

論文審査の結果の要旨

論文提出者氏名 小山洋平

博士論文および論文提出者の質疑応答に対する委員 5 名の全体的な評価は「非常に高い」という評価であった。発表途中での簡単な質問を許可しながらの発表であったので、発表時間が 40 分の予定であったが、60 分に延びた。審査委員は、発表者から事前に研究内容の説明を聞いておらず、内容的にも非常に高度な理解力を要するレベルの高い内容だったので、基礎的な質問を受けながらの発表となったが、発表者の明快な応対とわかりやすい説明により、全員が研究内容に関する理解を深めた。

発表の後の質疑応答も非常に活発であり、全体で予定時間 90 分を大幅に超過する 2 時間を越える面接となった。各審査委員の質問もきわめて建設的で、研究内容の将来的展望を含め、非常に前向きで論文提出者を激励するような質疑応答に終始した。論文内容には、高い新規性があり、これまでの分子座標による共分散行列を用いた主成分分析 (Principal component analysis : PCA) をベースにした分子動力学計算 (MD) の手法の限界を完全にクリアした PEPCA (potential energy principal component analysis) という新しい理論手法の開発とその応用が述べられており、タンパク質の構造やフォールディング過程のシミュレーションのみならず、タンパク質と薬物の相互作用解析など、幅広い応用が期待されるという、この新しい手法の将来性に関して審査委員全員の意見が一致した。

博士論文の書き方に関して、複数の審査委員から要請があった。論文の内容は専門家にはよく分かるが、分野外の研究者が読もうとした場合、かなり理論的に高度な内容なので分かりづらいのではないかというご意見であった。論文自体はわかりやすい英文で書かれており、論旨も明快でコンパクトにまとめられているので、その点では良いと思うが、日本語の要旨を論文の始めにつけることと、もう少し生のデータを付け加えると、内容を検討しながら読めるので理解しやすくなるのではないか、という示唆があった。論文提出者はそのご意見に従って論文の内容を部分的に改定し、審査委員会での 2 週間後に審査委員全員の了承を得た。

全体として、審査会では活発な議論が交わされ、論文提出者はわかりやすく説明し、審査委員全員から「今後の研究の発展に期待する」とのコメントが出されて 2 時間後に終了した。論文提出者にとっても非常に有意義なきわめて前向きな審査会であった。主査としては、今後、PEPCA の理論手法がタンパク質などのより大きな分子に適用され、論文提出者が、次第に限界が見えつつあるタンパク質シミュレーションの分野に革新的な貢献をなすことを願っている。

以上を以って、本審査委員会は博士 (学術) の学位を授与するにふさわしいものと認定する。