

# 論文審査の結果の要旨

氏名 市川 雄一

本論文は全六章から構成される。第一章は、本研究の背景と目的を説明しており、過去の実験における強光子場の分子においての特異的な現象の観測の研究の紹介と、その理論計算的な解明における、従来の方法による問題点と、電子と核の相関を取り入れた理論の必要性及び浮動ガウシアン基底を用いたアプローチについて議論している。

第二章では、浮動ガウシアン基底を用いた量子動力学計算において必要となる運動方程式の導出と、ハミルトニアン積分において必要となるガウシアン関数の各種積分を解析的に導出している。また、波動関数の基底状態への最適化に必要な方法について議論している。

第三章では、本研究における水素分子を例に、具体的な計算を行っている。まず、分子の原子核-電子波動関数による表現、及び浮動ガウシアン基底を用いた軌道による表現について説明している。その波動関数について、各軌道のハミルトニアン積分に表れる各種積分の解析的な導出を行い、さらに、運動方程式で必要となるハミルトニアン積分及び係数行列の、波動関数中各変数による偏微分を解析的に導出している。

第四章では、第二章及び第三章で導いた各表式を水素分子に適用し、水素分子における原子核-電子波動関数の基底状態への最適化と、基底状態における分子の振動の計算を行い、その結果について議論している。基底状態からわずかに核間距離を伸長させた状態を始状態として分子の振動運動を解析した結果、結合距離の変化において電子的な振動数成分が観測され、それは非断熱的な効果ととして解釈された。

第五章では、強光子場を適用した水素分子の動力学の計算を行っている。レーザー強度や、サイクル数、キャリアエンベロープ位相によるイオン化過程について議論している。

第六章は、各章をまとめ、将来の展望について述べている。

なお、本論文第四章は、加藤毅、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。