

氏名（本籍）	小	林	金	也	（東京都）			
学位の種類	工	学	博	士				
学位記番号	博	甲	第	4	5	7	号	
学位授与年月日	昭	和	62	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とミュオニック原子の衝突理論							
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	工学博士	渡	部	力			

論 文 の 要 旨

負のミュオンを触媒とする低温核融合反応がエネルギー生産の可能性への期待から近年注目されている。この触媒反応にはミュオニック水素同位元素の関与する多くの原子分子過程が含まれているがこれらの素過程の実験は非常に困難であり、そのメカニズムの解明には理論的研究が特に重要である。その様な素過程のひとつである水素イオン（陽子、重陽子、3重陽子）とミュオニック水素同位元素との低エネルギー衝突は最も一般的なクーロン3体問題の例であり、ミュオンの質量が大きいため通常の原子衝突過程を対象に開発されてきた諸方法をそのまま適用することは出来ない。本論文はこの問題に対する新しい理論的手法を提唱するものである。

第1章は序論であり、問題の背景が述べられている。

第2-1章ではこれまで用いられてきた唯一の方法である分子軌道展開法、いわゆる PSS 法を概説し、この問題への適用上の利点と欠点について述べている。室温程度の低エネルギーの衝突問題であるので、分極力や核間距離の小さいときの全系の分子的振る舞いが重要であるがこれらは PSS 法で十分取り入れられており、従って展開の収束性はよい。一方、PSS 波動関数は核間距離が大きいときの系の漸近状態を正しく記述出来ないという欠点を持つ。これには2つの起源がある。第1は分子軌道が正しい解離極限を与えないことであり、第2は相対運動が核間距離

で記述されているため散乱問題の物理的な境界条件を満足しないことである。これらが理論計算にどのような矛盾と誤差を生むかが議論されている。またここで著者は弾性散乱と組み換え衝突の振幅を2状態近似で計算し、結果を二つの核の換算質量の関数としてプロットすることによって遷移振幅が0になる所が周期的に存在することを示した。これによって実用上最も重要な重陽子と3重陽子間のミュオン移行過程が振幅の0点に非常に近く位置し、従って他の水素同位元素間の移行過程や弾性散乱に比べて特に精度のよい近似が必要であることを指摘している。

第2-2章ではPSS法の有効性とその限界が定量的に調べられている。PPS法の誤差は主として境界条件の問題である。そこで、入射チャンネルで正しい解離極限を与える分子軌道を用いてPSS波動関数を計算し、その漸近形から得られた遷移振幅を、積分形に書かれた遷移振幅公式と同じ波動関数を代入して求めたものと比較した。後者においては厳密な終状態のチャンネル関数を用いられているので境界条件に対する補正は近似的に取り入れられたことになり、その差はPSS法の誤差の程度を示す。 10^{-2} eV以下の入射エネルギー領域で計算の結果、弾性散乱ではこの差は非常に小さいがミュオン移行過程では大きい。これは用いられた波動関数が入射チャンネルでは低エネルギー極限で正しい境界条件を満たすように取られているが、移行過程は発熱反応であるため終状態で相対速度が大きく、このエネルギー領域でも境界条件の破れが大きいためである。重陽子、3重陽子間の移行過程では発熱量は比較的小さいにもかかわらずPSS法の誤差が非常に大きい、これは前節の議論から理解できる。

第2-3章で正しい境界条件を満たす新しい分子軌道展開法が導入され、これによる計算結果が示されている。まず、2つのイオンの電荷をパラメーターとして適当に選ぶことにより入射チャンネルと移行チャンネルで共に正しい解離極限を与える分子基底が作れることを示す。しかし、この基底では核間距離ベクトルが分子軸として取られているため、展開された全波動関数は相対運動の境界条件を満足出来ない。そこでこの基底と同程度の収束性が保証される範囲でハミルトニアンを分割し直して、ミュオニック原子の重心とイオンとの相対座標を分子軸とする全く新しい形の分子基底を導入した。こうして両チャンネルで正しい解離極限を与え、1つのチャンネルで相対運動の境界条件を満足させ得る展開基底が用意された。これを用いた展開法は計算が容易でありオープンチャンネルが唯一の場合に有効な方法となろう。ミュオンの移行反応が起こる場合には両チャンネルに対応する2つの分子基底が必要である。この場合は非直交系での展開となり、波動関数を求めるのに複雑な微積分方程式を解く必要がある。数値計算が2状態近似で実行され、結果は存在する間接的な実験値とよく一致している。

第3章には本論文のまとめと、今後更に検討を要する問題点が述べられている。

審 査 の 要 旨

ミュオニック原子とイオンの衝突現象は最近その重要性が認識されながらも、確立された理論的手法は皆無といってよく、簡単な分子軌道展開法による断面積の評価があるのみといった現状である。この方法の最大の欠点は波動関数が、特に組みかえ衝突において、物理的境界条件を満足出来ない点にある。著者はすべてのチャンネルで境界条件を満足し、しかも収束性のよい新しい断熱基底による展開法を開発し、ミュオニック原子とイオンの各種衝突過程の断面積の精度のよい評価を行った。その結果は従来の理論値を大幅に修正し、実験から推測されていた値とよく一致した。

この手法は、これまで困難とされていた低エネルギー組みかえ衝突で特に有効であり、ミュオニック原子の問題のみならず、一般の3体系の衝突問題に広い応用を持つものと期待される。

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、高く評価できる。

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。