

論文審査の要旨および学識確認結果

報告番号	①/乙第 号	氏 名	山口 晃寛
論文審査担当者：	主査	慶應義塾大学教授	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) 泰岡 顕治
		慶應義塾大学教授	博士(工学) 緒明 佑哉
(論文審査の要旨) 山口晃寛君提出の学位請求論文は「全原子分子動力学法を用いた生分解性ポリエステル/熱可塑性デンプン複合材料の強靱化に関する研究」と題し、全7章より構成されている。 近年、プラスチックに起因する環境汚染が深刻な社会問題となり、低環境負荷のバイオマスプラスチックが注目されている。特に植物由来の生分解性ポリエステルは容器包装材など使い捨て用途での適用が進む一方、材料コストの高さが普及の障壁となっている。これに対し、安価な熱可塑性デンプン(TPS)を配合した複合材料が有望視されているが、TPS の添加により材料の耐衝撃性が著しく低下することが多く、社会実装に向けて解決が求められている。TPS 複合材料の衝撃強度は、相分離界面の密着状態やモルフォロジーなど様々な因子が複雑に影響するため、各構成材料の線形複合則が成立せず、その破壊メカニズムや強靱化設計手法には未解明の部分が多い。 このような課題に対し、本論文では全原子分子動力学(MD)法を用いて TPS 複合材料の界面密着状態および破壊メカニズムを解析し、得られた知見を基に設計した材料を実際に作製・評価することで、材料の強靱化に関する分子論的理解を深めるとともに、それに基づく合理的な材料設計手法の確立に取り組んだ。 第1章では、生分解性ポリエステル/TPS 複合材料の特徴や利点を述べ、適用課題である耐衝撃性の改善に有効と考えられる高分子複合材料の各種強靱化手法について説明されている。 第2章では、本研究に用いた MD 法の理論と各種アルゴリズムについて説明されている。 第3章では、複合材料の作製に用いた各種材料成形プロセスについて述べるとともに、成形品の機械特性、熱特性およびモルフォロジー評価方法について説明されている。 第4章では、主要な4種類の生分解性ポリエステルであるポリ乳酸(PLA)、ポリブチレンサクシネート(PBS)、ポリヒドロキシ酪酸(PHB)およびポリブチレンアジペートテレフタレート(PBAT)と、2種類のTPS(未変性TPS:nTPS, クエン酸変性TPS:cTPS)を組み合わせた8種類の界面について、MD法を用いた解析が行われた。その結果、特に高い界面密着性を示す組み合わせとしてPBS/cTPSおよびPBAT/cTPSが抽出され、PBSおよびPBATがデンプンのクエン酸変性部位との間に形成する特定の会合構造が密着性向上に関与することが示されている。 第5章では、PLA/TPSおよびPLA/PBS/TPS複合材料を作製し各種特性が評価されている。その結果、TPS含有率が25-40wt%のPLA/PBS/TPS複合材料ではPLA/PBS複合材料以上の衝撃強度が得られ、TPS添加による材料の強靱化現象が見出されている。また、PLA/PBS/TPS複合材料においては、PLAマトリクス、PBSシェルおよびTPSコアからなるコア-シェル型の相分離構造が形成されることを確認し、PBSとTPSが互いに密着し易い傾向を持つことが実験的に確認されている。 第6章では、コア径とシェル厚さが異なる4種類のMDモデル(PLA/TPS25, PLA/PBS/TPS5, PLA/PBS/TPS25, PLA/PBS/TPS50)を構築し破壊挙動が解析された。その結果、PLA/TPS25およびPLA/PBS/TPS50はTPS相周囲で界面破壊を起こしたが、PLA/PBS/TPS5およびPLA/PBS/TPS25は材料破壊が主モードとなり、高い破壊エネルギーが示された。また、PLA/PBS/TPS5とPLA/PBS/TPS25を比較すると、前者のモデルではPLA相に生じた多量のボイドが結合することで破壊が促進されたが、後者はボイド生成速度が緩やかであり、ボイド生成に伴う変形エネルギー消費により効果的な強靱化が達成された。さらに、各MDモデルに対応する複合材料の衝撃強度を評価した結果、材料組成と衝撃強度の関係は破壊エネルギーの変化傾向と整合し、MD法により明らかとなったこのメカニズムは、実材料の基本的な物理現象を説明できると述べられている。 第7章では、本研究により得られた結果および考察を総括し、結言が述べられている。 以上、本研究は、生分解性ポリエステルとTPSをブレンドした複合材料について、破壊現象の分子論的理解と強靱化設計手法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。		