

論文審査の要旨および学識確認結果

報告番号	甲/乙第 号	氏名	湯原 大輔
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授	博士(工学) 泰岡 顕治
	副査	慶應義塾大学専任講師	Ph. D. 安藤 景太
		慶應義塾大学教授	博士(工学) 大村 亮
		慶應義塾大学教授	理学博士 高野 宏
(論文審査の要旨)			
<p>学士(工学), 修士(工学) 湯原大輔君の学位請求論文は「分子動力学シミュレーションを用いたメタンハイドレートの核生成, 結晶成長, 相平衡の解析」と題し, 6章から構成されている。</p> <p>クラスレート水和物とは, 水分子が水素結合により作るかご状の構造の中に, メタンなどの分子が閉じ込められることで形成される結晶状の固体である。クラスレート水和物は, 新たなエネルギー・環境問題の解決に可能性を秘めた物質であり, 様々な応用が期待されている。本論文ではメタンハイドレートに注目し, 核生成過程, 結晶成長過程, 相平衡状態について分子動力学シミュレーションを用いて解析している。</p> <p>第1章では本論文の背景および目的, 構成を, 第2章では分子動力学シミュレーションの基礎理論を説明している。第3章から第5章に結果を示している。</p> <p>第3章では, 非平衡分子動力学シミュレーションの結果を解析し, 核生成速度と臨界核サイズを求めている。解析には, これまで気相からの液滴核生成等のシミュレーションの解析に用いられてきた mean first-passage time (MFPT) 法及び液相からの気泡核生成等のシミュレーションの解析に用いられてきた survival probability (SP) 法を用いている。両手法から得られた核生成速度は良く一致し, クラスターの自由エネルギーを別に膨大な計算からも求めた先行研究とも良く一致している。一方, MFPT 法により求めた臨界核サイズについては, 先行研究よりも少し大きな値が得られている。これは MFPT 法で使用したモデルに用いられている近似に起因すると考えており, おおよその臨界核サイズを概算するには十分な精度であると結論付けている。本解析により, 分子動力学シミュレーションで得られるデータを直接解析する上記手法が, メタンハイドレートのような複雑な構造の核生成過程の解析に有用であることを示している。</p> <p>第4章では, 水/メタン界面付近でのメタンハイドレートの結晶成長シミュレーションを行い, 成長メカニズムの解析を行っている。メタン分子がハイドレートのケージに取り込まれるとその挙動が制限されることに注目し, 結晶成長過程を解析している。その結果, 結晶成長過程はメタン分子が結晶核上に吸着し, その周りにケージ構造が形成することで結晶成長が進行することを得ている。また, 界面付近の結晶成長速度が他の場所に比べて速いことを明らかにし, 界面に沿う方向へ成長が進行していくという実験的事実に分子論的な解釈を与えている。</p> <p>第5章では, 水/メタン/メタンハイドレート共存系において温度・体積一定 (NVT) シミュレーションを行い, 三相平衡条件を求めている。ハイドレートの崩壊あるいは成長に伴う系内の圧力及びポテンシャルエネルギーの変化を観測し, 285 K~300 K の4種類の温度で平衡圧力を求めることに成功している。本論文で得られた平衡圧力は, 先行研究で温度・圧力一定 (NPT) シミュレーションで求められた結果よりも高い値となっている。この結果の違いは, 本論文では先行研究と比較して長い計算時間, 大きな計算系を用いていること, 界面張力の効果を考慮した圧力計算を行ったことに起因していると考えている。特に, NPT シミュレーションでは界面張力の効果を無視した圧力制御を行っており, 圧力計算方法による影響が大きいと結論付けている。本論文で用いた NVT シミュレーションは, 系内の圧力が計算中に自動的に変化するため, NPT シミュレーションよりも少ない計算量で平衡条件を計算することが可能であり, 界面張力を考慮して計算できることから様々な多相共存系において相平衡条件を求める方法として有用であることを見いだしている。</p> <p>最後に第6章で研究全体に関する結論を述べている。</p> <p>以上要するに, 本論文の著者は, 分子動力学シミュレーションを用いてメタンハイドレートの核生成, 結晶成長, 相平衡について解析を行った。その成果は, クラスレート水和物の基礎的な理解を進めるだけでなく, 工学分野において重要な相平衡, 相変化現象の理解に寄与するところが少なくない。よって, 本論文の著者は博士(工学)の学位を受ける資格があるものと認める。</p>			
学識確認結果	<p>学位請求論文を中心にして関連学術について上記審査委員で試問を行い, 当該学術に関し広く深い学識を有することを確認した。</p> <p>また, 語学(英語)についても十分な学力を有することを確認した。</p>		