

## 審査結果の要旨

論文題目 「Study on the reactivity of active oxygen species with the composite films of methylene blue/water-soluble polymers using quantum chemical calculation」

(量子化学計算を用いた活性酸素種とメチレンブルー／水溶性ポリマー複合膜との反応性に関する研究)

学位申請者 Temeeprasertkij Pasika

本論文は、活性酸素の中でも最も酸化力の高いヒドロキシルラジカル (OH ラジカル) に特異的に反応する色素インジケータにおいて、活性酸素が色素インジケータとどのような反応により検知しているのかを量子化学計算により明らかにしたものである。本論文で報告されている主な学術的成果は色素インジケータと反応しない活性酸素種であるオゾンと反応する OH ラジカルを用いて反応メカニズムのモデルの構築に成功したことである。

本論文の背景には、これまでの研究では水溶性ポリマーであるプルランやアルギン酸ナトリウムにより塩基性色素であるメチレンブルー (MB) を混合した色素インジケータが、OH ラジカルが多く生成する環境でのみ脱色反応を起こすことを見出していたが、なぜ脱色反応が起こるのかが解明されていなかった。これに対して、本論文の目的は量子化学計算により色素インジケータがなぜ、OH ラジカルが多く生成する環境でのみ脱色反応を起こすかを解明することである。

本論文の構成は以下の通りである。

第1章では、研究背景と本研究で用いた分子軌道理論、計算化学的手法の有効性について述べられており、序論としての確であり、申請者が使用している材料や高分子化学、量子化学について十分な知識と経験を有していると判断できる。

第2章では、OH ラジカルを検出するための MB/プルラン複合薄膜を用いて、分子軌道 (MO) 計算を実施し MB とプルランの相互作用を特定した。構造解析の結果から、プルラン内の官能基と MB 内の原子間の水素結合形成の可能性が示されたことは、学術的な価値が高いと判断される。

第3章では、水溶性高分子としてアルギン酸ナトリウムを用いた場合の相互作用と MB の脱色メカニズムについて述べられている。MB の脱色を引き起こす原子の位置を明らかにしたこと、およびアルギン酸ナトリウムと MB の原子との間の分子間相互作用が OH ラジカル以外の活性酸素 (オゾン) による脱色を抑制することに寄与している可能性を見出したという重要な知見を含んでいる。

第4章では、OH ラジカルと MB および水溶性ポリマー (プルランおよびアルギン酸ナトリウム) の結合エネルギーを計算し、活性酸素の中でも OH ラジカルのみがこれら複合体と反応を起こし MB が脱色されることを証明したことは学術的な意義が大きい。

第5章では、第2章から第4章の内容が簡潔にまとめられており、色素インジケータと活性種との反応メカニズムの解明に本手法が応用できると考えられ、今後のさらなる発展が期待される。

以上の結果、本論文は学位論文として十分な内容を有するものと審査委員全員の一致で判定された。

したがって、学位申請者 Temeeprasertkij Pasika 氏は東海大学博士 (工学) の学位を授与されるに値すると判断した。

論文審査委員

主査	博士（理学）	岩岡 道夫	理学部教授	(総合理工学研究科総合理工学専攻)
委員	博士（工学）	岩森 暁	総合科学技術研究所教授	(総合理工学研究科総合理工学専攻)
委員	博士（工学）	岡村 陽介	マイクロナノ研究開発センター教授	(総合理工学研究科総合理工学専攻)
委員	博士（理学）	富田 恒之	理学部教授	(総合理工学研究科総合理工学専攻)
委員	博士（工学）	高橋 俊	工学部准教授	(総合理工学研究科総合理工学専攻)