極めてよい。これから得られた断面積は低エネルギー側 ( $\sim 0.2\text{keV}$ ) で量子論的PSS法と一致し、高エネルギー側 ( $\sim 1\text{keV}$ ) でETFを含む半古典論的PSS法と一致している。これは本論文の手法の妥当性を示すものである。

## 審 査 の 要 旨

低エネルギーイオン・原子衝突に対する理論手法としては分子軌道展開法が従来唯一のものであった。しかし、半古典論の成り立たない極低エネルギーではこの方法は無力であり、従って断面積の信頼出来る計算例は皆無であった。これは、この方法の最大の欠点である非物理的ないわゆる偽結合項を除去することが出来ないからである。この困難を含まない新しい断熱基底展開法が、最近小林らによってミュオニック原子過程の研究で導入された。著者はこれを通常の原子の問題に

適用するため、基底関数の独立性を検討してその選び方の指針を示し、動径波動関数を求める連立微積分方程式の数値解法を開発し、 $\alpha$ 粒子と水素原子の電荷移行反応の計算を実行して得られた結果の信頼性を示した。本論文はこの新しい展開法を多数の状態の結合するイオン・原子衝突問題に広く用いられる標準的な理論手法として確立したものと見える。

以上、本論文は原子衝突理論に大きな寄与を与えるものであり、高く評価出来る。

よって、著者は工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。