

論文審査の結果の要旨

氏名 高 翔

本論文は 5 章からなり、超短高強度近赤外レーザー場における水分子のイオン化と解離のダイナミクスについて、時間依存断熱状態法を組み合わせた第一原理分子動力学法および時間依存配置間相互作用法を用いた理論計算を行った結果を述べるとともに、時間依存配置間相互作用法に基づいたイオン化モデルを、多電子励起配置を取り扱うことができるように拡張するための手法を提案している。

第 1 章は、導入として、強レーザー場における原子・分子のイオン化現象について述べている。

第 2 章は、理論計算で使用される手法である第一原理分子動力学法、時間依存断熱状態法、時間依存配置間相互作用法をまとめている。

第 3 章では、超短高強度近赤外レーザー場における水分子のイオン化と解離のダイナミクスについて、時間依存断熱状態法を組み合わせた第一原理分子動力学法および時間依存配置間相互作用法を用いた理論計算の結果について記述している。第一原理分子動力学法計算によって得られた水分子の 2 価カチオンの 2 体解離から排出されたプロトンの運動エネルギー分布が先行実験をよく再現することを示し、さらにパルス内で 2 価カチオンの生成するタイミングに依存して 3 体解離から排出されたプロトンの運動エネルギー分布が変化することを示している。また、時間依存配置間相互作用法を用いたイオン化確率の計算に基づいて、水分子の 2 価カチオンから、増強イオン化機構によって 3 価カチオンが生成されることを示し、水の 3 価カチオンから放出されるプロトンの運動量分布がレーザーパルス幅に依存して変化するという先行実験で得られた観測結果を理論計算の結果に基づいて説明している。

第 4 章では、先行理論研究で提案されている 1 電子励起配置のみを含んだ時間依存配置間相互作用法に基づくイオン化モデルを、多電子励起配置含めることができるように拡張する手法を述べている。その第一歩として、水素分子の増強イオン化確率を、拡張されたイオン化モデルを用いて計算を行い、得られた結果が厳密計算によって得られた増強イオン化確率の核間距離依存性を再現することを示している。さらにこの手法が、水分子の増強イオン化確率の計算にも適用できることを述べている。

第 5 章においては、以上の研究成果をまとめており、さらに今後の展望について述べている。

なお、本論文第 3 章は、山崎馨、菅野学、河野裕彦、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分析及び検証を行なったもので、論文提出者の寄与が十分であると判断する。

よって、博士（理学）の学位を授与できるものと認める。