

平成22年 3月 1日


豊橋技術科学大学長 殿

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	塚本 貴志	学籍番号	第 0 4 3 7 2 0 号
申請学位	博士 (工学)	専攻名	機能材料工学専攻
論文題目	第一原理分子シミュレーションによる DNA及び人工核酸の電気伝導特性の解析		
公開審査会の日	平成 22 年 2 月 4 日		
論文審査の期間	平成22年1月28日～平成22年3月1日	論文審査の結果	合格
最終試験の日	平成 22 年 2 月 4 日	最終試験の結果	合格
論文内容の要旨	<p>本論文では、人工核酸塩基を含む DNA 二重鎖の電気伝導特性に関する理論的解析の結果、及び DNA 二重鎖の電気伝導度を向上させる新規人工核酸塩基の提案について、6つの章で述べている。</p> <p>第1章では、DNA 二重鎖の電気伝導特性に関する実験及び理論研究、及び新規人工核酸塩基の開発について述べている。</p> <p>第2章では、本研究での計算対象であるDNA及び人工核酸と金電極のモデル構造について述べている。</p> <p>第3章では、本研究で用いた古典分子動力学法、密度汎関数法に基づく電子状態計算法、量子輸送理論に基づく電気伝導特性解析手法について述べている。</p> <p>第4章では、本研究で開発した計算手法の概要、及びその計算精度の検証について述べている。</p> <p>第5章では、DNA 二重鎖の電気伝導特性を解析した結果が示され、DNA の塩基配列、DNA 周囲の水和水が電気伝導特性に与える影響について、実験結果を定性的に説明できる結果を述べている。また、人工核酸塩基を含む DNA 二重鎖の電気伝導特性についても示され、DNA 二重鎖の電気伝導度を向上させる新規の人工核酸塩基を提案している。</p> <p>第6章では、上記の研究成果を結論して纏めている。</p>		
審査結果の要旨	<p>DNA 二重鎖中の電気伝導機構には未解明な点が多く、DNA をナノサイズの電子素子として応用する際のボトルネックになっている。</p> <p>本研究では、既存の電気伝導特性解析プログラムに、密度汎関数法に基づく電子状態計算を導入することにより、高精度な電気伝導特性解析を可能にし、DNA の塩基配列、及び DNA 周囲の水和水が電気伝導特性に与える影響を明らかにした。この結果は、従来の実験結果を定性的に説明でき、本研究で開発した手法が、十分な計算精度があることが実証された。</p> <p>また、本研究では、既存の人工核酸塩基が DNA の電気伝導度を向上させる要因を明らかにし、より電気伝導度を向上させる新規の人工核酸塩基を実験に先駆けて提案している。この人工核酸塩基を含んだ DNA 二重鎖は、電気伝導度に優れたナノサイズのワイヤーとして利用できる可能性があり、将来、分子エレクトロニクスの発展に寄与できると考えられる。</p> <p>本論文の内容の一部は、既に、7編の原著論文として、査読付きの国際学術雑誌に発表されている。</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  印	後藤 仁志  印	栗田 典之  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。