

論文審査の結果の要旨

氏名 奥津 浩史

本論文は4章からなる。第1章は、イントロダクションであり、以下の3つの観点から本研究の意義及び過去の研究の展開について概説している。第一に、強レーザー光の出現により、レーザープラズマと呼ばれる高温かつ高密度のプラズマが生成可能となり、その特異な環境下に存在する原子、イオンの量子構造が新たな研究対象として捉えられるようになってきたという経緯を述べている。第二に、本研究の問題提起のきっかけとなった原子、イオンのスペクトルシフトの観測実験について、過去に行われた研究の歴史を紹介している。そして、最後に、理論の側面として、プラズマ中の原子に関する理論計算の手法がいかに発展してきたか、主な手法を紹介しつつ、本モデルの概要と妥当性について述べている。

第2章は、レーザープラズマ中における多電子原子の電子構造を、電子相関を考慮した量子化学計算により解明した点について述べている。まず、デバイ遮蔽モデルを導入し、有効ポテンシャルとして遮蔽されたクーロンポテンシャルを用い、ハミルトニアンを構築している。さらに、ユニバーサル基底関数法に基づく自由度の高い基底関数系の構築を新規に行っている。He, Li 原子についてのエネルギー構造の計算を行い、イオン化エネルギーの低下によるリュードベリ状態の消失、励起状態のエネルギーの低下などの実験事実が良く説明できることを指摘している。次に、振動子強度の計算を行い、He 原子の第一許容遷移と Li 原子の第二許容遷移については遮蔽により振動子強度が減少するのに対し、Li 原子の第一許容遷移では増加する傾向を示すこと、および、その原因を動径密度分布の変化から理解することができるという点を述べている。

以上、非クーロン場において、多参照配置間相互作用法による計算を行い、一般の3電子系原子以上まで拡張可能な方法論を開発したことが紹介されている。

第3章では、前章で構築した「デバイ遮蔽モデル」を多価イオンにまで広く適用するため、相対論効果を考慮したモデルの構築を行っている。その結果、 Al^{12+} の Ly_α (1s) $1\text{S} - (2\text{p})$ 1P 遷移、および Ar^{16+} の He_β (1s) $1\text{S} - (3\text{p})$ 1P 遷移の遷移エネルギーについて、実験で観測されているスペクトルシフトを定量的に説明できることを示している。

以上、レーザープラズマ中の多価イオンについて、プラズマ環境のような非クーロン場で記述されるポテンシャル中で、相対論効果と電子相関を考慮した量子化学計算を行い、実験事実を定量的に説明することに成功している。

第4章は本論文全体のまとめであり、電子相関を厳密に取り扱った計算の結果、実測のスペクトルシフトを説明できる点から、スペクトルシフトという現象の本質が遮蔽効果にあるという点を主張している。また、当該研究の今後の展望について述べている。

なお、本論文第2章、第3章は、佐甲徳栄・山内 薫との共同研究であるが、論文提出者が主体となって解析及び考察等の研究を推進したものであり、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と認める。