T2R2 東京科学大学 リサーチリポジトリ
Science Tokyo Research Repository

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	H(2s)生成断面積測定による分子二電子励起状態の研究
Title(English)	Investigation of doubly excited molecules by measuring cross sections for the formation of H(2s) fragment atoms
著者(和文)	熊谷嘉晃
Author(English)	Yoshiaki Kumagai
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第9384号, 授与年月日:2014年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:河内　宣之,木口　学,北島　昌史,河合　明雄,沖本　洋一,小田切　丈
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第9384号, Conferred date:2014/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

Powered by T2R2 (Science Tokyo Research Repository)

（博士課程）

論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第　　号		学位申請者氏名		熊谷嘉晃	
論文審査 審 査 員		氏　名	職　名		氏　名	職　名
	主査	河内宣之	教授	審査員	沖本洋一	准教授
	審査員	木口学	教授		小田切　丈	准教授
		北島昌史	准教授			
		河合明雄	准教授			

論文審査の要旨（2000 字程度）

本論文は、”H(2*s*)生成断面積測定による分子二電子励起状態の研究”と題し、6 章から構成されている。

第 1 章は序論であり、本研究の背景および目的について述べている。分子二電子励起状態をはじめとする共鳴状態では、平均場近似の破れに由来し、連続的電子状態との混じり合いがおこると述べている。そのため、Born-Oppenheimer 近似の帰結とは異なり、原子核の相対運動と電子運動が分離できなくなるため、分子二電子励起状態は化学における基本的な枠組みを逸脱する系として興味深い研究対象だと述べ、その解明において、分子二電子励起状態が寄与する断面積およびその振動子強度を定量的に議論することの重要性を主張している。本研究は分子二電子励起状態のダイナミクスを明らかにするために、光励起による H_2, D_2, CH_4, NH_3, C_2H_2 の H(2*s*)生成断面積および H(2*p*)生成断面積の絶対値を入射光子エネルギーに対して測定することを目的にしている。

第 2 章では、光励起による H(2*s*)生成断面積および H(2*p*)生成断面積の絶対値を入射光子エネルギーに対して測定する手法および装置について述べている。H(2*s*)原子および D(2*s*)原子検出器を開発するにあたっての種々の工夫を述べている。本研究により、これらの断面積を絶対値として測定することができるようになったと述べている。さらに、直線偏光した放射光により直線分子を励起し、入射光の偏光ベクトルに対する解離方向を指定して H(2*s*)原子を検出することにより、二電子励起状態の対称性(Σ, Π)を分けて光励起による H(2*s*)生成断面積を測定する手法も説明している。

第 3 章では、H_2 および D_2 の結果を述べている。30-50 eV のエネルギー領域において絶対値として測定された光励起による H_2 と D_2 の H(2*s*), D(2*s*)生成断面積および H(2*p*), D(2*p*)生成断面積を報告している。ここで、二電子励起状態の対称性(Σ, Π)を明らかにした上で H(2*s*), D(2*s*)生成断面積を測定している。測定された H(2*s*)生成断面積と、計算された光解離断面積を定量的に比較して, H_2 の二電子励起 $Q_2\ ^1\Pi_u(1)$状態および $Q_2\ ^1\Pi_u(2)$状態が H(2*s*)生成に大きく寄与していることを明らかにしている。本研究結果に加えて、理論計算により示唆された $Q_2\ ^1\Pi_u(1)$状態と $Q_2\ ^1\Pi_u(2)$状態の擬交差の存在から、二電子励起 H_2 分子の解離過程における $Q_2\ ^1\Pi_u(1)$状態と $Q_2\ ^1\Pi_u(2)$状態の間で状態間の遷移がおきていることを明らかにしている。さらに、$Q_2\ ^1\Pi_u(1)$状態と $Q_2\ ^1\Pi_u(2)$状態に由来する H(2*s*)生成および D(2*s*)生成の振動子強度に大きな同位体効果が現れたことを報告している。とくに後者の同位体効果は常識はずれに大きいと述べている。

第 4 章では、CH_4 および NH_3 の結果を述べている。光励起による CH_4 および NH_3 の H(2*s*)生成断面積および H(2*p*)生成断面積の絶対値を、それぞれ 18-45 eV と 15-48 eV のエネルギー領域において測定し、その結果を報告している。CH_4 および NH_3 において、H(2*s*)生成断面積と H(2*p*)生成断面積のエネルギー依存性がよく一致すると述べている。これらの断面積曲線に対して鏡映近似に基づいたピーク分離を施すことにより、H(2*s*)生成および H(2*p*)生成に同じ二電子励起状態が寄与していることを明らかにしている。その理由として、二電子励起 CH_4, NH_3 分子における多数回にわたる二電子励起状態間の遷移を挙げている。

第 5 章では、C_2H_2 の結果を述べている。15-45 eV のエネルギー領域において測定された光励起による C_2H_2 の対称性分離された H(2*s*)生成断面積および H(2*p*)生成断面積の絶対値を報告している。本研究で初めて、C_2H_2 の二電子励起状態を観測することに成功したと述べている。CH_4 および NH_3 と同様に、H(2*s*)生成および H(2*p*)生成に同じ二電子励起状態が寄与していると述べ、その要因として、多数回の状態間遷移を挙げている。

第 6 章において、本研究で得られた成果をまとめている。

以上、本研究は光励起による H_2, D_2, CH_4, NH_3, C_2H_2 の H(2*s*)生成断面積および H(2*p*)生成断面積の絶対値を入射光子エネルギーに対して測定することに初めて成功し、分子二電子励起状態のダイナミクスにおける状態間遷移の重要性を具体的にはじめて明らかにしたものであり、理学上貢献するところ大である。よって本論文は博士(理学)の学位論文として十分に価値のあるものと認める。