

論文審査の結果の要旨

氏名 井手 善広

本論文は5章からなる。第1章は、序論であり、強レーザー場中における分子の応答について過去の報告例を挙げ、電子と核の相関した運動の記述の重要性について記述している。さらに、分子波動関数の記述方法である Born-Huang 展開法の課題と、その課題を解決する手法について先行研究を引用し議論している。第2章では、多配置時間依存 Hartree-Fock (MCTDHF) 法による電子波動関数の記述について、先行研究を引用し概説している。第3章では、拡張された MCTDHF 法を用いた1次元水素分子波動関数の計算について、その理論と計算手法が述べられている。第4章では、拡張された MCTDHF 法によって計算された1次元水素分子 H_2 波動関数の計算結果が、基底状態のエネルギー期待値、電子およびプロトンの密度分布関数の観点からまとめられている。第5章では、第4章での計算結果を総括している。

第3章では、先行研究によって提案された拡張された MCTDHF 法によって、1次元水素分子の分子波動関数を計算する方法と、その背景となる理論を述べている。まず、1次元水素分子のハミルトニアンを具体的に書き表している。つづいて、分子波動関数を、拡張された MCTDHF 法の枠組みで表現している。さらに、構築したハミルトニアンと分子波動関数を用いて、Dirac-Frenkel の時間依存の変分原理に従って、分子波動関数を構成する電子軌道および核の運動を記述する関数の運動方程式が得られることを説明している。最後に、これらの運動方程式から基底状態の分子波動関数を計算する方法である虚時間発展法について述べ、本研究における計算のパラメーターを示している。第4章では、第3章で構築された方法を用いて分子波動関数を計算した結果がまとめられている。まず、基底状態のエネルギー期待値を示している。そして、Born-Huang 展開法による計算結果との比較を通して、拡張された MCTDHF 法では Born-Huang 展開法よりも波動関数の表現に必要なメモリーの数が非常に小さいという特徴を明らかにしている。さらに、電子およびプロトンの密度関数の計算結果からも、同じ特徴を確認している。最後に、多配置時間依存 Hartree (MCTDH) 法と拡張された MCTDHF 法の関係について考察している。

なお、本論文第3章、第4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計算および解析を行なったもので、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。