

論文審査の結果の要旨

論文提出者氏名

新崎康樹

化学動力学の1990年代は、フェムト秒オーダー幅のパルスレーザを利用した、分子の高速動力学あるいは実時間ダイナミクスの大発展の時代であった。多様な実験手法の開発と理論解釈の発展が世界的なスケールで行なわれた。この流れにあつて、光電子分光法は、エネルギー領域から時間領域へのそれへと大きな変貌を遂げつつある。特に、光電子の角度分布は、励起状態のダイナミクスをより詳細に反映した非常に重要な情報を与えると予想されていたが、フェムト秒領域のポンプ・プローブレーザの遅延時間を変えながら、光吸収・生成イオン・光電子のエネルギー分布・角度分布等を測定することによって励起状態の超高速ダイナミクスを追跡する実験技術が1999年に相次いで発表された。時間分解光電子分光自体の理論研究は1991年のDomckeらによる時間分解光電子分光の提案を受けて、ヨーロッパを中心に発展してきたが、非常に簡単なモデル計算しか出来ない状況が続いた。特に、従来の理論計算では、イオンへの遷移モーメントを定数値等に仮定した非常に単純なモデルに基づいており、光電子の角度分布などの計算などは及ぶべきもなかった。一方では、実験の発達に伴って、各種実験パラメータ、例えば、レーザの振動数・強度・分極方向、などの関数として、物理的内容が表現できる理論と計算が強く求められていた。

新崎康樹氏は、その学位論文において、散乱理論計算による精度の高い、核間座標の関数としてのイオン化遷移モーメントを繰り込んで、基底状態・励起状態・イオン状態の各ポテンシャル面上にある振動波束とその間の相互作用を同時にとりいれた量子力学的多チャンネル問題を扱う新しい運動方程式の定式化を行い、その実現のための方法論を開発し、振動波束のダイナミクスの理論計算を行った。これにより、エネルギー-角度分解・時間分解の光電子分光の理論計算は実験事実と比較対応することができる新しい時代に入った。具体例として、 Na_2 分子の励起状態でのダイナミクス追跡を具体例にとり、角度分解フェムト秒ポンプ・プローブ光電子分光研究としての最初の報告を行うとともに、幾つかの興味深い結果や理論的問題を解析した。新崎氏の研究は、すでに世界的な注目を集め、国際会議の招待講演に幾度か選ばれている。例えば、本年度の光電子分光法のFaraday DiscussionsのIntroductory Lectureもその一例である。また、この方法は、振動過程のなかで非断熱遷移による電子状態の遷移を直接観測する手段として、極めて有効であることが予想され、今後化学動力学分野に著しい貢献をなすことが期待されている。以上の理由により、本論文審査委員会は全員一致で、新崎康樹氏を博士(学術)にふさわしいと判断した。