




論文審査結果の要旨

報告番号	甲創第25号	氏名	大塚 裕太
審査委員	主査	小暮健太郎	
	副査	田中香治	
	副査	植野 哲	

学位論文題目

Chemometrics evaluation of phase transformations based on ATR-IR spectra and powder X-ray diffractogram.

(ATR-IR スペクトルと粉末X線回折に基づくケモメトリックスによる相転移評価の研究)

審査結果の要旨

著者は、生体親和性材料や固形医薬品の相転移機構の解明を目的として、全反射減衰赤外分光法 (ATR-IR 法) や粉末 X 線回折法などの分光分析データに多変量解析などの計量化学的手法を応用する研究を行った。生体吸収性セラミックスである自己硬化アパタイトセメントの硬化相転移に関する研究では、ペースト試料の高精度 ATR-IR 測定を行い、試料中に混在する二酸化炭素の濃度が相転移に重要な役割を果たしていることを明らかにした。抗てんかん薬のカルバマゼピン (CBZ) の溶媒介多形転移に関する研究では、高分子医薬品添加物 (セルロース誘導体) が転移速度を低下することを示し、これが同添加物による溶液粘度の上昇と CBZ の表面自由エネルギーの低下によるものと推測した。さらに、メカノケミカル合成したカフェイン-シュウ酸共結晶の粉末 X 線回折データにも多変量解析を適用し、共結晶の生成に対する機械的エネルギーの影響を明らかにした。本研究は、分光分析データを計量化学的手法によって解析することで、従来の手法では取り出せなかった物理化学的情報を抽出し、新たな知見が得られることを明らかにしたもので、本論文は博士論文として適当と認めた。