

論文審査の結果の要旨

氏名 藤 崎 弘 士

本論文は、I. Motivation for this thesis, II. Basic concepts, III. Chaos induced by quantum effect due to breakdown of the Born-Oppenheimer adiabaticity, IV. Highly excited vibronic eigenfunctions in a multimode nonadiabatic system with Duschinsky rotation, V. General summary, VI. Further aspects の 6 章、及び Appendix からなる。

近年のレーザー技術、特にフェムト秒オーダーのパルスを用いた計測技術の進歩により、平衡状態（基底状態）から遠くはなれた、分子の高励起状態のダイナミクスを直接「見る」ことが可能になってきている。しかし、多モード性と非断熱性をあわせもつ分子の高励起状態に関する研究は少なく、現実的な多原子分子を計算をすることは現在の計算機能力でも非常に難しい。そこで本論文提出者は、分子内の非断熱性と多モード性の競合の効果を最小限に取り入れたモデル系として、Heller の提案した 2 モード 2 状態系 (two-mode-two-state system, 以下 TMTS 系と略す) を用いた。

Heller は TMTS 系のような非断熱遷移系にも使える系の「複雑さ」の指標として「スペクトル基準」(spectral criterion) という測度を提案した。それを用いて、系が適度な非断熱結合と Duschinsky 角を有すれば、高励起状態は「カオス」的になりうることを示した。しかし、他の測度で測ったときにその判別はどうなるのか、高励起状態の詳細な性質はどうなっているのかということに関する議論はこれまでなされていない。本論文においてその提出者は Heller とは異なる観点から TMTS 系の振る舞いを数値的に調べた。

まず III 章で、提出者は原子核系や量子カオス系の研究でよく用いられる幾つかの統計量：エネルギー準位の隣接間隔分布や Δ_3 統計量、固有関数の振幅分布を用いて、TMTS 系の「カオス」性を測った。その結果、TMTS 系の高エネルギー領域において、確かにこれらの統計量がすべて「カオス」性を示すパラメータ領域があることが見出された。これは Heller の結論と矛盾しない。更に、下断熱面だけがあり、非断熱結合のない系の統計的な性質も調べた。その結果、TMTS 系の場合、非断熱結合のある系が「カオス」性を示しても、下断熱面のみ系は強い「カオス」性を示さない場合があることが分かった。すなわち、TMTS 系の「カオス」性は透熱面や断熱

面の非可積分性によってではなく、非断熱性のみによって引き起こされていると考えることができるので、この現象は「非断熱カオス」と呼ぶにふさわしいものである。この結果は量子カオス研究の新たな局面を切り開く可能性を示した。

III章ではエネルギー準位や固有関数の統計的性質について調べたが、IV章ではTMTS系の「個別の」固有状態の性質を反映する高励起状態の分光的性質について調べた。その際、非断熱結合のある場合と下断熱面だけがある場合の古典・量子スペクトルを計算し、比較した。その結果、上で調べた「カオス」的なパラメータ領域では、自然に考えると「不規則」なスペクトルが現れることが期待されるが、初期波束によってはエネルギーに関してむしろ周期的なスペクトルが現れてくる場合があることを見出した。これは系の固有関数が「カオス」的になっているとはいえ、その中に規則的な *nodal pattern* がまだ残っていることを示している。その際、非断熱結合の強さが透熱極限でも断熱極限でもないにも関わらず、固有関数は透熱面や断熱面上での固有関数の性質を強く引きずるものがあることを見出し、こういった固有関数の存在は電子移動の観点からも重要であることを議論した。

以上はシンプルなモデル系から得られた結果であるが、これらは1次元系、もしくは断熱的な系に還元できない性質であり、分子内非断熱過程の多モード性の重要性を示したものである。また、ここで得られた概念は、多次元性と非断熱性をあわせもつ現実的な分子の理解や、そういった分子のレーザー制御の問題を考える際にも重要なものと考えられる。

なお、本論文第III・IV章は高塚和夫教授との共同研究であるが、論文提出者が主体となって分析及び検証を行なったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

したがって、博士（理学）の学位を授与できるものと認める。