

## 論文審査の結果の要旨

論文提出者氏名 甲田信一

### 学位論文の学術的背景と意義

分子の量子論はその複雑さの故、未開拓の領域を多く残している。現在では、計算機の発達により、より大きな分子を扱い、より精度の高い電子状態の計算を目指すのが量子化学の大きな流れとなっている。しかし一方、化学反応に伴う原子核の運動を量子論で扱うのは今でも難しい問題として残されている。また、デンドリマーと総称されるアンテナ状に広がった枝分かれ繰り返す構造（階層的な樹状構造）を持つ一群の分子では、アンテナ面で吸収された光エネルギーが中心部に向けて移動する、という現象が知られていて、その基本的なメカニズムに関心が集まっている。古典統計的なエネルギー再分配過程では、このような一方向性の説明が難しく、このダイナミクスの根源にも量子効果が働いていると推察できる。甲田氏の学位論文は、この方面において、基礎理論を組み上げ、新しい方法論を提案し、応用したものであり、分子の量子動力学の研究に一石を投ずる学術的に先端的かつ意欲的な内容を含んでいる。

### 学位論文の内容と成果

本論文は2部構成となっている。第1部（第2章）では、半古典近似されたプロパゲータの理論を取り扱っている。次いで、第2部（第3、4章）では、集光デンドリマー中の励起エネルギー移動に関して、デンドリマー分子の形状に由来する置換対称性を扱う新しい表現論を創り出し、それによってデンドリマー中心部に向けたエネルギー勾配ができることを示している。最後の章で、数値計算によりそれを実証している。以下、それらを個別に概観し、その学術的意義を評価する。

物質波の波長が短い領域における量子波動関数を古典力学的運動軌跡を利用する一連の近似を半古典論という。半古典近似プロパゲータは、この領域で波動関数を時間発展させる積分核のことである。第2章では、従来から提案されている多数の半古典力学的プロパゲータが、より一般的な手順から、系統的に導出できることを示した。具体的には、まずコヒーレント状態経路積分と呼ばれる量子力学の一種の表現を一般化し、その経路積分でプロパゲータを書き表し、次いで、積分を鞍点法で近似評価した後、外的に設定できるパラメータを適当に調節することにより、各種の半古典プロパゲータが導かれることを示した。これにより、それらの半古典プロパゲータに共通する理論的な基礎が提案できたとと言える。

第2部では、集光 dendrimer 中の励起エネルギー移動の数理物理的基礎を提案している。Dendrimer は、その集光機能（アンテナ効果）の他に、様々なユニークな性質が知られており、化学上の応用にも注目が集まっている。その集光機能のメカニズムは、科学的に興味深いだけでなく、より高機能の dendrimer の合成指針を与える可能性がある為に重要である。しかし、Dendrimer 様のネットワークを形成するハミルトニアンは一見複雑であり、ハミルトニアンをそのまま対角化しても、その結果と複雑な形状を対応付けることは容易ではない。そこで甲田氏は、ハミルトニアンを、1次元的なネットワークの集まりの上で定義されるハミルトニアンに等価に変換される一般的方法論を提案した。一見複雑な dendrimer の運動も、対称性があれば、いくつかの1次元的な運動の重ね合わせに過ぎないという一般的事実を数学的に示した。これを直鎖分解と呼ぶ。甲田氏は、直鎖分割が可能となるための一般的な条件を明らかにした。それに基づいて、甲田氏は dendrimer に自然に発生するエネルギー流の二つの機構を提案し、説明した。一つは各直鎖（1次元系）内で外から内へ下るエネルギーの勾配が形成されるという事実、もうひとつは各直鎖間でも外から内へ下る勾配が形成されるという機構である。例えば後者は、長い1次元系ほどエネルギーが低下（安定化）するが、空間的に見ると、長さが長いほど中心部まで届くことになり、中心側のエネルギーが低いというエネルギー勾配が形成される。

最終章では、これらの理論予測を検証する為の、数値計算による研究が展開され、集光機構に関して新たな知見を得ている。

このように、甲田氏の研究は、Dendrimer の集光機能の背景となる量子力学的機構の基礎に対して重要な貢献をなしたものであると評価できる。また、甲田氏は、学位論文審査委員会においても、関連する研究内容や学識に関する質疑に対しても端的にして要を得たプレゼンテーションと、それに対する質疑に対して的確な応答がなされた。

## 結論

以上のように、甲田信一氏の学位論文の内容は、博士としての水準に達しており、独創性も十分に有する。さらに、甲田氏の行った理論的考察は普遍性を持ち、得られた成果の一般性が高い。今後の dendrimer 研究や物性科学の応用研究に影響を及ぼす研究であると総括できる。本論文は、高塚和夫教授との共同研究の成果であるが、論文の提出者が主体となって理論の構築、提案、応用、数値計算の解析を行ったものであり、論文提出者の寄与が十分であると判断する。よって本論文は博士（学術）の学位を授与できるものと認める。