

平成20年2月25日

豊橋技術科学大学長 殿

審査委員長 栗田典之印

## 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。

学位申請者	仙石康雄	学籍番号	第003165号
申請学位	博士(工学)	専攻名	機能材料工学専攻
論文題目	DNA電荷移動シミュレーション手法の開発と実践		
公開審査会の日	平成20年2月7日		
論文審査の期間	平成20年1月23日～平成20年2月25日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	平成20年2月7日	最終試験の結果	合格
論文内容の要旨	<p>本研究では、ナノデバイスとしての応用を目指し精力的に研究が行われているDNAを研究対象とし、その電気伝導特性を解明する計算手法の開発、及びそれを用いたDNA中の電荷移動機構の解析を4つの章で述べている。</p> <p>はじめに、DNA電荷移動機構の研究に関する現状をまとめ、本研究を行うモチベーションを述べている。第1章では、DNA中に起こるStep wiseな電荷移動機構を電荷平衡法を用いて見積もりの方法を提倡し、先行研究と一致する結果を得られた事を述べている。第2章では、より高精度なシミュレーションを大規模系に適用すべく、Fragment MO法(FMO)の開発を行っている。まず理論の説明が述べられ、続いて本研究で作られたFMOにより、分子の全エネルギー、双極子モーメント、分極率、超分極率の分子物性とその空間勾配が高精度に求められる事が述べられている。第3章では、メゾスコピック系の伝導計算法であるGreen関数法によるLandauer-Buttiker理論についての解説が行われ、加えて本研究で用いられたプログラムを用いた計算例が実験と比較する形で述べられている。最後に第4章でFragment MO(FMO)法に基づき電気伝導度を計算する手法が提案され、本手法が従来の分子軌道法で得られる伝導度を非常に高精度で再現する事が紹介されている。</p>		
審査結果の要旨	<p>DNA中の電荷移動機構の解明は、最近の物理化学及びナノバイオデバイスの研究分野において、重要な研究テーマであり、世界中で多くの研究者が研究を進めており、本研究の研究対象は適切である。</p> <p>電荷平衡法に基づく解析では、DNA中の電荷移動による構造変化とそれに伴う全エネルギーの変化に着目している。多くの理論計算において、このようなDNAの構造変化の影響が重要視されており、本研究のアプローチは適切であると思われる。</p> <p>また、Fragment MO法を導入した手法に関しては、多くの先行研究が半経験的手法を用いている現状において、第一原理MO計算を用いて高精度に電気伝導度を解析できる計算手法を新たに開発した事は、新規性があると高く評価できる。</p> <p>さらに、この手法により実験で用いられているDNA2重鎖の電気伝導度が計算出来たことにより、今後、本手法のような高精度な電気伝導計算手法が多く伝導体の特性評価に適用され、その結果は、DNAをナノデバイスの基本材料として応用する際に、有益な情報となると思われる。</p> <p>このように、本研究では、新規の計算手法の開発、及びナノデバイスの開発に役立つDNAの電気伝導度の解析が行なわれ、その結果が、学術雑誌に3編の原著論文として発表されている。</p> <p>以上により、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。</p>		
審査委員	角田範義	関野秀男	後藤仁志
	栗田典之	印	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。