

学位論文内容の要旨

量子化学と特殊相対性理論の統合は、理論化学及び計算化学の分野における最も重要な問題の1つであるが、未だ発展途上の問題である。本研究では、核磁気遮蔽テンソルの相対論的計算を行った。核磁気遮蔽テンソルは核磁気共鳴 (NMR) の化学シフトを表す物理量である。種々の物性の中でも、とりわけ化学シフトには、相対論的効果を強く受けるという性質がある。それは、化学シフトが原子核の近傍における電子密度と電流密度に強く依存しているからである。本研究では、核磁気遮蔽テンソルを相対論的に計算するための3つの方法を提案した。また、それらの方法による計算値を他の方法による文献値と比較することによって、それらの方法の信頼性について検討した。

論文審査結果の要旨

近年、重原子核の核磁気共鳴 (NMR) の測定が盛んに行われるようになってきた。重原子核 NMR の測定データから重原子核の周りの電子状態や化学結合に関する情報を得るためには、核磁気遮蔽テンソルに対する相対論的効果を簡単に計算する方法の開発が必要である。本論文は、NMR の核磁気遮蔽テンソルに対する相対論的効果を2成分波動関数を用いた3つの方法によって定式化して計算を行い、4成分波動関数を用いた標準理論による計算結果と比較したものである。その結果、計算の簡単な2成分法によっても、4成分法の結果がよく再現できることがわかった。本研究の成果は、アメリカ物理学会誌に3報にわたって発表され、かつ、国際学会においても発表されている。本研究の結果は、今後の重原子核の NMR 研究に大きく寄与するものと考えられ、かつ、博士論文として必要な事項をすべて満たしている。

よって、申請者は、北見工業大学博士(工学)の学位を授与される資格があるものと審査委員会は認めた。