

豊橋技術科学大学長 殿




平成20年 8月25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	小畑 繁昭	学籍番号	第 991032 号
申請学位	博士(工学)	専攻名	機能材料工学
論文題目	分子性結晶構造の解析と予測に向けた計算化学技術の開発		
公開審査会の日	平成 20 年 8 月 4 日		
論文審査の期間	平成20年 7月16日～平成20年 8月21日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	平成 20 年 8 月 4 日	最終試験の結果	合格
論文内容の要旨	<p>本研究では、機能性材料や創薬などのターゲットである有機化合物等の分子性結晶について、その機能発現や品質管理と密接に関わる多形構造とその物性を予測することを目標とし、そのために必要な結晶計算法に関する様々な計算化学技術の開発と評価を行なうとともに、実践的な応用による実証研究を行っている。</p> <p>第1章では、分子性結晶とその多形現象に関して概説し、分子性結晶の多形構造の違いで様々な物性が異なること、このため機能性材料や医薬品などの開発では多形現象を制御して期待した物性を示す結晶を創出する技術が必要であること、ゆえに多形構造とその物性を予測できるシミュレーション技術の重要性について述べている。続いて第2章では、結晶計算法のアルゴリズムの詳細について解説し、第3章では、その並列分散処理アルゴリズムと、並列計算機による大規模計算においても計算精度を維持するための方法について解説している。さらに第4章では、より高精度に結晶構造を予測するために、結晶力場のポテンシャル関数を検討し、第5章において、これを様々な結晶構造に適用し、実験に基づく昇華エネルギーと比較することで評価している。さらに、実践的な研究への応用例として、ここで開発した結晶計算法を合成医薬品として有名なアスピリンの配座多形解析(第6章)と結晶多形間相転移解析(第7章)に適用した結果、実験を再現するとともに興味深い知見を得ている。</p>		
審査結果の要旨	<p>本研究が目標とする分子性結晶の構造予測は、「紙に書いた任意の分子構造から結晶構造を決定する」という80年代から計算化学に期待される最重要課題の一つである。世界中の多くの研究者がこの課題に取り組んでいるが、未だ決定的な手法はない。本研究においてもその目標に到達したとはいえないが、結晶計算法、並列分散処理、結晶力場の改良と評価、実践応用という一連の研究としてまとめられたことは、その目標に向けた大きな進歩として評価できる。また研究内容に関して、結晶計算法のアルゴリズムこそ比較的一般的な手法を採用しているが、大規模並列計算機に適した分散処理技術の高効率化、大規模化に伴う精度低下を防ぐ加算アルゴリズムの検証など、メゾ領域の分子シミュレーションが抱える問題に対する本研究の取り組みは、他の結晶計算法では未だ十分に考慮されておらず、新規性や独自性が認められる。また、これらの取り組みによって直径0.2μmもの大規模結晶計算を実現している点も高く評価できる。さらに機能性材料や医薬品の開発において結晶の多形構造と物性の制御は、物質探索から品質管理、特許戦略などにも関わるため、本研究に対する産業界からの注目は大きく、今後、改良を継続することによりその波及効果はさらに広がるのが期待できる。</p> <p>これらの研究成果は3編の論文として学術雑誌や書籍に発表されている。</p> <p>以上により本論文は博士(工学)の学位論文に相当するものと判定した。</p>		
審査委員	関野秀男 	角田 範義 	後藤 仁志 
	印	印	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。