

学位論文及び審査結果の要旨

氏 名	早川 大地
学 位 の 種 類	博士(工学)
学 位 記 番 号	工府博甲第444号
学位授与年月日	平成27年3月25日
学位授与の根拠	学位規則（昭和28年4月1日文部省令第9号）第4条第1項及び横浜国立大学学位規則第5条第1項
学 府 ・ 専 攻 名	工学府 機能発現工学 専攻
学 位 論 文 題 目	計算化学を用いたセルロースおよびセルロース誘導体の構造と特性の評価 (Evaluation of the structure and properties of the cellulose and cellulose derivatives by using computational chemistry)
論 文 審 査 委 員	主査 横浜国立大学 教授 上田 一義 横浜国立大学 教授 榊原 和久 横浜国立大学 教授 渡邊 正義 横浜国立大学 准教授 大山 俊幸 横浜国立大学 講師 迫村 勝

論文及び審査結果の要旨

本学位請求論文は、セルロースの工業利用を進めるうえで頻繁に問題となる構造と物性の課題について計算化学を用いて検討した結果を述べたものである。本論文は、以下の六章から構成されている。第一章の「緒言」では、当該分野に関するこれまでの研究背景とその課題を示し、本研究の目的・意義について論じた。第二章の「計算化学の手法についての概説」では本論文全体にわたって使用する分子動力学法と量子化学計算について、その基礎と解析方法について概説した。第三章の「セルロース I β 型および II 型結晶中の水素結合の構造とダイナミクス」では、セルロースの結晶構造について検討した。セルロースはいくつかの結晶多型を有し、セルロースの有効利用のためにはその構造の理解が重要であるが結晶中の水素結合ネットワーク等に不明な点が多い。本章では、その構造と熱的な挙動を計算化学的に明らかにした。第四章の「セルローストリアセテート II 型結晶の溶解メカニズム」ではセルロースの誘導体であるセルローストリアセテート(CTA)のナノサイズのモデルを作成し、DMSO 溶媒中での溶解過程をシミュレーションで観測し、その溶解のメカニズムを明らかにした。第五章の「セルローストリアセテートのアモルファス構造中の分子構造と複屈折の関係」ではセルロースアセテートフィルム中の分子構造と、複屈折の関係を分子動力学シミュレーションにより明らかにした。

以上、本論文は、「計算化学を用いたセルロースおよびセルロース誘導体の構造と特性の評価」と題し、セルロース結晶の構造から、CTA の溶解機構、アモルファス CTA 延伸フィルムの変屈折に至る一連の過程について、計算化学的に明らかにしたものであり、博士（工学）の学位論文として十分に価値があるものと認める。