

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

題目(和文)	振動分光および生体金属分子系の計算を目指したFMO法の開発
Title(English)	Development of Fragment Molecular Orbital Method toward the Application to Vibration Spectra and Inorganic Biochemistry
著者(和文)	中田浩弥
Author(English)	Hiroya Nakata
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第9811号, 授与年月日:2015年3月26日, 学位の種類:課程博士, 審査員:櫻井 実,藤井 正明,小長谷 明彦,田口 英樹,大谷 弘之,中村 振一郎
Citation(English)	Degree:., Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第9811号, Conferred date:2015/3/26, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

(博士課程)

## 論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第	号	学位申請者氏名	中田浩弥		
論文審査 審査員		氏名	職名		氏名	職名
	主査	櫻井実	教授	審査員	大谷弘之	准教授
	審査員	小長谷明彦	教授		中村振一郎	学外審査員
		藤井正明	教授			
		田口英樹	教授			

論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は「Development of Fragment Molecular Orbital Method toward the Application to Vibration Spectra and Inorganic Biochemistry」と題し英文で書かれ、8 章より構成されている。

第 1 章「Introduction」では、本研究の背景、目的及び意義について述べている。

第 2 章「Unrestricted Hartree-Fock based on the fragment molecular orbital method: energy and its analytic gradient」では、FMO 法を開殻系分子に適用する際に必要となるエネルギー勾配の理論式を導出し、汎用分子軌道計算プログラムに実装することに成功している。さらに、開発した方法を有機分子や金属分子などに適用し、その精度と有用性を明らかにしている。

第 3 章「Derivatives of the approximated electrostatic potentials in unrestricted Hartree-Fock based on the fragment molecular orbital method and an application to polymer radicals」では、第 2 章で開発した開殻系のための FMO 法に静電場を点電荷におきかえる近似を導入することに成功している。その結果、計算コストの著しい改善を達成し、数万原子の系に対する FMO 計算が可能になったことを述べている。

第 4 章「Unrestricted density functional theory based on the fragment molecular orbital method for the ground and excited state calculations of large systems」では、第 2 章で開発した方法の計算精度向上を目指して、密度汎関数法への拡張を行っている。また、その新規方法を有機ラジカル分子のソルベトクロミズム・タンパク質分子の吸収スペクトル、および巨大な金属酵素における酸化還元反応の問題に適用し、実験値を再現することに成功している。

第 5 章「Analytic second derivatives of the energy in the fragment molecular orbital method」では、開殻系の FMO 法に対してエネルギー 2 次微分や基準振動解析の理論式を導出し、それらを汎用プログラムへ実装することに成功している。また開発した方法を様々な分子に適用し、その結果を第一原理計算の結果と比較することにより、その精度と有効性を実証している。

第 6 章「Efficient vibrational analysis for unrestricted Hartree-Fock based on the fragment molecular orbital method」では、FMO 法による開殻系の振動解析を可能にする計算法を開発し、酸化還元反応等の電子数変化を伴う複雑な反応に対して自由エネルギーを評価することに成功している。

第 7 章「Simulations of Raman spectra using the fragment molecular orbital method」では、FMO 法によるラマン散乱の理論の導出とプログラムへの実装を行い、数百原子を超えるタンパク質のラマン散乱および各種振動分光スペクトルの全原子量子化学計算の実現に成功している。

第 8 章「Conclusion: The future beyond this thesis」本研究の結論と意義をまとめ、最後に今後の展望について述べている。

これを要するに、本論文は、様々な新規理論式の導出とその実装により、FMO 法の創薬等への応用を飛躍的に広げることに貢献しており、工学上ならびに工業上貢献するところが大きい。よって本論文は博士 (工学) の学位論文として十分価値のあるものと認められる。

注意: 「論文審査の要旨及び審査員」は、東工大リサーチポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。