

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 松川 豊

修士(工学)松川豊提出の論文は「衝突動力学による酸素分子の振動緩和に関する研究」と題し、本文6章及び付録3項から成っている。

大気中を高速飛行する飛行体周りに生じる極超音速流れにおいて、さまざまな実在気体効果が生じるが、まず基本となるのは分子振動緩和、あるいは分子振動励起過程である。分子振動励起の励起率、あるいは振動遷移定数に関して実在する実験データはその数が限られる上、有効な温度範囲は比較的低温領域に限られているのが現状である。即ち、極超音速流れで必要となる高温領域でのデータが少ないのが現状である。一方、理論的には、衝突動力学的手法により、振動遷移定数を算出することが出来るが、実験データとの一致という点からは、さらなる研究が必要となっている。しかしながら、衝突動力学的手法によれば実験的には困難である高温領域における予測が可能となるという特徴がある。そのため、本研究では衝突動力学的手法の可能性を追求することとし、実験データとの一致の可能性を追求すると同時に、実験的には得られない高温領域におけるデータを予測することを目的としている。具体的には、比較的データのそろっている O_2 -Ar 間の衝突に着目して検討を加えるとともに、地球大気の流れにおいて重要となる O_2 -O 間の衝突についての検討を行う。

第1章は序論であり、極超音速流れにおいて、分子振動緩和あるいは分子振動遷移過程の重要性を指摘するとともに、研究の現状が述べられ、それを踏まえて本研究の目的が述べられている。

第2章では、準古典論的衝突動力学に基づく振動遷移定数の計算法が述べられている。この手法では、分子原子間の衝突過程が直接数値的に計算され、始状態に対応する終状態を求め、振動状態の遷移確率を計算し、平衡分布にあるさまざまな始状態に関して平均を取るものである。この際、分子並進運動、回転運動、振動運動は古典的力学に従うが、振動運動に関しては量子論的に定まる振動準位への割り振りを行なうものである。

第3章では、半古典論的衝突動力学に基づき振動遷移定数の計算法が述べられている。準古典論的衝突論とは異なり、分子並進運動、回転運動は古典論的に扱われるのに対し、振動運動を量子論的に扱うものである。

第4章では、 O_2 -Ar 間の衝突による O_2 分子の振動励起に関する考察を行っている。この系は、従来から、よく研究が進められており、比較的信用できる実験結果が存在するものの、過去の研究により、衝突動力学的手法による振動遷移定数の値は、実験結果に対し一桁以上の相違を示すことが知られていた。これに対して、本論文では過去の研究で用いられていた分子・原子間ポテンシャルを吟味し、より妥当なポテンシャルを用いることを提案している。具体的には、*ab initio* 分子軌道法によるポテンシャルデータをもとに、ポテンシャルモデルを再構成し、そのポテンシャルによる準古典論的衝突動力学法による結果が実験的に得られたものによく一致することを見出している。また、半古典論的衝突動力学法に基づく結果は、準古典論的衝突動力学法によって得られた結果にほぼ一致し、比較的低い温度領域でも量子論的な効果がそれほど小さくなく、準古典論的衝突動力学法でも実験結果を再現できることを示している。

第5章では、 O_2 -O 間の衝突による O_2 分子の振動励起に関する考察を行っている。この衝突過程は、大気中を飛行する際に生じる重要な過程であるが、理論的な検討が十分行なわれていないものである。まず、原子・分子間ポテンシャルを *ab initio* 分子軌道法により求め、それに基づき、ポテンシャルモデルを構成するとともに、このようにして求めたポテンシャルモデルの妥当性を検討している。さらに、このポテンシャルモデルに基づいて、準古典論的衝突動力学法を適用し、 O_2 -O 間の衝突による O_2 分子の振動遷移定数を算出して

いる。このようにして得られた定数は、実験結果のある比較的低温域において、ほぼ、実験結果と一致する結果を与えているばかりでなく、さらに高温領域においても予測値を与えるものである。

第6章は結論であり、O₂-Ar系、O₂-O系の振動遷移定数について、適当な分子・原子間ポテンシャルを用いることにより、実験結果を再現する結果を衝突動力学法が与えることを示すのみならず、実験データの得られていない高温領域における振動遷移定数を新たに提案している。また、そのようなポテンシャルは、*ab initio* 分子軌道法により算出可能であることを示し、具体的なポテンシャルを提案したことが述べられている。

以上要するに、本論文は極超音速流れにおいて重要となる分子振動遷移定数について、衝突動力学法に基づく理論的予測の妥当性を示し、さらに、その応用性を示した点で宇宙工学に貢献するところが大きいと認められる。

よって、本論文は博士（工学）の学位請求論文として合格と認められる。

