

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	
Title(English)	Development of Biomass-based Polyurethanes and their Application as Adhesives
著者(和文)	CHENGYe
Author(English)	Ye Cheng
出典(和文)	学位:博士(学術), 学位授与機関:東京工業大学, 報告番号:甲第12924号, 授与年月日:2024年9月20日, 学位の種別:課程博士, 審査員:道信 剛志,扇澤 敏明,早川 晃鏡,相良 剛光,MANZHOS SERGEI
Citation(English)	Degree:Doctor (Academic), Conferring organization: Tokyo Institute of Technology, Report number:甲第12924号, Conferred date:2024/9/20, 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

(博士課程)

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	CHENG Ye	
論文審査 審査員		氏名	職名	氏名	職名
	主査	道信 剛志	教授	MANZHOS Sergei	准教授
	審査員	扇澤 敏明	教授		
		早川 晃鏡	教授		
	相良 剛光	准教授			

論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は「Development of Biomass-based Polyurethanes and their Application as Adhesives (バイオマス由来ポリウレタンの開発と接着剤としての応用)」と題し、英文で六章から構成されている。

第一章「Introduction (序論)」では、木質バイオマスであるリグニンを概観した後、リグニン由来芳香族分解菌による 2-ピロン-4,6-ジカルボン酸 (PDC) の生成と PDC をモノマーとした重合研究について整理している。さらに、石油由来プラスチックをバイオマス由来に置き換えることの重要性を指摘し、実用化のためには機能性を付与する必要があることを強調している。そのため、本論文では PDC ポリウレタンに焦点を絞り、機械学習の手法を用いて効率よく接着性を向上させる目的が述べられている。

第二章「Materials and General Methods (試料および実験手法)」では、試料の入手先や測定法について記述した後、ビス(ヒドロキシエチル)-2-ピロン-4,6-ジカルボン酸の合成法について記している。

第三章「PDC-based Polyurethanes via ROP of δ -Valerolactone (δ -バレロラク톤の開環重合を介して得た PDC 由来ポリウレタン)」では、ビス(ヒドロキシエチル)-2-ピロン-4,6-ジカルボン酸を開始剤として δ -バレロラク톤を開環重合した後、ジフェニルメタンジイソシアネート (MDI) と重付加し、PDC を含むポリウレタンエラストマーを得ることに成功している。その際、りん酸ジフェニルを触媒として用いると、PDC 部位を分解することなく、 δ -バレロラク톤の開環重合とウレタン形成反応を両方とも活性化できることを見出している。 δ -バレロラク톤を開環重合後、ポリマーを単離することなく、ワンポットでポリウレタンを合成することにも成功している。また、得られた PDC ポリウレタンはアルミニウム板や鉄板に強い接着性を示すことを明らかにしている。

第四章「Accelerated Development of PDC-based Polyurethane Adhesives via Machine Learning (機械学習による PDC 由来ポリウレタン接着剤の開発促進)」では、過去の報告例が限られている PDC ポリウレタン接着剤の開発において、機械学習の手法を用いると効率よく高い接着性を実現できることを証明している。ソフトセグメントとしてのポリオールおよびイソシアネートモノマーの化学構造、イソシアネートとヒドロキシ基の比をパラメータとして 25 種類の PDC ポリウレタンを合成している。タグチメソッドに従い、ホットプレスの温度および時間を各種変えて、PDC ポリウレタンのアルミニウム板への接着強度を測定し、それらを初期データとしている。次に、ベイズ最適化後のデータを回帰モデルにあてはめ、接着強度を予測している。5 つの回帰モデルを試験し、ランダムフォレストが最も精度が高い予測データを与えることを明らかにしている。実際に有望な条件で実験したところ、3 時間のホットプレス条件下で 10.04 MPa の接着強度を得ることに成功している。

第五章「Tailoring Rapid-Adhesion Properties of Polyurethanes Synthesized from PEG, MDI, and Biomass-Derived PDC (PEG, MDI およびバイオマス由来 PDC から合成したポリウレタンの速い接着特性の調整)」では、第四章で得られた結果に基づいて、ビス(ヒドロキシエチル)-2-ピロン-4,6-ジカルボン酸と MDI、ポリエチレングリコールの組合せに絞り、より短いホットプレス時間で高い接着強度を得ることを目指している。ポリエチレングリコールの分子量を最適化することで、ホットプレス時間が 1 時間でも 9.79 MPa の接着強度を達成している。

第六章「Conclusion and Future Prospects (結言および将来展望)」では、本論文を総括すると共に、今後の展望を述べている。

これを要するに、本論文はバイオマス由来成分を用いてポリウレタンを開発し、その接着特性を機械学習によって向上できることを示すものであり、学術上貢献するところが大きい。よって本論文は博士(学術)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。