

氏 名	安 田 祐 介 やす だ ゆう すけ
学 位 の 種 類	理 学 博 士
学 位 記 番 号	理 博 第 150 号
学 位 授 与 の 日 付	昭 和 44 年 1 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 化 学 専 攻
学 位 論 文 題 目	Lifshitz—van der Waals Forces between Graphite Masses Deviations from Pairwise Additivity— (グラファイト塊間のリフシッツ—ファン・デア・ワールス力—— 相加性からのずれ——)
論文調査委員	(主 査) 教 授 山 本 常 信 教 授 雜 賀 亜 幌 教 授 小 泉 直 一

論 文 内 容 の 要 旨

主論文は van der Waals 引力に関する相加性の仮定を理論的に論じたものである。この目的のために申請者は二つの graphite 塊の間に働く力を詳細に研究し、巨視的物体間に働く力では相加性の仮定が著しく破れていることを見出した。

E. M. Lifshitzによれば、巨視的なスケールの二つの物体間に働く Van der Waals力は、もし誘電率の虚数部分が全波長領域で知られているならば、計算することができる。この方法は、物体を連続的な誘電体と見ること以外は近似を含まないで、Maxwell方程式と統計力学から電磁場のゆらぎを極めて一般的に扱って物体間に働く力を導くものである。申請者は graphite の場合には幸い誘電率のデータが Taft 及び Philipp の実験により完備していることに注目し、これに Lifshitz の理論を応用した。100Å 離れて対立する半無限の塊の間に働く力を綿密な計算によって導き、 $4.76 \times 10^4 \text{ dyne/cm}^2$ という結果を得たのである。一方相加性を仮定した場合の力を求めるために、申請者は Crowell らによって決定された二つの炭素原子間に働く力（これは 200,000 気圧までの圧力範囲で観測された graphite 結晶の層間距離をよく再現する）を lattice sum の方法に従って積算した。その結果は上述の Lifshitz 理論から求めた値の 4.4倍にも達し、明らかに相加性の仮定がよくないことを示している。

この喰違いの原因を突止めるために申請者は続いて次の計算を行なった。両方の graphite 塊を無限に薄い層に切断し、一対の層間の力を、残りの層の存在を無視して、Lifshitz 理論から求め、これをすべての対について加えた。その結果は正確な値の3.0倍であった。このことから、相加性の仮定が破れた主たる原因は、力が中間の誘電体によって shield されることを無視した結果であることが明らかにされた。この効果は、graphite に限らず一般の誘電体について広く起こり得るものであるから、巨視的な物体間の力、例えば巨大分子間の力を扱う場合には、従来常套手段と思われていた相加性の仮定に頼ることが重大な誤りに導くことが結論された。

この研究の副産物を一つ付加えるならば、 σ -電子と π -電子それぞれに由来する van der Waals 力を

分離することができたことである。

参考論文その 1 は、Drude 模型に基づいて分子間力の相加性を議論したもので、R. Zwanzig の先駆的な研究を一層深め、彼の行過ぎた結論を是正した。

参考論文その 2 では、二次相転移に伴う異常比熱の実験結果を広範かつ詳細に分析して、転移点近傍における比熱の異常性を調べた。

参考論文その 3 では、無秩序なスピン系における輸送現象を Green 函数を用いて扱う方法を展開している。

論文審査の結果の要旨

二つの系の間に働く van der Waals 力を考える場合、通常系を構成する要素（原子、原子団またはイオン）に分けて、一对の要素毎に働く力を積算して全体の力を求める方法がとられる。これは相加性の仮定と呼ばれ、この仮定のもとに処理された問題は極めて多い。一方、いかなる場合にこの仮定が破れるかという問題も研究されており、二つの場合が知られている。第一は分子同志が非常に接近した場合であって、通常の二体力の外に多体的な反発力の現われることが知られている。第二の場合は反対に十分離れた系の間の引力に関するもので、申請者の研究はこれに属する。この分野では Lifshitz による一般論の展開があったにもかかわらず、また生体高分子のような巨大分子間に働く力の重要性が認識されているにもかかわらず、具体的な定量的な研究に乏しくその進歩が遅々としていた。申請者は主論文において二つの graphite 塊の間に働く力に注目することによって、一方では Lifshitz 理論の見事な具体化をなしとげ、他方では分子間力の相加性の仮定に鋭い検討を加え、従来単に定性的な予想に止っていた shielding 効果を定量的な知見に高めたことが高く評価される。また σ -電子および π -電子から van der Waals 力への寄与が分離されたことは、 π -電子を含む分子の分子間力について興味深い貢献を行なったといえることができる。

以上要するに、申請者は主論文において巨視的な物体間に働く van der Waals 力に関して優れた研究を行なってこの分野の進歩に貢献し、また参考論文においても、統計力学の分野において豊富な知識と優れた研究能力を持っていることを示している。

よって、本論文は理学博士の学位論文として価値があるものと認める。