

学 位 審 査 報 告 書

(ふ り が な) 氏 名	なかじま ちひろ 中 島 千 博
学位 (専攻分野)	博 士 (理 学)
学 位 記 番 号	理 博 第 号
学位授与の日付	平成 年 月 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 1 項 該 当
研 究 科 ・ 専 攻	理学研究科物理学・宇宙物理学専攻
(学位論文題目) Molecular Transport through a Bottleneck Driven by External Force (ボトルネックを通過する外場によって駆動された分子輸送)	
論 文 調 査 委 員	(主査) 早川尚男 教授 太田隆夫 教授 小貫明 教授

理 学 研 究 科

【論文博士用】

学 位 審 査 報 告 書

(ふりがな) 氏 名	
学位（専攻分野）	博 士 （ 理 学 ）
学 位 記 番 号	論 理 博 第 号
学位授与の日付	平成 年 月 日
学位授与の要件	学 位 規 則 第 4 条 第 2 項 該 当
(学位論文題目)	
論 文 調 査 委 員	(主査)

理 学 研 究 科

(続紙 1)

京都大学	博士 (理学)	氏名	中島千博
論文題目	Molecular Transport through a Bottleneck Driven by External Force		
(論文内容の要旨) 本論文では外場によって駆動された分子系がボトルネックのある容器を流れるときに、流量がどう変化し、それらが何によって決まるかを分子動力学シミュレーションによって調べたものである。本論文の大筋は公表論文、C. Nakajima and H. Hayakawa, Progress of Theoretical Physics, 122, 1377 (2009)に沿っているが、公表論文に含まれない詳細な解析や新しい知見も含まれている。 本論文は3つの章からなり、第1章は序として電子輸送、脂質膜間のイオン輸送、多孔質媒質やカーボンナノチューブ等の微小領域中の粒子輸送、クヌーセン効果やラバール管といった孔を通した気体輸送から砂時計、人の流れ、交通流のようなマクロな現象も含めてボトルネックを通過する粒子系の輸送現象の数多くの例を紹介し、その共通の性質や測るべき統計量等について紹介している。 第2章は本論文の中心部である。まず分子動力学シミュレーションの詳細について、用いた分子モデルや一つの制御変数θで特徴付けられるボトルネックのある容器形状の紹介、境界条件、解くべき運動方程式、定常状態が実現していることの確認等を行った。また次に幾つかの典型的なパラメータでの分子輸送の様子のスナップショットを紹介し、その特徴を論じている。更に定常流の外場の強さや形状依存性を数値的に調べた結果を報告している。その中で少なくともかなり広いθに対しては流量が臨界外力と臨界流量を用いてスケールリングが可能であることを見出し、その臨界流量がθの単純な関数であることや臨界流量の物理的起源も明らかにした。また流量のサンプルによる揺らぎ、流量と密度の関係式、流量のボトルネックの幅依存性についても詳細に調べている。更に臨界外力以下での目詰まりが分子間引力の結果として生じることや、高温ではその目詰まりが消えることも明らかにしている。これらの多くの数値計算の結果は Lennard-Jones (LJ) 分子を用いた分子動力学シミュレーションに基づいているが、申請者は斥力だけの WCA モデルや粉体のように粒子間衝突に伴う散逸力のあるモデルについても調べており、流量やアーチ形成による目詰まりが起こるか否かについて報告している。申請者は流量の時間揺らぎについてもパワースペクトル $S(f)$ を計測することで調べており (f は周波数)、$S(f) \propto f^{-\alpha}$ としたとき α の値が開口部では普遍的に2になること、ボトルネック領域で LJ 分子では α の値が 1.2 程度になり、粉体等の密度流の際に観測される値に近い事、また WCA モデルや散逸力のあるモデルでは α が 1.7 に近いことも発見している。更に定常状態での密度揺らぎが臨界外力近傍で顕著なピークを持つこともシミュレーションにて確認している。 第3章は議論と結論である。そこでは簡単に結果をまとめた他、理論的に説明のつかない予想外の結果はどういう原因で生じたかについてまとめている。また将来に向けての改善点等にも簡単に触れている。 本論文で用いたモデルはやや理想化しすぎたきらいがあるが、分子系の簡単な輸送モデルからボトルネックで見られる様々な興味深い分子流の挙動を明らかにしたものである。またしっかりした英語で論文が書かれていることも申し添えておく。			

(論文審査の結果の要旨)

申請者の論文の主要部は公表論文として既に英文学術雑誌の出版されており、十分に学位審査に叶う資格を持っていることは確認されている。従って、審査においては学位論文の細かな体裁の訂正を求めると共に、内容の妥当性を詳細に吟味した。

審査委員から出された最も深刻な疑義は、モデルの正当性である。本論文の序で数多くの例が出されているものの、申請者が取り扱ったモデルはその何れにも当てはまらず、また電荷を持たない LJ 分子を外場によって駆動することは現実には不可能であるとの指摘は当を射たものである。実際に分子を外場で駆動するのであれば、電場によるものと考えられるが、分子間のクーロン力はモデルの中に含まれておらず、また遮蔽する電子等の自由度も考慮されていない。勿論、重力による駆動としては粒子の内部散逸が積極的に取り入れられておらず、散逸の効かない微小スケールの問題であろう。申請者の扱ったモデルが駆動分子系のミニマムモデルでありながら現実での対応物がない点がモデルの重大な欠点である。このような分子系を現実的にモデル化するのであれば、境界での圧力制御によるもの、粒子密度制御によるものが考えられる。また電荷を持った場合ならそのクーロン相互作用が必要であり、重力駆動であればマクロな粉体粒子と看做するのが適切であろう。しかしながらこれらの系はかなり複雑であり、今回申請者が行ったような多数のパラメータを様々に変えた大規模シミュレーションの実行は必ずしも容易ではない。その点で、審査委員は比較的シンプルな系であるからこそボトルネックのある系の流動現象の普遍的性質の抽出が容易になったという利点も同時に認めている。

また審査委員からの指摘としてスケーリング関数が 2 つの指数関数で表現されているが、その適用可能領域はどうなっているのか、また微小外場の極限で線形応答理論と素直に繋がるのかという質問が出た。申請者は、それに対してあくまで指数関数は臨界点近傍のフィッティング関数であり、微小外場の極限まで外挿できないことを返答したに留まった。また本論文の幾つかの不適切な表記や表現について審査委員から指摘された。

しかしながら本論文で、申請者はボトルネックのある系での分子輸送に関して数多くの興味深い性質を分子動力学シミュレーションを通して明らかにしており、とりわけ申請者が発見したスケーリング関数は分子間引力の効果が大きく、分子スケールの相互作用の影響がマクロな輸送現象に現れたという点に審査委員は一定の評価を与えた。またその外場に対する応答も線形応答ではなく強い非線形性を持つことを発見した点も興味深い発見と評価された。またパワースペクトル等公表論文にはないものまで含めて数多くの数値的な発見があり、それらの丁寧な解析と共に簡単な理論的考察を加えて、その物理的本質を説明した点も評価の対象になった。口頭試問での動画を使ったよくまとまったプレゼンテーションの他、審査委員の質問に対する受け答えもまずは無難にこなしており、博士に相応しいという評価で審査委員の間で意見の一致を見た。

よって、本論文は博士（理学）の学位論文として価値あるものと認める。また、平成 22 年 1 月 14 日論文内容とそれに関連した事項について口頭試問を行った。その結果、合格と認めた。

【論文博士用】

学識確認のための試問の結果

氏 名

(試問の科目・方法・判定)

(科 目) (方 法) (判 定) (備 考)

専攻学術

〇〇〇〇〇

口頭

合格

〇〇〇〇〇

筆答

合格

外国語

〇〇〇〇〇

筆答

合格

注) 外国語を免除した場合は、外国語の項目を削除してください。

(試問の結果の要旨)

上記のとおり、専攻学術および外国語の学力に関する試問の結果、本学大学院博士

後期課程を修了した者と同等以上の学力を有することを確認した。

注) 外国語を免除した場合は、上記の文章の「および外国語の学力」を削除してください。

試問担当者氏名

氏 名

氏 名

氏 名

氏 名

氏 名

注) 試問担当者には調査委員 3 名と学識確認委員 2 名の名前を記入してください。

