

論文内容の要旨

博士論文題目 均質なコポリマーを製造可能な新規フリーラジカル共重合プロセスの確立

Establishment of a novel free radical copolymerization process to produce homogeneous copolymers

氏 名 脇内 新樹

(論文内容の要旨)

本学位論文は、均一なコポリマーを効率的に製造するための新しいフリーラジカル共重合プロセスの確立を目的としており、第 1 章から第 6 章で構成されている。

第 1 章では、工業的共重合反応の現状が総括され、課題として、開発段階と生産段階の環境の違いから反応のスケラビリティを確保することが困難である点が挙げられている。その解決方針として、デジタル制御およびインライン分析による常時監視を実施する、マイクロミキサー・フローリアクター・バッチリアクターの組み合わせとしての装置を提案している。

第 2 章では、従来のバッチリアクターに代わり、マイクロミキサーとフローリアクターを融合した装置における共重合の挙動に関する成果を示している。この装置は、反応場の均一化と連続的な共重合反応を可能にすることで、コポリマーの組成や分子量の一貫した制御を実現する利点を有している。

第 3 章では、共重合プロセスのインライン測定への応用を目指した新規ケモメトリック手法を提案している。具体的には、ウェーブレット変換とエラスティックネットを組み合わせた機械学習モデルを用いており、このモデルは赤外分光スペクトルからモノマー濃度を高精度で予測する能力を持ち、かつ予測結果の説明可能性を備えていることが示されている。

第 4 章では、第 3 章で提案された機械学習モデルの発展として、複数のモノマー濃度を同時に予測する手法と、量子化学計算を用いたモデル挙動の詳細な解析が示されている。前者によってモノマー濃度予測スキームの簡略化の可能性が示され、後者によってモデルがモノマー濃度予測において、ポリマー化で失われる部位に由来するピークを重視していることが明らかにされた。

第 5 章では、独自に開発した新規共重合装置のスケラビリティと並列可能性を実証している。この特徴により、小規模試験から大規模生産へのスムーズな移行が可能であることを示された。さらに、この装置によって、大容量の従来型製造装置に比して、安全性確保が高まる可能性も示されている。

第 6 章では、全体を総括し、将来の展望について論じている。具体的には、ラボラトリーオートメーションへの発展可能性を論じ、これまで重視されてこなかったスケラビリティを確保した全自動生産システムの実現が将来的な目標として提案されている。

論文審査結果の要旨

申請者氏名 脇内 新樹

本学位論文は、均一なコポリマーを効率的に製造するための新しいフリーラジカル共重合プロセスの確立を目的とし、従来の大規模生産プロセスに依存せず、少量で多様なポリマー製造のニーズに応えるための新しい手法を提案するものであり、小規模の装置によって高度に制御された環境における大量合成に関する包括的な方法論を実証している。本論文の主要な結果は以下の通りである。

1. マイクロミキサーとフローリアクターを融合した装置における共重合の挙動に関する成果が示された。MMAおよびStまたはGMAでモノマー仕込み比と共重合体組成比がより近い値を取る実験条件が初めて見出された。これは、共重合理論で一般的に使用される r_1 および r_2 に類似したパラメータが、特にMMA-GMAでは以前の研究の r_1 および r_2 よりも1に近いことによって示された。

2. 共重合プロセスのインライン測定のために、ウェーブレット変換とエラスティックネットを組み合わせた機械学習モデルが提案され、この機械学習モデルが赤外分光スペクトルからモノマー濃度の定量的な予測性能において従来の方法に比べて優れていることが、5通りの二元系共重合溶液のデータセットを用いて示された。この機械学習モデルを発展させることで、複数のモノマー濃度の同時予測が可能であることも実証され、さらには、量子化学計算を用いた解析により、モノマーがポリマー化する際の赤外分光スペクトルの変化を用いて濃度推定を行っていることが明らかにされた。

3. マイクロミキサー、フローリアクター、並列接続されたバッチリアクター、デジタル制御を組み合わせた共重合装置が独自に開発され、反応速度理論を基にした共重合プロセスのデジタル制御が達成された。この独自装置を用いることで1日に1.97キログラムの乾燥ポリマーの安定的な生産が実証され、スケラビリティを有し、並列化可能な世界初の装置が確立した。これらの特徴により、小規模試験から大規模生産へのスムーズな移行が確立されたと結論できる。

本学位論文はフリーラジカル共重合プロセスの理学的な理解、機械学習に基づく新規理論、量子化学計算による原理的検証を用いることで、既存の大量生産・大量消費を背景とした製造とは非連続的な設計思想を確立させ、少量多品種の高品質コポリマーを効率的に生産する能力を有する独自装置として結実させた。これは、現代の高機能ポリマーの需要に応えるための革新的な製造手法と結論できる。以上の結果は工学的意義にとどまらず学術的に大きな意義があり、審査委員一同は本論文が博士(理学)の学位論文として価値のあるものと認めた。