

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	酸素分子及び水素分子の超低エネルギー電子衝突の研究
Title(English)	
著者(和文)	奥村拓馬
Author(English)	Takuma Okumura
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11028号, 授与年月日:2019年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:北島 昌史,河内 宣之,大島 康裕,木口 学,沖本 洋一
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第11028号, Conferred date:2019/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	論文要旨
Type(English)	Summary

論文要旨

THESIS SUMMARY

専攻： Department of	化学	専攻	申請学位（専攻分野）： Academic Degree Requested	博士 Doctor of	（ 理学 ）
学生氏名： Student's Name	奥村 拓馬		指導教員（主）： Academic Supervisor(main)	北島 昌史	
			指導教員（副）： Academic Supervisor (sub)	河内 宣之	

要旨（和文 2000 字程度）

Thesis Summary (approx.2000 Japanese Characters)

電子－分子衝突は、多中心少数多体系に関わる最もシンプルな散乱問題であり、量子力学における散乱理論モデルを検証するための系として古くから研究が為されてきた。電子－分子衝突では、分子の振動・回転運動が電子衝突過程に与える影響が興味深い。多くの場合、電子による衝突時間は分子の振動・回転運動の時間スケールよりも十分に短く、衝突電子の運動と原子核の運動を分離して取り扱う断熱近似が良い近似であるとされている。一方で、もしも衝突時間が長くなると、断熱近似が破れ、衝突のさなかに原子核が振動・回転することによる動的な効果が電子衝突過程に何らかの影響を及ぼすと考えられる。衝突のさなかの原子核の運動により生じる効果については未だ多くのことが分かっておらず、本研究ではこの動的な効果を実験的に明らかにすることを目指した。本研究では衝突時間が長くなる系として i) O_2 の $^2\Pi_g$ 形状共鳴および ii) H_2 , HD , D_2 の超低エネルギー電子衝突に着目した。i) O_2 の $^2\Pi_g$ 形状共鳴は、衝突電子が標的分子に一時的に束縛された準安定な負イオンである。負イオンの寿命が非常に長いと、衝突のさなかに負イオンが何度も振動・回転すると考える **compound limit** と呼ばれる共鳴理論モデルが有効であるとされてきた。しかし、寿命の逆数である共鳴幅の正確な値は未だ分かっておらず、これまで **meV** から **μeV** に渡る非常に広い範囲の値が報告されてきた。もしも共鳴幅が **meV** オーダーであれば、共鳴の寿命は負イオンの回転周期と同程度になり、**compound limit** は良い近似ではなくなる。本研究では、 O_2 の $^2\Pi_g$ 形状共鳴の共鳴幅を正確に決定し、この共鳴における原子核の運動の効果が **compound limit** により記述されるか否かを検証することを目指した。ii) H_2 , HD , D_2 の低エネルギー電子衝突では、衝突エネルギーが極めて低くなると衝突時間が長くなると考えられる。水素分子は質量が小さいため分子の振動・回転が速く、**100 meV** を下回るような超低エネルギーにおいて、断熱近似の破れ、すなわち衝突のさなかの原子核の運動の効果が他の分子よりも顕著に現れることが期待される。また、水素分子では同位体効果により原子核の運動の効果を探ることが可能である。本研究では、 H_2 , HD , D_2 の電子衝突断面積を測定し、超低エネルギーにおける断熱近似の破れを探索することを目指した。

実験では、電子衝突実験で良く用いられる熱フィラメントではなく、本研究グループが独自に開発したしきい光電子源を電子源として使用した。しきい光電子源により生成した電子ビームを標的分子を満たしたガスセルに照射し、透過電子ビーム強度を測定することで、透過減衰法により電子衝突全断面積を決定した。

O_2 について、過去に本研究グループが測定した全断面積上に、 $^2\Pi_g$ 形状共鳴による一連のピーク群を観測した。本研究では、これらの $^2\Pi_g$ 形状共鳴によるピークを **compound limit** の描像に基づく新たな手法で解析し、共鳴幅を決定した。本研究による新解析法では、ピーク幅ではなくむしろピークの高さから共鳴幅を決定するため、従来の解析法よりも正確である。本研究では、新解析法により負イオンの振動量子数 $v'' = 4-11$ における共鳴幅を決定することに成功し、特に $v'' = 4-7$ の共鳴幅は **1 meV** を下回ることが分かった。**1 meV** を下回る共鳴幅であれば、**compound limit** は成立すると考えられる。本研究により、 O_2 の $^2\Pi_g$ 形状共鳴では衝突のさなかの原子核の運動の効果が **compound limit** により記述できることが明らかになった。

H_2 , HD , D_2 について、衝突エネルギー **20 eV** から **10 meV** を下回るエネルギーにおける電子衝突全断面積の測定に成功した。今回初めて測定した超低エネルギー領域において、 H_2 , HD , D_2 の全断面積には同位体効果が存在すること、また従来成立すると考えられていた散乱理論モデルが破れることを、本研究は明らかにした。前者は、超低エネルギー電子－水素分子衝突において断熱近似が破れることを意味している。後者の理論モデルの破綻は、超低エネルギーにおいて衝突のさなかに原子核が動くことで、衝突電子が感じるポテンシャルが時々刻々と変化するためであると解釈できる。本研究から、超低エネルギー領域における電子－分子衝突では衝突のさなかの原子核の運動の効果が重要な役割を果たし、理論的には断熱近似を超えた取り扱いが必要であることが明らかになった。超低エネルギー電子－分子衝突を始めとした多中心少数多体系の散乱理論に関する研究は未だ発展途上であり、本研究の成果は当分野における今後の理論モデルの方向性を規定する重要なものである。

備考：論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。
Note：Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意：論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。
Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).

論文要旨

THESIS SUMMARY

専攻 : Department of	化学	専攻	申請学位 (専攻分野) : Academic Degree Requested	博士 Doctor of	(理学)
学生氏名 : Student's Name	奥村 拓馬		指導教員 (主) : Academic Supervisor(main)	北島 昌史	
			指導教員 (副) : Academic Supervisor(sub)	河内 宣之	

要旨 (英文 300 語程度)

Thesis Summary (approx.300 English Words)

In low-energy electron collisions with molecules, it is particularly interesting how the motions of the target's nuclei affect the electron collision cross section. In many cases, since the time required for electron collisions is much shorter than the periods of the molecular vibration and rotation, the adiabatic-nuclei approximation can be applicable to the collision processes. The aim of this thesis is to elucidate the non-adiabatic effects due to the motions of nuclei during electron collisions. The electron collision processes in which the collision times become long, where the adiabatic-nuclei approximation may break down, were studied, i.e. the $^2\Pi_g$ shape resonance of O_2 and the very-low-energy electron collisions with H_2 , HD , and D_2 .

The $^2\Pi_g$ resonance of O_2 has been known to have a lifetime longer than the periods of the molecular vibration and rotation and thus was considered to be the typical example of “compound-limit” model. However, there were confusions in the values of resonance widths, the reciprocal of the lifetime. In the present study, the resonance widths were accurately determined by a new analysis method. The present resonance widths show that the lifetimes of the resonances are longer than the vibrational and rotational periods, which confirms that the compound-limit model is reasonable for the $^2\Pi_g$ resonance of O_2 .

In the present study of hydrogen molecules, the total cross sections of electron scattering from H_2 , HD , and D_2 in the energy range from below 10 meV to 20 eV were obtained. Anomalous isotope effects were found on the cross sections in the very-low-energy region below 100 meV, which show that the adiabatic-nuclei approximation breaks down in these very-low-energy regions. The present total cross sections were also compared to the fitted curves derived from the modified effective range theory. It was revealed that the theory failed to reproduce the cross sections in the very-low-energy regions. This indicates that the interaction potential between the scattering electron and the target molecule changes during collisions due to moving-nuclei effects in the very-low energy regions, which have been shown for the first time.

備考 : 論文要旨は、和文 2000 字と英文 300 語を 1 部ずつ提出するか、もしくは英文 800 語を 1 部提出してください。

Note : Thesis Summary should be submitted in either a copy of 2000 Japanese Characters and 300 Words (English) or 1copy of 800 Words (English).

注意 : 論文要旨は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。

Attention: Thesis Summary will be published on Tokyo Tech Research Repository Website (T2R2).