

豊橋技術科学大学長 殿

平成 17 年 2 月 28 日

審査委員長 阿部 英次



論文審査及び最終試験の結果報告書

このことについて、下記の結果を得ましたので報告いたします。

記

学位申請者	伴 和宏	学籍番号	第 9 3 1 5 1 3 号
申請学位	博士(工学)	専攻名	機能材料工学専攻
論文題目	Basic Investigation on Retention Mechanism in Liquid Chromatography Using Molecular Dynamics Simulation (分子動力学シミュレーションによる液体クロマトグラフィー保持機構の基礎的検討)		
公開審査会の日	平成 17 年 2 月 18 日		
論文審査の期間	平成17年 1 月 26 日 ~ 平成17年 2 月 28 日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	平成 17 年 2 月 18 日	最終試験の結果	合格

論文内容の要旨

本研究では、移動相及び固定相を含む分子モデルに対して、コンピュータシミュレーションの一つである分子動力学 (MD) 法を適用し、液体クロマトグラフィー(LC)における保持機構の解明に重要な役割を果たす固定相の表面状態について、分子レベルでの解析を試みている。

第1章では、本研究の概要ならびに目的について述べている。

第2章では、分子動力学法の LC における分離機構の解明への適用の可能性について検討するため、LC におけるモデル分離場として、仮想的な固定相としてオクタデシルシラン、移動相として水/メタノール混合溶媒、溶質としてプロピルベンゼンを含む簡単な分子モデルを構築し、種々の移動相組成下の MD シミュレーションを行った結果について記述している。



第3章では、固定相にシリカゲル担体にオクタデシルシランを化学結合した ODS を選び、より大規模な分子モデルに MD シミュレーションを適用し、移動相の組成変化が ODS 固定相の表面構造に及ぼす影響について、より詳細な検討を行った結果について記述している。また、第4章では、移動相組成の変化だけでなく温度変化に対しても MD シミュレーションを行った結果、温度変化のリガンド立体構造に及ぼす影響が、ラマン分光法などの実測結果と良好な一致を示すことを見出し、温度の違いが固定相表面の構造に及ぼす影響について、詳細に検討した結果についてまとめている。


最後に、第5章で本研究の結論を述べている。

審査結果の要旨

液体クロマトグラフィー(LC)は、現在さまざまな科学分野で最も一般的に使用されている分離分析技術であるが、その広範な利用にもかかわらず、未だ化合物が何故保持され分離できるかという保持機構の解明はほとんどなされていないのが現状である。LC では、溶質-固定相-移動相間での分配相互作用が、保持を支配すると考えられているが、分離機構の解明には、溶質と固定相、移動相間の分子間相互作用についてのより詳細な理解が必要となる。本論文はこのような現状に鑑み、移動相及び固定相を含む分子モデルに対して、コンピュータシミュレーションの一つである分子動力学(Molecular Dynamics, MD)法を適用し、固定相表面の分子レベルの解析を行なうことによって、LC の保持機構の解明を試みた結果をまとめたものである。まず仮想的な固定相として最も一般的なオクタデシルシリカ、移動相として水/メタノール、溶質としてプロピルベンゼンを選び、簡単な分子モデルを構築した。そして移動相組成を変化させ、MD シミュレーションを行い、固定相表面のアルキルリガンドのコンフォメーション変化の保持への寄与が、実測データと一致することを見出し、この手法の有効性を確認した。ついで、より大きな分子モデルを構築し、温度を変化させて、MD シミュレーションを行い、温度変化とリガンドコンフォメーションとの関係を明確に示すことができた。この結果は分光法などによる散発的な実測結果とよく一致しており、MD 計算法が、LC の保持機構の解明に強力な手法となることを実証した。これらの結果は分離科学分野に計算化学手法を採り入れた数少ない研究成果として世界的に注目されており、本論文は博士(工学)の学位論文に相当するものと判定した。

審査委員

阿部 英次  平田 幸夫  吉田 祥子 印

神野 清勝  印

(注) 論文審査の結果及び最終試験の結果は「合格」又は「不合格」の評語で記入すること。