

論文審査の結果の要旨

論文提出者氏名

關 秀嗣

本論文は電荷を持った高分子がブラシ状に平面に植え込まれた高分子電解質ブラシとよばれるものの電荷分布およびブラシの厚さと電荷の割合との関係を調べたものである。

高分子ブラシは溶液中のコロイド粒子の凝集沈殿を防ぐ上で塗料などで実用化されているもので、応用面からもその性質を知ることが有意義であるが、物理化学的学問上も興味ある対象物である。電荷がある高分子が溶液中にブラシ状に存在する場合、その対イオンの分布はある特徴的な形をとると思われる。本論文はこの電荷分布について詳細に理論的考察を行ったものである。

電荷分布を理論的に求めるには、自己無撞着場（平均場）理論が有効であるが、ポアソン・ボルツマン方程式を境界条件を考慮に入れて解く必要がある。溶液中にある正に帯電した対イオンが高分子ブラシ内に束縛されている場合（強結合）と束縛されていない（弱結合）場合に分かれ、それぞれ異なる振る舞いが見られる。

対イオン層の厚さを d とし、ブラシの高さを h とすると、前者は $h > d$ であり、後者は $h < d$ で表される。 $h = d$ の場合、浸透圧が高分子の弾性力とつりあうが、ブラシの高さ h が電荷の割合 f と代数的冪のスケール関係をもつことが考えられ、その冪の指数が $1/2$ であるか $2/5$ であるか、理論的にこれまで両方の説が展開されてきた。

本論文では高分子の統計力学的取り扱いにより、排除体積効果を入れて、また電荷のクーロン相互作用を考慮し、分配関数を計算した。平均場近似により、偏微分方程式である拡散方程式とポアソンボルツマン方程式とが結合した基本となる方程式系を得た。その解を数値解析して求め、高分子のモノマー密度を植え付けた平面からの距離の関数として得た。また h と f との冪指数として $2/5$ を得た。これにより、いままでの指数の値についての研究に確定的な結論を与えたと言える。さらに、弱結合のときのブラシの有効電荷が対イオンの遮蔽効果により、一定値以上には f の値を大きくしてもならないという新しい興味深い知見を得た。

また、高分子の電荷と対イオンの電荷を足した全電荷分布が植え付け平面からの距離の関数と見た時、二重層を形成していることを見いだした。この結果は今後の実験による観測を方向づける結果ということが出来る。

以上の新しい知見を得た本論文に対し、論文審査委員会では本論文は電荷がある場合の高分子の集合であるブラシ状での電荷分布を分子場の方法にもとづく基本的な方程式系により、理論的に解析したもので興味深い新しい結果を得ていると審査委員は判定した。また、数値的に分子場による得られた連立方程式を詳細に解いて、実験と比較出来るように具体的な電荷分布を提示し、今後の実験研究の指針となる重要な結果であると判断した。

本論文はすでにその一部が *Journal of the Physical Society of Japan* の 76 巻、104601 ページ (2007 年) に発表済みであり、さらに本論文では詳細な結果とともに、高分子電解質ブラシ研究のこれまでの研究のレビューも分かりやすく記述し、一連の研究のながれが分かるように記載されている。博士論文として十分な体裁内容となっていると判断される。

結論として、本論文は、電荷のある高分子ブラシの問題に対し、理論的に新しい電荷分布の理論的定式化を行い、有意義な結果を見だし、更にこの方法および結果が実験を解析する時に強力な手法および指針となっていることを示していると審査委員会は判定した。

博士課程での理論物理の研究全般についても、本論文以外のテーマに関して既に *Phys.Rev.B* に二次元電子系についての発表論文があり、物理学の十分な知識があるものと判定された。

従って、本審査委員会は著者に対し、博士 (学術) の学位を授与するにふさわしいものと認定する。