

2012. 5

特集号



(題字：脇口宏学長)

国立大学法人

高知大学学報

## 高知大学学位授与記録第五十五号

法人企画課広報戦略室発行

本学は、次の者に博士（理学）の学位を授与したので、高知大学学位規則第14条に基づき、その論文の内容の要旨及び論文審査の結果の要旨を公表する。

\*\*\*\*\*  
 \*  
 \*  
 \*  
**高知大学学報**  
 \*  
 \*  
 \*  
 \*\*\*\*\*

本学は、次の者に博士（理学）の学位を授与したので、学位規則（昭和28年文部省令第9号）第8条の規定に基づき、その論文の内容の要旨及び論文審査の結果の要旨を公表する。

## 目 次

学位記番号	氏 名	学位論文の題目	ページ
甲総科博第4号	小澤 隆弘	水蒸気を導入した新しい固相反応プロセスの構築	1
甲総科博第5号	張 伝香	Synthesis and Oxygen Reduction Activity of Ruthenium-Based Catalysts (ルテニウム系触媒の合成と酸素還元活性)	4
甲総科博第6号	林 浩子	準周期タイリングの局所配置に関する研究	6
甲総科博第7号	阪口 昌彦	Optimal threshold probabilities in Markov decision processes (マルコフ決定過程における最適閾値確率に関する研究)	8
甲総科博第8号	八木 潤	The topology of the configuration space of a model for ringed hydrocarbon molecules (環状炭化水素分子の数理モデルの配置空間のトポロジー)	10

ふりがな 氏名(本籍) 学位の種類 学位記番号 学位授与の要件 学位授与年月日 学位論文題目 発表誌名	こざわ たかひろ 小澤 隆弘(富山) 博士(理学) 甲総科博第4号 学位規則第4条第1項該当 平成24年3月23日 水蒸気を導入した新しい固相反応プロセスの構築 (1) <i>Journal of the European Ceramic Society</i> , 29, 3259-3264, 2009 (2) <i>JP Journal of Geometry and Topology</i> , Vol.10, No.1, p29-40, 2010 (3) <i>Journal of Solid State Chemistry</i> , 184, 589-596, 2011 (4) <i>Chemistry Letters</i> , 38, 476-477, 2009 (5) <i>Journal of the Ceramic Society of Japan</i> , 118, 1199-1201, 2010  <div style="text-align: right;">           審査委員 主査 教授 柳澤 和道            副査 教授 北條 正司            副査 教授 石塚 英男            副査 助教 恩田 歩武         </div>
--	---

### 論文の内容の要旨

本学位論文では、水蒸気雰囲気下でのセラミックス粉末の固相合成とその固相反応を促進させる水蒸気作用の解明をおこなうとともに、水蒸気を効果的に利用した応用研究をおこない、従来の固相反応場に1気圧の水蒸気を導入した新しい固相反応プロセスの構築を目指した。本学位論文は全6章で構成されており、まず第1章ではセラミックスの合成プロセスや固相からの粉末合成などを解説した後、本研究を遂行するにあたっての研究背景やこれまでの先行研究などを記述した。その後、以下の2章から5章にかけて本研究で得られた詳細な結果を示して考察をおこない、第6章で本研究を総括した。

#### 第2章 水蒸気雰囲気下でのチタン酸バリウムの固相合成

炭酸バリウム( $\text{BaCO}_3$ )と酸化チタン( $\text{TiO}_2$ )との固相反応によるチタン酸バリウム( $\text{BaTiO}_3$ )の合成を空気中および水蒸気中でおこなった結果、水蒸気が固相反応を大幅に促進させ、 $\text{BaTiO}_3$ が低温、短時間で得られることを明らかにした。また、固相反応を促進させる水蒸気作用として、水蒸気が以下の4つの反応を加速させることを見出した；① $\text{BaCO}_3$ の熱分解、② $\text{Ba(OH)}_2$ の生成と気相輸送、③ $\text{TiO}_2$ 粒子上での表面反応、④ $\text{BaTiO}_3$ 構造内での空孔形成。さらに、焼成 $\text{BaTiO}_3$ の酸素同位体分析から水蒸気による $\text{BaTiO}_3$ の生成促進機構を検証した。

#### 第3章 水蒸気雰囲気下での酸化物の焼結

固相反応を促進させる水蒸気作用の一つである「酸化物粒子表面での水蒸気作用」を系統的に明らかにするため、さまざまな酸化物の焼結を試みた。水蒸気雰囲気下では酸化物の焼結が促進され、低温で密度の高い焼結体が得られた。また焼結体表面の顕微鏡観察から、粒成長が大幅に促進されていることを明らかにした。酸素四面体や酸素八面体などで構成されている酸化物はその酸素多面体が頂点や稜で共有されており、水蒸気は酸素多面体間の結合を切断あるいは再結合を加速させることで粒成長が促進されると考察した。

#### 第4章 水蒸気雰囲気下での亜鉛水酸化塩化物から酸化亜鉛への熱分解

水熱徐冷法で合成した亜鉛水酸化塩化物( $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2 \cdot \text{H}_2\text{O}$ , ZHC)の酸化亜鉛( $\text{ZnO}$ )への熱分解挙動を水蒸気分圧が制御された雰囲気中での熱分析により明らかにした。反応場に水蒸気が存在することで、ZHCの熱分解過程で生成した非晶質塩化亜鉛( $\text{ZnCl}_2$ )の加水分解が促進され、低温で $\text{ZnO}$ が得られることがわかった。一方、乾燥 $\text{N}_2$ 中では $\text{ZnCl}_2$ の蒸発に起因した重量減少がみられた。また、 $\text{ZnO}$ の結晶成長におよぼす水蒸気の影響も調査した。

## **第5章 アスベスト含有廃棄物の熱分解処理への水蒸気利用**

固相反応が水蒸気により促進されることを利用して、有害廃棄物の熱分解処理へ水蒸気導入を応用した。人体に有害なアスベストを含んだセメント廃棄物の熱分解を水蒸気中でおこなったところ、アスベスト熱分解物とセメント成分との固相反応が促進されていることがわかった。また、JIS法で規定されている処理物の無害化判定をおこなった結果、水蒸気処理物は空気中に比べ100℃低い温度で無害化が達成されていることを明らかにした。

## 論文審査の結果の要旨

本論文は6章で構成されており、第1章は序論で、第2章から5章までは研究成果を詳細に記述し、第6章では研究成果を総括している。

第1章では、固相反応に関して概説した上で固相反応プロセスの低温化について議論し、その一つとして固相反応プロセスへの水蒸気の導入を提案している。

第2章「水蒸気雰囲気下でのチタン酸バリウムの固相合成」では、炭酸バリウムと酸化チタンとの固相合成において、水蒸気が反応を加速することを見出し、その効果は(1)  $\text{BaCO}_3$  の熱分解促進、(2)  $\text{Ba(OH)}_2$  の形成と気相輸送、(3)  $\text{TiO}_2$  粒子表面の結合切断、(4) 空孔形成によるイオン拡散促進の以上4つの機構で説明できることを示した。また、水蒸気雰囲気下で合成した生成物には、水蒸気の酸素が多量に取り込まれることを、酸素同位体水を使用した実験から明らかにした。

第3章「複酸化物の固相合成における原料酸化物への水蒸気作用」では、原料となる酸化物（チタニア、ジルコニア、シリカ）への水蒸気的作用について検討し、水蒸気がチタニアの緻密化、粒成長を促進することを見出した。水蒸気は  $\text{SiO}_4$  四面体の再配列を促進させることで非晶質  $\text{SiO}_2$  の結晶化を促進させ、 $\text{Y}_2\text{O}_3$  安定化  $\text{ZrO}_2$  の焼結を抑制した。この結果より、チタン酸塩やケイ酸塩の生成の場合には、第2章で考察した水蒸気による四つの促進効果が期待できるものの、ジルコン酸塩では気相を介した物質移動が生成促進の大きな要因となることを突き止めた。

第4章「水蒸気雰囲気下での亜鉛水酸化塩化物から酸化亜鉛への熱分解」では、水熱徐冷法で合成した六角板状  $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2\cdot\text{H}_2\text{O}$  から  $\text{ZnO}$  への熱分解挙動や  $\text{ZnO}$  の結晶成長におよぼす水蒸気の影響を検討した。X線回折-示差走査熱量同時測定および示差熱重量分析による熱分析により、熱分解が反応場に存在するわずかな水蒸気によっても影響を受けることを見出した。さらに、水蒸気雰囲気下での熱分解では、生成する  $\text{ZnO}$  がもとの  $\text{Zn}_5(\text{OH})_8\text{Cl}_2\cdot\text{H}_2\text{O}$  の *c* 軸配向性を失うことを見出した。

第5章「アスベスト含有廃棄物の熱分解処理への水蒸気導入」では、クリソタイルを含有する廃棄物を熱処理し無害化する工程に、水蒸気の導入を試みた。水蒸気雰囲気下では、クリソタイルの熱分解生成物と共存するセメント成分との固相反応が促進され、空気中よりも  $100^\circ\text{C}$  低温でノンアスベスト化されることを明らかにした。また、熱分解処理物が主にケイ酸塩から構成されたことから、処理物がセメント原料に再利用できることを示した。

第6章「総括」では、第2章から5章までの研究成果を総括し、水蒸気導入が固相反応を低温化させる新たなアプローチであると結論している。また、本研究で取り上げなかった  $\text{WO}_3$ 、 $\text{Al}_2\text{O}_3$ 、 $\text{Nb}_2\text{O}_5$  などの他の酸化物の酸素多面体への水蒸気的作用を究明することにより、さらに多くのさまざまな機能性複酸化物の低温合成に水蒸気導入法が新しい道を拓くことに期待をよせている。

上記の得られた成果は、5編の査読付き論文 (*Chem. Lett.*, *J. Ceram. Soc. Jpn.*, *J. Solid State Chem.*, *J. Eur. Ceram. Soc.* 2編) として既に学術雑誌に公表されている。このように、本研究は、水蒸気を導入した新しい固相反応プロセスの構築について重要な知見を得たものとして、価値ある集積であると認める。よって、学位申請者 小澤 隆弘 は、博士(理学)の学位を得る資格があると認める。



## 論文審査の結果の要旨

本論文は6章で構成されており、第1章「序論」、第2章「ソルボサーマル1段合成法における炭素の役割」、第3章「RuSe<sub>x</sub>/C 触媒の酸素還元特性」、第4章「Se<sub>x</sub>-Ru/C 触媒の酸素還元特性」、第5章「金属ドーブルテニウム系触媒の酸素還元特性」、第6章「結論と今後の課題」からなっている。

第1章では、直接型メタノール燃料電池の原理と正極で起こる酸素還元反応を説明し、これまでに研究が実施されてきた正極触媒材料とその合成方法を紹介している。その中でも、ルテニウム系触媒の可能性を指摘し、ルテニウム系触媒の開発を研究の目的として定めている。

第2章では、ルテニウムアルコキシドとイオウを原料とし、高温高圧のi-プロパノール中で反応させるソルボサーマル反応において、触媒担持体のカーボン、触媒の分散剤としても大きな役割を担うことを見出した。炭素と触媒とを物理的に混合する方法と比較して、反応系内に炭素を添加して合成した触媒が、回転ディスク電極法により測定した酸素還元特性が高い値を有することを示した。

第3章では、第2章で開発したソルボサーマル反応を用い、Ru-Se 系触媒の合成を行なっている。原料としてルテニウムアルコキシドとセレンを用い、Ru : Se モル比、反応温度、アルゴン気流中での焼成温度が、得られた触媒の酸素還元特性に及ぼす影響を系統的に調査した。その結果、原料の Ru : Se モル比を 1:3、反応温度を 150°C、アルゴン気流中での焼成温度を 300°C とすることにより、最も優れた酸素還元特性を有する触媒が合成できることを示した。また、酸素還元特性を評価する際に用いた電解液に取ってメタノールを添加して触媒特性を評価し、Pt 系触媒はメタノール耐性が極めて低いものの、本研究で開発したルテニウム系触媒は高いメタノール耐性を有することを示した。

第4章では、出発原料を塩化ルテニウムと亜セレン酸として触媒の合成を行ない、反応温度 150°C において、Se:Ru モル比が 1 : 0.33 において最も高い酸素還元特性が得られることを見出した。この試料を用いて回転ディスク電極の回転数を変化させ得られた K-L プロットから、4 電荷移動過程で触媒反応が進行していることを立証した。

第5章では、Ru-Se 系触媒に Mo、Fe、Rh あるいは Pt を Ru : M モル比として 1 : 0.1 の比率で添加し、添加物の酸素還元特性におよぼす影響を調べている。第3章で述べたルテニウムアルコキシドを原料とする方法で得られた触媒に対する添加効果は Rh > 無添加 > Mo > Fe の順であり、第4章で述べた塩化ルテニウム原料とする方法で得られた触媒に対する添加効果は Pt > Fe > 無添加 > Mo の順であった。このことから、Rh や Pt の添加が触媒特性を向上させることを見出した。Pt を添加し塩化ルテニウム原料とする方法で得られた触媒は、特に高い酸素還元特性を有していることを示した。

第6章では、得られた成果を総括すると同時に、今後の課題として、異なる条件や方法により触媒を評価してより広範囲な触媒特性を明らかにすること、開発した触媒を実際に燃料電池に組み込むことなどを挙げている。

上記の得られた成果は、Catal. Lett. と CrystEngComm の2編の査読付き英文論文として公表されており、1編が投稿中である。このように、本研究はルテニウム系酸素還元触媒の開発について重要な知見を得たものとして、価値ある集積であると認める。よって、学位申請者 張 伝香 (Chuanxiang Zhang) は、博士 (理学) の学位を得る資格があると認める。

<small>ふりがな</small> 氏名(本籍) 学位の種類 学位記番号 学位授与の要件 学位授与年月日 学位論文題目 発表誌名	<small>はやし ひろこ</small> 林 浩子(岡山) 博士(理学) 甲総科博第6号 学位規則第4条第1項該当 平成24年3月23日 準周期タイリングの局所配置に関する研究 (1) <i>Nihonkai Mathematical Journal</i> , Vol.22, No.1, p49-, 2011 (2) <i>Nihonkai Mathematical Journal</i> , Vol.22, No.2, p59-, 2011  <div style="text-align: right;"> 審査委員 主査 教授 逸見 豊  副査 教授 諸澤 俊介  副査 教授 松岡 達臣  副査 准教授 小松 和志 </div>
---	---

### 論文の内容の要旨

準周期タイリングとは準結晶という物質の数理モデルである。また、その局所配置とは、タイリング内の有限個のタイルの成す配置のことをいう。特に、それらの中で頂点の周りを覆う最小の局所配置を *vertex atlas* と呼ぶ。この論文では、準周期タイリングの局所配置のもつ性質が全体の構造であるタイリングの性質にどのように反映されるかを研究している。調べる対象として *Penrose* タイリングと *Danzer* タイリングを選び、双方を比較する形で議論を行った。*Penrose* タイリングでは5回回転対称性をもつものが存在することが知られており、*Danzer* タイリングでは7回回転対称性をもつものが存在することが知られている。これらの回転対称性をもつ *Penrose*、*Danzer* タイリングは *up-down generation* と呼ばれる構成法と、さらに鏡映変換、回転変換を用いることで構成されるという類似の構成原理をもっている。

しかしながら、次の2つの異なる性質をもつことが証明できた。ひとつは、5回回転対称性をもつ *Penrose* タイリングは *up-down generation* によってのみ構成されたタイリングの列の極限として得られるが、7回回転対称性をもつ *Danzer* タイリングは *up-down generation* によってのみ構成されたタイリングの列の極限として得られることはできないということである。もうひとつは *Penrose* タイリングにおいては *up-down generation* では作られない特異な *vertex atlas* をもつものが存在し得ないが、*Danzer* タイリングでは特異な *vertex atlas* をもつものが存在するというのである。

さらに、特異な *vertex atlas* が存在するならば、どんなに大きな局所配置においてもその周囲のタイルの配置が一意的に定まらないことを示すことができた。このことは *Danzer* タイリングのように特異な *vertex atlas* をもつ準周期タイリングでは十分大きな局所配置でも、全体構造であるタイリングの構造を決定しないということを意味している。

証明においては *up-down generation* により作られる39種類の *vertex atlas* の完全分類と特異な *vertex atlas* の発見およびその性質が大きな役割を果たしている。

## 論文審査の結果の要旨

本論文では、準周期タイリングの局所配置のもつ性質が全体の構造であるタイリングの性質にどのように反映されるかというテーマが扱われている。ここで、準周期タイリングとは準結晶の数理モデルである。また、その局所配置とは、タイリング内の有限個のタイルの成す配置のことをいう。特に、それらの中で頂点の周りを覆う最小の局所配置を *vertex atlas* と呼ぶ。

ここでは、扱う対象として Penrose タイリングと Danzer タイリングを選び、双方を比較する形で議論を行っている。Penrose タイリングでは5回回転対称性をもつものの存在が知られており、Danzer タイリングでは7回回転対称性をもつものの存在が知られている。これらの回転対称性をもつ2つのタイリングは類似の構成原理をもっていることが知られているが、論文提出者は、それらが2つの点で異なる性質をもつことを明確にしている。ひとつは、5回回転対称性をもつ Penrose タイリングは *up-down generation* によってのみ構成されたタイリングの列の極限として得られるが、7回回転対称性をもつ Danzer タイリングは *up-down generation* によってのみ構成されたタイリングの列の極限としては得られないということである。もうひとつは Penrose タイリングにおいては *up-down generation* では作られない特異な *vertex atlas* をもつタイリングを得ることはできないが、Danzer タイリングではそのようなものが存在するということである。

さらに、特異な *vertex atlas* が存在するならば、どんなに大きな局所配置においてもその周囲のタイルの配置が一意的に定まらないということも示されている。このことは Danzer タイリングのように特異な *vertex atlas* をもつ準周期タイリングでは十分大きな局所配置でも、全体構造であるタイリングの構造を決定しないということを意味している。

証明においては *up-down generation* により作られる 39 種類の *vertex atlas* の完全分類と特異な *vertex atlas* の発見およびその性質が大きな役割を果たしている。

以上のように、本論文は準周期タイリングの構造について、これまで知られていない事実を明らかにしており、特に Penrose タイリングと Danzer タイリングの違いを明確にしたものとして価値ある研究であると認める。よって、学位申請者林浩子は、博士（理学）の学位を得る資格があると認める。



415-418 (1967).

3. R.A. Howard, J. Opns. Res. Soc. Japan. 6 169-199 (1963/64).
4. Y. Ohtsubo, K. Toyonaga, J. Math. Anal. Appl. 271 66-81 (2002).
5. Y. Ohtsubo, Appl. Math. Comput. 149 519-532 (2004).
6. D.J. White, J. Optim. Theory Appl. 56 1-29 (1988).
7. C. Wu, Y. Lin, J. Math. Anal. Appl. 231 47-67 (1999).

### 論文審査の結果の要旨

本論文では、Ohtsubo(2004)で研究された目標集合を伴う離散時間マルコフ決定過程における閾値確率基準に対する最小化問題を、連続時間セミマルコフ決定過程に拡張し、期待値評価基準との関係を明確にすることが目的である。現在リスク最小化問題として注目されているこの研究は、White(1993)の研究にはじまり、Wu-Lin(1999)、Ohtsubo-Toyonaga(2002、2004)などによって発展してきたが、離散時間型にとどまっていた。本論文で初めて連続時間型へと拡張され、待ち行列システムなどへの応用範囲を広げている。この新しいモデルは、可算な状態空間とアクション空間において、滞在時間の分布とセミマルコフ核によって、総和利得が閾値以下である確率を最小にする政策を見つけることを目的とするセミマルコフ決定問題を定式化している。このために、このモデル独特の閾値列を導入し、このモデルへ一般化された非線形な作用素を与えている。仮定としては目標集合には確率1で到達する。このとき、最適値のみならず非線形作用素による最適方程式を導き、その方程式の一意な解であることを示している。また、最適値関数が分布関数であることを示し、その関数の値反復法を与え、閾値に関して右連続な最適政策が存在することを示している。さらに、最適政策に収束する政策改良法を提案している。これらの証明において重要なことは非線形作用素に関する不動点定理が成立することである。もう1つの目的はBlackwell(1962、1967)などによって研究された従来の総和利得の期待値との関係を研究している。先に求めた最適な閾値関数が分布関数であることに着目するとそれに関する期待値を定義できる。本論文では、その新しい期待値と従来の期待総利得との関係は確率順序の概念を導入して、新期待値の方が大きいことを示している。この結果は初めて得られた研究でこの分野に新境地を与えている。

なお、本研究は査読付学術誌「Applied Mathematics and Computation」(2010)に筆頭著者として共著で発表されており、その他2編が京都大学数理解析研究所講究録に発表されている。また、国際学会で2回、日本数学会で3回を含め、計7回の口頭発表を行っている。

本研究はマルコフ決定過程において、閾値確率最小化問題に関する研究をしたものであり、その特徴付けについて重要な知見を得たものとして価値ある集積であると認める。よって、学位申請者阪口昌彦は、博士(理学)の学位を得る資格があると認める。

ふりがな 氏名(本籍) 学位の種類 学位記番号 学位授与の要件 学位授与年月日 学位論文題目  発表誌名	やぎ じゅん 八木 潤 (京都) 博士(理学) 甲総科博第8号 学位規則第4条第1項該当 平成24年3月23日 The topology of the configuration space of a model for ringed hydrocarbon molecules (環状炭化水素分子の数理モデルの配置空間のトポロジー) (1) Kochi. J. math., Vol. 7, 89-96, 2012 (2) Kochi. J. math., Vol. 5, 163-172, 2010  <div style="text-align: right;">           審査委員 主査 教授 逸見 豊            副査 教授 福間 慶明            副査 教授 津江 保彦         </div>
--	---

### 論文の内容の要旨

1947年から1972年までに、シクロペンタンなどの飽和5員環では、得られる全ての立体構造の構造データに対して、その結果である二面角データを座標変換しプロットすることでコンピュータの画面上に円周が現れることが知られている。また1975年前後には、シクロヘキサンなどの飽和6員環の立体構造では球面が現れることが分かっているが、7員環以上の構造についてはよく分かっていない。そこで一般にn員環の環状分子の数理モデルを考え、その配置空間のトポロジーを調べることが考えられる。以降では、n員環とはn本のbondで繋がれた閉チェーンであり、配置空間とはそのような閉チェーンの集合に位相を入れたものとして考える。一般に、配置空間はbond angleとbondの長さを決める剛性関数を使って定義される集合で与えられる。このとき、Kamiyaによって、その配置空間が多様体であることとその配置空間を決める剛性関数のgradが一次独立であることが必要十分であることが示されている[1]。従ってその配置空間が多様体であることを示すためには、任意の閉チェーンはその配置空間を決める剛性関数のgradの関係式から出てくるforbidden local configurationsを持たないことを示せばよいことになる。S. GotoとK. Komatsuは環状分子の標準的なbond angleのとき、bond angleが固定されていることを用いて、その配置空間内にはforbidden local configurationsを持つclosed chainがないことを示した。また、その配置空間上の微分可能関数を定義し、その臨界点の数を具体的に求めることで、n=5,6,7の場合の配置空間は(n-4)次元球面に同相であることを示した[2]。これにより、飽和5員環、飽和6員環の配置空間がそれぞれ円周、球面になることが説明される。今回私達はn=5,6,7,8のとき、 $(n-2)\pi/(n-4) < \theta < (n-2)\pi/n$ (n=5,6,7),  $5\pi/7 \leq \theta < 3\pi/4$ (n=8)のbond angle  $\theta$ に対して、その配置空間内の閉チェーンを、ある2つのチェーンに分け、それぞれの距離の最大値と最小値を比較することで、実際にその配置空間内にはforbidden local configurationsを持つ閉チェーンがないことを示した。このとき、臨界点の数を数えることで、n=5,6,7,8のときの配置空間は(n-4)次元球面に同相になることが分かる。特にn=5,6,7のときは上記の結果の拡張になっていることに注意しておく。さらに私達はヤコビ行列のランクを求めることによって、[2]で与えられた可微分関数はモース関数であることを示した。これにより、[2]の条件の下でモース関数の性質を使うことで、その多様体が球面に微分同相であることも分かる。従って、環状分子の標準的なbond angleにおいて、n=5,6,7の場合の配置空間は(n-4)次元球面に微分同相であることが分かった。

[1] H. Kamiya, Weighted trace functions as examples of Morse functions, Jour. Fac. Sci. Shinshu Univ. 7 (1971), 85-96

[2] S. Goto and K. Komatsu, The configuration space of a model for ringed hydrocarbon molecules, Hiroshima Math. J., to appear.

### 論文審査の結果の要旨

本論文で扱っているテーマは、 $n$ -員環の環状分子の数理モデルを構成し、その配置空間の位相を調べることである。これまでに、5員環や6員環については知られた結果がある。すなわち、シクロペンタンなどの飽和5員環に対しては、1947年から1972年までに全ての立体構造の構造データがコンピュータグラフィックスを用いて解析され、それにより配置空間が円周であることが分かった。一方、シクロヘキサンなどの飽和6員環に関しては、1975年前後に2次元球面であることが分かっている。しかしながら、7員環以上の構造についてはよく分かっていない。そこで、一般の $n$ -員環の数理モデルを構成し、その配置空間を調べるのが問題になる。

一般に、 $n$ -員環の数理モデルとして  $n$  本の辺で繋がれた閉チェーンを考え、それらのチェーン全体の集合に自然な位相を入れたものが配置空間である。この配置空間は各辺の間の角度（ボンドアングル）と辺の長さを決める剛性関数を使って定義される集合で与えられるが、その配置空間が多様体になることと、その配置空間を決める剛性関数の grad ベクトルが一次独立であることが同値になることが Kamiya により示されている。そこで、各閉チェーンがその配置空間を決める剛性関数の grad ベクトルの関係式から出てくる局所配置で禁じられたものがないかを調べるのが問題になる。これについては、ボンドアングルが標準的な場合は、配置空間内には禁じられた局所配置をもつチェーンが存在しないことが Goto-Komatsu により示されている。また、同時に配置空間上の微分可能関数を定義し、その臨界点の数を具体的に求めることで、 $n=5,6,7$  の場合の配置空間が $(n-4)$ 次元球面に同相であることも示されている。

今回、論文提出者は  $n=5,6,7,8$  のとき、ボンドアングル  $\theta$  に対し、 $(n-2)\pi/(n-4) < \theta < (n-2)\pi/n$  ( $n=5,6,7$ ) ,  $5\pi/7 \leq \theta < 3\pi/4$  ( $n=8$ ) という条件を設け、その条件下では禁じられた局所配置を持つチェーンが存在しないことを示し、それにより配置空間は $(n-4)$ 次元球面に同相になることを示した。これは  $n=5,6,7$  のときは、すでに知られている結果の拡張になっている。さらに、Goto-Komatsu により与えられた可微分関数のヤコビ行列のランクを求めることによって、その関数はモース関数であることを示し、これにより、Goto-Komatsu の条件の下で、その多様体が球面に微分同相であることも分かり、結果として環状分子のボンドアングルが標準的な場合、 $n=5,6,7$  の場合の配置空間は $(n-4)$ 次元球面に微分同相であることも示している。

以上のように、本論文は  $n$ -員環の環状分子の数理モデルの配置空間の構造について、これまで知られている結果を拡張したものとして価値ある研究であると認める。よって、学位申請者八木潤は、博士（理学）の学位を得る資格があると認める。