

氏名	尾 崎 次 郎		
学位(専攻分野)	博 士(理 学)		
学位授与番号	博 乙 第 2643 号		
学位授与の日付	平成 5 年 9 月 30 日		
学位授与の要件	博士の学位論文提出者 (学位規則第 4 条第 2 項該当)		
学位論文題目	強磁場下における水素分子イオン H_2^+ の状態		
論文審査委員	教授 山寄比登志	教授 米井 克己	教授 萬成 勲
	教授 佐藤 公行	教授 東辻 浩夫	

学 位 論 文 内 容 の 要 旨

白色矮星, 中性子星中で $10^8 \sim 10^{13}$ Gauss の強い磁場の存在が確認されて以来, 強磁場下での原子・分子の研究が盛んに行われるようになった。原子の研究から始まり, 今では水素原子の量子力学的計算を通じて threshold (energy 連続状態と energy 離散状態の境目) 付近のスペクトルを説明する為に, 古典カオスを考慮しつつ, 量子カオスの研究も盛んになってきている。一方, 分子の研究は小さい分子に限られていて, 詳細な研究はなされていないのが現状である。最小の分子である H_2^+ イオンの研究でさえ, 基底状態周辺に限られていると言って良い。そこで本研究は H_2^+ イオンのいくつかの励起状態 ($m = -1, -2, -3, -4, -5$) の強磁場下でのあらゆる振舞いを詳細に調べて, いくつかの重要な結論を引き出し, 強磁場中の分子の研究に寄与することを目指している。その為に変分的断熱近似法の定式化を行い, 任意の磁気量子数 m に対して安定な解が得られるような数値計算法を確立した。この方法は磁場の強い所だけでなく, 比較的磁場の弱い所でも, 極めて有効に働くことが数値計算結果から解った。Even z -parity を持つ状態が磁場の強さの変化 ($10^8 \sim 10^{12}$ Gauss) に対して, どのように振舞うのかを明らかにする為に, 各状態の全エネルギー, 平衡核間距離, そしてエネルギー差 $2(E_{H_2^+} - E_H)$ を前 2 つは磁場の強さの関数として, 最後のものは核間距離の関数として, 数値計算を行いくつかの重要な結論を得た。同様に, odd z -parity を持つ状態が磁場の強さの変化に対して, どのように振舞うのかを明らかにする為に, 各状態に対して, 上と同種の計算を行っていくつかの重要な結論を得た。これ等のことから, 強磁場下の H_2^+ イオンの状態の全体的振舞いが明らかになった。

論文審査の結果の要旨

天体観測により、白色矮星や中性子星等において $10^8 \sim 10^{13}$ ガウスという、地球上には存在しない非常に強い磁場が確認されて以来、強磁場下における原子・分子の研究が盛んに行われるようになった。まず原子についての研究がなされ、次第に分子の研究に移ってきているが、現状ではまだ小さい分子の研究に限られている。

最も簡単な多原子分子である水素分子イオン H_2^+ の強磁場下における研究も、これまで基底状態周辺に限られていた。そこで本論文ではいくつかの励起状態について強磁場下における振る舞いを、理論数値計算により詳細に研究している。

- 1) この研究では変分的断熱近似法を用いるが、まず他の方法 (Monte Carlo法) で研究されている πg 状態の磁場変化を調べた。その結果、磁場がないとき antibonding state であったこの状態が、磁場が強くなると bonding state に変化し、両方法で同じ結論が得られ、その信頼性が確認された。
- 2) H_2^+ 分子状態をその性格から even z-parity 状態と odd z-parity 状態に分類して磁場効果の研究を進めている。even z-parity 状態では磁場がないとき bonding state であっても、antibonding state であっても磁場の強さが増すに連れてすべて bonding state になる。次いで odd z-parity 状態の antibonding state のすべてが強磁場下で bonding state になることが示された。そして全エネルギー、平衡核間距離、解離エネルギー等の振る舞いが明らかにされた。

この論文によって断熱近似法ならびに変分的断熱近似法が強磁場下の分子状態研究に有効であることが示された。したがってこの方法は、他の、より複雑な分子の研究に有効であり、また磁場中の水素分子におけるカオスの存在が注目を集めているが、この方法は水素分子における量子カオス研究にも貢献できると予測される。以上のように、本研究はこの研究分野に重要な寄与をしたと認められる。

本論文の内容、論文発表会、参考論文を総合的に審査した結果、本論文は博士学位論文に値するものと認定する。