

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	分子動力学シミュレーションと原子間力顕微鏡によるプラスチック材料のナノ物性解析
Title(English)	
著者(和文)	細谷亮平
Author(English)	Ryohei Hosoya
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第11616号, 授与年月日:2020年9月25日, 学位の種別:課程博士, 審査員:中嶋 健,原 正彦,穴戸 厚,古屋 秀峰,戸木田 雅利,森田 裕史
Citation(English)	Degree:Doctor (Engineering), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第11616号, Conferred date:2020/9/25, Degree Type:Course doctor, Examiner:,,,,,
学位種別(和文)	博士論文
Category(English)	Doctoral Thesis
種別(和文)	審査の要旨
Type(English)	Exam Summary

論文審査の要旨及び審査員

報告番号	甲第		号	学位申請者氏名		細谷 亮平	
		氏名	職名		氏名	職名	
論文審査 審査員	主査	中嶋 健	教授	審査員	戸木田雅利	准教授	
	審査員	原 正彦	教授		森田裕史	(産総研) 研究チーム長	
		穴戸 厚	教授				
		古屋秀峰	准教授				

論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は「分子動力学シミュレーションと原子間力顕微鏡によるプラスチック材料のナノ物性解析」と題し、全7章で構成されている。

第1章「緒論」では、ナノメートルスケールにおける力学物性(ナノ物性)の評価手法としての分子動力学シミュレーション(MD)と原子間力顕微鏡(AFM)の特徴と、両手法を併用した手法について概観している。高密度ポリエチレン(HDPE)とポリスチレン(PS)を評価対象に、物性を決定づける高次構造と荷重負荷に起因する物理的現象を明らかにするという目的のもと、両手法を相補的に応用することの意義について述べている。

第2章「AFM によるナノ物性測定とその解析方法」では、AFM の探針を試料に対して垂直に押し込み、引き離す挙動をもとに、荷重と試料変形量を測定する原理と実際のフォース-試料変形量測定例、ナノ物性を解析するための代表的な理論モデルについて述べている。また、弾性率などのナノ物性を解析するための手段として採用した DMT 接触理論モデルと JKR 接触理論モデル、その理論選択のための手段として使用した Tabor パラメータ及び凝着地図について述べている。

第3章「MD のモデル構造とナノ物性シミュレーション方法」では、MD で使用する分子モデル(ユナイテッドアトムモデル)やポテンシャル、外場、温度制御方法などの基本的なシミュレーション条件のほか、AFM によるナノ物性測定方法を再現するための基本モデルの構成について記述している。ここで決定した探針押し込み深さとユニットセルのサイズをもとにフォース-試料変形量曲線を描いたところ、その曲線は AFM で得られる曲線の特徴を良く捉えたものであった。

第4章「非晶性材料 (PS) のナノ物性解析」では、MD と AFM ともに 23°C におけるフォース-試料変形量曲線とナノ物性を解析している。MD で予測したフォース-試料変形量曲線は探針を押し込む場所が異なっているにもかかわらず、その形状は類似することを示している。しかしその一方で解析した弾性率は測定場所ごとに定量的差異が見られたことから、その差異は局所的な密度の違いに起因する可能性が示唆された。さらに平均値と標準偏差、最頻値は AFM の各測定結果に対して同等のスケールで予測されていることから、モデルの再現性は高いといえる。

第5章「結晶性材料 (PE) のナノ物性解析」では、MD と AFM ともに 23°C におけるフォース-試料変形量曲線とナノ物性を解析している。MD モデルは折り畳み鎖とアモルファス鎖からなる半結晶性構造を再現でき、探針の接触位置がフォース-試料変形量曲線の形状に影響を与えることを述べている。各測定点において解析した弾性率にもまた有意差が見られ、探針接触下における高次構造の違いと荷重負荷による分子挙動の違いに起因することを明らかにしている。また、弾性率の平均値は AFM と同等の値が得られ、モデルとしての有効性を示している。AFM で 2 μm 四方においてナノ物性を評価した結果、フォース-試料変形量曲線は MD と同様の特徴が見られること、測定面の弾性率像に不均一性が見られることなどもまたそれを裏付けている。ここではさらにフォース-試料変形量曲線に見られる特徴を簡便に解析する手段として、判別パラメータを定義している。

第6章「温度依存性解析」では、PS と HDPE について、ナノ物性の温度依存性を評価している。PS に関して、AFM で測定したフォース-試料変形量曲線は高温になるにつれて劇的に変化し、ガラス転移温度 (T_g) を超える温度帯では塑性変形が生じる。一方 MD のフォース-試料変形量曲線は T_g を超える温度帯で劇的に形状が崩れ、押し込み曲線と引き離し曲線がほとんど一致しない。弾性率は T_g に近接した温度帯において弾性率の平均値と標準偏差に特異な変化が生じる。これらガラス-ゴム転移領域における高次構造の変化を AFM と MD の両側面から見た知見を述べている。HDPE については、第5章で MD の結果をもとに定義した判別パラメータを AFM 測定結果に対して適用する解析手法を提案している。判別パラメータはフォース-試料変形量曲線の形状及び MD で予測した分子ダイナミクスを数値化する考えに基づいていることから、このパラメータを指標にしてナノ物性値を解析することにより、実際には観測することのできない探針直下のダイナミクスと実際に測定した物性データを結びつけることができる。その結果、低温域では荷重負荷により結晶粒界の滑りが顕著に表れる一方で結晶構造は保たれていること、今回の場合 64°C を超えると結晶構造が緩和することを明らかにしている。

第7章「結論」では、本論文の内容について総括し、今後の展望について記述している。これを要するに、本論文は高分子の高次構造がナノ物性に与える影響について、MD と AFM を併用した手法により明らかにしている。視覚的かつ定量的な観点から解析することのできる本手法は、他材料に対する有用性も十分に望め、広範な材料について物性と構造の関係解明につながる事が期待されることから、工学上ならびに工業上貢献するところが大きい。よって本論文は博士(工学)の学位論文として十分な価値があるものと認められる。

注意: 「論文審査の要旨及び審査員」は、東工大リサーチリポジトリ(T2R2)にてインターネット公表されますので、公表可能な範囲の内容で作成してください。