

論文審査の要旨および学識確認結果

報告番号	Ⓐ／乙第 号	氏 名	佐藤 碧海
論文審査担当者： 主査 慶應義塾大学准教授 博士(工学) 荒井 規允			
副査 慶應義塾大学教授 Ph. D. 堀田 篤			
慶應義塾大学教授 博士(工学) 斎木 敏治			
慶應義塾大学教授 博士(工学) 泰岡 顕治			
(論文審査の要旨) 佐藤碧海君提出の学位請求論文は「分子シミュレーションを用いたグラフトナノ粒子の自己集合挙動の解明およびその応用に関する研究」と題し、全6章より構成されている。 ナノ粒子は、その自己集合構造の機能性の高さから、多くの化学、光学、医療などの工業製品に使用されている。これらの機能性はナノ粒子の自己集合形態によって変化することが明らかにされており、自己集合構造を制御することで、新たな機能性の発見や安定した製品開発が可能となるため、特に重要である。これまでに自己集合構造を制御する方法として、ナノ粒子の表面特性を変化させるアプローチが用いられており、その中でもナノ粒子表面に機能性ポリマーを付加するグラフトナノ粒子 (GNP) は、多様な自己集合構造の形成因子を有することから注目を集めている。 GNP は、グラフトするポリマーの性質や長さなどのさまざまなパラメータを変更することで構造を変化させることが可能である。しかし、形成因子が多様であるがゆえに、自己集合構造との関係について未解明の部分が多い。 このような課題に対し、本論文では粗視化分子シミュレーション手法を用い、GNP の自己集合挙動を調べ、自己集合構造に影響を与える形成因子の解明とその応用に取り組んでいる。 第1章では、GNP の有用性と現在の応用分野について説明した。その後、自己集合構造が未解明である閉じ込め系に着目し、新たな応用分野としてナノセンサと誘電材料の研究を行うことを示した。 第2章では、散逸粒子動力学法と粗視化分子動力学法について、その歴史と各手法のアルゴリズムを説明した。 第3章では、閉じ込め系における GNP の自己集合構造を調査した。はじめに、ナノ粒子表面にグラフトするポリマーの性質を変更し、閉じ込め径ごとに構造を分類した。また、閉じ込め壁面の性質を変更し、その影響についても明らかにした。軸方向の圧力と、ナノチューブの半径とナノ粒子半径の比に対する定性的な状態図を作成し、通常のナノ粒子の自己集合構造との比較を行った。強い閉じ込め下では、ポリマーや壁面の性質に関係なく一定の構造が形成された。一方で、ナノチューブ径が大きく、粒子配置の自由度が高い場合には、僅かな圧力範囲において二つの特徴距離を有する構造が形成されることを示した。 第4章では、GNP 二量体の粒子間距離とセンシングの標的分子の捕捉精度について調査を行った。GNP のポリマー長さやグラフト密度が増加すると、粒子間距離も増加することを明らかにした。また、センサとして最適な 1 nm 以内の粒子間距離を維持するための条件についても明らかにした。さらに、センシングの標的分子を加えた際の捕捉率と、複数の GNP が存在する系における二量体形成について検討を行い、実験における最適な GNP 構造を提案した。 第5章では、GNP を添加したポリマーナノコンポジット材料における周波数ごとの誘電特性について調査した。GNP を添加することで誘電正接が低下することを確認した。また、誘電正接の低減に影響を持つパラメータを明らかにした。 第6章では、本研究の結論として、研究全体の総括を行った。 以上、本研究は、ポリマーをグラフトしたナノ粒子が持つ機能性材料としての可能性に関する基礎的な知見を提供し、工学分野への貢献も期待される。 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。			
学識確認結果	学位請求論文を中心に、関連する学術分野について審査会委員が試問を行い、当該分野に関して広範かつ深い学識を有することを確認した。さらに、語学 (英語) に関しても十分な学力を有することを確認した。		