

氏名	種村正美 たねむらまさきはる
学位の種類	理学博士
学位記番号	理博第463号
学位授与の日付	昭和52年5月23日
学位授与の要件	学位規則第5条第1項該当
研究科・専攻	理学研究科物理学第一専攻
学位論文題目	粒子配置の統計幾何学的研究

論文調査委員 (主査) 教授 松原武生 教授 富田和久 教授 恒藤敏彦

論文内容の要旨

主論文は粒子配置の統計幾何学的研究に関連した3つの部分から成っている。その第1部は2次元剛体球の系をいわゆる Delaunay 三角形で分割して、隣接粒子対の距離の分布関数を確率幾何学的考察から求めている。Collins も隣接粒子対の分布関数に関する定式化を与えているが、これは理想気体側で成り立つ理論であるのに対し、申請者の新しい定式化では高密度側でよい結果を与えるように作られている。系を Delaunay 三角形のマルコフ定常過程と見なして分布関数に関する積分方程式を立て、それを密度展開の形に解いて状態方程式やエントロピーを計算し、計算機実験の高密度相の結果と比較しよい一致を得ている。この定式化では、長距離秩序が枠組に仮定されていないことが特色で、高密度極限の場合だけが解析的に与えられているが、数値計算を実行すれば流動相の状態も再現できるものと思われる。

主論文の第2部では逆べき相互作用

$$\phi(r) (= \varepsilon(\alpha/r)^{12})$$

で作用しあう粒子の集団に対して、分子力学法による計算機シミュレーションを実行して、系の結晶化過程を調べ、その幾何学的解析を行なっている。ここで Voronoi 多面体を導入し、原子の局在配置を多面体の位相幾何学を表現する指標を用いて分類する。その結果液相、fcc 固相、bcc 固相を各指標の多面体のヒストグラムで特徴づけることができる。また fcc 格子の Voronoi 多面体は (001) 方向に圧縮すると bcc 格子の多面体 (Kelvin 多面体と呼ばれるもの) に変換されることから、fcc 固相は (001) 軸に沿ってわずかに圧縮することにすれば bcc 固相とともに Kelvin 多面体で統一的に表現できる。こうして Kelvin 多面体を局所的な結晶的秩序としてとらえ、結晶核の多面体およびこれに近い多面体 (周囲の原子のわずかな変位で Kelvin 多面体になるもの) によって定義し、結晶核の成長の様子を記述している。この結果、結晶核はほとんど常にまず1次元的に成長することがわかった。調べたのは粒子数の500の系であるが、周期条件を用いているために粒子数が20~30に達すれば急激に結晶核が成長

することが示されている。ともかく粒子の多面体的認識によって初めて可能になる解析法で他の方法では見られない特徴的なものである。

第3部は粒子配置の統計幾何学的考えの生態系への応用である。動物のなわばりの形成される様子をモデル化して、計算機シミュレーションを実行したものである。動物のなわばりは、各個体が孤立する性質を持ち、力が同等であるとき、環境が全く一様であるという理想的な状況の下では、Voronoi 多面形による空間分割となるであろう。有限の2次元領域にこのような動物を最初完全ランダムに同時に多数個ばらまく。すると互いに近距離に位置する個体同志は反撥力で遠ざけあう。その時各個体は自分の周囲しか見ないから、反撥力は隣接対だけにしか及ばないと考えることができる。そこでこの時各個体は Voronoi 多面形の中央に移動すると考える。このような過程を順次くり返せば、次第に安定な配置ができあがり、安定ななわばりが形成される。申請者は2次元でシミュレーションを実行し、安定ななわばりの多面形の分布を求め、魚における実験との一致がよいことを示している。

参考論文は主論文に盛られた研究を進展させてゆく過程で、申請者が随時発表してきた主論文に密接に関係した仕事の速報である。

論文審査の結果の要旨

古典粒子系の多体問題として、液体論を考えると、斥力による粒子間の局所的な多体相関が液体の構造をきめるのに重要な役割を果たす。粒子の体積排除効果を端的に示すものが剛体球モデルであるが、このモデルは実際の液体の性質の多くを表現しうるし、また Alder が見出したように、液相固相転移の prototype とも見なされる。剛体球の空間構造に注目するならば、粒子のとりうる配置は純粋に幾何学的関係によって決まる。現実の液体の構造も多かれ少なかれこのような事情によって定まるものと考えられる。そうであれば従来の理論よりもっと短距離での多体相関を重視した幾何学的な扱いが必要ではないか。

このような思想は古く Bernal の液体構造論の中に含まれていたが、申請者は主論文の1部II部においてこの液体構造の統計幾何学的考察というアイデアを大幅に進展させ、さらに従来の液体構造論によって論じることが殆んど不可能であった結晶化過程をも、この視点から捉えようとした野心的で極めて新鮮な研究を展開している。もともと融解凝固の機構は、特に液相から固相が形成されるのは液体の局所秩序が積み重なって長距離秩序ができる過程であるから、この過程を表現するにはやはり局所的な幾何学的配置を考察することが必要になる。故に既に述べられたように、高密度の液体構造や、結晶化過程にとっては、原子間の斥力による距離相関を如何に正しく取り扱うかが本質的な問題となるが、申請者は局所的な粒子配置のパターンを Voronoi 図形、又はそれと双対的な Delaunay 図形として表現し、この図形の分布の統計的処理法を定式化することによって、上記の困難な問題を解決する糸口を提供している。特に主論I部において、長距離秩序を欠きながら著しく短距離秩序が発達した2次元剛体球系への応用は見事である。また第2部の結晶化過程を多面体図形の分布の変化として捉える着想は独創的であって、その解析結果は興味深く、結晶化過程において起きている粒子配置の変遷に関して多く示唆を与えるものである。このような研究方法は今後の計算機実験の発展と結びついて、有力な手段と

して登場することが期待される。さらに通常の液体以外にアモルファス系への応用などの可能性も十分考えられる。また第3部の生態系への応用も非常に興味深い。以上のことから参考論文と併せ考えて、申請者は統計物理学の分野で広い学識と高い研究能力を持つことが示されている。

よって、本論文は理学博士の学位論文として価値あるものと認める。