

## 学位論文審査の要旨

		要 旨
学位申請者	黒木 菜保子 【理学専攻 平成28年度生】	<p>本学位論文の審査は、5名の審査員（森寛敏准教授（主査）・鷹野景子教授（副査）・益田祐一教授（副査）・近藤敏啓教授・由良敬教授）により行なわれ、提出論文の内容および口頭発表に関する質疑応答に基づき行われた。審査された博士論文は、イオン液体の溶液構造・混合溶液の過剰熱力学物性・超臨界流体の輸送物性など、各種機能性液体物性の理論予測に関するものであり、申請者がオリジナルに開発した高速かつ高精度な第一原理分子シミュレーション法：有効フラグメントポテンシャル分子動力学法（EFP-MD）に基づくものである。審査は理論および関連する実験的背景の両観点から総合的に行った。</p> <p>まず、博士論文の内容について、平成 30 年 12 月 19 日に第一回審査委員会を開催した。その結果、研究成果についての口頭試問に進むことができるレベルを満たしていることを審査員全員で確認した。続いて同年 12 月 26 日に、黒木氏本人による提出論文の内容に関する口頭発表を行なった。審査委員から、手法、結果、考察、研究の位置づけ、先行研究の内容、論文の記述の仕方に亘り、広い角度からのコメントや質疑がなされた。その結果、全ての質疑に対し申請者の応答は的確だが、専門的な用語の定義等について、細かな修正を施すべきであるとの判定を行い、審査員からのより詳細な質疑をメールベースで行うことを決定し、平成 31 年 1 月 15 日までに黒木氏から回答を得ることとした。</p> <p>これらを受け、黒木氏より加筆修正された改定原稿の提出が、平成 31 年 1 月 15 日になされた。改定原稿を確認した後、第三回審査委員会を同年 1 月 15 日～2 月 28 日の期間に亘りメール会議の形で開催した。その結果、十分に博士論文の内容が適切に修正されたことを審査委員会全会一致で確認し、3 月 1 日の最終審査会に進ませることを決定した。最終審査会では5名の各審査員から、博士論文の最終稿と口頭発表の内容について質疑応答が行なわれた。その結果、全ての質疑に対して適切な応答が得られ、審査員全員より、申請者の論文が博士論文として学術的価値があり、最終試験結果は合格、博士（理学）(Ph. D. in Chemistry) の学位を得るに相応しい資格を有すると判断された。</p>
論文題目	フラグメント化の手法に基づく分子シミュレーション法を用いた機能性液体の物性研究	
審査委員	(主査) 准教授 森 寛敏	
	教授 鷹野 景子	
	教授 益田 祐一	
	教授 近藤 敏啓	
	教授 由良 敬	
インターネット公表	<p>○ 学位論文の全文公表の可否（ 否 ）</p> <p>○ 「否」の場合の理由</p> <p>ア. 当該論文に立体形状による表現を含む イ. 著作権や個人情報に係る制約がある ウ. 出版刊行されている、もしくは予定されている  <input checked="" type="radio"/> 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 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>	