

## 審査の結果の要旨

氏名 山口 浩樹

本論文では量子分子動力学を用いて二体衝突過程を詳細に解析することにより、ミクロスケールからの情報のみに基づく合理的な等核二原子分子の振動緩和/励起衝突モデルを構築することを目的としている。

近年、半導体製造プロセスをはじめとするナノテクノロジー分野や人工衛星、国際宇宙ステーションに代表される宇宙開発分野の重要性が日々高まっており、それらの系に対する数値解析が求められている。このような希薄気体流の数値解析手法としては DSMC (Direct Simulation Monte Carlo) 法が広く一般に用いられている。しかし、DSMC 法において多原子分子の内部自由度の非平衡を取り扱うことは非常に難しく、等核二原子分子気体においても局所平衡を仮定した統計論的なモデルによる解析がほとんどである。一方、回転の自由度に対しては二体衝突過程を詳細に解析し、その統計量からモデルを構築することも行われており、そのモデルが実験をより良く再現できることが既に明らかとなっている。更に、振動の自由度は化学反応にも大きな影響を与えることが知られており、詳細な物理に基づく衝突モデルが求められている。

以上のような背景を踏まえ、本論文では二体衝突過程の詳細な解析に基づく、内部自由度の非平衡に対応した振動緩和/励起衝突断面積モデルを提案する。まず、半古典的手法を導入することで、二体衝突過程を解析する。その結果を利用して、DSMC 解析において用いることができるような関数形に基づく振動遷移衝突断面積モデルを構築する。このような経験的要素を極力排除した、自由度間非平衡に対応する等核二原子分子の振動衝突断面積モデルを構築することが本論文の内容であり、全6章から構成される。本論文においては等核二原子分子として窒素を採用している。

第1章は「序論」であり、研究の目的と既存の振動緩和モデルの概要と問題点、そして解析的及び数値的な手法による既存の二体衝突過程解析手法の概要を述べている。

第2章は「衝突過程の解析」であり、二体衝突過程の解析に用いた半古典的解析手法について述べている。この手法は、振動の自由度のみを量子力学的に、回転と並進の自由度を古典力学により取り扱う手法である。具体的には原子核の分子内振動運動は波動関数を用いて、また回転、並進運動は分子動力学法に基づいて解析を行う。これは振動特性温度が回転及び並進の特性温度に比べて非常に高いためである。このようにすることにより振動準位を離散的に解析するが可能となる。その一方で計算負荷はそれ程大きくない。平衡状態を再現するための条件となる微視的可逆性の原理を厳密には満たさない手法ではあるが、実用上問題ない範囲でこの原理を満たしていることを確認している。

第3章は「遷移速度定数」であり、手法の妥当性を検証するため、既存の実験結果を整理した経験式及び半古典的数値解析結果と比較、検証している。その結果、統計誤差の範囲内で良く一致していることが示されている。

第4章は「衝突断面積モデルの構築」であり、既存の理論的解析の様々な成果を効果的に用いて振動緩和／励起衝突断面積を関数化したモデルを提案している。まず、基本的な関数形は量子力学に基づく摂動法を用いた解析的手法である歪み波法に基づいて決定している。そして、既存の研究で知られている構造因子を用いることが可能であることを確認し、さらに回転運動の効果は、相対並進エネルギーに回転エネルギーを組み込んだエネルギー全体が衝突断面積に寄与すると考えることで新しくモデル化している。このモデルは広いエネルギー範囲に渡って二体衝突過程の数値解析結果を再現する。また、基底状態同士の衝突のみならず様々な振動準位間の衝突に対しても適用可能である。この関数化は各項の物理的意味が明白であり、他の分子種に拡張する際も共線衝突のみを解析すれば良いように構築されている。散乱各分布が古典的軌道解析の結果とほぼ一致することから、回転非弾性衝突過程及び散乱角の決定には既存のモデルを利用することで解析が可能である。

第5章は「モデルの検証」である。モデルの構築に当たって、微視的可逆性の原理を満たすように考慮してあるため、平衡状態は再現可能である。そこで、構築したモデルによる緩和時間が第3章で示した遷移速度定数から求まる緩和時間と一致することを、貯気槽問題に DSMC 法を適用することで確認した。これにより、モデルの妥当性を示している。

そして、第6章が「結論」である。本研究では、DSMC 法に適用可能な振動緩和／励起衝突断面積モデルの構築を行った。

並進・回転・振動の自由度間非平衡を前提とした DSMC 法に対する振動緩和／励起衝突モデルの構築という試み自体が新しく、独創的である。特に、本研究はその結果を物理的意味の明白な関数により振動緩和／励起衝突モデルを構築したという点で非常に優れた論文である。

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。