

炭化水素分子の幾何学的数理モデルと配置空間

八木 潤

幾何学

数理モデル

配置空間

研究室の所在：専攻科棟2階

・なぜこの研究をしているの？

私の研究テーマは、大雑把に言えば様々な現象の幾何学的数理モデルの構築とその研究です。特に、最近では医薬品などに含まれる（飽和）炭化水素分子の立体構造の数理モデルの配置空間を調べています。立体構造が違えば異なる性質をもつため、配置空間を調べることで幅広い応用ができると考えています。

・具体的に今やっているのはどんなこと？

炭素原子を頂点、共有結合を辺に対応させることで剛性を持つ空間グラフに対応づけられ、それらのなす配置空間のトポロジーを調べています。

一般に頂点（または辺）の数が多くなってくると構造が複雑になってきますが、配置空間上に定義された Morse関数などを用いることで、ある程度大域的な性質を把握することができます。

・研究成果はどのようなモノやコトに役立つの？

（飽和）炭化水素分子は立体構造により化学的な性質が異なることが知られており、立体構造の数理モデルを考えその配置空間を調べることは、その変位を解析することにあたり、薬学など他分野への応用が期待されます。