

論文 / 著書情報  
Article / Book Information

題目(和文)	振動分光法を用いた人工および天然高分子近傍の水分子の水素結合状態の解析
Title(English)	
著者(和文)	千頭俊太
Author(English)	Shunta Chikami
出典(和文)	学位:博士(理学), 学位授与機関:東京科学大学, 報告番号:甲第251号, 授与年月日:2025年3月26日, 学位の種別:課程博士, 審査員:林 智広,柘植 丈治,児島 千恵,田中 祐圭,石田 忠
Citation(English)	Degree:Doctor (Science), Conferring organization: Institute of Science Tokyo, Report number:甲第251号, Conferred date:2025/3/26, 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	千頭 俊太	
論文審査 審査員		氏名	職名	氏名	職名
	主査	林智広	准教授	田中祐圭	准教授
	審査員	柘植丈治	教授		
		児島千恵	教授		
石田忠		准教授			

### 論文審査の要旨 (2000 字程度)

本論文は「振動分光法を用いた人工および天然高分子近傍の水分子の水素結合状態の解析」と題し、日本語で書かれ全5章から構成されている。

第1章「序論」では、高分子近傍の水の挙動と材料機能・特性の関係について説明し、従来の研究手法における水素結合状態の解析における課題について説明している。その後、高分子近傍の水の水素結合状態を解析する意義と本研究の目的を記述している。

第2章「赤外分光法と多変量解析を組み合わせた高分子薄膜の水和構造の解析」では、減衰全反射赤外分光法(ATR-IR)と多変量スペクトル分離(MCR)法を組み合わせた振動分光法を用いて、高分子ブラシ薄膜の水和構造の解析を行った成果について述べている。水溶液中の高分子と固体表面上に固定した高分子ブラシ薄膜の水和構造の違い、さらに非イオン性高分子と双性イオン性高分子の水和構造の相違について議論している。また、膜厚の異なる高分子ブラシ薄膜の近傍水のスペクトルから、高分子の化学構造だけでなく高分子ブラシの密度や膜厚など構造的パラメータも水和構造に影響を及ぼしていることを明らかにしている。

第3章「赤外分光法と多変量解析を組み合わせた人工高分子の水和構造の解析」では、高分子水溶液の異なる濃度における ATR-IR スペクトルから、MCR 法によって高分子近傍の水分子のスペクトルを抽出し、高分子近傍の水の水素結合状態を議論している。また、OH および OD 伸縮振動のエネルギーが水素結合状態によって多様に変化することを述べている。特に従来のピークの帰属の課題であった、対称・非対称伸縮振動を区別していない点、変角振動モードの倍音、フェルミ共鳴の影響を考慮していない点を指摘し、新しいスペクトルの解釈方法に関して述べている。これらの知見を利用し、高分子鎖近傍の水分子の振る舞いを、結合している官能基の特定、その個数という観点から議論している。

第4章「赤外分光法と多変量解析を組み合わせた水合構造解析の天然高分子への応用」では、毛髪表面の近傍水スペクトルについて議論を行っている。ここでは、水の蒸発過程を利用したスペクトルセットの取得方法を開発し、多変量解析により近傍水およびバルク水のスペクトルを分離している。さらに、近傍水の水素結合状態を毛髪表面の分子構造の違いに基づいて議論し、毛髪表面および内部の官能基の周囲の水分子との相互作用を明らかにしている。第3章で考案した OD 伸縮振動領域における水分子の水素結合状態の解釈は、人工高分子だけでなく生体組織を構成する、組成・構造という点で複雑さを有する天然高分子の近傍の水の解析にも応用することができることを示し、様々な生体組織の水を詳細に解析するための方法論に関して述べている。

第5章「総括と今後の展望」では本研究で得られた知見をまとめ、本論文の結論と共に今後の研究の展望を述べている。

以上を要するに本論文は、人工および天然高分子近傍の水分子の挙動を選択的に解析する新しい分光法を開発し、高分子近傍の水分子の振るまいと高分子材料の機能発現のメカニズムに関して議論している。新しい高分子材料の設計のための指針も与えるのみならず、材料近傍の水分子の挙動の解析という基礎研究としての成果として、理学的貢献するところが大きい。よって、本論文は博士(理学)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、東京科学大学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。