

豊橋技術科学大学長 殿





平成 27年 11月 30日

審査委員長 関野 秀男



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	松原 正陽	学籍番号	033732
申請学位	博士(工学)	専攻名	機能材料工学専攻
論文題目	計算化学的手法によるNMR- <sup>2</sup> J <sub>CH</sub> を用いたアルドヘキソピラノースの立体配座解析		
公開審査会の日	平成 27年 11月 25日		
論文審査の期間	平成27年1月28日～平成27年11月30日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	平成 27年 11月 30日	最終試験の結果	合格
論文内容の要旨	<p>糖鎖は、核酸、タンパク質に次ぐ第三の生命鎖と呼ばれ、生命活動に重要な役割を担っていることが明らかになりつつあるが、実験解析が極めて困難なことが糖鎖機能を解明する上で大きな障害になっている。特に、多数存在するアルドヘキソピラノースの水酸基が形成する分子内・外の水素結合ネットワークの解析が、その機能解明には最も重要にあると思われるが、現在のところ、NMR法<sup>2</sup>J<sub>CH</sub>結合定数の解析しか観測方法が無いため、計算化学による支援が強く望まれている。</p> <p>本研究では、膨大な計算結果から有益な情報を取り出す方法論として糖配座命名法を開発するとともに、計算コストの高い量子化学計算による<sup>2</sup>J<sub>CH</sub>理論予測に代わる高速<sup>2</sup>J<sub>CH</sub>値予測法を開発した。第1章では本研究の目的と意義、および研究背景、第2章では糖および糖鎖の配座と解析手法について説明している。第3章では本研究の対象となるアルドヘキソピラノースの配座探索と、配座異性体の名称を統一する糖配座命名法の提案を行っている。また、第4章では分子軌道法によるNMR-<sup>2</sup>J<sub>CH</sub>理論予測値に基づく多配座解析、第5章で経験的NMR-<sup>2</sup>J<sub>CH</sub>予測式の導出、第6章ではその予測式を用いて分子動力学シミュレーションによる立体配座解析、第7章では糖配座データベース開発に向けた取り組みを説明している。そして、最終章では本論文の総括を行っている。</p>		
審査結果の要旨	<p>糖および糖鎖の研究は、学術的にも社会的に極めて重要な物質であることは言うまでもないが、実験的にも計算的にもその解析が極めて困難であることも良く知られている。その中で申請者は、多種類のアルドヘキソピラノースに関する計算化学研究の中で、初めて徹底的な配座探索を行い、得られた全ての配座異性体に対して一意に識別できる糖配座命名法を開発するとともに、高精度量子化学計算を適用して<sup>2</sup>J<sub>CH</sub>値の理論予測を行っている。特に糖配座命名法の開発は、今まで研究者独自の配座で報告されていた結果の道筋をつけいる上でたいへん評価できるものである。実際、開発した配座命名法による研究過程で得られた全ての配座異性体をデータベース化して利活用するためのセマンティックウェブのプラットフォームの開発が国際的な共同研究として進んでいる。</p> <p>また、配座検索によって得られた構造を用いた量子化学計算では、溶液中での結果が実験値(<sup>2</sup>J<sub>CH</sub>)と一致する方法を見いだした。この結果に基づいて、水酸基の回転異性に伴う<sup>2</sup>J<sub>CH</sub>理論値から新たな経験式を導き、計算コストの少ない高速<sup>2</sup>J<sub>CH</sub>値予測法を開発し、さらに、分子動力学計算による動的変位構造に対してこの予測法を適用した分子シミュレーションによる高速<sup>2</sup>J<sub>CH</sub>解析法を提案するなど糖鎖化学における計算化学分野の発展に大きく貢献した。以上のことから、本論文は博士(工学)の学位論文に相当すると判断した。</p>		
審査委員	関野 秀男  後藤 仁志 	角田 範義  印	栗田 典之  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。