



HOKKAIDO UNIVERSITY

Title	Explicit-Solvent Excited-State Ab Initio Molecular Dynamics : Methodological Development and Applications to Cyanine and Stilbene Photodynamics
Author(s)	峯岸, 佑典
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16867号
Issue Date	2026-03-25
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k16867
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/99712
Type	doctoral thesis
File Information	MINEGISHI_Yusuke_review.pdf, 審査の要旨 https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/



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 峯岸 佑典

審査担当者	主査	教授	長谷川 淳也
	副査	教授	武次 徹也
	副査	教授	前田 理
	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

Explicit-Solvent Excited-State Ab Initio Molecular Dynamics: Methodological Development
and Applications to Cyanine and Stilbene Photodynamics
(溶媒を陽に取り入れた励起状態第一原理分子動力学法の開発とシアニンおよびスチルベンの光反応ダイナミクスへの展開)

本論文は、溶媒分子を明示的に取り入れた励起状態第一原理分子動力学（AIMD）法の整備に取り組み、QM/MM 法に基づく溶液内励起状態ダイナミクス計算手法を確立するとともに、シアニン色素および cis-スチルベンの光反応へ応用している。シアニン色素のねじれ光異性化反応について気相および溶液中で比較解析を行い、分光シミュレーションと機械学習解析から N 原子のピラミダル化を含む多次元座標の重要性を明らかにした。さらに、朱-中村理論に基づく非断熱遷移評価法を導入し、cis-スチルベンの溶液内失活および分岐ダイナミクスを解析して、溶媒極性による励起寿命や分光挙動の違いを理論的に再現している。以上より、本論文は溶液中光反応の分子論的理解に貢献する成果であり、学位授与に値するものと認められる。