

学 位 論 文 内 容 の 要 旨

学位申請者	姚 嵐【理学専攻 平成22年度生】	要 旨
論文題目	Theoretical Study on Intermolecular Interactions in Complexes of Cyclodextrins with Bile Acids and Bile Salts	<p>本論文は、シクロデキストリン(CD)と胆汁酸（コール酸 CA、デオキシコール酸 DCA）の1：1包接錯体の構造およびホスト-ゲスト相互作用について、密度汎関数法(DFT)、分子軌道(MO)計算、および分子動力学(MD)計算に基づいた考察をまとめたものである。ホスト-ゲスト間の相互作用エネルギーをフラグメント分子軌道(FMO)法に基づく pair interaction energy decomposition analysis (PIEDA) により解析した。その結果、気相において静電力と分散力がともに大きく、錯体の安定化に寄与すること、一方、水溶液中では、分散力の寄与がより重要になることを示した。本論文は6章から成る。</p> <p>第1章で、対象分子 CD と胆汁酸、およびその 1:1 包接錯体の背景を概観した後、第2章では、本研究の重要性、独創性、及び計算手法について述べた。</p> <p>第3章では、気相におけるホスト分子と包接錯体の構造と結合様式を明らかにした。最も安定な錯体は、open/top1 であった。</p> <p>第4章では、水溶液中での CD/CA 錯体に対する MD シミュレーションの結果を論じている。β-CD/CA 中の CA はフリーの状態より伸びたコンホメーションをとる割合が高いが、γ-CD/CA 中の CA はフリーと違いがなかった。</p> <p>第5章では、FMO 法による相互作用エネルギーの解析結果を論じている。FMO-MP2 レベルでの PIEDA の結果より、気相では静電力と分散力がともに大きく錯体の安定化に寄与すること、水溶液に対するクラスターモデルからは、静電項に比べて分散項がより安定化に寄与することを示した。</p> <p>第6章では、総括が述べられている。CD/CA 錯体の分子間相互作用について、特に水溶液中で分散力が重要であることを結論づけた。</p>
審査委員	(主査) 教授 鷹野景子	
	准教授 森 寛敏	
	教授 益田祐一	
	教授 近藤敏啓	
	准教授 相川京子	