

学位論文審査の要旨

		要 旨
学位申請者	姚 嵐【理学専攻 平成22年度生】	<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。</p> <p>本論文の審査会は4回行われた。</p> <p>第1回審査会（12月25日）では、審査の進め方を審議するとともに、審査委員から、論文の構成、内容、記述の改良すべき点の指摘や助言がなされ、その内容を主査から申請者に伝えることとした。</p> <p>第2回審査会（1月17日）において、申請者より、事前に寄せられた審査員からのコメントに対する書面での回答が各審査員に提出され、また、学位論文の加筆修正部分の案が回覧された。続いて、申請者による英語での口頭発表と口頭試問が行われた。審査委員より、手法、結果、考察に至るまで、広い角度からのコメントや質問が出されたが、申請者の応答は的確であった。</p> <p>審査委員からのコメントや助言を受けて、申請者は論文を改訂し、第3回審査会（2月7日）において、論文改訂版を審査員に提出するとともに、質問への回答を含めて口頭発表（英語）を行い、引き続き質疑応答を行った。申請者の受け答えは良好であり、次回を公開発表会とすることが認められた。</p> <p>公開発表会（2月21日）では、審査委員からの助言を活かした明解な発表（英語）が行われ、質問に対する応答は的確であった。</p> <p>公開発表会後の最終審査会では、それまでの経緯を踏まえて最終判定を行った。提出論文、口頭発表、口頭試問、公開発表における質疑応答などを総合的に判断し、本審査委員会は、本論文が本研究科の学位、博士（理学）、Ph.D. in Chemistry の学位に相応しいものと判定した。</p>
論文題目	Theoretical Study on Intermolecular Interactions in Complexes of Cyclodextrins with Bile Acids and Bile Salts	
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	
インターネット公表	<p>○ 学位論文の全文公表の可否（<input checked="" type="radio"/> 可 ・ 否）</p> <p>○ 「否」の場合の理由</p> <p style="margin-left: 20px;">ア. 当該論文に立体形状による表現を含む</p> <p style="margin-left: 20px;">イ. 著作権や個人情報に係る制約がある</p> <p style="margin-left: 20px;">ウ. 出版刊行されている、もしくは予定されている</p> <p style="margin-left: 20px;">エ. 学術ジャーナルへ掲載されている、もしくは予定されている</p> <p style="margin-left: 20px;">オ. 特許の申請がある、もしくは予定されている</p> <p>※ 本学学位規則第24条第4項に基づく学位論文全文のインターネット公表について</p>	