HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Analysis of Chemical Reaction Mechanisms based on Mathematical Scientific Approaches : Applications to Organic and Bio-synthetic Reactions
Author(s)	曲, 立豪
Description	この博士論文の全文は利用可能日以降に公開されます。
Degree Grantor	北海道大学
Degree Name	博士(理学)
Dissertation Number	甲第16861号
Issue Date	2026-03-25
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k16861
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/99706
Type	doctoral thesis
File Information	QU_Lihao_review.pdf, 審査の要旨 https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/

Hokkaido University Collection of Scholarly and Academic Papers : HUSCAP

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　曲　立豪

審査担当者

主査	教授	前田 理
副査	教授	武次 徹也
副査	教授	長谷川 淳也
副査	准教授	小林 正人
副査	准教授	佐藤 信一郎

学 位 論 文 題 名

Analysis of Chemical Reaction Mechanisms based on Mathematical Scientific Approaches: Applications to Organic and Bio-synthetic Reactions
（数理科学的アプローチを基盤とした化学反応機構の解析：有機化学・生合成反応への応用）

本論文は、数理科学的アプローチに基づく反応空間投影法を高度化し、同種核置換反転異性体に起因する組合せ最適化問題を克服するために交互最適化（AO）アルゴリズムを導入した ReSPer-AO 法を確立している。これにより、構造間距離評価の精度を維持したまま計算コストを大幅に削減することに成功した。さらに、クライゼン転位反応およびミルチラジエン生合成反応への応用を通して、反応経路ネットワークと ab initio 分子動力学トラジェクトリーを低次元反応空間上に可視化し、動的分岐と生成物選択性の関係を明らかにしている。以上より、本論文は複雑系反応機構の理解に新たな枠組みを与える成果であり、学位授与に値するものと認められる。