

論文審査の結果の要旨

申請者氏名 Le Nhu Minh Tue	
論文審査委員	職 氏 名
	主 査 兵庫県立大学 教授 鷺津 仁志
	副 査 兵庫県立大学 教授 畑 豊
	副 査 兵庫県立大学 准教授 安田 修悟
	副 査 兵庫県立大学 准教授 尾嶋 拓
論文審査の結果の要旨	
<p>水の中で特定の機能を有する材料は、水圏機能材料などと呼ばれ近年とくに注目を浴びている。水圏機能材料の代表的なものとして、人工呼吸器で用いられる表面コーティング用高分子がある。この高分子で被覆された表面では、血小板など血液中の成分が表面に吸着しにくいため血栓症を誘発しないという優れた生体適合性を有する。この分子論的な機構として、これまで田中賢らによって提唱された中間水コンセプトがある。高分子の近傍には、高分子と弱い相互作用のみを行う自由水、高分子と強く相互作用し摂氏-100 度でも凍結しない不凍水、その中間的な様態である中間水があり、これらは示差走査熱量計により実験的に観測されたものである。さらに、高分子近傍に中間水の多い材料ほど生体適合性が高いことが様々な材料系で判っており、より詳細な分子論的な理解が、材料設計において重要課題となっていた。</p> <p>本研究では、分子動力学法を用いた高分子水溶液のシミュレーションを行い、高分子周辺の水の構造を明らかにすることを目的に解析を行った。第一章では上記の課題について詳細に歴史的経緯と論点が議論されている。第二章では、環状分子であるα-シクロデキストリンに鎖状高分子のポリエチレングリコールが貫通したロタキサンを金表面に配置した系に対して、高分子周囲の水の分布、水素結合ネットワーク、および四面体秩序因子を分析し、様々な種類の水を分類することに成功した。この結果、SPRING-8 を用いた最新の軟 X 線発光分光実験により観測された水の状態を説明できることがわかった。分子シミュレーションにより実験と対応する分子構造を明らかとしたことは、本研究の重要な結果である。第三章では、生体系高分子であるキトサン水溶液の分子動力学により、先と同様に高分子の水分子の構造を定常状態および外部電場下において解析した。この結果、水分子とヒドロキシル、エーテル、エステルなどの官能基との相互作用により、中間水のような水分子集団が形成されることが判った。電場下においては、室温においても液体から氷様構造への状態変化が観測され、水の四面体秩序因子の変化と関連づけることができた。</p> <p>このように、本研究では大規模分子動力学によって水の構造と動態の一端を明らかにすることができた。分子動力学法は基本的な手法を用いているが、その結果の解析手法については界面科学、水の科学、統計力学を駆使した新規性を有するものである。以上により、本研究は博士（シミュレーション学）の学位に値するものと認める。</p>	