



Title	Topological Descriptors and Comparative Frameworks of Reaction Route Maps
Author(s)	村山, 武来
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16868号
Issue Date	2026-03-25
DOI	https://doi.org/10.14943/doctoral.k16868
Doc URL	https://hdl.handle.net/2115/99713
Type	doctoral thesis
File Information	MURAYAMA_Burai_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 村山 武来

審査担当者	主査	教授	小松崎 民樹
	副査	教授	武次 徹也
	副査	教授	前田 理
	副査	准教授	佐藤 信一郎
	副査	准教授	小林 正人

学 位 論 文 題 名

Topological Descriptors and Comparative Frameworks of Reaction Route Maps
(反応経路地図のトポロジカル記述子と比較の枠組み)

化学反応の機構は、ポテンシャルエネルギー曲面上の極小点（平衡構造; EQ）と一次鞍点（遷移状態構造; TS）を用いて第一義的には理解される。原子組成が決まった系の EQ と TS 及びそれらの接続情報を集約した反応経路地図（RRM）の構築が、計算性能とプログラムの開発により近年可能となってきたが、多くの場合、活性化エネルギーの低い一部の経路の解析のみが行われており、RRM 全体の形状を横断的に比較するための指標は十分に整備されてこなかった。本学位論文では、RRM を表すグラフ構造に対して、「穴」が変化する様子を定量的に記述するパーシステント・ホモロジー（PH）を適用することで、RRM のトポロジカル記述子を獲得し、これを利用した横断的比較のための枠組みを構築している。

第一章は序論であり、研究背景と意義を述べている。

第二章は研究に用いる RRM や PH に関する理論的背景を述べている。RRM に PH を適用するにあたって、disconnectivity graph や速度定数行列縮約法などの関連手法を用いた解析についても詳述している。

第三章では、具体的に RRM に対して PH を適用する方法について述べている。RRM を構成する EQ と TS のエネルギーを利用し、エネルギー閾値の上昇に伴って RRM の中に含まれる穴がどのように変化するかを PH を利用して定量化する手法を提案している。本手法により、0 次元の PH 解析からは活性化エネルギーの情報が、1 次元の PH 解析からは迂回経路に関する情報が抽出できることを示している。また、金属ナノクラスターや有機分子反応への具体的な適用を行い、化学的な特徴との対応についても議論している。

第四章では、前章の手法を解離反応を含む RRM へと適用している。具体的にはまず、解離フラグメントの RRM の直積を構築し、これを解離前の系の RRM に埋め込むプログラムを開発している。さらに、解離反応を考慮することによる RRM の変化を定量化するために、連結パーシステンス図という手法を利用している。本手法を用いることで、解離による活性化エネルギーの低減などを検出することに成功している。

ここまで利用してきた RRM は、一般に同種核置換反転異性体を区別しない商空間に対して構築されたものである。しかし、商空間上では異なる組成比を持つ系は置換反転異性体の数が異なるため、これらを同じ土俵で比較することはできない。第五章では、商空間上で構築された RRM を、同種核置換反転異性体を区別する形状空間に展開するプログラムを利用し、形状空間上で組成比の異なる金属ナノクラスターの特徴量を比較・評価している。

第六章では、本研究により得られた知見を総括した上で、今後の展望について述べている。

これを要するに、著者は反応経路地図のトポロジカル記述子を得る手法の開発と、この記述子を利用した異なる系の反応経路地図の比較を行う枠組みの開発という野心的研究の遂行に成功しており、化学分野の発展に貢献するところ大なるものがある。

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。