

| | |
|---------|---|
| 氏名(本籍) | 佐野達司(東京都) |
| 学位の種類 | 理学博士 |
| 学位記番号 | 博甲第42号 |
| 学位授与年月日 | 昭和54年10月31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 | 化学研究科 化学専攻 |
| 学位論文題目 | Adoptability of the Effective Hamiltonian Method and the Generator Coordinate Method for the Evaluation of Electronic Correlation in Molecules (分子における電子相関の評価についての有効ハミルトニアン法および生成座標法の適用性) |
| 主査 | 筑波大学教授 理学博士 鐸木啓三 |
| 副査 | 筑波大学教授 理学博士 徳丸克己 |
| 副査 | 筑波大学教授 理学博士 池田長生 |

論 文 の 要 旨

本論文は2部より成り、それぞれ有効ハミルトニアン法と生成座標法とによって、分子の電子状態を記述することを試み、分子内電子相関を評価するのに、いずれも採用できることを結論したものである。

第1部では、分子を記述する最も基本的なH-F近似に電子相関を取り入れるために通常用いられる配置間相互作用(CI)法の欠点を論じ、特に、実験で直接得られる励起エネルギーが間接にしか計算できない欠点に対し、有効ハミルトニアン法はそれを組立てる基礎空間の選択により励起エネルギーを直接計算し得ることを示した。

トランスブタジエンについて計算した結果は極めてよい収束性を示した。

第2部では、HF法が破たんするH₂の解離反応を取り上げ、いくつかの方法の総合的比較を行った。その総合のために生成座標法(GCM)により検討した結果、最近用いられている非制限HF法(UHF)、調和近似法(RPA)、非調和近似法の3種は、ある積分方程式の展開による解法のそれぞれ0次、1次、2次の近似であることが確かめられた。また、変形径路に沿う集団運動の導入によって非調和項まで取り入れGCMで解く方法を提出した。この方法はH₂について上記の3法が実験と矛盾する結果を与える核間距離においてもほぼ満足なエネルギー曲線を与えた。

審 査 の 要 旨

分子の電子状態の理論は、興味の対象が分子の化学反応に移行するに従い、より有効な近似法の探索を続けて来ている。本研究はその線上の一成果である。

著者は他分野において開発される方法に絶えず注意を払い、そのうちふたつの方法がこの分野に適用できることをここに示したものである。

第1部における巧妙な基礎空間の選択および収束性の徹底的な検討、第2部における諸法の総合的考察および独創的な新法の提案等いずれも著者のなみなみならぬ学識をあらわすものと思われる。

よって、著者は理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。