

審査の結果の要旨

論文提出者氏名 上村 淳

この物質世界の様々な現象を分子運動に基づいて記述し、理解し、制御し、設計することを目標とする統計物理学も黎明期のマクスウェルやボルツマン・ギブスらの研究から百余年を経た今日、平衡状態およびそのまわりの線形非平衡現象については基本的な問題は解決しつつある。とはいえ現実の現象の多様性を前にすると、これまでの成果は今後の非線形非平衡研究への序番であったと思わざるを得ない。

この世界に見える多様性は、従来の熱統計物理学でよく扱ってきた熱力学的極限とは対極の巨視極限に位置すると考えられる。熱力学的極限は同じようなものが莫大な数集まってできる巨視世界を想定しているのに対し、多様性はそれぞれは少数ながら莫大な種類の異質なものが集まってできる巨視世界とする扱いが必要と思われるのである。

多様な現象の代表は生物であろう。1つの細胞が活着しているという状態は、数千数万の遺伝子に制御された莫大な種類の分子の運動と反応として記述される筈である。

本論文はこうした問題意識を背景に、生物細胞を念頭に、ナノスケールでの反応系を分子動力学シミュレーションにより解析した結果を取りまとめたものである。その成果はまずはマイクロメートル以下の細胞内での現象を念頭においたナノスケール・メソスケールでの拡散過程・流れ・反応の再検討に始まる。3次元以下の空間でみられる異常ふるまいから、基本的な拡散反応系だけでも多様なふるまいが見られることを実証した。

さらに、熱ゆらぎに支配される分子が意味と機能とを獲得して素朴な熱ゆらぎでは容易には予想し得ないふるまいへと脱してゆくことを明らかにした。非平衡反応ネットワークを分析し、こうしたふるまいの鍵が相互触媒反応系であることを示した。この成果を踏まえ、たった2種類の分子からなる生物のモデルを提唱し、細胞の自己増殖をこのモデルの拡散反応系の枠内で説明することに成功した。

本論文の研究は、原子・分子の物理理論および熱統計物理学を、計算科学の手法および非平衡反応ネットワークの数理により、生物学に代表されるような多様性をもった複雑な非線形非平衡現象を扱う問題へと結びつけるものとして高く評価できる。博士(工学)の学位請求論文として合格と認められる。