



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Theoretical Study on Excited-State Molecular Interactions [an abstract of dissertation and a summary of dissertation review]
Author(s)	屋内, 一馬
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(理学)
Dissertation Number	甲第12787号
Issue Date	2017-03-23
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/65432
Rights(URL)	https://creativecommons.org/licenses/by-nc-sa/2.1/jp/
Type	doctoral thesis
File Information	Kazuma_Yanai_review.pdf, 審査の要旨



学 位 論 文 審 査 の 要 旨

博士の専攻分野の名称 博士（理学） 氏名 屋内 一馬

審査担当者	主査	教授	武次 徹也
	副査	教授	武田 定
	副査	教授	長谷川 靖哉
	副査	教授	加藤 昌子
	副査	准教授	中山 哲
	副査	教授	長谷川 淳也

学 位 論 文 題 名

Theoretical Study on Excited-State Molecular Interactions
(励起状態における分子間相互作用に関する理論的研究)

光誘起電荷移動やソルバトクロミズムなどを示す系においては、周辺環境との分子間相互作用が機能の発現に強く影響する例が多く知られている。本論文では、電荷分離状態や電子励起状態における溶媒分子の電子分極がポテンシャルエネルギー面に及ぼす影響について、理論化学的手法を用いて解析した結果について述べている。

第一章は序論であり、研究の背景と意義について述べている。

第二章では、effective fragment potential (EFP) 法により、電荷分離状態に寄与する分極相互作用の生成メカニズムを分子レベルで明らかにした研究について説明している。水中のグアニン-チミン対を研究対象とし、溶媒分子における分極相互作用の起源を局所電場との相互作用の観点で詳細に解析し、電荷分離系の安定化に寄与する溶媒分子の空間的分布を明らかにした。

第三章では、溶媒中における分子の励起エネルギーの計算に関して、溶媒分子との電子的相互作用の寄与を考慮するための計算手法の開発成果について述べている。励起エネルギーを与える交換子を導出し、分子間相互作用を与える励起演算子を求め、二次摂動理論を用いてこれらの寄与を計算するものである。同時に溶媒分子毎に分子間相互作用の寄与を分割し、解析することが可能である。いくつかの小分子系に応用した結果について述べている。

第四章では、第三章で説明した計算手法を、より実地的な系に応用するためのプログラム開発を行い、レチナールタンパク質におけるオプシシフトの解析に利用した成果について述べている。計算に必要な計算機資源を大幅に削減し、並列処理が可能である計算アルゴリズムを開発している。レチナール分子のオプシシフトの解析に応用し、約 1.2 eV もの光吸収エネルギーの変化について、溶媒やアミノ酸残基との量子的な相互作用の寄与を明らかにし、オプシシフトに寄与するアミノ酸残基を特定することができた。

第五章では、結果と考察をまとめ、研究を総括している。

以上のように、本論文では、励起状態における分子間相互作用を明らかにするための理論化学計算手法を新たに提案し、電荷分離状態や電子励起状態における分子間相互作用の効果を明らかにしており、複雑系分子理論の研究に貢献するものであると考えられる。

よって、著者は北海道大学博士（理学）の学位を授与される資格があるものと認める。