

論文 / 著書情報
Article / Book Information

題目(和文)	減衰全反射赤外分光法と多変量スペクトル分解を用いた固液界面の定性・定量的分析
Title(English)	
著者(和文)	前田翔一
Author(English)	Shoichi Maeda
出典(和文)	学位:博士(工学), 学位授与機関:東京科学大学, 報告番号:甲第354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 (Engineering), Conferring organization: Institute of Science Tokyo, Report number:甲第354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

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	前田 翔一	
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「減衰全反射赤外分光法と多変量スペクトル分解を用いた固液界面の定性・定量的分析」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、固液界面における水の挙動と固体材料機能との関係を説明し、代表的な従来の表面・界面分析手法を挙げている。さらに、それらの特徴と測定される物性や構造、そして固液界面の構造に関して、既存手法の課題や制限を述べ、本研究の目的を記述している。

第2章「減衰全反射赤外分光法と多変量スペクトル分解を融合した新しい界面選択的振動分光法の開発」では、距離制御 ATR-IR と多変量スペクトル分解を組み合わせた新しい界面選択的振動分光法について説明している。従来の振動分光法では、固液界面におけるバルク水分子と界面水分子の OH 伸縮振動スペクトルが重なり、界面水分子のシグナルの抽出が不可能であることを述べている。その問題の解決のために、振動分光法と情報科学を融合し、界面領域からの信号を抽出する技術について説明している。具体的には、従来の全反射型赤外分光法である減衰全反射赤外分光(ATR-IR)法において、赤外光プリズムと固液界面との距離を制御する機構を開発し、距離制御をしつつ複数の赤外吸収スペクトルを取得することで、バルク水信号と界面水信号の割合を変化させたスペクトルセットを取得し、そのスペクトルセットに対して多変量スペクトル分解(MCR)を行うことで、バルク水と界面水の OH 伸縮振動スペクトルを分離する方法について述べている。さらに、スペクトル分解で得られたバルクと界面の信号強度比から、界面領域の厚さ(0.5~6 nm)の算出に成功し、固液界面の分子の挙動を、分光学的観点から定性的かつ定量的に分析している。

第3章「各種モデル材料と水の界面構造の解析」では、種々のモデル材料と水の界面を分析した結果について述べている。ポリジメチルシロキサン(PDMS)、および自己組織化単分子膜(SAMs)と水の界面を分析し、従来と同様の結果を得ることで、本手法の界面選択性を確認し、さらに従来の手法では解析ができなかった界面領域の厚さを明らかにしている。石英(Quartz)と水の界面を分析した結果では、Quartz 表面の電荷密度の増加に伴い、界面水の水和構造の変化・界面領域の厚さの増加を確認している。また、ポリスチレン(PS)と水の界面の分析においては、プラズマ処理による PS 表面の改質が、生成した遊離高分子と水の混合、水和水の増加を引き起こすことを説明している。

第4章「圧力制御 ATR-IR と多変量スペクトル分解を融合したハイドロゲルの水和構造の解析」では、多量のバルク水を含むハイドロゲルの水和水を選択的に測定できる圧力制御 ATR-IR 分光法を開発し、その詳細を記述している。この手法を用いて親水性高分子を配合したゲルの水和構造を分析した結果、双性イオン型高分子を配合することで水和水が増加するだけでなく、高分子との相互作用をもたない水和水(=自由水)を多く含むことを明らかにしている。

第5章「総括と今後の展望」では、本博士論文の研究成果を総括するとともに、振動分光法と情報科学を融合した本手法の今後の波及効果について記述している。

以上を要するに本論文は、界面領域を解析する新しい分光法を開発し、界面領域における水分子の振るまいと接着・摩擦などの界面現象の相関について議論し、界面の水に着目した新しい材料設計のアプローチを提案している。これらの知見は、界面における分子の振る舞いの理解という基礎研究としての成果のみならず、材料の設計のための指針も与える事から、工学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。