

平成 26年 7月 7日

論文審査結果の要旨

専攻 入学年度	生物機能応用科学 平成 24 年度 (4 月) 入学	専攻 氏名	宇都 卓也
論文題目	分子鎖シート立体構造の安定性評価に基づいたセルロース結晶多形の構造特性解析		
審査委員 職名及び氏名	主査	准教授 湯井 敏文	
	副査	教授 林 幸男	
	副査	教授 保田 昌秀	
	副査	教授 太田 一良	
	副査	准教授 白上 努	
	副査	准教授 松本 仁	
審査結果の要旨 (800字以内)			
<p>本研究は、セルロース結晶多形の結晶モデルとこれらの結晶構造を構成する分子鎖シートモデルの計算化学研究によって、セルロース結晶多形の結晶構造特性に関する分子論的解析を目的としている。</p> <p>第1章では構造特性解析の方法および研究目的について述べた。第2章ではセルロースⅢ₁型の溶媒和結晶モデルを対象とした分子動力学 (MD) 計算を実施し、実際のセルロースⅢ₁型からIβ型結晶転換において提案された、Ⅲ₁型(1-10)分子鎖シートからIβ型分子鎖シートへの変換過程の再現に成功している。第3章では分子鎖シート単独のモデルを対象とした密度汎関数理論 (DFT) 最適化計算の着想に至り、Iα型とIβ型、Ⅱ型およびⅢ₁型に由来する合計7種類の分子鎖シートモデルのDFT最適化構造を求め、初期構造と比較した。その結果、分子鎖シートモデルは、初期構造の維持、ねじれ変形の発生、またはシート形態の消失と、分子鎖シートによって異なる最適化挙動を与えたことを報告している。第4章では、対応する溶媒和結晶モデルのMD変形挙動との比較から、結晶構造特性に関する体系的な議論を展開している。その過程で、Ⅲ₁型(100)分子鎖シートからセルロースナノチューブ (CeINT) 形成を発見し、6種の CeINTモデルの分子設計と安定性評価へと展開している。</p> <p>以上のように、本論文では、既知のセルロース結晶転移や結晶変形現象を分子鎖シートの安定性から解析し、その分子鎖シートの概念を新規セルロースナノ構造体研究へと展開した。その結果、セルロース多形結晶構造の新たな視点に基づいた分子論的解釈を提案するとともに、セルロースのナノ構造体としての可能性を拡張した。これらの研究成果は、独創性・新規性が高く、内容が適切に論文としてまとめられている。公聴会での発表内容や質疑に対する応答も適切であり、本審査委員会は、論文の審査および最終試験に合格したと判定する。</p>			

(注) 論文題目が外国語の場合は日本語を併記すること。