

2024年3月21日(木)

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : カーボンネガティブに挑戦する革新的触媒

2024年3月21日(木) 9:00 ~ 11:30 会 A1431(14号館 [3階] 1431)

[A1431-4am] カーボンネガティブに挑戦する革新的触媒

座長、シンポジウム関係者：佐山 和弘、砂田 祐輔、笹倉 英史、松下 康一、天尾 豊

日本語 依頼講演

9:10 ~ 9:40

[A1431-4am-01]

二酸化炭素を利用する有機合成反応のための革新的触媒開発

○藤原 哲晶¹ (1. 京都大学)

日本語 依頼講演

9:40 ~ 10:10

[A1431-4am-02]

日本製鉄が取り組むCCU技術開発

○三浦 理華¹ (1. 日本製鉄株式会社)

10:10 ~ 10:20

[4A143101-03-4add]

インキュベーションタイム

日本語 基調講演

10:20 ~ 11:20

[A1431-4am-03]

カーボンニュートラルに向けたトランジション・GXとエネルギー・化学分野の今後

○関根 泰¹ (1. 早稲田大学)

11:20 ~ 11:30

[4A143101-03-6add]

インキュベーションタイム

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : 化学・材料の研究開発から実用化に向けたサイバー・
フィジカルシステムの最前線

2024年3月21日(木) 9:00 ~ 11:40 会場 A1432(14号館 [3階] 1432)

[A1432-4am] 化学・材料の研究開発から実用化に向けたサイバー・フィジカルシステムの最前線

座長、シンポジウム関係者：安藤 康伸、一杉 俊平、古賀 遼、飯野 裕明

日本語 基調講演

9:10 ~ 10:00

[A1432-4am-01]

グローバル戦略としての国内外データ連携と政策展開

○和泉 憲明¹ (1. 経済産業省)

10:00 ~ 10:10

[4A143201-03-3add]

インキュベーションタイム

日本語 依頼講演

10:10 ~ 10:40

[A1432-4am-02]

粉体成膜プロセスインフォマティクスを用いたサイバー・フィジカル探索システム

○長藤 圭介¹ (1. 東京大学)

10:40 ~ 10:50

[4A143201-03-5add]

インキュベーションタイム

日本語 依頼講演

10:50 ~ 11:20

[A1432-4am-03]

マルチスケール光学応答計算と機械学習を用いた銀ナノ粒子分散材料開発の加速

○大澤 耕¹、柏木 恒雄¹、小島 茂¹ (1. コニカミノルタ株式会社)

11:20 ~ 11:40

[4A143201-03-7add]

インキュベーションタイム

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : 持続可能社会を創出する高分子科学の研究前線

2024年3月21日(木) 9:00 ~ 11:40 会場 A1433(14号館 [3階] 1433)

[A1433-4am] 持続可能社会を創出する高分子科学の研究前線

座長、シンポジウム関係者：井狩 芳弘、原 賢二、辻 良太郎、粕谷 健一

◆ 日本語 ◆ 基調講演

9:10 ~ 10:10

[A1433-4am-01]

高性能な海洋生分解性バイオマスプラスチックの開発を目指して

○岩田 忠久¹ (1. 東京大学)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

10:10 ~ 10:40

[A1433-4am-02]

生分解性バイオポリマーの社会実装

○佐藤 俊輔¹ (1. 株式会社カネカ)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

10:40 ~ 11:10

[A1433-4am-03]

ベンゼン環を代替可能なバイオベースビフラン骨格の開発

○橘 熊野¹ (1. 群馬大学)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

11:10 ~ 11:40

[A1433-4am-04]

ラジカル系の動的共有結合化学が拓くサステナブルな架橋高分子材料

○大塚 英幸¹ (1. 東工大)

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : カーボンネガティブに挑戦する革新的触媒

2024年3月21日(木) 13:00 ~ 14:50 会場 A1431(14号館 [3階] 1431)

[A1431-4pm] カーボンネガティブに挑戦する革新的触媒

座長、シンポジウム関係者：佐山 和弘、砂田 祐輔、笹倉 英史、松下 康一、天尾 豊

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

13:00 ~ 13:30

[A1431-4pm-01]

炭素資源循環に資する不均一系有機合成反応

○三浦 大樹¹ (1. 東京都立大学)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

13:30 ~ 14:00

[A1431-4pm-02]

炭素循環社会の実現に向けたCO₂電解技術の開発○北川 良太¹ (1. 株式会社 東芝)

14:00 ~ 14:10

[4A143104-06-3add]

インキュベーションタイム

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

14:10 ~ 14:40

[A1431-4pm-03]

分子集積に立脚した小分子変換材料の創出

○近藤 美欧^{1,2} (1. 東京工業大学、2. JST さきがけ)

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : 化学・材料の研究開発から実用化に向けたサイバー・
フィジカルシステムの最前線

2024年3月21日(木) 13:00 ~ 15:30 会 A1432(14号館 [3階] 1432)

[A1432-4pm] 化学・材料の研究開発から実用化に向けたサイバー・フィジカルシステムの最前線

座長、シンポジウム関係者：安藤 康伸、一杉 俊平、古賀 遼、飯野 裕明

日本語 依頼講演

13:00 ~ 13:30

[A1432-4pm-01]

ポリマーインフォマティクスを基点とした材料イノベーション

○内藤 昌信¹ (1. 物質・材料研究機構)

日本語 依頼講演

13:30 ~ 14:00

[A1432-4pm-02]

触媒インフォマティクスによるメタン酸化触媒開発

○高橋 啓介¹ (1. 北海道大学)

14:00 ~ 14:10

[4A143204-07-3add]

インキュベーションタイム

日本語 依頼講演

14:10 ~ 14:40

[A1432-4pm-03]

エレクトロニクス材料開発におけるシミュレーション

○四橋 聡史¹ (1. パナソニック ホールディングス株式会社)

日本語 依頼講演

14:40 ~ 15:10

[A1432-4pm-04]

パターン認識技術を活用した有機トランジスタ型化学センサ

○南 豪¹ (1. 東大生研)

15:10 ~ 15:30

[4A143204-07-6add]

インキュベーションタイム

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : 持続可能社会を創出する高分子科学の研究前線

2024年3月21日(木) 13:00 ~ 15:40 会場 A1433(14号館 [3階] 1433)

[A1433-4pm] 持続可能社会を創出する高分子科学の研究前線

座長、シンポジウム関係者：井狩 芳弘、原 賢二、辻 良太郎、粕谷 健一

◆ 日本語 ◆ 基調講演

13:00 ~ 14:00

[A1433-4pm-01]

樹脂分解触媒反応の開発とケミカルリサイクルへの展開

○野崎 京子¹ (1. 東京大学)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

14:00 ~ 14:30

[A1433-4pm-02]

スーパーエンジニアリングプラスチックのケミカルリサイクルを拓く解重合法の開発

○南 安規^{1,2} (1. 国立研究開発法人 産業技術総合研究所、2. 筑波大学連携大学院)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

14:30 ~ 15:00

[A1433-4pm-03]

物理劣化・物理再生理論により構築される新たなプラスチック資源循環

○八尾 滋¹ (1. 福岡大学)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

15:00 ~ 15:30

[A1433-4pm-04]

自立分離膜を用いた大気からの直接的CO₂回収○藤川 茂紀¹ (1. 九州大学)

シンポジウム | アジア国際シンポジウム：アジア国際シンポジウムーコロイド・界面化学ディビジョンー

2024年3月21日(木) 9:00 ~ 11:40 会 A1422(14号館 [2階] 1422)

[A1422-4am] アジア国際シンポジウムーコロイド・界面化学ディビジョンー

座長、シンポジウム関係者：小倉 卓、村上 良、藤井 秀司、飯山 拓

◆ 英語 ◆ Keynote Lecture

9:05 ~ 9:40

[A1422-4am-01]

Particle Adhesion on Thin Liquid Layer

○Sanghyuk Wooh¹ (1. Chung-Ang University)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

9:40 ~ 10:00

[A1422-4am-02]

Solution and Foam Properties of Homogeneous Polyoxyethylene-Type Nonionic Surfactants with Multi-Branched Chains

○Shiho Yada¹ (1. Tokyo University of Science)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

10:00 ~ 10:20

[A1422-4am-03]

Lipid Based Artificial Multicellular Systems for Compartmentalized and Stimuli-Responsive Drug Delivery

○Richard James Archer¹, Tsuyoshi Inaba¹, Shin-Ichiro M. Nomura¹ (1. Tohoku University)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

10:25 ~ 10:45

[A1422-4am-04]

Colloidal interaction-mediated wrapping of zeolite crystals with graphene oxide sheets

○大塚 隼人¹、久保 圭¹、金子 克美¹ (1. 信州大学)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

10:45 ~ 11:05

[A1422-4am-05]

The influence of electrostatic and hydrodynamic interactions on gelation of colloidal particles

○Joeri Opdam¹, Michio Tateno¹, Hajime Tanaka^{1,2} (1. Research Center for Advanced Science and Technology, The University of Tokyo, 2. Department of Fundamental Engineering, Institute of Industrial Science, The University of Tokyo)

◆ 英語 ◆ Keynote Lecture

11:05 ~ 11:40

[A1422-4am-06]

Clathrate hydrates: A cool way to store carbon dioxide permanently

○Praveen Linga¹ (1. National University of Singapore)

シンポジウム | アジア国際シンポジウム：アジア国際シンポジウム—光化学ディビジョン—

2024年3月21日(木) 13:00 ~ 15:40 会場 A1422(14号館 [2階] 1422)

[A1422-4pm] アジア国際シンポジウム—光化学ディビジョン—

座長、シンポジウム関係者：阿部 二郎、今吉 亜由美、重光 孟、小林 洋一、森 直、池田 浩、中嶋 琢也、長谷川 真士、堀内 新之介、廣瀬 崇至

◆ 英語 ◆ Keynote Lecture

13:05 ~ 13:40

[A1422-4pm-01]

Coordination Assembly of Photofunctional Lanthanide-Organic Architectures

○Qing-Fu Sun¹ (1. Fujian Institute of Research on the Structure of Matter)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

13:40 ~ 14:00

[A1422-4pm-02]

キラルな多核錯体を用いた円偏光発光材料の開発

○小野 利和¹ (1. 九州大学)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

14:00 ~ 14:20

[A1422-4pm-03]

アザ[n]ヘリセン (n=9-19) の合成とそのキラル光学特性および電気化学特性の系統的研究

○田中 隆行¹、松尾 悠佑¹、権 正行¹、田中 一生¹、関 修平¹ (1. 京都大学)

◆ 英語 ◆ Keynote Lecture

14:20 ~ 14:55

[A1422-4pm-04]

Helical Synthetic Nanographene with Atomic Precision

○Jiaobing Wang¹ (1. Sun Yat-Sen University)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

14:55 ~ 15:15

[A1422-4pm-05]

大きな非対称性因子を示す円偏光発光性分子の振電解析と設計戦略

○石割 文崇^{1,2} (1. 大阪大学大学院、2. JSTさきがけ)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

15:15 ~ 15:35

[A1422-4pm-06]

量子化学計算を用いた無輻射失活過程の解析：光電子移動触媒を用いたラジカル反応への応用

○原 潤 祐^{1,2} (1. WPI-ICReDD、2. JST-ERATO)

シンポジウム | 特別企画：粒子・分子の凝集・分散・集合を用いた機能性システムと利用

2024年3月21日(木) 9:00 ~ 11:40 会場 A1423(14号館 [2階] 1423)

[A1423-4am] 粒子・分子の凝集・分散・集合を用いた機能性システムと利用

座長、シンポジウム関係者：武田 真一、米澤 徹

◆ 日本語

9:05 ~ 9:40

[A1423-4am-01]

光の高効率利用をめざしたプラズモニックナノ粒子の組織化・集合化

○秋山 毅¹ (1. 滋賀県立大学)

◆ 日本語

9:40 ~ 10:20

[A1423-4am-02]

化粧品・皮膚洗浄における乳化と分散

○野々村 美宗¹ (1. 山形大学)

◆ 日本語

10:20 ~ 11:00

[A1423-4am-03]

ベシクル/ディスク構造転移により生成した界面吸着層で安定化された乳化物の物性

○渡辺 啓¹ (1. 武庫川女子大学)

◆ 日本語

11:00 ~ 11:35

[A1423-4am-04]

化粧品エマルションの調製とその評価

○坂 貞徳

シンポジウム | 特別企画：化学における情報・AIの活用

2024年3月21日(木) 13:00 ~ 15:40 会場 A1423(14号館 [2階] 1423)

[A1423-4pm] 化学における情報・AIの活用

座長、シンポジウム関係者：岩澤 伸治、栗原 和枝、寺山 慧、松原 誠二郎、大野 充、榎山 儀恵

◆ 日本語

13:05 ~ 13:30

[A1423-4pm-01]

データ駆動科学の歴史と展望

○船津 公人¹ (1. 奈良先端科学技術大学院大学)

◆ 日本語

13:30 ~ 13:55

[A1423-4pm-02]

データ駆動型材料研究の諸問題：限られたデータの壁を乗り越える

○吉田 亮¹ (1. 統計数理研究所)

◆ 英語

13:55 ~ 14:20

[A1423-4pm-03]

マテリアルズインテグレーション：欲しい性能から材料・プロセスをデザインする

○出村 雅彦¹ (1. NIMS)

◆ 日本語

14:30 ~ 14:45

[A1423-4pm-04]

マテリアル革新力強化戦略に基づく政府の取組について

○宅間 裕子¹ (1. 文部科学省)

◆ 日本語

14:45 ~ 15:05

[A1423-4pm-05]

ロボット実験とAIの連携による蓄電池材料開発の革新

○松田 翔一¹ (1. 物質・材料研究機構)

◆ 日本語

15:05 ~ 15:20

[A1423-4pm-06]

バッチ型自動反応実験装置の活用と化学反応空間の構築

○榎山 儀恵¹ (1. 分子科学研究所・総合研究大学院大学)

◆ 日本語

15:20 ~ 15:35

[A1423-4pm-07]

機械学習に基づく繊維状ウイルスの合目的配列制御と機能物性創出

○澤田 敏樹¹ (1. 東京工業大学)

シンポジウム | 特別企画：機器分析が拓く次世代の医療技術

2024年3月21日(木) 13:00 ~ 15:40 会場 A1424(14号館 [2階] 1424)

[A1424-4pm] 機器分析が拓く次世代の医療技術

座長、シンポジウム関係者：岡田 友記、松村 有里子、大倉 一郎、大塚 諭、谷 浩行、中村 浩之

◆ 日本語

13:10 ~ 13:40

[A1424-4pm-01]

リポミクスを応用したアレルギー性疾患の病態解明と診断・治療への応用

○村田 幸久¹ (1. 東京大学)

◆ 日本語

13:40 ~ 14:10

[A1424-4pm-02]

分析データの集積と共有による医療課題の解決：新型コロナからの教訓

○末松 誠¹ (1. (公財) 実中研)

◆ 日本語

14:10 ~ 14:40

[A1424-4pm-03]

再生医療、次世代治療薬開発に向けた、分析計測、自動化、AI技術の活用

○江連 徹¹ (1. 株式会社 島津製作所)

◆ 日本語

14:40 ~ 15:10

[A1424-4pm-04]

ヘルスケアに向けての島津製作所の取り組み

○中島 宏樹¹ (1. 株式会社 島津製作所)

◆ 日本語

15:10 ~ 15:40

[A1424-4pm-05]

質量分析によるアルツハイマー病血漿解析

○小田 吉哉¹ (1. 東京大学大学院医学系研究科)

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : カーボンネガティブに挑戦する革新的触媒

2024年3月21日(木) 9:00 ~ 11:30 会場 A1431(14号館 [3階] 1431)

[A1431-4am] カーボンネガティブに挑戦する革新的触媒

座長、シンポジウム関係者：佐山 和弘、砂田 祐輔、笹倉 英史、松下 康一、天尾 豊

2020年10月に「2050年カーボンニュートラル」宣言を契機として、2030年度までの温室効果ガス削減目標を2013年度比で46%削減することとし、将来的には80%削減に向けて新たな方針も示されております。これらの目標達成のためには、人工光合成を含む再生可能エネルギーを用いた水素製造や二酸化炭素利用に加えて、二酸化炭素フリー水素製造技術、二酸化炭素の水素化や二酸化炭素の有価物への触媒の変換技術を急速に発展・成熟させ、二酸化炭素排出実質ゼロを超えるマイナスに転じるカーボンネガティブ技術が必要です。本セッションでは、これらの研究について世界をリードする研究者に紹介いただきます。カーボンニュートラルは本当に達成できるか、それをを超えるカーボンネガティブ実現に向け、どんな挑戦が必要か、活発な議論の場の提供を考えております。

聴講後の[アンケート](#)へのご協力をお願いいたします。

9:00 ~ 9:10

開会挨拶

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

9:10 ~ 9:40

[A1431-4am-01]

二酸化炭素を利用する有機合成反応のための革新的触媒開発

○藤原 哲晶¹ (1. 京都大学)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

9:40 ~ 10:10

[A1431-4am-02]

日本製鉄が取り組むCCU技術開発

○三浦 理華¹ (1. 日本製鉄株式会社)

10:10 ~ 10:20

[4A143101-03-4add]

インキュベーションタイム

◆ 日本語 ◆ 基調講演

10:20 ~ 11:20

[A1431-4am-03]

カーボンニュートラルに向けたトランジション・GXとエネルギー・化学分野の今後

○関根 泰¹ (1. 早稲田大学)

11:20 ~ 11:30

[4A143101-03-6add]

インキュベーションタイム

二酸化炭素を利用する有機合成反応のための革新的触媒開発

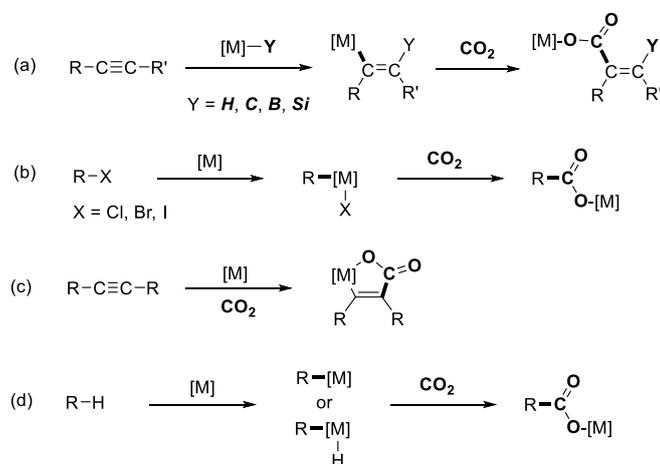
(京大院工) ○藤原 哲晶

Development of innovative catalysts for organic synthetic reactions using carbon dioxide
(Graduate School of Engineering, Kyoto University) Tetsuaki Fujihara

The chemical transformation of carbon dioxide (CO₂) into useful carbon resources is an important research issue. The development of new organic reactions using CO₂ as a C1 source is an attractive research subject from the viewpoint of effective utilization of CO₂ as well as the development of new organic reactions.¹ Herein, the author will review the recent progress and future prospects of organic reactions using CO₂ catalyzed by transition metal complexes.

Keywords : Carbon Dioxide; Transition Metal Complexes; Homogeneous Catalysts

二酸化炭素 (CO₂) を有機資源へと再生する物質変換法の開発は、CO₂ の排出削減や隔離技術の開発と並び、エネルギー問題の解決ならびに地球環境保全の観点からも重要な研究課題である。均一系の遷移金属錯体触媒を活用して CO₂ 固定化を実現する反応開発は、CO₂ 有効活用の観点からも新しい有機合成反応開発の観点からも注目を集めてきた¹⁾。均一系触媒の最大の特徴は、様々な有機基質の精密カルボキシル化反応が可能な点にある。この遷移金属 (M) を触媒とする CO₂ の利用では、M-C 結合をもつ求核的な化学種の触媒的な生成が鍵となる (Scheme 1)。



Scheme 1. Organometallic elementary steps for carboxylation reactions: (a) addition reaction, (b) oxidative addition, (c) oxidative cyclization, and (d) C-H activation

本講演では、均一系金属錯体触媒を活用する触媒的カルボキシル化反応において、これまでに達成された代表的な反応例を、我々の成果も踏まえながら紹介する。

1) (a) T. Fujihara, "Carboxylation with Carbon Dioxide as a C1 Source via Carbon-Carbon Bond Forming Reactions" in *The Chemical Transformations of C1 Compounds*, X.-F. Wu, B. Han, K. Ding, Z. Liu, Eds., Wiley-VCH, Weinheim, **2022**, p 909.

日本製鉄が取り組む CCU 技術開発

(日本製鉄株式会社¹) 三浦 理華¹

Development of CCU technologies by NIPPON STEEL CORPORATION (¹NIPPON STEEL CORPORATION)○Ayaka Miura¹

NIPPON STEEL CORPORATION is taking on the challenge to realize of achieving carbon neutrality by 2050 as the most important management task. While developing technologies for carbon neutral ironmaking processes, we are also developing CCUS technologies to further reduce CO₂ emissions. In this presentation, we will present an overview of our CCU technology development activities.

Keywords : Carbon dioxide, Catalyst, CCU

鉄は他素材に比べ、製造時の単位鉄重量あたりの CO₂ 発生が少なく、リサイクル性にも優れ、ライフサイクルアセスメントの視点でも環境負荷が低い。一方で、鉄は他素材に比べ、用途が幅広く、大量に使用されるため、必然的に製造量が多くなることから、鉄鋼業からの CO₂ 発生量が多いことが課題である。

日本製鉄では、気候変動問題への取り組みを経営の最重要課題と位置付け、当社独自の取り組みとして「日本製鉄カーボンニュートラルビジョン 2050」を掲げ、2050 年カーボンニュートラルの実現にチャレンジしている。大型電炉での高級鋼の量産製造や水素還元製鉄などの開発に鋭意取り組んでいるが、熱源の確保などを目的に引き続き石炭の使用が必要なため、CCUS 等によるカーボンオフセット対策も含めた複線的なアプローチを進めている (図 1)。当社が取り組む CCUS 取り組み全体像を図 2 に示す。CCUS 技術の開発として、当社では、①CO₂ 分離回収技術、②H₂ 製造技術、③CCU 技術の開発に取り組んでおり、特に CCU 技術においては、CO₂ 削減の期待が大きい種々の化成品や燃料合成に国プロにて取り組んでいる。

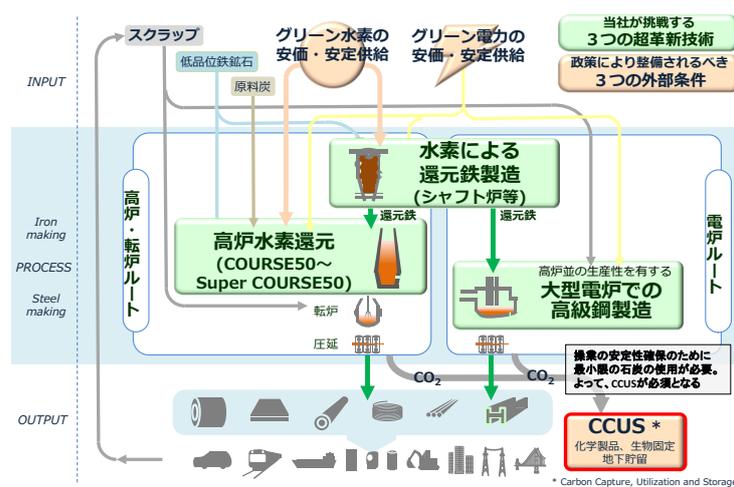


図 1 日本製鉄が目指すカーボンニュートラル生産プロセス

当社は CCU 技術の一つとして、CO₂ からのメタノール及びパラキシレン合成プロセスの開発に取り組んでいる。メタノールは化成品の基幹物質や燃料となり、パラキシレンは PET 樹脂の原料ともなる有用化成品である。現状、天然ガスやナフサの改質から合成しているが、CO₂ から合成することができれば、大幅な CO₂ 削減が期待できる。2020 年度から NEDO/カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発/CO₂ 排出削減・有効利用実用化技術開発/化学品への CO₂ 利用技術開発事業にて「CO₂ を原料としたパラキシレン製造に関する技術開発」のテーマに参画し、富山大学、三菱商事、千代田化工建設、ハイケム、日鉄エンジニアリングとの 6 社共同開発を実行している。

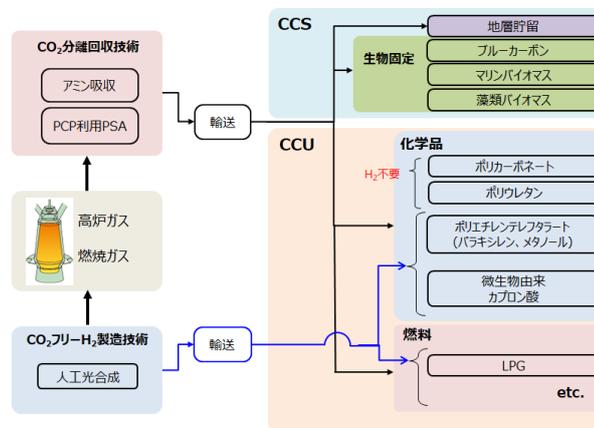


図 2 日本製鉄における CCUS 取り組み全体像

「CO₂ を原料としたパラキシレン製造に関する技術開発」のテーマに参画し、富山大学、三菱商事、千代田化工建設、ハイケム、日鉄エンジニアリングとの 6 社共同開発を実行している。

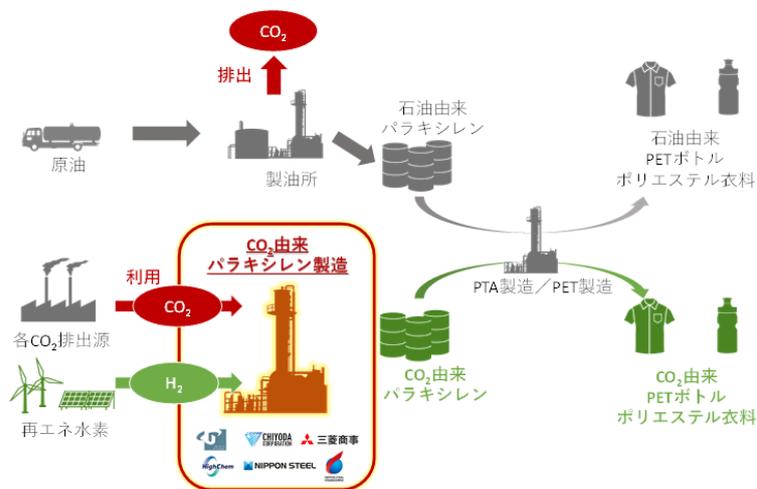


図 3 CO₂ からのパラキシレン合成における体制

本講演では、上記の他、日本製鉄におけるカーボンニュートラルに向けた全体概要、化学品原料の製造を目的とした CCU に関わる触媒研究開発の取り組みについて紹介する。

【謝辞】パラキシレン合成について、本研究は、新エネルギー・産業技術総合開発機構の委託事業「カーボンリサイクル・次世代火力発電等技術開発/CO₂ 排出削減・有効利用実用化技術開発/化学品への CO₂ 利用技術開発」の中で行った。関係諸氏に感謝の意を表す。

カーボンニュートラルに向けたトランジション・GX と エネルギー・化学分野の今後

(早大理工) ○関根 泰

Transition and green transformation towards carbon neutrality and future of the energy and chemical sectors

(Waseda University) ○Yasushi Sekine

With global carbon dioxide concentrations exceeding 420 ppm, what to do about global warming has become a pressing issue. At the G7 Climate, Energy, and Environment Ministerial Meeting held in Sapporo in 2023, the urgency of climate change countermeasures was emphasized. An international framework to become carbon neutral by 2050 was discussed, and efforts to reduce plastic pollution to zero by 2040 based on the Osaka Blue Ocean Vision were also agreed upon. Concerned about climate change, the G7 called for a 43% reduction in CO₂ emissions by 2030 and a 60% reduction by 2035, and urged cooperation in economic transformation. This would facilitate the transition from petrochemistry to catalytic chemistry in the renewable energy era. Hydrogen, ammonia, and carbon dioxide recycling were emphasized, and the elimination of inefficient fossil fuel subsidies by 2025 was also confirmed.

In Japan, a 2 trillion-yen Green Innovation Fund and a 20 trillion-yen GX policy are underway, and a shift away from petroleum-based chemical synthesis is underway. Domestic chemical manufacturers have also announced their intention to move away from upstream processes and are focusing on high-value-added products to improve ROIC. In this context, we would like to summarize the direction that chemistry should take in the Transition GX toward carbon neutrality.

Keywords : Carbon neutral; Chemical reaction; Green innovation; Green transformation

世界の二酸化炭素濃度が 420ppm を超え、温暖化をどうするかは喫緊の改題となっている。2023 年に札幌で開催された G7 気候・エネルギー・環境大臣会合では、気候変動対策の緊急性が強調された。2050 年のカーボンニュートラルへの国際的な枠組みが議論され、大阪ブルー・オーシャン・ビジョンに基づき 2040 年までにプラスチック汚染をゼロにする取り組みも合意された。気候変動への懸念から、G7 は 2030 年までに CO₂ 排出を 43%、2035 年までに 60%削減するよう要請し、経済変革への協働を求めた。これは石油化学から再エネ時代の触媒化学への移行を促進するものである。議論では、水素・アンモニアや二酸化炭素の再資源化が重要視され、2025 年までの非効率な化石燃料補助金の廃止も確認された。我が国では、グリーンイノベーション 2 兆円基金と 20 兆円の GX 政策が進行中で、石油を基軸とした化学合成からの転換が進んでいる。国内の化学メーカーも川上行程からの離脱を表明し、高付加価値品に注力して ROIC を向上させている。このような中で、カーボンニュートラルに向けたトランジション・GX において、化学がこれから進むべき方向を整理したい。

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : 化学・材料の研究開発から実用化に向けたサイバー・フィジカルシステムの最前線

2024年3月21日(木) 9:00 ~ 11:40 会場 A1432(14号館 [3階] 1432)

[A1432-4am] 化学・材料の研究開発から実用化に向けたサイバー・フィジカルシステムの最前線

座長、シンポジウム関係者：安藤 康伸、一杉 俊平、古賀 遼、飯野 裕明

現実の現象をコンピュータ上で再現し現実の世界へフィードバックするサイバー・フィジカルシステムが化学・材料の研究開発から実用化に至るあらゆるフェーズで必要とされています。本セッションでは、マテリアルズ・インフォマティクスを用いた材料開発に加え、製造プロセス開発やサプライチェーンのデジタル化を含めた化学・材料の研究開発から実用化に向けたシステムの活用事例について講演頂きます。

聴講後の[アンケート](#)へのご協力をお願いいたします。

9:00 ~ 9:10

開会挨拶

日本語 基調講演

9:10 ~ 10:00

[A1432-4am-01]

グローバル戦略としての国内外データ連携と政策展開

○和泉 憲明¹ (1. 経済産業省)

10:00 ~ 10:10

[4A143201-03-3add]

インキュベーションタイム

日本語 依頼講演

10:10 ~ 10:40

[A1432-4am-02]

粉体成膜プロセスインフォマティクスを用いたサイバー・フィジカル探索システム

○長藤 圭介¹ (1. 東京大学)

10:40 ~ 10:50

[4A143201-03-5add]

インキュベーションタイム

日本語 依頼講演

10:50 ~ 11:20

[A1432-4am-03]

マルチスケール光学応答計算と機械学習を用いた銀ナノ粒子分散材料開発の加速

○大澤 耕¹、柏木 恒雄¹、小島 茂¹ (1. コニカミノルタ株式会社)

11:20 ~ 11:40

[4A143201-03-7add]

インキュベーションタイム

グローバル戦略としての国内外データ連携と政策展開

(経済産業省 情報経済課) 和泉憲明

経済産業省では、「2025年の崖」問題を乗り越えるためのDX推進政策を、グローバル戦略を見据えた社会インフラ整備の政策へと展開している。今回は、Gaia-X や Manufacturing-X 等を含む国際データ連携の動向を踏まえ、ウラノス・エコシステムやデジタルライフライン全国総合整備計画による政策展開を紹介する。

なかでも、デジタル時代の政策推進における課題として、デジタルという未知技術に起因する「想定外」への対応があげられる。そこで、官民が一丸となり、スピーディーな意思決定と政策推進を目的として、政府と業界団体の合意形成に基づく新しい政策推進スキームをウラノス・エコシステムとして実装している。今回は、国内外のデータ連携に関する官民の動向を交え、産学官から専門家を結集させて政策の立案（アーキテクチャ設計）から展開（社会実装）までを一気通貫で実施する仕組みを中心に紹介する。

粉体成膜プロセスインフォマティクスを用いたサイバー・フィジカル探索システム

(東大工) ○長藤 圭介

Cyber-physical exploration system using powder-film-formation Process Informatics

(Graduate School of Engineering, The University of Tokyo) ○Keisuke Nagato

Film formation of functional materials for next-generation energy devices such as batteries and fuel cells is based on powder film formation. As with powdered dishes, nano- and micro-scale complex phenomena in each kneading, coating, and drying affect the macroscopic physical phenomena. The process development, which has been Japan's strength, is required to achieve high throughput in the DX era. I introduce Process Informatics as one solution to this requirement with an example in a powder-film-formation process.

Keywords : Process Informatics; powder film formation; autonomous exploration; Bayesian Optimization

畜電池・燃料電池をはじめとした次世代エネルギーデバイスの機能性材料の成膜は粉体成膜を基本としていますが、粉もの料理と同様に、混練・塗布・乾燥それぞれのナノ・マイクロスケールの物理現象がマクロな現象に影響する複雑現象です。だからこそ日本の強みであったプロセス開発は、DXの時代でハイスループット化が求められています。その一つの解決策としてのプロセスインフォマティクスを粉体成膜プロセスの事例で紹介します。

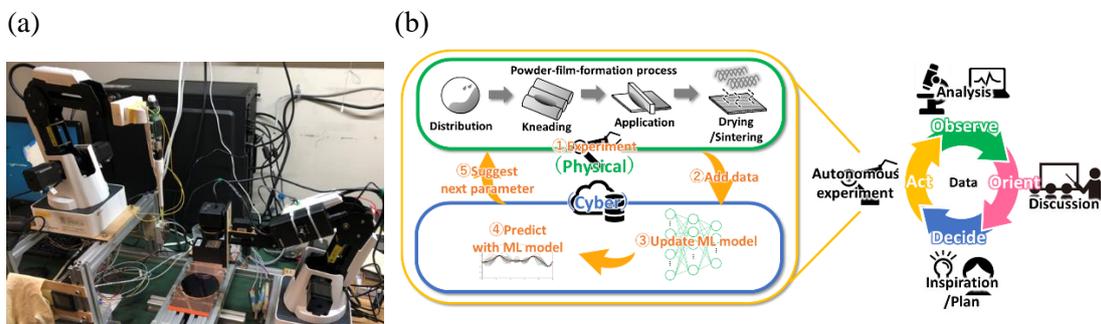


図 (a) 自律プロセス探索実験装置の概要 (左が滴下ロボット, 右が撮影ロボット), (b) 粉体成膜プロセスインフォマティクスの活用方法の概要

- 1) 長藤圭介ほか「粉体成膜プロセス研究のハイスループット化のためのデータ駆動型粉体プロセス・インフォマティクス」機械の研究, 2020年7月号, 511-516.
- 2) 未来社会創造事業「マテリアル探索空間拡張プラットフォーム(MEEP)」<https://meep.nagato-u-tokyo.jp/>
- 3) K. Nagai, T. Osa, G. Inoue, T. Tsujiguchi, T. Araki, Y. Kuroda, M. Tomizawa, K. Nagato, "Sample-efficient parameter exploration of the powder film drying process using experiment-based Bayesian optimization", *Sci. Rep.* **2022**, *12*, 1615. <https://doi.org/10.1038/s41598-022-05784-w>
- 4) YouTube video; https://youtu.be/z1pIU1X_jW8

マルチスケール光学応答計算と機械学習を用いた銀ナノ粒子分散材料開発の加速

(コニカミノルタ株式会社) ○大澤 耕・柏木 恒雄・小島 茂

Acceleration in the development of materials with dispersed silver nanoparticles using multiscale optical response calculations and machine learning (*KONICA MINOLTA, INC.*)

○Ko Osawa, Tsuneo Kashiwagi, Shigeru Kojima

Nanoparticle-dispersed materials have potential applications in numerous fields, including energy-saving thermal barrier films, highly efficient solar cells, and color materials that can be decorated on demand with less waste. However, achieving the desired optical response necessitates a considerable development time. In this presentation, using the development of materials with dispersed silver nanoparticles as a case study, we describe how computational science, machine learning, and high-throughput synthesis can accelerate R&D process.

Our development process involved the amalgamation of computational science, high-throughput synthesis, and measurement through machine learning. Initially, automated liquid handler and UV-Vis plate reader were used for the synthesis and characterization of silver nanoparticles¹⁾. This system allowed for the synthesis and evaluation of 96 different conditions using various dispersants and additives within a few days, marking a significant time savings compared to manual experimentation. Subsequently, we developed a multi-scale optical calculation framework that amalgamated first-principles calculations, electromagnetic optical calculations, and theoretical geometric domain equations. The validity of these calculations was verified by employing an individual particle shape measurement technique²⁾ using atomic force microscopy (AFM).

We further leveraged machine learning to enhance the efficiency of calculations, processes, and measurements. By utilizing active learning in large-parameter scanning calculations, we were able to reduce the required number of computations by a factor of four. The shape of the silver nanoparticles was transformed into latent variables using a variational autoencoder (VAE)³⁾, and a shape search (chromaticity optimization), conducted through Bayesian optimization⁴⁾ decreased the number of necessary calculations by a factor of 3.4 compared to a random search. Moreover, high-throughput experiments combined with machine learning optimized the quantity of material added to the coating ink, reducing the number of experiments by a factor of four in comparison to a random search. Additionally, we estimated the shape of silver nanoparticles using rapidly measurable spectroscopic measurements⁵⁾ and confirmed that the estimated shape moderately corresponded with the measurements obtained from scanning electron microscopy (SEM).

Keywords : silver nanoparticle, high-throughput synthesis, optical simulation, machine learning

ナノ粒子分散材料は冷暖房の省エネルギー化を実現する遮熱フィルム、高効率太陽電池、オンデマンド加飾が可能で廃棄の少ない色材などへの応用が期待されているが、所望の光学応答実現に多くの開発期間を要する問題があった。本報告では、銀ナノ粒子分散材料の開発を事例に、計算科学・機械学習・高速試作プロセスを活用した開発

加速について述べる。

本研究では計算科学・プロセス・計測を機械学習により融合させる三位一体の開発プロセスを用いた。まず、銀ナノ粒子合成プロセスについて、自動分注装置と紫外可視域のプレートリーダーを併用し、分散剤や添加剤の種類等を変えた 96 条件を 2 日で合成および評価できる仕組みを構築した¹⁾。人の手による実験数と比較して大幅な時間短縮ができる。次に、第一原理計算と電磁光学計算および幾何領域の理論式を組み合わせたマルチスケール光学計算の枠組みを整理した。また、原子間力顕微鏡 (AFM)を用いた個別粒子形状計測²⁾により計算の妥当性を確認した。

機械学習の活用により、計算、プロセスおよび計測の更なる効率化を実現した。大量パラメータ走査計算において、能動学習を用いることで 1/4 倍の計算量削減を行った。さらに、変分オートエンコーダ(VAE)³⁾を用いて銀ナノ粒子形状の潜在変数化を行ない、ベイズ最適化⁴⁾を用いた形状探索(色度最適化)により、計算回数をランダム探索と比較して 1/3.4 倍に短縮した。そして、ハイスループット実験と機械学習を組み合わせて、塗布用インクの方法添加量の最適化を行ない、ランダム探索と比較して 1/4 倍の実験回数短縮が行えることを示した。また、高速測定可能な分光測定から銀ナノ粒子形状を推定⁵⁾し、推定した形状が走査型電子顕微鏡(SEM)測定と類似していることを確認した。

謝辞

この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機(NEDO)の委託業務 (JPNP16010)の結果得られたものです。プロジェクトの成果を活かして 2022 年 4 月に「データ駆動型材料設計技術利用推進コンソーシアム」が設立されており⁶⁾、データ駆動型材料開発」の入り口・情報交流の場・業界全体の技術力向上への貢献が期待されています。

本研究を進めるにあたり国立研究開発法人産業技術総合研究所の、中村恒夫先生、松井正冬先生、陶究先生、竹林良浩先生、小野巧先生、時崎高志先生、重藤知夫先生にご指導いただきました。この場を借りて御礼申し上げます。

文献

- 1) T. Kashiwagi, K. Sue, Y. Takebayashi and T. Ono, *Chem. Eng. Sci.* **2022**, vol. 262, 23, 118009.
- 2) T. Sigehuzi, *J. Chem. Phys.* **2017**, 147, 8, 084201.
- 3) D.P. Kingma, M. Welling, *The International Conference on Learning Representations* **2014**.
- 4) B. Shahriari, K. Swersky, Z. Wang, R.P. Adams and N. de Freitas, *Proceedings of the IEEE* **2016**, vol. 104, no. 1, pp. 148-175.
- 5) 松井 正冬, 柏木 恒雄, 陶 究, 大澤 耕, 重藤 知夫, 時崎 高志, 中村 恒夫, *第 15 回 分子科学討論会* **2020**.
- 6) <https://unit.aist.go.jp/cd-fmat/ja/c-dmd/index.html>

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : 持続可能社会を創出する高分子科学の研究前線

2024年3月21日(木) 9:00 ~ 11:40 会場 A1433(14号館 [3階] 1433)

[A1433-4am] 持続可能社会を創出する高分子科学の研究前線

座長、シンポジウム関係者：井狩 芳弘、原 賢二、辻 良太郎、粕谷 健一

石油化学は高分子科学工業を生み出し、衣食住にわたって我々の生活を豊かにしてきた一方で、近年では温室効果ガス排出やプラスチックごみの環境拡散といった新たな課題を生み出しています。これらの課題に対して、サーキュラーエコノミーコンセプトは、高分子科学による革新的な解決策創出の後押し要因となっています。樹脂を再利用するための技術や、特定の環境下で分解するような材料、CO₂やバイオマスなどから合成される新規材料等、様々な研究成果が生まれつつあり、高分子科学は大転換期を迎えようとしています。本セッションでは、持続可能社会を創出する高分子科学の研究前線を紹介すると共に、これからの高分子科学の在り方について議論します。

聴講後の[アンケート](#)へのご協力をお願いいたします。

9:00 ~ 9:10

開会挨拶

◆ 日本語 ◆ 基調講演

9:10 ~ 10:10

[A1433-4am-01]

高性能な海洋生分解性バイオマスプラスチックの開発を目指して

○岩田 忠久¹ (1. 東京大学)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

10:10 ~ 10:40

[A1433-4am-02]

生分解性バイオポリマーの社会実装

○佐藤 俊輔¹ (1. 株式会社カネカ)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

10:40 ~ 11:10

[A1433-4am-03]

ベンゼン環を代替可能なバイオベースビフラン骨格の開発

○橋 熊野¹ (1. 群馬大学)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

11:10 ~ 11:40

[A1433-4am-04]

ラジカル系の動的共有結合化学が拓くサステナブルな架橋高分子材料

○大塚 英幸¹ (1. 東工大)

高性能な海洋生分解性バイオマスプラスチックの開発を目指して

(東大院農) 岩田 忠久

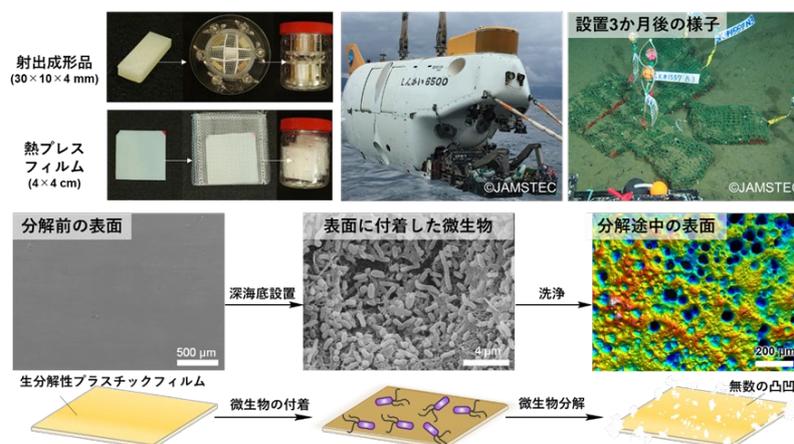
Development of high-performance marine biodegradable biomass plastics
(Graduate School of Agricultural and Life Sciences, The University of Tokyo)

○Tadahisa Iwata

This presentation will introduce a series of our laboratory's research results on biodegradable biomass plastics, including the development of molding and processing technologies for high-performance real materials using biodegradable aliphatic polyesters and polysaccharide ester derivatives, elucidation of the correlation between structure and physical properties using synchrotron radiation, elucidation of mechanisms controlling biodegradability rate using degradation enzymes, addition of biodegradation initiation switch functions, and marine degradability evaluation.

Keywords : Biodegradable Biomass Plastics, Marine Biodegradation, Microbial Polyesters, Polysaccharide Ester Derivatives, Biodegradable Initiation Switch

生分解性脂肪族ポリエステル、高分子多糖類エステル誘導体などを用いた高性能な実部材への成形加工技術の開発¹⁾、大型放射光を用いた構造と物性との相関解明、分解酵素を用いた生分解性速度の制御機構の解明、生分解開始スイッチ機能の付与^{2,3)}、海洋分解性評価⁴⁾など、一連の生分解性バイオマスプラスチックに関する当研究室の研究成果を紹介する。



- 1) Recent developments in microbial polyester fiber and polysaccharide ester derivative research. T. Iwata, H. Gan, A. Togo, Y. Fukata, *Polym. J.* **2021**, *53*, 221.
- 2) Enzymatic Self-Biodegradation of Poly(l-lactic acid) Films by Embedded Heat-Treated and Immobilized Proteinase K. Q.Y. Huang, T. Iwata, *et al.*, *Biomacromolecules*, **2020**, *21*, 3301.
- 3) A Strategy for Improving Polyester Biodegradation in Seawater: Thermal Embedding of *Humicola insolens* Cutinase. Q.Y. Huang, S. Kimura, T. Iwata, *Biomacromolecules*, **2023**, *24*, 5836.
- 4) Microbial decomposition of biodegradable plastics on the deep-sea floor. T. Omura, T. Iwata, *et al.*, *Nat. Commun.*, **2024**, in press.

生分解性バイオポリマーの社会実装

((株) カネカ¹) ○佐藤 俊輔¹

Practical application of Biodegradable-biopolymer

(¹Agri-bio&Supplement Research Laboratories, KANEKA CORPORATION)

○Shunsuke Sato,¹

We have been developing biodegradable-biopolymer (PHBH) to create a sustainable polymer industry. PHBH is a random copolymer of (*R*)-3-hydroxybutyrate (3HB) and (*R*)-3-hydroxyhexanoate (3HHx) (Fig.1). This polymer is produced by bacteria from renewable carbon sources such as vegetable oils and sugars. The mechanical properties of the PHBH depends on the fractions of 3HHx. Thus, it is highly important to regulate the fractions of 3HHx of the polymer. Therefore, we examined the precise control of the 3HHx fractions by fine-tuning the expressions of several genes. Following to the fermentation process, PHBH is purified in a downstream process by using “water process” without any solvent.

Keywords : Polyhydroxyalkanoate, PHBH, Biodegradable-polymer

(株)カネカでは、持続可能なポリマー産業の創造を志し、生分解性を有するバイオベースポリマー、PHBH の開発を行っている。PHBH は植物油脂や糖質などの再生可能原料から微生物発酵により生産されるポリヒドロキシアルカン酸の一種であり、(*R*)-3-ヒドロキシ酪酸、並びに(*R*)-3-ヒドロキシヘキサン酸(3HHx)の両モノマーから構成される共重合ポリエステルである(Fig.1)。PHBH の物性はその 3HHx 分率によって変化するため、PHBH の 3HHx 分率を制御することが実用化には極めて重要となる。そこで、我々は PHBH 生産微生物を改良することで、3HHx 分率を精密に制御する技術を開発し、産業生物の育種を行った。PHBH は開発した微生物を培養し、更に後工程にて細胞から回収、精製されることで、材料となる。特に、精製プロセスは溶剤不使用とし、環境に優しいプロセスを開発した。

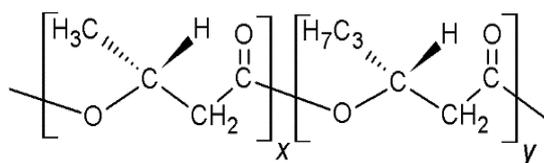


Fig.1 PHBH の構造

ベンゼン環を代替可能なバイオベースビフラン骨格の開発

(群大院理工¹・群大食健セ²) ○橘 熊野^{1,2}

Development of bio-based bifuran moiety capable of replacing benzene ring. (¹Graduate School of Science and Technology, Gunma University & ²Gunma University Center for Food Science and Wellness)○Yuya Tachibana^{1,2}

Almost furan compounds are produced from furfural which is converted from hemicellulose. Recently, we have been focusing on the bifuran moiety, which is constructed through the coupling reaction at the 5,5'-position of single furan derivatives, as a novel biobased building block. The bifuran moiety adopts a rigid structure and has an expanded π -conjugation between two furan rings to enhance the properties of polymers. In this presentation, we will be discussing the synthesis and characteristic properties including recyclability of the following polymers: poly(Schiff base) from bifurfural, poly(bifurfurylene succinate) from bi(furfuryl alcohol), poly(bifurylidene bisglycerol succinate) from bifurylidene bis(glycerol acetal), polyamide from bifurfurylamine, and polycarbosilane from dihydrosilylbifuran.

Keywords : Bio-based polymer; furan; inedible biomass; recycling

バイオベース高分子 : バイオマスであれば何でも良いという時代は過ぎ、非食用かつ廃棄物系のバイオマスの利用が求められている。ヘミセルロースとセルロースから製造されるフラン誘導体の中でも、フルフラールは化学工業の原料として安価かつ大量供給可能なバイオマス由来化合物であるが、現在の用途は、金属 casting バインダーのフラン樹脂にほぼ限定されている。一方、20世紀終盤からは、非可食バイオマス資源であるフラン誘導体をバイオ燃料や高分子に利用する研究が行われてきた¹。

ビフラン骨格 : 私たちはフラン環の5位同士で連結したビフラン骨格に着目して研究を進めている。ビフラン骨格は2つのフラン環が逆並行で完全平面のコンフォメーションが再安定である。ビフラン骨格を高分子鎖に導入することで、光学特性の付与、剛直性の付与、高分子鎖間の π - π スタッキングによる耐熱性の強化に繋がる。本発表では、ビフラン骨格を有する様々な高分子を合成すると共に、ビフラン骨格とフラン環、ベンゼン環を有する高分子との比較を通じて、**ビフラン骨格がバイオベース由来のビルディングブロック**として有望であることを示す。

ビフラン骨格含有高分子 : フルフラール (BFF) とジアミンの脱水中縮合によってポリシッフ塩基 (PSB) を合成した (Figure 1a)²。フラン環含有ポリシッフ塩基と比較すると、ガラス転移温度 (T_g) の上昇 (9°C) と UV-vis スペクトルの長波長シフト (50 nm) に加えて、引張試験のヤング率 2.3 倍、破断強度 2.3 倍という高強度化が達成された。ビフルフリルアルコール (BFAI) とジカルボン酸無水物との脱水縮合によりポリエステル (PBFD) を合成した (Figure 1b)³。フラン環含有のポリエステルと比較すると、 T_g と融点 (T_m) の上昇 (28°C と 78°C) が観測された。また、ビスマレイミド

を用いて PBFDF の架橋反応を行ったところ、ネットワーク構造ではなくハシゴ状高分子へと変換されていた。ビフラン骨格とアセタール骨格を有するビフリデンビス(グリセロールアセタール) (BFG) を合成し、コハク酸無水物 (フルフラールから合成可能) との脱水縮合によってポリ(ビフリデンビス(グリセロールアセタール)サクシネート) (PBFGS) を合成した (Figure 1c)⁴。アセタール骨格は、亜鉛触媒とグリセロールで処理することで、BFG へと定量的に変換可能であった。また、酸触媒を添加することでアセタール骨格の加水分解が進行し、BFE の原料でもある BFF へと定量的に変換可能であった。ビフルフリルアミン (BFAm) とジカルボン酸クロライドとの重縮合によってポリアミド (PA) を合成した (Figure 1d)⁵。ベンゼン環含有ポリアミドと比較すると、 α 緩和温度の上昇 (16°C) と UV-vis スペクトルの長波長シフト (79 nm 以上) が観測された。フランのカップリングで得られるビフランをジヒドロシリルビフラン (DSBF) へと変換し、それと末端アルケン化合物とのヒドロシリル化重合を行うことで、ビフラン骨格含有ポリカルボシラン (PBFSi) を合成した (Figure 1e)⁶。フラン環含有ポリカルボシラン (PFSi)、ベンゼン環含有ポリカルボシラン (PPhSi) と比較すると、PBFSi と PPhSi はほぼ同等の熱安定性・ T_g ・ T_m を有してしたが、PFSi はアモルファスであり耐熱性・ T_g ともに大幅に低く観察された。また PBFSi のみ蛍光発光を示し、プロト脱シリル化によるケミカルリサイクル性付与が達成可能であった。

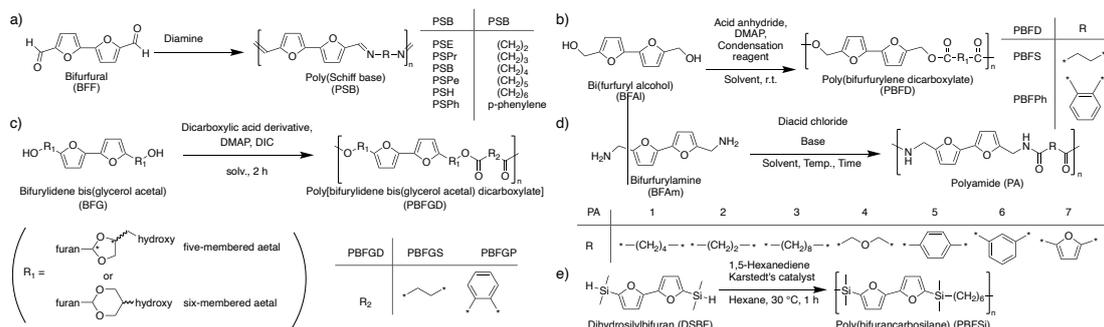


Figure 1. a) poly(Schiff base) from bifurfural, b) poly(bifurfurylene succinate) from bi(furfuryl alcohol), c) poly(bifurylidene bis(glycerol succinate) from bifurylidene bis(glycerol acetal), d) polyamide from bifurfurylamine, e) polycarbosilane from dihydrosilylbifuran

- 1) Y. Tachibana, K. Kasuya, Bio-based polymers synthesized from furan derivatives, *in Biopolymers*, Ed. V. Sessini, S. Ghosh, M. E.G. Mosquera, (2023).
- 2) Biobased Poly(Schiff-Base) Composed of Bifurfural, Y. Tachibana, S. Hayashi, K. Kasuya, *ACS Omega* **2018**, *3*, 5336–5345.
- 3) Synthesis and Cross-Linking Behavior of Biobased Polyesters Composed of Bi(Furfuryl Alcohol), S. Hayashi, A. Narita, T. Wasano, Y. Tachibana, K. Kasuya, *Eur. Polym. J.* **2019**, *121*, 109333.
- 4) Chemically Recyclable Bio-Based Polyester Composed of Bifuran and Glycerol Acetal, S. Hayashi, Y. Tachibana, N. Tabata, K. Kasuya, *Eur. Polym. J.* **2021**, *145*, 110242.
- 5) Synthesis of Biobased Polyamides Containing a Bifuran Moiety and Comparison of Their Properties with Those of Polyamides Based on a Single Furan Ring, K. Arai, T. Tsutsuba, T. Wasano, Y. Hirose, Y. Tachibana, K. Kasuya, *ACS Appl. Polym. Mater.* **2023**, *5*, 3866–3874.
- 6) Recyclable Polycarbosilane from a Biomass-Derived Bifuran-Based Monomer, S. Beppu, Y. Tachibana, K. Kasuya, *ACS Macro Lett.* **2023**, *12*, 536–542.

ラジカル系の動的共有結合化学が拓くサステナブルな架橋高分子材料

(東工大物質理工) ○大塚 英幸

Sustainable Cross-Linked Polymer Materials Based on Radical-Type Dynamic Covalent Chemistry (*Department of Chemical Science and Engineering, Tokyo Institute of Technology*)
○Hideyuki Otsuka

In this presentation, the self-healing, recycling, stress relaxation, and degradation of chemically cross-linked polymers based on radical-type dynamic covalent chemistry are introduced. Specifically, sustainable cross-linked polymer materials were developed by introducing sterically hindered diaminodisulfide bonds as dynamic covalent bonding units at the cross-linking points of chemically cross-linked polymers. The reactivity, characteristics, and working mechanism of the obtained chemically cross-linked polymers are introduced.

Keywords : Dynamic Covalent Chemistry; Cross-linked Polymers; Recycling; Self-healing; Polymer Reactions

架橋高分子は三次元空間に広がった網目構造を有しており、その構造によって高強度や耐熱性が求められる構造材料から、高弾性や柔軟性が求められるゴムやゲルといったソフトマテリアルまで、特有の物性を活用して幅広く利用されている。網目構造の一部が可逆的な分子間相互作用で構成される物理架橋高分子は、外部環境に応じて比較的容易に構造を変えることが可能であり、易加工性、自己修復性、リサイクル性などの魅力的な機能を発現する。一方で、すべてが共有結合で構成される化学架橋高分子の場合、通常は不溶不融の高分子ネットワーク構造となるため、「高分子の最終形態」とも言われてきた。

近年、特定の環境下において可逆的な開裂・結合の平衡状態を与え、組み換え可能な共有結合を活用する動的共有結合化学が大きな注目を集めている。化学架橋高分子に動的共有結合を導入することで、超分子化学に基づく物理架橋高分子と同様に、さまざまな構造再編成に基づく機能発現が期待できる。本講演では、加熱条件で互いに組み換わる動的共有結合骨格を有する化学架橋高分子の合成、さらには得られる化学架橋高分子の応力緩和特性、修復性、再成形性、接着性に関して、演者のグループの研究成果を紹介する (Figure 1)。

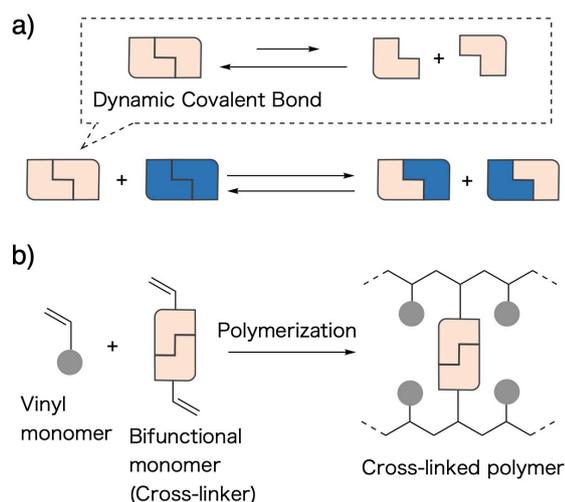


Figure 1. (a) Conceptual illustration of an exchange reaction of dynamic covalent bonds. (b) Synthesis of a cross-linked polymer by polymerization using a cross-linker with a dynamic covalent bond.

ラジカル系の動的共有結合化学に基づく架橋高分子の修復・再成形・融合

自己修復系高分子の設計に活用できる動的共有結合骨格として、ビス(2,2,6,6-テトラメチルピペリジン-1-イル)ジスルフィド (BiTEMPS, **Figure 2a**) を開発した。複数の BiTEMPS 誘導体を用いてジスルフィド結合の熱的な均一開裂挙動、および熱的な結合交換特性などについて評価を行った結果、室温では全くラジカル種が観測されず、100 °C 程度の加熱により交換反応が進行し、酸素の影響を全く受けないことが明らかとなった¹⁾。また、BiTEMPS をスペーサーとする架橋剤を用いて、架橋点に BiTEMPS 骨格を有するポリ(メタクリル酸エステル)を合成し、BiTEMPS の熱的な結合組み換えに基づく自己修復性について評価した結果、24 時間後には破断強度および破断伸びも切断前のサンプルと同程度まで修復した。さらに、BiTEMPS 骨格を有する化学架橋高分子を粉碎して鑄型中で加熱すると、再成形性を示した²⁾。BiTEMPS 骨格の組み換えを利用した異種架橋高分子の融合にも成功した³⁾。演者のグループでは、これらの反応系以外にも、高い官能基許容性を利用して、BiTEMPS 骨格の組み換え反応に基づく様々な高分子反応系の構築にも成功している⁴⁻¹²⁾。

ラジカル系の動的共有結合化学に基づく分子内架橋高分子の可逆架橋

BiTEMPS 骨格を架橋点に有する架橋高分子を分子内架橋された 1 本の高分子鎖 (Single-chain nanoparticles, SCNP) へと直接変換する手法を開発した (**Figure 2b**)。また、SCNP どうしの分子間架橋反応によって架橋高分子の復元を達成し、ラジカル系の動的共有結合化学に基づく網目構造の再編成によるサステナブルな架橋トポロジー変換系を構築した¹³⁾。

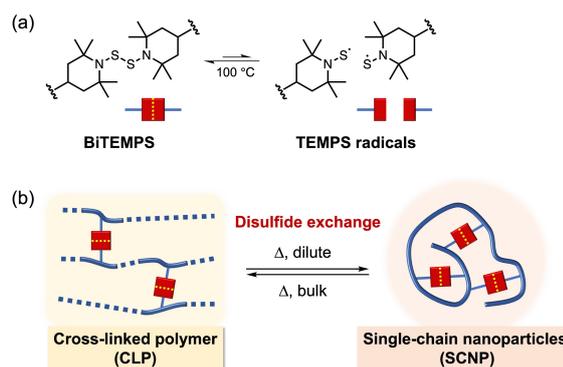


Figure 2. (a) Equilibrium between BiTEMPS and TEMPS radicals under heating conditions. (b) Interconversion between cross-linked polymer and single chain nanoparticles based on radical-based dynamic covalent chemistry of BiTEMPS.

謝辞 高橋 明先生 (東京工業大学助教)、青木大輔先生 (千葉大学准教授) をはじめとする共同研究者の皆様に深く感謝いたします。本研究は、JST 未来社会創造事業などの財政的支援により実施されました。

参考文献 1) H. Otsuka et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2017**, 56, 2016; 2) H. Otsuka et al., *ACS Macro Lett.*, **2017**, 6, 1280; 3) H. Otsuka et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, 59, 4294; 4) D. Aoki, H. Otsuka et al., *Angew. Chem. Int. Ed.*, **2020**, 59, 4269; 5) D. Aoki, H. Otsuka et al., *Polym. Chem.*, **2020**, 11, 3357; 6) D. Aoki, H. Otsuka et al., *Macromolecules*, **2020**, 53, 4670; 7) H. Otsuka et al., *ACS Appl. Polym. Mater.*, **2021**, 3, 888; 8) H. Otsuka et al., *ACS Macro Lett.*, **2021**, 10, 558; 9) D. Aoki, H. Otsuka et al., *Macromolecules*, **2021**, 54, 8154; 10) D. Aoki, H. Otsuka et al., *Macromolecules*, **2021**, 54, 9992; 11) D. Aoki, H. Otsuka et al., *Polym. Chem.*, **2023**, 14, 4344; 12) D. Aoki, H. Otsuka et al., *Org. Biomol. Chem.*, **2024**, in press; 13) H. Otsuka et al., in preparation.

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : カーボンネガティブに挑戦する革新的触媒

2024年3月21日(木) 13:00 ~ 14:50 会場 A1431(14号館 [3階] 1431)

[A1431-4pm] カーボンネガティブに挑戦する革新的触媒

座長、シンポジウム関係者：佐山 和弘、砂田 祐輔、笹倉 英史、松下 康一、天尾 豊

2020年10月に「2050年カーボンニュートラル」宣言を契機として、2030年度までの温室効果ガス削減目標を2013年度比で46%削減することとし、将来的には80%削減に向けて新たな方針も示されております。これらの目標達成のためには、人工光合成を含む再生可能エネルギーを用いた水素製造や二酸化炭素利用に加えて、二酸化炭素フリー水素製造技術、二酸化炭素の水素化や二酸化炭素の有価物への触媒的変換技術を急速に発展・成熟させ、二酸化炭素排出実質ゼロを超えるマイナスに転じるカーボンネガティブ技術が必要です。本セッションでは、これらの研究について世界をリードする研究者に紹介いただきます。カーボンニュートラルは本当に達成できるか、それをを超えるカーボンネガティブ実現に向け、どんな挑戦が必要か、活発な議論の場の提供を考えております。

聴講後の[アンケート](#)へのご協力をお願いいたします。

日本語 依頼講演

13:00 ~ 13:30

[A1431-4pm-01]

炭素資源循環に資する不均一系有機合成反応

○三浦 大樹¹ (1. 東京都立大学)

日本語 依頼講演

13:30 ~ 14:00

[A1431-4pm-02]

炭素循環社会の実現に向けたCO₂電解技術の開発○北川 良太¹ (1. 株式会社 東芝)

14:00 ~ 14:10

[4A143104-06-3add]

インキュベーションタイム

日本語 依頼講演

14:10 ~ 14:40

[A1431-4pm-03]

分子集積に立脚した小分子変換材料の創出

○近藤 美欧^{1,2} (1. 東京工業大学、2. JSTさきがけ)

14:40 ~ 14:50

閉会挨拶

炭素資源循環に資する不均一系有機合成反応

(都立大都市環境) ○三浦 大樹

Heterogeneous organic synthesis contributing to carbon neutrality (*Tokyo Metropolitan Univ.*)

○Hiroki Miura

The universal transformation of abundant C(sp³)-O bonds should be a key technology for achieving carbon neutrality since the C(sp³)-O bond is often found not only in oxygenated chemical feedstock such as alcohols, ethers, and esters, but also in natural biomass compounds. In this study, we successfully developed various efficient transformations of C(sp³)-O bonds mainly by utilizing cooperative catalysis of Au nanoparticles and acid-base site on supports.

Keywords : Heterogeneous catalysts; Gold nanoparticles; C-O transformation

二酸化炭素を吸収して生長するバイオマスを原料として高付加価値な化成品を製造することは高度な炭素資源循環の実現のための鍵となる。バイオマス由来化合物には多くの C-O 結合が含まれるため、効率的な C-O 結合変換手法の開発は極めて重要である。一方、サステナブルケミストリーの観点から、触媒の再利用などを可能にする不均一系触媒を用いた有機合成プロセスが注目されている。なかでも担持金属触媒は酸化還元特性やルイス酸性を示す金属ナノ粒子に加えて、担体である金属酸化物上に酸塩基点を豊富に有する点で非常に魅力的な材料である。特に Au ナノ粒子は 1 電子酸化還元能やソフトなルイス酸性など特異な触媒機能を示すことから、担体上の他の元素との協働を利用することにより、他の触媒にはない特異な分子変換が実現できると考え、種々検討を行った。

例えば、表面に酸点を高密度に有する金属酸化物に Au ナノ粒子を担持した触媒はアリエステルの C(sp³)-O 結合のポリル化に対して極めて活性を示す¹⁾。ここではソフトルイス酸である Au ナノ粒子と、金属酸化物表面のハードルイス酸が反応基質を同時に活性化することで C(sp³)-O 結合のヘテロリシスが効率的に進行することが鍵となる。一方、両性金属酸化物に Au ナノ粒子を担持した触媒は、エステルやエーテルに含まれる極めて安定な C(sp³)-O 結合を C(sp³)-Si 結合へと効率的に変換することができる^{2,3)}。この場合、塩基点によって活性化されたケイ素源であるジシランを Au ナノ粒子が 1 電子酸化することで反応性の高いシリルラジカルを発生させ、それが酸点によって活性化されたエステルを攻撃することで安定な C(sp³)-O 結合のホモリシスが進行することが鍵となる。このように本講演では、Au ナノ粒子とその周辺に存在する酸塩基点との協働を活用することで、従来にない効率的な C-O 結合変換の開発に成功した成果について概説する。

- 1) Miura, H.; Hachiya, Y.; Nishio, Y. Fukuta, T. Toyomasu, H.; Kobayashi, K.; Masaki, Y.; Shishido, T. *ACS Catal.* **2021**, *11*, 758–766.
- 2) Miura, H.; Doi, M.; Yasui, Y.; Masaki, Y.; Nishio, H.; Shishido, T. *J. Am. Chem. Soc.* **2023**, *145*, 4613–4625.
- 3) Miura, H.; Yasui, Y.; Masaki, Y.; Doi, M.; Shishido, T. *ACS Catal.* **2023**, *13*, 6787–6794.

炭素循環社会の実現に向けた CO₂ 電解技術の開発

(東芝研究開発セ) ○北川 良太

Development of CO₂ electrolysis technology towards the realization of a carbon recycling society (Corporate Research & Development Center, Toshiba Corporation) ○Ryota Kitagawa

Recent efforts towards carbon neutrality have made the reduction and absorption of CO₂ essential. Toshiba is developing Power to Chemicals (P2C) technology, which converts CO₂ into raw materials for fuel and chemicals. A challenge has been increasing cell throughput. We've adopted a zero-gap CO₂ electrolysis cell and improved current density by promoting CO₂ diffusion in the cathode catalyst layer. To further increase throughput, we've developed a CO₂ electrolysis cell stack with a large electrode area and cooling mechanism to reduce efficiency loss from heat. This stack has a capacity of 60NL-CO₂/h, approximately 1t-CO₂ annually. I will present our CO₂ resource technology and the current development status of our CO₂ electrolysis cell.

Keywords : CO₂ electrolysis; CO₂ electrochemical reduction ;catalyst ;Cell stack

近年、政府や企業によるカーボンニュートラルへの取り組みが活発化しており、その実現のためには化石資源利用に依存する産業部門や運輸部門での CO₂ 削減や吸収が不可欠となっている。この課題に対する一つの解決策として、当社は CO₂ を再エネ電力により電解し、高環境価値の燃料や化成品へと転換する Power to Chemicals (P2C) 技術の開発を推進している。

CO₂ 電解における課題の一つはセルの高スループット化（高電流密度化、セルの大面积・積層化）である。当社はこの課題を解決するため、ゼロギャップ型 CO₂ 電解セルを採用し、カソードの三相界面制御と多孔質化により、電流密度を大幅に向上することに成功した。カソード触媒層に意図的に設けた空孔の存在によって CO₂ の拡散が促進されることで触媒層全体に CO₂ が供給されて電流密度の向上に大きく寄与したり。また、セルの更なる高スループット化を図るには、大面积化、セルの積層化が必要となる。当社は上記独自開発した触媒電極を用いて、電極面積 100cm²、4 セル以上積層した CO₂ 電解セルスタックを開発した。積層したセル間に冷却機構を設けることで、CO₂ 電解時に生じる発熱による効率低下を抑制した。開発したセルスタックは 60NL-CO₂/h(年間最大約 1t-CO₂)の処理能力となる。本講演では、東芝の取り組む CO₂ 電解技術の内容を紹介するとともに、現在進めている実機級 CO₂ 電解セルの開発状況についても紹介する。

謝辞

本研究の一部は、環境省「二酸化炭素の資源化を通じた炭素循環社会モデル構築促進事業(多量二酸化炭素排出施設における人工光合成技術を用いた地域適合型二酸化炭素資源化モデルの構築実証)」で実施した。

1) Y. Kofuji et. al., Chem. Lett. (2021), 50, 482.

分子集積に立脚した小分子変換材料の創出

(東工大院理¹・JST さきがけ²) ○近藤 美欧^{1,2}

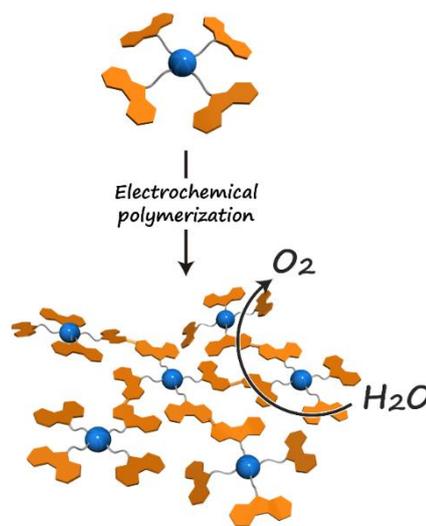
Development of Catalytic Systems for Small Molecule Conversions based on Molecular Assembly (¹Graduate School of Science, Tokyo Institute of Technology, ²JST PRESTO) ○Mio Kondo,^{1,2}

Four electron oxidation of water is a reaction which is considered a bottleneck for achieving artificial photosynthetic reactions. Therefore, the development of a highly active catalyst for the reaction is strongly demanded. We anticipated that the key to promote a water oxidation reaction is the acceleration of multielectron transfer process. In this work, novel multinuclear metal complexes bearing carbazole moieties, which can form charge-transporting biscarbazoles upon electrochemical oxidation, was synthesized and characterized. By the electrochemical oxidation of the complexes, polymer-based materials were successfully deposited on electrodes. The catalytic activity of the polymers for water oxidation was the highest among the relevant metal-complex-based catalytic systems.

Keywords : Small Molecule Conversion, Metal Complex, Water Oxidation, Electrochemical Polymerization

水の4電子酸化による酸素発生反応 ($2\text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{O}_2 + 4\text{H}^+ + 4\text{e}^-$) は、人工光合成においてボトルネックとされる反応であり、この反応に対する良好な触媒の開発が強く望まれている。本研究では、(1) 酸素発生能を有する多核金属錯体¹⁾に、(2) 電荷輸送サイトを組み込む戦略を立案した (右図)。

上記の戦略に基づき、電気化学的酸化によって二量化し、電荷輸送サイトを形成するカルバゾール骨格を組み込んだ複数の新規多核金属錯体を設計・合成した。合成した各種錯体を、グラッシカーボン電極上で電解重合することでポリマー電極を作成し、紫外-可視-近赤外吸収分光法、赤外吸収分光法 SEM、EDS を使って詳細に分析した。また、ポリマー電極の触媒能を調査したところ、得られたポリマー膜はいずれも酸素発生反応を触媒した。さらに、触媒活性(TOF)を他の関連する触媒系と比較したところ、本材料は最高クラスの触媒活性を有することを見出した^{2),3)}。



1) (a) M. Okamura, M. Kondo, R. Kuga, Y. Kurashige, T. Yanai, S. Hayami, V. K. K. Praneeth, M. Yoshida, K. Yoneda, S. Kawata, S. Masaoka, *Nature*, **2016**, *530*, 465. (b) M. Kondo, S. Masaoka, *Acc. Chem. Res.*, **2020**, *53*, 2140.

2) H. Iwami, M. Okamura, M. Kondo, S. Masaoka, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 5965.

3) T. Matsuzaki, H. Iwami, K. Kosugi, T. Kambe, H. Kiuchi, T. Uematsu, S. Kuwabata, Y. Saga, M. Kondo, S. Masaoka, *Manuscript in preparation*

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : 化学・材料の研究開発から実用化に向けたサイバー・フィジカルシステムの最前線

2024年3月21日(木) 13:00 ~ 15:30 会場 A1432(14号館 [3階] 1432)

[A1432-4pm] 化学・材料の研究開発から実用化に向けたサイバー・フィジカルシステムの最前線

座長、シンポジウム関係者：安藤 康伸、一杉 俊平、古賀 遼、飯野 裕明

現実の現象をコンピュータ上で再現し現実の世界へフィードバックするサイバー・フィジカルシステムが化学・材料の研究開発から実用化に至るあらゆるフェーズで必要とされています。本セッションでは、マテリアルズ・インフォマティクスを用いた材料開発に加え、製造プロセス開発やサプライチェーンのデジタル化を含めた化学・材料の研究開発から実用化に向けたシステムの活用事例について講演頂きます。

聴講後の[アンケート](#)へのご協力をお願いいたします。

日本語 依頼講演

13:00 ~ 13:30

[A1432-4pm-01]

ポリマーインフォマティクスを基点とした材料イノベーション

○内藤 昌信¹ (1. 物質・材料研究機構)

日本語 依頼講演

13:30 ~ 14:00

[A1432-4pm-02]

触媒インフォマティクスによるメタン酸化触媒開発

○高橋 啓介¹ (1. 北海道大学)

14:00 ~ 14:10

[4A143204-07-3add]

インキュベーションタイム

日本語 依頼講演

14:10 ~ 14:40

[A1432-4pm-03]

エレクトロニクス材料開発におけるシミュレーション

○四橋 聡史¹ (1. パナソニック ホールディングス株式会社)

日本語 依頼講演

14:40 ~ 15:10

[A1432-4pm-04]

パターン認識技術を活用した有機トランジスタ型化学センサ

○南 豪¹ (1. 東大生研)

15:10 ~ 15:30

[4A143204-07-6add]

インキュベーションタイム

マテリアルズインフォマティクスを活用した高分子材料開発

(NIMS¹) ○内藤昌信¹

Development of Polymer Materials with Materials Informatics (¹Research Center for Macromolecules and Biomaterials, National Institute for Materials Science) ○Masanobu Naito¹

Artificial intelligence (AI) creates recipes, and IoT-enabled automated experimental devices autonomously search for materials. Such a science fiction-like era is just around the corner. The core technology for this is a smart lab, a collection of automated devices that work in conjunction with AI. The introduction of smart laboratories in the pharmaceutical and other fields has been preceded by the introduction of smart laboratories in the pharmaceutical and other fields, but in the past few years, smart laboratories have rapidly spread to various material fields in response to the spread of material informatics (MI). In this presentation, we will introduce our recent efforts to develop new materials using MI tools such as SmartLab, including several examples.

Keywords : Materials Informatics; Polymer Smart Lab; Data-driven Polymer Design;

人工知能 (AI) がレシピをつくり、IoT化した自動実験装置が自律的に材料探索を行う。そんなSFのような時代がすぐそこまで来ている。そのコア技術となるのが、AIと連動したスマートラボとよばれる自動装置群である。製薬分野などへの導入が先行してきたが、マテリアルズインフォマティクス (MI) の浸透に呼応するように、ここ数年で様々な材料分野に急速に広まりつつある。

材料開発では、合成のみならず、物性・材料特性までを総合評価する必要がある。また、先端材料に求められる性能・特性は刻々と変化する。そのため、ポリマースマートラボには、臨機応変に対応できるロバスト性が求められる。演者らのポリマースマートラボでは、これらの課題解決のため、技術仕様を予め固めずに、様々なAIツールやデータサービスを組み合わせていくアジャイル的な開発手法を採っている。そのAIツールやデータベースとして、NIMSが整備を進める材料プラットフォーム「DICE」が提供する電子ラボノート、データ解析AI、IoT化ツール、データサーバなどの各種モジュールを利用できることも、システム開発の迅速化に大きなメリットとなっている。また、従来の材料評価は、サンプル作製や測定に多くの時間・労力・職人技などが求められ、材料開発のハイスループット化を困難にしてきた。この問題に対し、我々はMI駆動研究に特化した装置を開発することで、合成から材料評価までの一連の工程を自動化・高速化することに取り組んできた。すでに接着材料や超撥水材料、また複数素材の特性を取り入れた傾斜材料などの新たな機能性樹脂材料の開発で威力を発揮している。課題解決の迅速化に、ポリマースマートラボが強力なツールとなることは間違いない。一方で、サーキュラーエコノミーやカーボンニュートラルなど、高分子材料を取り巻く課題は多い。本発表では、スマートラボをはじめとしたMIツールを駆使しながら、新規材料の開発について、いくつかの事例を挙げながら、最近の我々の取り組みについて紹介する。

触媒インフォマティクスによるメタン酸化触媒開発

(北大理¹) ○高橋 啓介¹

Methane oxidation catalysts design via catalysts informatics (¹Graduate School of Science)○
Keisuke Takahashi¹

Catalytic informatics consists of three main components. These are the "catalyst database," the "process of extracting knowledge from data," and the "platform."^{1,2,3} Catalyst data sets can be created through high-throughput experiments and calculations with large-scale data acquisition and the use of literature data. The knowledge extraction process can actively utilize data mining and network methods as well as machine learning-based prediction. The construction of the platform does not require advanced programming techniques, and an environment for practicing catalytic informatics is readily available. These elements harmonize with each other and catalytic informatics is formed. This presentation will focus on the development of methane oxidation catalysts using catalyst informatics.

Keywords : Catalysts Informatics; Machine Learning; High-throughput Experiment

触媒インフォマティクスは、三つの主要な構成要素から成り立っている。これらは、「触媒データベース」、「データから知識を引き出す過程」、「プラットフォーム」である^{1,2,3}。触媒データは、ハイスループット実験・計算で大規模データの取得、文献データの活用などによってデータセットが作成可能である。知識の抽出プロセスでは、機械学習による予測だけでなく、データマイニング法やネットワーク法なども積極的に活用できる。プラットフォームの構築には、高度なプログラミング技術などが不要で、触媒インフォマティクスを実践するための環境が手軽に利用できる。これらの要素が相互に調和し合い、触媒インフォマティクスが成り立っている。今回の講演では、触媒インフォマティクスを駆使したメタン酸化触媒の開発を中心に紹介する。

1) K Takahashi, et.al, *ChemCatChem* 11 (4), 1146-1152(2019)

2) K Takahashi, et.al, *Cheml Comm* 59 (16), 2222-2238 (2023)

3) T Taniike, K Takahashi, *Nature Catalysis* 6 (2), 108-111 (2023).

エレクトロニクス材料開発におけるシミュレーション

(パナソニック ホールディングス株式会社) ○四橋 聡史

Simulation in the development of electronic materials (Technology Division, Panasonic Holdings Corporation) ○Satoshi Yotsuhashi

In recent years, informatics and simulation have played an increasingly important role in materials development. We report here on some of the simulation efforts for the development in the Panasonic Group. There are two main types of simulation technologies that we promote. One is a multi-scale calculation method that combines the electronic structure calculations and molecular dynamics or CAE calculations, and the other is a new material search by the combination of material simulations and machine learning technology. As an example of multiscale calculation, we will introduce a method for deriving the pressure-enthalpy diagram and temperature glide defining as difference between the dew and boiling point using quantum chemical calculations and molecular dynamics, which is necessary for calculating theoretical efficiencies of environmentally friendly refrigerants. Another topic is a new molecular search scheme for nonlinear optical response materials using DFT and machine learning techniques.

We will also introduce our recent activities to promote the use of computational techniques in materials development and to study the use of quantum computing.

Keywords : Quantum Chemistry; Molecular Dynamics; Machine Learning

近年、材料開発におけるインフォマティクスとシミュレーションの役割はますます重要になってきている。本講演では、パナソニックグループにおける材料開発のためのシミュレーション取組みの一端を報告する。我々が進める材料開発シミュレーション技術は主に2種類ある。一つは電子状態計算からスタートして、そこから計算されるパラメータを分子動力学計算やCAE計算などにつなぐことでマクロ物性までの算出を可能にするマルチスケール計算手法、もう一つは電子状態計算や分子動力学計算と機械学習技術を活用した新規材料探索である。マルチスケール計算の例として、環境配慮型冷媒の理論効率算出に必要な圧力-エンタルピー線図及び沸点と露点の温度差を示す温度グライドに関する量子化学計算と分子動力学を用いた導出手法の構築について、また新規材料探索の例として非線形光学応答材料の分子探索を機械学習アルゴリズムと量子化学計算を組み合わせて行った事例¹⁾について紹介する。

当日の講演では、材料開発現場への計算技術の普及活動や、量子コンピューティング活用検討などの最近の事例も併せて紹介する。

- 1) ハイスループット計算と機械学習を活用した光機能性有機材料の新規構造探索, 大越 孝洋, 大越 昌樹, 長尾 宣明, 四橋 聡史, *Panasonic Technical Journal*, **2021**, 67, 78.

パターン認識技術を活用した有機トランジスタ型化学センサ

(東大生研) ○南 豪

Organic Transistor-based Chemical Sensors with Pattern Recognition Techniques (*Institute of Industrial Science, The University of Tokyo*) ○Tsuyoshi Minami

Chemical information derived from various essential markers plays a significant role in diagnosis, environmental assessment, and food analysis, whereas chemical sensors for facile detection and analysis have not been fully established. To this end, the author has used organic transistors functionalized with supramolecular receptors for pattern recognition-driven chemical sensing. The presentation will contain the details of sensor designs and their applicability to real-sample analysis by using pattern recognition techniques.

Keywords : Organic Transistor; Pattern Recognition; Chemical Sensor; Artificial Receptors; Real-Sample Analysis

体液や環境水、食品サンプルには、多種多様な構造を持つ標的分子・イオン種が存在しており、マーカの種類とその濃度を含む化学情報は、病理診断や環境分析、食品管理の場面で重要な役割を担う¹⁾。レセプタとトランスデューサで構成される化学センサは、目には見えない標的種を捕捉し、その認識情報を可視化するための分析手段である²⁾。社会実装が加速する物理センサに対して、化学センサの開発が萌芽段階にあるのは、水中で分子認識能を発揮するレセプタの設計・具現化とそれらをセンサデバイスへと組み込む手法が確立されていないことに起因する¹⁾。本講演では、分子認識化学に基づくレセプタ設計と固液界面での化学センシングを達成するデバイス構造の両面から、多種多様な標的種に対する同時分析を実現する化学センサデバイスの設計指針に関して紹介する。

交差応答性を示す化学センサの設計には、天然の分子認識機構の一つである哺乳類の嗅覚系に着想を得たパターン認識型のレセプタ設計が求められる^{3),4)}。類似構造を有する標的種に対して、比較的緩やかな結合能を有するレセプタを必要とするパターン認識において、交差応答的な認識を得意とする超分子レセプタは有利となる^{5),6),7)}。他方、センサプラットフォームとして採用した有機トランジスタ (OFET) は、溶液法によって作製可能な電子デバイスであり、適切な分子認識能を賦与することで、標的種捕捉に伴う化学情報は閾値電圧または電流値の変化として読み出すことができる^{1),8)}。センサの設計において、駆動部の OFET と検出部を分離した延長ゲート構造では、固液界面での化学センシングにおいても安定したデバイス駆動が達成される^{1),8),9),10)}。本研究では、パターン認識駆動型の化学センシングを指向し、超分子レセプタを自己組織化単分子膜として修飾した延長ゲート型 OFET 化学センサについて紹

介する。

標的種の構造や濃度の違いによって変化する様々なトランジスタ特性は、多成分分析において有効な指紋パターンとなり得るため、データ解析技術^{3),11)}を駆使することによって、マーカー種を判別する定性分析や実サンプル中に含まれる標的種の未知濃度予測を行う定量分析へと展開できる^{12),13)}。

本講演では、パターン認識駆動型 OFET 化学センサの汎用性について議論するための分析例として、ヒト体液中に含まれるオキソアニオン類¹²⁾と果汁に含まれるポリアミン類検出¹³⁾について紹介する。具体的には、超分子レセプタの設計、デバイス作製プロセス、パターン認識技術の特徴と活用法を含めた内容について触れ、分子認識化学と有機エレクトロニクスの融合技術に基づく化学センサデバイス開発のアプローチについて論じる。

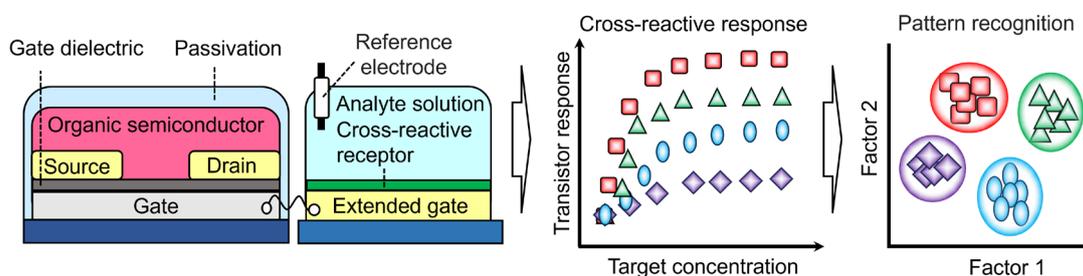


Fig. 1 (a) Schematic illustration of the extended-gate-type OFET chemical sensor functionalized with a cross-reactive receptor for pattern recognition. The OFET-based chemical sensor shows various transistor characteristics depending on analyte structures and their concentrations, which can be used as fingerprint-like profiles for pattern recognition.

- 1) A. Hulanicki et al., *Pure Appl. Chem.*, **1991**, 63, 1247.
- 2) T. Minami et al., *Phys. Status Solidi A*, **2023**, 220, 2300469 (Invited Review, Cover).
- 3) T. Minami et al., *Coord. Chem. Rev.* **2021**, 429, 213607 (Invited Review).
- 4) E. V. Anslyn et al., *J. Org. Chem.* **2009**, 74, 4479.
- 5) T. Minami et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2013**, 135, 15238.
- 6) T. Minami et al., *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, 136, 11396.
- 7) T. Minami et al., *Chem. Sci.* **2020**, 11, 3790. (Cover, Hot Article).
- 8) T. Minami et al., *ACS Sens.* **2019**, 4, 2571 (Invited Review, Cover).
- 9) T. Minami et al., *Appl. Phys. Lett.* **2014**, 104, 243703.
- 10) T. Minami et al., *Commun. Mater.* **2021**, 2, 8.
- 11) P. Anzenbacher, Jr. et al., *Chem. Soc. Rev.* **2010**, 39, 3954.
- 12) T. Minami et al., *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2022**, 14, 22903 (Cover).
- 13) T. Minami et al., *J. Mater. Chem. C* **2021**, 9, 11690 (Cover, HOT Paper)

シンポジウム | イノベーション共創プログラム (CIP) : 持続可能社会を創出する高分子科学の研究前線

2024年3月21日(木) 13:00 ~ 15:40 会場 A1433(14号館 [3階] 1433)

[A1433-4pm] 持続可能社会を創出する高分子科学の研究前線

座長、シンポジウム関係者：井狩 芳弘、原 賢二、辻 良太郎、粕谷 健一

石油化学は高分子科学工業を生み出し、衣食住にわたって我々の生活を豊かにしてきた一方で、近年では温室効果ガス排出やプラスチックごみの環境拡散といった新たな課題を生み出しています。これらの課題に対して、サーキュラーエコノミーコンセプトは、高分子科学による革新的な解決策創出の後押し要因となっています。樹脂を再利用するための技術や、特定の環境下で分解するような材料、CO₂やバイオマスなどから合成される新規材料等、様々な研究成果が生まれつつあり、高分子科学は大転換期を迎えようとしています。本セッションでは、持続可能社会を創出する高分子科学の研究前線を紹介すると共に、これからの高分子科学の在り方について議論します。

聴講後の[アンケート](#)へのご協力をお願いいたします。

◆ 日本語 ◆ 基調講演

13:00 ~ 14:00

[A1433-4pm-01]

樹脂分解触媒反応の開発とケミカルリサイクルへの展開

○野崎 京子¹ (1. 東京大学)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

14:00 ~ 14:30

[A1433-4pm-02]

スーパーエンジニアリングプラスチックのケミカルリサイクルを拓く解重合法の開発

○南 安規^{1,2} (1. 国立研究開発法人 産業技術総合研究所、2. 筑波大学連携大学院)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

14:30 ~ 15:00

[A1433-4pm-03]

物理劣化・物理再生理論により構築される新たなプラスチック資源循環

○八尾 滋¹ (1. 福岡大学)

◆ 日本語 ◆ 依頼講演

15:00 ~ 15:30

[A1433-4pm-04]

自立分離膜を用いた大気からの直接的CO₂回収○藤川 茂紀¹ (1. 九州大学)

15:30 ~ 15:40

開会挨拶

樹脂分解触媒反応の開発とケミカルリサイクルへの展開

(東大院工) 野崎京子

Development of catalytic resin-degradation reactions and their application to chemical recycling (*Graduate School of Engineering, The University of Tokyo*) Kyoko Nozaki

Conventionally, organic-polymer materials were synthesized from fossil resources and were intended to be discarded after use, namely, the one-way use. On the other hand, these wastes can be considered as attractive carbon resources. Accordingly, research aimed at reusing polymer materials is actively conducted globally. In this lecture, the author will present the current status of their “Resin Degradation Project” since 2021, focusing on catalyst development for the thermosetting-resin recycling¹. Tricks to facilitate decomposition of olefin-based polymers² and synthesis of CO₂-based polymers³ will be also briefly presented to initiate discussions on their potential application in society.

Keywords : Resin; Degradation; Catalyst; Chemical Recycling

従来、有機高分子材料は化石資源を原料として合成され、使用後は廃棄されるという一方向の使用が前提であった。しかし、これらの廃棄物は魅力的な炭素資源ととらえることができる。このため、高分子材料の再利用を目指した研究が国内外で活発に行われている。本講演では、演者らが2021年より「樹脂分解プロジェクト」で取り組んでいる、熱硬化性樹脂のリサイクルに向けた触媒開発について現状を報告する¹。併せてオレフィン系材料分解のための工夫²、二酸化炭素を原料とする高分子³についても簡単に紹介し、社会実装の可能性について議論するための話題提供としたい。

- 1) (a) Y. Liao, K. Takahashi, K. Nozaki, *J. Am. Chem. Soc. in press*. [10.1021/jacs.3c09061](https://doi.org/10.1021/jacs.3c09061). (b) T. Iwasaki, K. Tsuge, N. Naito, K. Nozaki, *Nat. Commun.* **2023**, *14*, 3279.
- 2) (a) G. Yonezaki, F. Seidel, K. Takahashi, K. Nozaki, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2023**, *96*, 545–549. (b) S. Tang, F. W. Seidel, K. Nozaki, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 26506–26510.
- 3) (a) M. Hill, S. Tang, K. Masada, Y. Hirooka, K. Nozaki, *Macromolecules* **2022**, *55*, 3311–3316. (b) S. Tang, Y. Zhao, K. Nozaki, *J. Am. Chem. Soc.* **2021**, *143*, 17953–17957. (c) R. Nakano, S. Ito, K. Nozaki, *Nature Chem.* **2014**, *6*, 325–331.

スーパーエンジニアリングプラスチックのケミカルリサイクルを拓く解重合法の開発

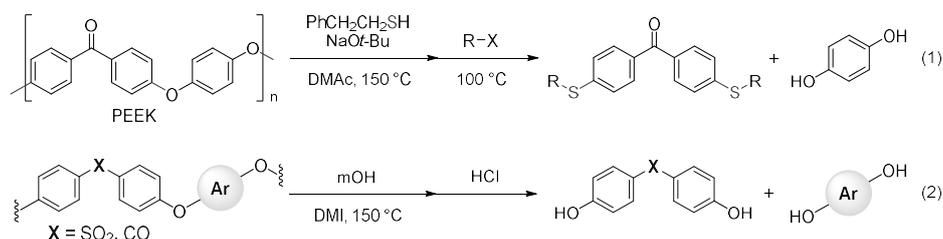
(産総研 IRC3) ○南 安規^{1,2,3}

Depolymerization of super engineering plastics toward chemical recycling (¹*Interdisciplinary Research Center for Catalytic Chemistry (IRC3)*, *National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)*, ²*PRESTO*, *Japan Science and Technology Agency (JST)*, ³*U. of Tsukuba*) ○Yasunori Minami^{1,2}

Super engineering plastics show high thermal stability and mechanical strength as well as chemical resistance. On the other hand, chemical recycling for these plastics has not been developed due to their stability. In this lecture, I report our recent development of the depolymerization of super engineering plastics toward the chemical recycling. One is that the depolymerization of polyetheretherketone (PEEK) with organo thiolates to form dithiofunctionalized benzophenone and hydroquinones. The products were applicable to the synthesis of various polymers. Second is the depolymerization of various super engineering plastics such as polysulfone (PSU), polyethersulfone (PESU), and PEEK by alkali hydroxides to form corresponding bisphenols.

Keywords : Chemical Recycling; Depolymerization; Phenol; Plastic; Sulfur

スーパーエンジニアリングプラスチックは、高い熱安定性と機械的強度、耐薬品性を示す。一方、その安定性からケミカルリサイクルの研究がほとんど進んでいないのが現状である。本講演では、ケミカルリサイクルに向けたスーパーエンジニアリングプラスチックの解重合法の開発について報告する。一つは、ポリエーテルエーテルケトン (PEEK) を有機チオレートで解重合し、ジチオ官能化ベンゾフェノンやヒドロキノンを生産する方法である (式1)¹⁾。この生成物は様々なポリマーの合成に応用可能であった。第二は、アルカリ水酸化物による各種スーパーエンジニアリングプラスチックの解重合で、対応するビスフェノール類を形成する (式2)^{2,3)}。



- 1) Y. Minami, N. Matsuyama, Y. Takeichi, R. Watanabe, S. Mathew, Y. Nakajima, *Y. Commun. Chem.* **2023**, *6*, 14.
- 2) Y. Minami, Y. Inagaki, T. Tsuyuki, K. Sato, Y. Nakajima, *JACS Au* **2023**, *3*, 2323–2332.
- 3) Y. Minami, R. Honobe, Y. Inagaki, K. Sato, M. Yoshida, *Polymer J.* DOI: 10.1038/s41428-023-00870-w.

物理劣化・物理再生理論により構築される新たなプラスチック資源循環

(福岡大研究推進部) 八尾 滋

Advanced Plastic Resource Circulation Based on the Physical Degradation and Physical Regeneration Theory (*Central Research Institute Fukuoka University*) Shigeru Yao

In Japan, the recycling ratio of plastics is about 85%. However, about 70% of the recycled plastics are used for energy recovery, about 5% for chemical recycling, and about 25% for mechanical recycling.

Our laboratory is engaged in the research and development of the advanced repelletizing process based on the "Physical Degradation/Physical Regeneration Theory" and its fundamental meso-region internal structure analysis method. In the pelletizing system, we have devised a new device element called a "Molten Resin Reservoir : MRR", and are investigating a very effective mechanism for improving the physical properties of the material derived from this element. In meso-area internal structure analysis, we are proposing new analysis methods using SAXS and AFM.

Keywords : Plastic mechanical recycle, Physical degradation, Physical regeneration, Meso-scale inner structure

2022年に施行された「プラスチック資源循環促進法」では、設計・製造段階から販売・提供段階、そして排出・回収・リサイクル段階において、事業者や自治体などが実施すべき行動指針が示されている。この中のリサイクルに関して福岡大学は高度物性再生プロセス構築に関して、Fig.1に示す「物理劣化・物理再生理論」を基盤として、各大学・研究機関ならびに企業とともに基礎ならびに応用の研究開発を行っている。その結果、①プラスチックは過度なせん断履歴を受けることで力学特性、特に伸びや靱性が大きく低下する物理劣化が生じること、②一方で動的変形などを与えることで物性が再生できること、③各々の力学特性の変化に応じて生じている、メソ領域のラメラ積層構造の変異が種々の手法で解析できること、④力学特性の変化は、系中の絡み合いの数ならびにそれによるタイ分子数が変化したためであると考えられること、などを示す成果が得られている。さらに、実用的なマテリアルリサイクルプロセスとして、樹脂

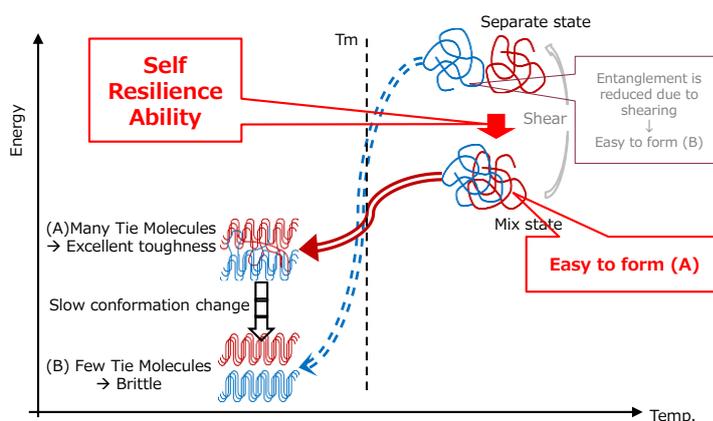


Fig.1 Diagram of Physical Degradation and Physical Regeneration Theory

溜まり部 (Molten Resin Reservoir : MRR) を設けた押出機を考案し、その性能や拡張の研究も行っている。この課題に関しては、実生産機レベルを目指したスケールアップ研究を実施し、2022年度末に吐出量が 300kg/hour の MRR が設置された 70mm φ の実証試験機を作製し、現在性能評価・運転条件検討を行っている。

また「物理劣化・物理再生理論」は、成形品の物性がせん断履歴に大きく依存することを示している。実際にゲート付近から採取した試験片の力学物性は、ゲートから離れた部位と比較すると著しく低下している。これは、ゲート付近がもっともせん断速度が大きく、ゲートから離れるに従って小さくなるためである。即ち射出成形品の物性は部位依存性を持つ不均質なものであり、さらにゲート付近の部位のリサイクル性も大きく低下する。この課題を解決するために、三光合成では新規な成形プロセスの開発研究を行っている。Fig.2 は成果の一例である。これまでの成形で得られた試料②はバージン品①よりも物性が低下していることが分かる。さらにリサイクルした試料③は、元の 1/5 までに物性が低下していることが分かる。一方金型内でのせん断履歴を均質にする新たな成形手法で作製した試料④は、物性が①とほぼ同じで維持されており、またリサイクルを行っても⑤に示すように物性低下が全くないことが分かる。この結果は、せん断履歴を均質化するという工夫を行うことで、初期物性においても力学特性が非常に均質に高くなるだけでなく、リサイクル時にも物性が維持されており、高度な再利用が効率的に可能になることが示されている。

プラスチックの資源循環を、社会負担やコスト課題なども考慮して、効率的・効果的に実施するためには、製品製作段階からの環境配慮設計を行うことが重要である。現状環境配慮設計としては一般的には、易解体やモノマテリアル化などが想定されているが、物性の高度化による薄肉化・軽量化、高耐久性付与による長寿命化、さらにリサイクル時の物性維持など、高分子物性の根本にかかわる取り組みが不可欠である。

今回示したように、「物理劣化・物理再生理論」は、プラスチックの成形からリサイクルまでの成形プロセスと物性に関する関連性を網羅的に示しているものであり、この理論を展開することで、成形時の環境配慮設計から高度リサイクルまで、一貫したプラスチック資源循環を構築することが可能となる。

この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO) の委託業務(JPNP20012)の結果得られたものです。

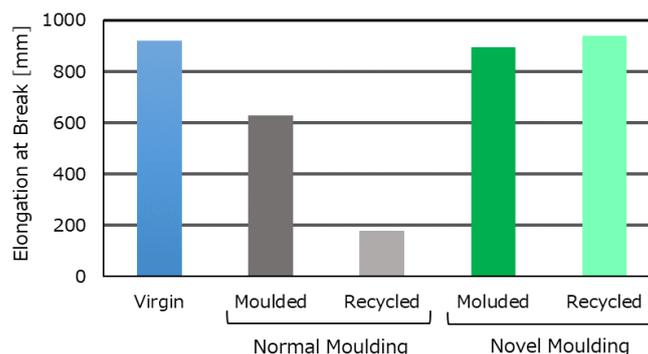


Fig.2 Molding method dependence of Elongation at break

自立分離膜を用いた大気からの直接的 CO₂ 回収

(九大 WPI-I2CNER¹・九大 K-NETs²) 藤川 茂紀^{1,2}

Direct Air Capture by free-standing nanomembranes (¹*International Institute for Carbon-Neutral Energy Research, Kyushu University*, ²*Research Center for Negative Emissions Technologies, Kyushu University*) ○Shigenori Fujikawa^{1,2}

CO₂ capture directly from the atmosphere, known as Direct Air Capture (DAC), is essential to achieving carbon neutrality. CO₂ capture by membranes is inherently superior to other technologies because there are no site limitations. However, conventional membranes have low permeability and their application to DAC has been considered impossible. To change this common perception, we fabricated a nanomembrane with a thickness of 34 nm and free-standing properties using a crosslinked polydimethylsiloxane material, and achieved an overwhelmingly high CO₂ permeability, several tens of times higher than the world's highest value.¹ Further membrane thinning with the thickness of the membrane to 17 nm was succeeded and its CO₂ permeability has reached about 50,000 GPU.² In such an ultra-thin membrane, the sorption behavior of gas molecules on the membrane surface becomes the rate-limiting step. In other words, the surface molecular design of the separation membrane is extremely important to improve the membrane performance. We have achieved high CO₂/N₂ selectivity by modifying the membrane surface in various ways.

Keywords : CO₂ capture, Direct Air Capture, DAC, free-standing nanomembrane

大気からの直接的 CO₂ (Direct Air Capture, DAC)は、カーボンニュートラル実現に必須である。設置場所に制限のない膜分離での CO₂ 回収は、DAC 用途として他技術に比べて優位である。しかしながら、従来の CO₂ 分離膜はその透過量が極めて少ないため、DAC への適用は不可能と考えられてきた。これに対し我々は、架橋性ポリシロキサン材料を用いて、厚みが 34nm で自立性をもつナノ膜の作製し、従来の CO₂ 透過度世界最高値の数十倍という、圧倒的に高い CO₂ 透過度を実現した。¹⁾ さらなる薄膜化(膜厚:約 17nm)を進め、約 50,000GPU という極めて高い CO₂ 透過度を実現した。²⁾ またこのような超薄膜化された分離膜では、分離膜表面での気体分子の収着挙動が律速段階になる。すなわち分離膜の表面分子設計が分離膜性能向上に極めて重要となる。我々は様々な分離膜表面の修飾を行い、高い CO₂/N₂ 選択性を実現した。



1) S. Fujikawa, M. Ariyoshi, R. Selyanchyn, T. Kunitake, *Chem. Lett.* **2019**,48, 1351.

2) M. Ariyoshi, S. Fujikawa, and T. Kunitake, *ACS Appl. Mater. Interfaces* **2021**, 13, 51, 61189.

シンポジウム | アジア国際シンポジウム：アジア国際シンポジウムーコロイド・界面化学ディビジョンー

2024年3月21日(木) 9:00 ~ 11:40 皿 A1422(14号館 [2階] 1422)

[A1422-4am] アジア国際シンポジウムーコロイド・界面化学ディビジョンー

座長、シンポジウム関係者：小倉 卓、村上 良、藤井 秀司、飯山 拓

9:00 ~ 9:05

開会挨拶

◆ 英語 ◆ Keynote Lecture

9:05 ~ 9:40

[A1422-4am-01]

Particle Adhesion on Thin Liquid Layer

○Sanghyuk Wooh¹ (1. Chung-Ang University)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

9:40 ~ 10:00

[A1422-4am-02]

Solution and Foam Properties of Homogeneous Polyoxyethylene-Type Nonionic Surfactants with Multi-Branched Chains

○Shiho Yada¹ (1. Tokyo University of Science)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

10:00 ~ 10:20

[A1422-4am-03]

Lipid Based Artificial Multicellular Systems for Compartmentalized and Stimuli-Responsive Drug Delivery

○Richard James Archer¹, Tsuyoshi Inaba¹, Shin-Ichiro M. Nomura¹ (1. Tohoku University)

10:20 ~ 10:25

休憩

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

10:25 ~ 10:45

[A1422-4am-04]

Colloidal interaction-mediated wrapping of zeolite crystals with graphene oxide sheets

○大塚 隼人¹、久保 圭¹、金子 克美¹ (1. 信州大学)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

10:45 ~ 11:05

[A1422-4am-05]

The influence of electrostatic and hydrodynamic interactions on gelation of colloidal particles

○Joeri Opdam¹, Michio Tateno¹, Hajime Tanaka^{1,2} (1. Research Center for Advanced Science and Technology, The University of Tokyo, 2. Department of Fundamental Engineering, Institute of Industrial Science, The University of Tokyo)

◆ 英語 ◆ Keynote Lecture

11:05 ~ 11:40

[A1422-4am-06]

Clathrate hydrates: A cool way to store carbon dioxide permanently

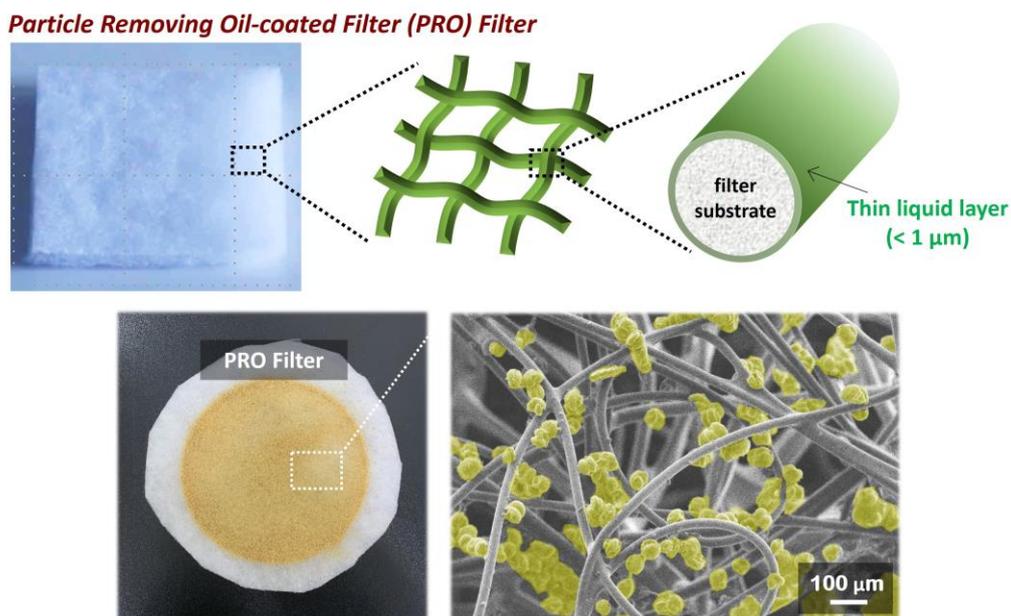
○Praveen Linga¹ (1. National University of Singapore)

Particle Adhesion on Thin Liquid Layer

(Department of Chemical Engineering, Chung-Ang University) ○ Sanghyuk Woo

Keywords: Adhesion; Air Filter; Capillary Force; Surface Modification; Thin Liquid Film

Dry dust filters with small pores have been worldwide used to clean air and now are everywhere in our daily life. Dust, also called particulate matter (PM), are captured at the pore of the filters, therefore smaller pores result in higher PM capturing efficiency. However, air becomes more difficult to pass through the filter as the pores get smaller, which decreases the air permeability and increases the air pressure drop across the filter. This dilemma, caused by the low adhesion of solid PMs to the dry solid surface of the filters, has been one of the most important issue to be overcome on dry dust filter for several decades. Here, inspired by human nose filtering system with thin mucus coated nasal hairs, we create a dry dust filter having a thin non-volatile liquid layer at the surface of the pores. The strong adhesion of PM on liquid thin film improves the PM capturing efficiency without affecting the air permeability of the filter. The liquid thin film coated filter particularly exhibits outstanding dust filtering capability at fast speed filtering system with no re-dispersion of captured PMs. In addition, the suppressed PMs re-dispersion allows a new bi-directional dust filtering. The Particle Removing Oil-coated Filter (PRO) filter proposes a new paradigm of dust filtering and opens a new door for fast and efficient air cleaning.



Solution and Foam Properties of Homogeneous Polyoxyethylene-Type Nonionic Surfactants with Multi-Branched Chains

(Faculty of Engineering, Tokyo University of Science) ○Shiho Yada

Keywords: Multi-branched chain; Polyoxyethylene-type surfactant; Aggregation; Foam; Small-angle neutron scattering

1. Introduction Double-chain surfactants, comprising two hydrophobic groups and one hydrophilic group, have been known to exhibit some interesting properties, such as low surface tension, excellent wetting ability, and formation of vesicles in dilute aqueous solutions. Surfactants containing branched alkyl chains also exhibit low Krafft temperature, low surface tension, excellent penetration, and high salt resistance. Herein, we are focusing on branched double-chains-containing surfactants, which are expected to possess properties of both the double-chain and branched chain-containing compounds. In this presentation, I would like to introduce two homogeneous polyoxyethylene (EO) alkyl ether and ester-type nonionic surfactants with multi-branched double chains: bC_7 - bC_9 EO₁₂ and bC_7 - bC_9 COOEO₁₂, where bC_7 and bC_9 represent branched chains with total carbon numbers of 7 and 9, respectively, while EO₁₂ represents dodecaoxyethylene (Fig. 1). Their solution and foam properties were investigated and compared to those of homogeneous EO alkyl ether and ester-type nonionic surfactants with symmetric and asymmetric linear double chains (C_8 - C_8 X and C_6 - C_8 X; C_6 and C_8 represent linear hexyl and octyl chains, respectively; X represents EO₁₂ in dodecaoxyethylene ether and COOEO₁₂ in dodecaoxyethylene ester) as well as a conventional surfactant with a linear single chain (C_{18} EO₁₂). The effects of structures of the branched and linear alkyl chains, number of alkyl chains, and structure of the ether or ester group between the alkyl and EO chains on the solution and foam properties were also investigated.

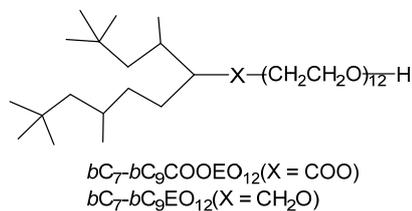


Fig. 1 Structures of homogeneous EO-type nonionic surfactant.

2. Experiment Their solution properties were investigated through cloud point, surface tension, and small-angle X-ray scattering measurements installed at the BL40B2 beamline of the SPring-8 facility. These foam properties were measured by small-angle neutron scattering (SANS) using an i-MATERIA installed on the BL20 beamline at the MLF of the J-PARC in combination with other techniques.

3. Results and Discussion

3.1. Solution properties¹⁾ The surface tension at the critical micelle concentration (CMC) of homogeneous EO-type nonionic surfactants decreased in the order of linear single chain (38.2 mN m^{-1}) > linear double chain (30.4 – 32.5 mN m^{-1}) > multi-branched double chain (27.9 – 28.8 mN m^{-1}) (Fig. 2). An increase in the ratio of methyl groups to the total carbon number of the hydrophobic group reduced the surface tension. The effectiveness of the adsorption and

micellization process (CMC/C_{20}) ratio increased in the order of linear single chain < linear double chain < multi-branched double chain. In particular, the CMC/C_{20} ratio of the multi-branched double-chain-type surfactants ($bC_7-bC_9EO_{12}$ and $bC_7-bC_9COOEO_{12}$) was considerably higher than that of the linear single-chain and double-chain ones: this indicates that the former easily adsorbed at the air/water interface. These results suggest that the adsorption ability at the air/water interface for multi-branched double-chain surfactants was higher than that of the linear counterparts. In the temperature vs. concentration phase diagram (Fig. 2), the regions of lamellar liquid crystals were extensive because of the small interfacial curvature induced by the steric hindrance of the multi-branched chains.

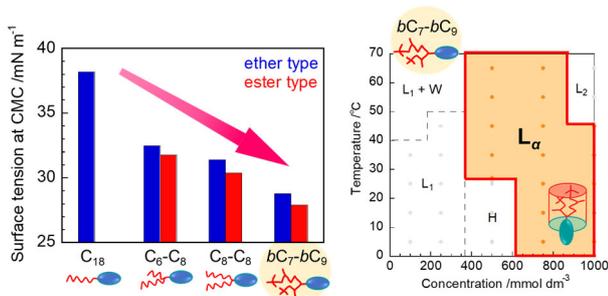


Fig. 2 Surface tension at CMC and temperature vs. concentration phase diagrams.

3. 2. Foam properties²⁾ SANS can provide insight into the microstructure of the surfactant-stabilized foam. We performed SANS experiments to assess the structures and stabilities of the homogeneous EO-type nonionic surfactants ($bC_7-bC_9EO_{12}$, $C_8-C_8EO_{12}$, and $C_{18}EO_{12}$)-stabilized foams, thereby revealing the existence of micelles in the films between bubbles containing the plateau border and determining the average radius of the bubble. The $bC_7-bC_9EO_{12}$ and $C_8-C_8EO_{12}$ surfactants with multi-branched chains and double-chains increased the foam stability compared to $C_{18}EO_{12}$. The films between bubbles contained micelles similar to those found in the bulk solution. For $bC_7-bC_9EO_{12}$ and $C_8-C_8EO_{12}$, the average radius of the bubbles immediately after foaming was of the order hundreds of μm , and finally, these radii became large to the order of thousands of μm . On the other hand, in the case of the $C_{18}EO_{12}$, the radii rapidly increased after foaming and the bubbles collapsed (Fig. 3). The $bC_7-bC_9EO_{12}$ and $C_8-C_8EO_{12}$ exhibited fast adsorption rates, high interfacial elasticity, and unlike linear $C_{18}EO_{12}$, formed rod-like micelles in the foam film. These anisotropic aggregates with their high interfacial activity were found to stabilize the foam considerably. Thus, this study presents a first-time account in terms of using SANS to probe the structure of foams stabilized by homogeneous EO-type nonionic surfactants. The information on the structure and stability of these foams is expected to be useful in food, cosmetics, and other industries.

References 1) S. Yada, et al., *Colloids Surf. A* **2022**, 648, 129247. 2) S. Yada, et al., *Langmuir* **2023**, 39(43) 15355–15361.

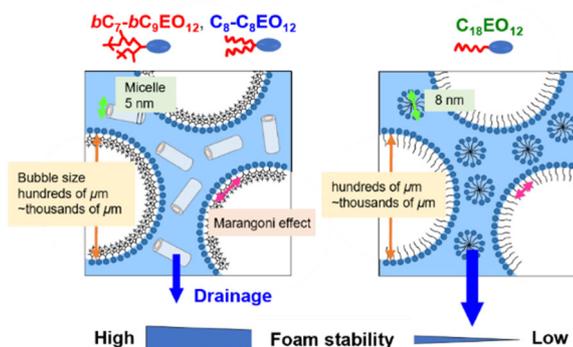


Fig. 3 Microstructure of the surfactant-stabilized foam.

Multicellular lipid compartments for efficient and scalable micro-compartmentalization with stimuli-responsive release.

Richard Archer,¹ Tsuyoshi Inaba,¹ Shin-Ichiro Nomura.¹

¹Graduate School of Engineering, Department of Robotics, Tohoku University

Keywords: Self-assembly; Micro-compartmentalization; Lipids; Controlled release, HIPE.

Multicellular Lipid Compartments (MCLCs) are lipid stabilized High Internal Phase Emulsions (HIPE), which show remarkable encapsulation efficiencies, with dispersed phase concentrations far exceeding the continuous phase (Fig 1a). MCLCs have typical internal phase contents of over 88% leading to tight packed droplets delineated by lipid rich membranes, leading to their “cellular-like” morphologies (Fig 1b).^{1,2} “Cellular” micro-compartment sizes are typically between 50 to 500 μm depending on formation conditions. The synthesis process easily achieves milliliter scales within minutes and is highly scalable. The MCLC can be simply pipetted into an external water phase to create a double emulsion. Due to MCLCs semi-solid-like properties, 3D printing of vast arrays of micro-compartment within external aqueous media has been demonstrated (Fig. 1c). MCLC systems are extremely stable with months-long observations showing no loss of structure or unwanted release of internal contents. A proposed application for this system is in transdermal drug delivery by creation of portable and applicable MCLC patches by gelling the external aqueous phase. Using membrane solubilization techniques to release the contents, we show the unique morphology can confer advantages in control of the release rate. We also show the controlled release of the internal contents by environmental triggers which could lead to environmentally dependent delivery of encapsulated compounds (Fig. 1d).

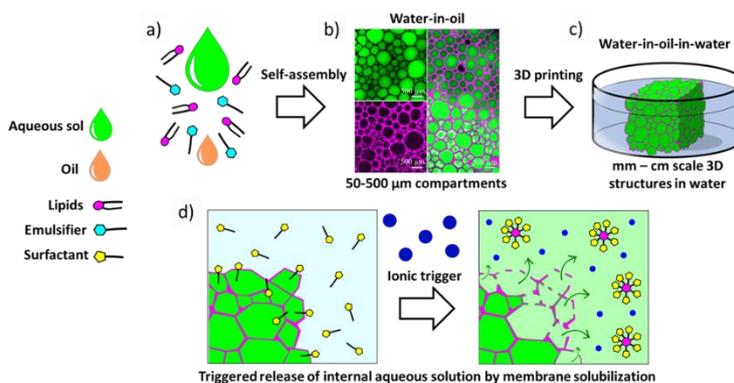


Fig.1 Schematic of MCLC system showing (a) Initial components for self-assembly (b) confocal micrograph of formed MCLC with aqueous phase (green), oil phase (pink) and combined image, (c) 3D MCLC in external aqueous phase (d) Salt triggered membrane solubilization to release internal contents.

- (1) Nomura, S. M.; Shimizu, R.; Archer, R. J.; Hayase, G.; Toyota, T.; Mayne, R.; Adamatzky, A.. *ChemSystemsChem* **2022**, 4 (5), (2) Archer, R. J.; Hamada, S.; Shimizu, R.; Nomura, S.-I. M. *Langmuir* **2023**, 39 (14), 4863–4871.

Colloidal interaction-mediated wrapping of zeolite crystals with graphene oxide sheets

(¹Research Initiative for Supra-Materials: RISM, Shinshu University, ²Faculty of Engineering, Shinshu University) ○Hayato Otsuka,¹ Kei Kubo,¹ Daisuke Saeki,^{1,2} Katsumi Kaneko¹

Keywords: Graphene oxide; zeolite; wrapping; salting out; colloidal stability

Wrapping of inorganic and organic solids is an approach to modify the colloidal properties of the solids. Graphene oxide (GO)/graphene-wrapping imparts high dispersibility or electrical conductivity to the solids and has application potentials for batteries and supercapacitors. GO spontaneously wraps positively charged particles due to the Coulombic interaction with negatively charged GOs. Wrapping of negatively charged particles is not that easy way and salting out enables to wrap the negatively charged particles with GO. Control of the surface properties of GO also is important for better wrapping because the properties of GO changes with time in colloidal states.¹ In this study, we examined wrapping of negatively charged zeolite crystals with GO by addition of ammonium chloride (NH₄Cl) with an aid of colloid chemistry.

We prepared GO dispersions via improved Hummers' method from Madagascar graphite. MFI zeolite crystals dispersed in water were mixed with GO dispersion under the different concentrations of NH₄Cl solution. The mixture was shaken vigorously and then left under the dark to obtain GO wrapped MFI zeolite crystals (GO-MFI).

The formation of GO-MFI flocculation depends on the concentration of NH₄Cl. MFI zeolite crystals and GOs separate below 0.01 mol dm⁻³, above which GO-MFI flocculation is formed at the bottom. The negative zeta potential of MFI zeolite and GO particles increases with increasing the concentration and GO wraps MFI zeolites, when the zeta potential is low enough. The wrapping process is divided into three stages depending on the concentration (Fig. 1). MFI zeolite and GO particles are separately disperse in the low concentration region and GO partially wraps MFI zeolites in the middle. Wrapping completes and some GO sheets bridge GO-MFI particles in the high concentration range. GO wrapping improves the colloidal stability of zeolite and the GO-MFI are stable in aqueous solution for more than two weeks.

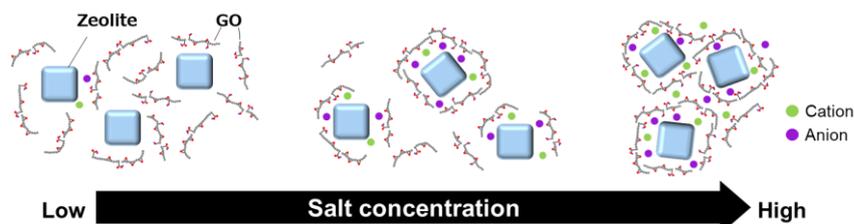


Fig. 1 Wrapping process of zeolite with GO.

1) H. Otsuka, K. Kaneko, *et. al.*, *Nat. Commun.* in third revision.

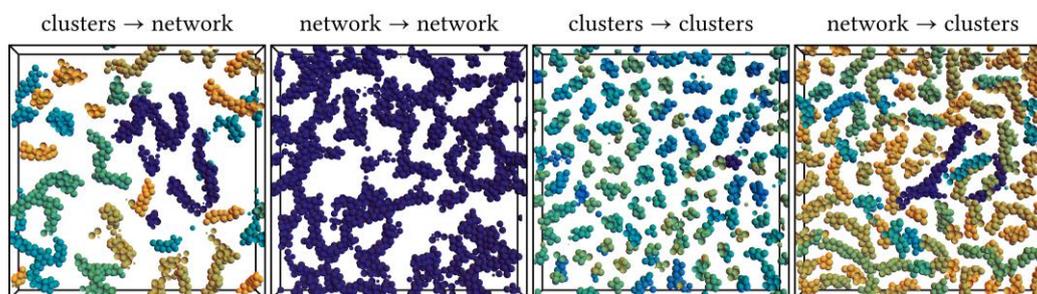
The influence of electrostatic and hydrodynamic interactions on gelation of colloidal particles

(¹Research Center for Advanced Science and Technology, The University of Tokyo, ²Department of Fundamental Engineering, Institute of Industrial Science, The University of Tokyo) ○Joeri Opdam,¹ Michio Tateno,¹ Hajime Tanaka^{1,2}

Keywords: Charged colloids; Gelation; Cluster phase; Hydrodynamic interactions; Fluid particle dynamics simulations

Colloids with short-range attractive interactions can form gels as a result of dynamically arrested phase separation. Such gels are soft solid materials consisting of a colloidal network and an intertwined solvent. Due to their interesting transport and mechanical properties, colloidal gels have many applications in products such as foods, cosmetics and drug delivery. Generally, colloids in such systems exhibit long-range repulsive electrostatic interactions in addition to the short-range attraction. The combination of these competing interactions strongly influences the gelation process¹. For example, previous studies have shown that gelation can occur by the percolation of equilibrium clusters² that have a preferred cluster size due to the relatively large increase in the number of repulsive interactions upon increasing cluster size.

In this talk, the structure evolution of charged colloidal systems that do not exhibit an equilibrium cluster phase is discussed. Systematic computer simulations were performed for different concentrations and interaction potentials. At early stages the aggregation of particles either results in compact clusters or in a percolating network with thin branches. In both cases, the final structure can be either a cluster phase or a gel phase depending on the simulation parameters. The final structures, and thus the mechanical and transport properties, can be remarkably different depending on the simulation parameters and the structure evolution pathway, as seen in the figure below which shows slices of representative obtained structures. Finally, we briefly discuss the influence of hydrodynamic interactions on the structure evolution. Accounting for hydrodynamic interactions is computationally demanding and investigating their role in gelation processes is important to guide future simulation studies.



- 1) A. I. Campbell, V. J. Anderson, J. S. van Duijneveldt, and P. Bartlett, *Phys. Rev. Lett.* **2005**, *94*, 208301.
- 2) J. Ruiz-Franco and E. Zaccarelli, *Annu. Rev. Condens. Matter Phys.* **2021**, *12*, 51.

Clathrate hydrates: A cool way to store carbon dioxide permanently.

(¹Department of Chemical and Biomolecular Engineering, College of Design and Engineering, National University of Singapore, Singapore) ○Praveen Linga¹

Keywords: *Gas Hydrates; Clathrate Hydrates; CO₂ Sequestration, CCS, Ocean Sequestration*

Climate change is known to be dominantly caused by the increased concentration of greenhouse gases in the atmosphere, in particular carbon dioxide (CO₂). The clathrate hydrate process has been demonstrated over the years as promising technology for innovative applications like natural gas storage, carbon dioxide capture, seawater desalination, cold energy storage etc. CO₂ hydrate, a solid compound made of molecular CO₂ enclathrated in crystalline lattices formed by water molecules, is an attractive option to capture and for long-term CO₂ sequestration. Methane (CH₄) hydrates in oceanic sediments have been stable for millions of years. As a natural analog, is it possible to store CO₂ in the form of hydrates in oceanic sediments forever? In this presentation, the state of the art on clathrate hydrate technology pertaining to carbon capture and storage will be discussed in detail. Furthermore, future research and development opportunities and pathways for commercialization will be discussed.

シンポジウム | アジア国際シンポジウム：アジア国際シンポジウムー光化学ディビジョンー

2024年3月21日(木) 13:00 ~ 15:40 皿 A1422(14号館 [2階] 1422)

[A1422-4pm] アジア国際シンポジウムー光化学ディビジョンー

座長、シンポジウム関係者：阿部 二郎、今吉 亜由美、重光 孟、小林 洋一、森 直、池田 浩、中嶋 琢也、長谷川 真士、堀内 新之介、廣瀬 崇至

13:00 ~ 13:05

開会挨拶

◆ 英語 ◆ Keynote Lecture

13:05 ~ 13:40

[A1422-4pm-01]

Coordination Assembly of Photofunctional Lanthanide-Organic Architectures

○Qing-Fu Sun¹ (1. Fujian Institute of Research on the Structure of Matter)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

13:40 ~ 14:00

[A1422-4pm-02]

キラルな多核錯体を用いた円偏光発光材料の開発

○小野 利和¹ (1. 九州大学)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

14:00 ~ 14:20

[A1422-4pm-03]

アザ[n]ヘリセン (n=9-19) の合成とそのキラル光学特性および電気化学特性の系統的研究

○田中 隆行¹、松尾 悠佑¹、権 正行¹、田中 一生¹、関 修平¹ (1. 京都大学)

◆ 英語 ◆ Keynote Lecture

14:20 ~ 14:55

[A1422-4pm-04]

Helical Synthetic Nanographene with Atomic Precision

○Jiaobing Wang¹ (1. Sun Yat-Sen University)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

14:55 ~ 15:15

[A1422-4pm-05]

大きな非対称性因子を示す円偏光発光性分子の振電解析と設計戦略

○石割 文崇^{1,2} (1. 大阪大学大学院、2. JSTさきがけ)

◆ 英語 ◆ Invited Lecture

15:15 ~ 15:35

[A1422-4pm-06]

量子化学計算を用いた無輻射失活過程の解析：光電子移動触媒を用いたラジカル反応への応用

○原 祐^{1,2} (1. WPI-ICReDD、2. JST-ERATO)

15:35 ~ 15:40

閉会挨拶

Coordination Assembly of Photofunctional Lanthanide- Organic Architectures

Metallosupramolecular architectures have a wide range of application prospects in recognition and sensing, biomimetic catalysis, and drug delivery. We have introduced rare earth metal ions, which bear excellent optoelectromagnetic and catalytic properties, into the structural design of coordination supramolecular systems. The lanthanide supramolecular edifices overcome the problem that many metals in coordination supramolecular systems are only used as connecting nodes and lack their own functionality. We have developed precise assembly and luminescence control strategies for rare earth coordination supramolecules, and further promoted their applications in optical sensing, up-conversion luminescence, extraction, and multimodal biological imaging based on the synergistic effect of inorganic and organic components.

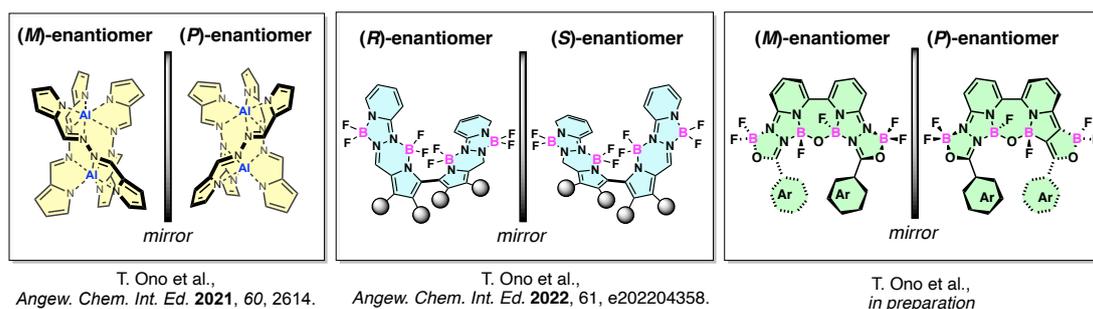
Achieving Circularly Polarized Luminescent Materials Based on Chiral Multinuclear Complexes

(¹Graduate School of Engineering, Kyushu University, ²Center for Molecular Systems (CMS), Kyushu University) ○Toshikazu Ono,^{1,2}

Keywords: Boron Complexes; Aluminum Complexes; Axial Chirality; Helical Chirality; Circularly Polarized Luminescence

Materials that exhibit strong fluorescence in both solution and solid states, particularly those showing two types of left- and right-handed circularly polarized luminescence (CPL), have recently garnered significant interest. Notably, metal complexes are at the forefront of CPL materials due to their ability to form various chiral structures based on ligand and metal ion coordination. However, the propensity to form complexes often compromises their stability, leading to potential racemization and reduced CPL activity. Therefore, metal complexes that maintain chiral stability while exhibiting strong luminescence are the subject of intense modern research.

In this context, our study advances the development of functional dyes derived from multinuclear complexes of typical elements, highlighting their chiroptical properties. Specifically, we have focused on synthesizing dinuclear triple-helical complexes,¹⁻³ tetranuclear complexes,^{4,5} and helicene-like complexes⁶ featuring elements such as aluminum and boron. Our research demonstrates that these complexes' enantiomers, or mirror-image counterparts, serve as dyes that display both circular dichroism (CD) and CPL activity. This presentation will delve into the synthesis processes of these complexes and share detailed insights into their synthesis techniques and chiral luminescent properties.



1) T. Ono and K. Ishihama et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 2614. 2) K. Ueno and T. Ono et al., *submitted*. 3) Y. Konishi and T. Ono et al., *in preparation*. 3) L. Cui, H. Shinjo and T. Ono et al., *Angew. Chem. Int. Ed.* **2022**, *61*, e202204358. 4) L. Cui and T. Ono et al., *J. Mater. Chem. C* **2023**, *11*, 2574-2581. 5) L. Cui, R. Furuta and T. Ono et al., *submitted*.

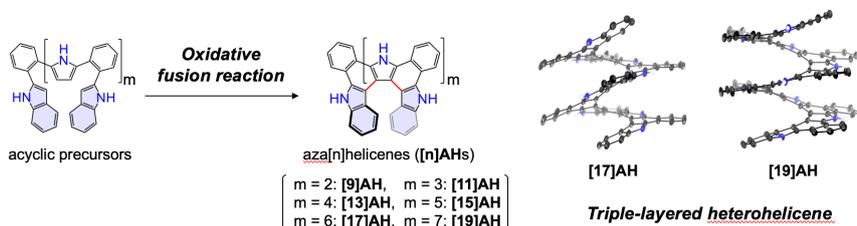
Synthesis of aza[n]helicenes (n = 9-19) and systematic studies on their (chir)optical and electrochemical properties"

(¹Graduate School of Engineering, Kyoto University) ○Takayuki Tanaka¹, Yusuke Matsuo¹, Masayuki Gon¹, Kazuo Tanaka¹, Shu Seki¹

Keywords: Heterohelicene; Oxidative Fusion Reaction; Aromaticity; Hydrogen Bonding; Circularly Polarized Luminescence

Heterohelicenes, in which heteroatoms are embedded into the helicene backbones, have attracted attention because of their excellent luminescence and redox properties. Generally, heterohelicenes are more electron-rich compared with carbohelicenes, thus their HOMO energy levels are continuously destabilized with the π -extension. Therefore, it is difficult to synthesize long heterohelicenes with full conjugation, whereas several heterohelicenes with a double-layered structure have been synthesized; one example is diazatrioxa[13]helicene.¹⁾ Furthermore, a triple-layered structure was accomplished with oxa[n]helicene (n=17, 19) albeit with disrupted π -conjugation.²⁾ To qualitatively evaluate the electronic properties of helicenes, however, it is necessary to systematically synthesize fully conjugated heterohelicenes of different lengths, and a new synthetic strategy toward longer heterohelicene would be indispensable.

We recently reported oxidative fusion reactions of *ortho*-phenylene-bridged oligopyrroles to afford various heterocirculenes and heterohelicenes.³⁾ Notably, tetraaza[8]circulenes, with planar structures excluding any sterically encumbering substituents, are fairly soluble in THF and DMSO. This property arises from effective hydrogen-bonding interactions between the pyrrolic NH site and the H-bond accepting solvent molecule. Inspired by this molecular design principle, herein we report a synthetic challenge for longer azahelicenes with outer-pointing pyrrolic NH sites, and a series of benzannulated aza[n]helicenes up to n=19 were successfully obtained from the corresponding acyclic precursors.⁴⁾ Comprehensive characterizations by NMR, UV/Vis and fluorescence spectroscopy, electrochemistry, as well as CD and CPL spectra of the enantiomers revealed the π -conjugation along the helix and between the layers.



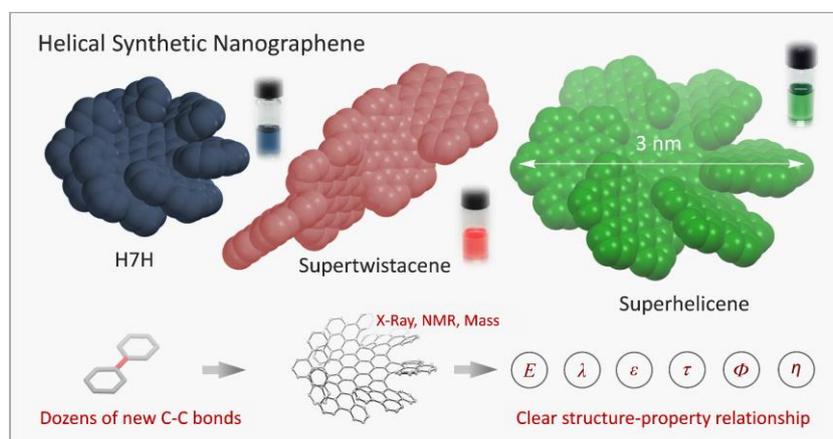
1) S. K. Pedersen, K. Eriksen, M. Pittelkow, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 18419. 2) J. Nejedlý, I. G. Stará, I. Starý *et al.* *Angew. Chem. Int. Ed.* **2017**, *56*, 5839. 3) T. Tanaka, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **2022**, *95*, 602. 4) Y. Matsuo, M. Gon, K. Tanaka, S. Seki, T. Tanaka, *ChemRxiv*. DOI:10.26434/chemrxiv-2023-4z7z6.

Helical Synthetic Nanographene with Atomic Precision

(School of Chemistry, Sun Yat-Sen University) ○Jiaobing Wang

Keywords: Nanographene; Helical; PAH; Chiroptical Properties; Conjugation

Atomically precise synthesis of novel 3D molecular nanographene (NG), comprising hundreds of conjugated carbon atoms and possessing excellent properties, is one of the most challenging research topics in modern synthetic chemistry. We create a new research line featured by a series of giant helical NGs such as superhelicene and supertwistacene,¹⁻⁶ which are prepared in a highly efficient manner via the cyclotrimerization of alkyne and the Scholl oxidation. These synthetic achievements set a series of new records, which include the biggest chiral NG ever synthesized in solution, the first helical graphene nanoribbon having a thermally stable configuration, the polycyclic aromatic hydrocarbon displaying the most prominent light absorption capability, and the chiral NG showing the strongest Cotton effect. These studies provide fundamental knowledge for understanding the structure-property relationship of synthetic NG at a new level of sophistication.



- 1) Y. Zhu, et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2018**, *140*, 4222.
- 2) Y. Zhu, et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2019**, *141*, 5511.
- 3) Y. Wang, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2019**, *58*, 16966.
- 4) S. Ma, et al. *J. Am. Chem. Soc.* **2020**, *142*, 16887.
- 5) Y. Chen, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.* **2021**, *60*, 7796.
- 6) Y. Zhu, et al. *Acc. Chem. Res.* **2023**, *56*, 363.

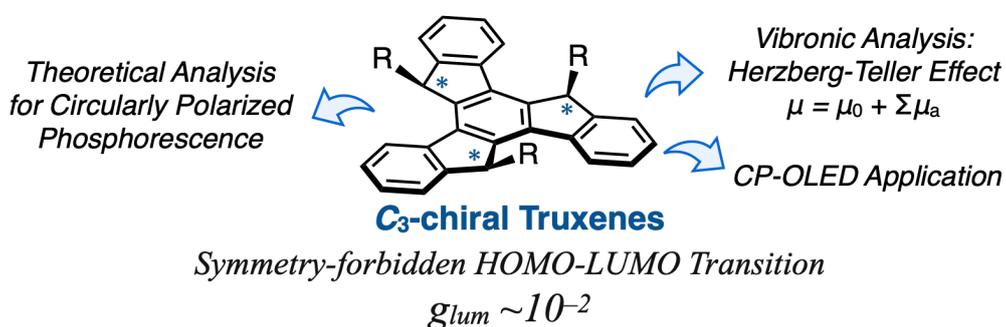
Vibronic Analysis and Design Strategy for Circularly Polarized Luminescent Molecules with Large Dissymmetry Factors

(¹Graduate School of Engineering, Osaka University, ²JST-PRESTO)

○Fumitaka Ishiwari^{1,2}

Keywords: Circularly Polarized Luminescence, Truxene, Vibronic Analysis, Herzberg–Teller Effect

Recently, significant effort has been devoted to creating new molecules that show circularly polarized luminescence (CPL) and can be applicable to devices from both experimental and theoretical approaches. The g_{lum} value is approximately represented by $g_{\text{lum}} \propto (|\mathbf{m}|/|\boldsymbol{\mu}|) \cdot \cos\theta$, where θ is the angle between electric transition dipole moment $\boldsymbol{\mu}$ and magnetic transition dipole moment \mathbf{m} . Lanthanide complexes are representative examples that exhibit large g_{lum} values due to their small $|\boldsymbol{\mu}|$ values arising from the *symmetry-forbidden* nature of *f-f* transitions. Here we show a new design strategy to achieve a large g_{lum} for based on the *symmetry-forbidden* transition of π -conjugated molecules. This approach was successfully demonstrated by the fact that trivial *syn*-5,10,15-trisubstituted truxenes¹ exhibit excellent CPL of the order of 10^{-2} . We showed that the molecular vibration dramatically lowers the CPL property through Herzberg-Teller vibronic analysis² and variable-temperature CPL measurement. Furthermore, at low temperatures, *syn*-5,10,15-trimethyltruxene exhibits long-lifetime and strong phosphorescent CPL, which can be analyzed by calculating transition dipole moments using molecular orbitals in the triplet excited state. Finally, a conformationally rigid double-decker-type truxene with robust CPL properties at high temperatures was applied as an emitter of electroluminescence device exhibiting circularly polarized electroluminescence with high g value. This study provides not only a new design strategy to achieve high g values, but also insights into the gap between experimental and theoretical CPL properties, as well as phosphorescent CPL property of molecules.



1) A. M. Echavarren, *et al.*, *Chem. Eur. J.* **2002**, *8*, 2879. 2) F. Santoro, *et. al.*, *J. Comput. Chem.* **2023**, *44*, 626.

量子化学計算を用いた無輻射失活過程の解析：光電子移動触媒を用いたラジカル反応への応用

(北大 WPI-ICReDD¹・JST-ERATO²) ○原 祐^{1,2}

Analysis of non-radiative decay pathways using quantum chemical calculations: Application to photoredox-catalyzed radical reaction (¹WPI-ICReDD, Hokkaido Univ., ²JST-ERATO)

○Yu Harabuchi^{1,2}

The Photoresponse of molecules is understood by four processes, i.e. internal conversion, intersystem crossing, fluorescence, and phosphorescence. In the mechanistic analysis of photoreactions based on quantum chemical calculations, it is important to obtain the conical intersection (CI) and seam of crossing (SX) regions because non-radiative decays efficiently occur via these regions. We proposed systematic search methods for CI and SX geometries and analyzed various types of photofunctional molecules. Explorations of non-radiative decay paths were effective in the mechanistic analyses of molecular fluorescence, ultrafast decay processes of molecules, and photoreactions of metal complexes where both singlet and triplet states contribute. Recently, we investigated the mechanism of Knowles's light-promoted catalytic intramolecular hydroamination using systematic reaction path exploration. The obtained reaction path network includes reaction paths via transition states and non-radiative decay paths through SXs between different electronic states. It was shown that the bond formation/cleavage competes with single electron transfer (SET) between the catalyst and substrate. The energetically favorable SET path was determined by introducing a practical computational model representing SET as non-adiabatic transitions via SXs between the substrate's potential energy surfaces for different charge states adjusted based on the catalyst's redox potential. Calculations showed that the reduction and proton shuttle process proceeded concertedly. Also, the relative importance of SET paths varies depending on the catalyst's redox potential, affecting the yield.

Keywords : Quantum chemical calculations; Reaction path network; Reaction path search; Conical intersection; Seam of crossing

光反応では、励起した分子は、内部転換過程、項間交差過程、蛍光過程、りん光過程により基底状態へと失活する。一般に内部転換及び項間交差過程はポテンシャル交差（円錐交差および交差シーム）領域を通じて効率的に起こるため、光反応の理論解析では、ポテンシャル交差構造を求めることが重要である（図1）。しかし、これらの構造は基底状態の分子の安定構造とは異なる場合が多く、その推定は容易ではない。これに対して、我々は、時間依存密度汎関数理論と反応経路探索法に基づきポテンシャル交差構造を網羅的に探索する

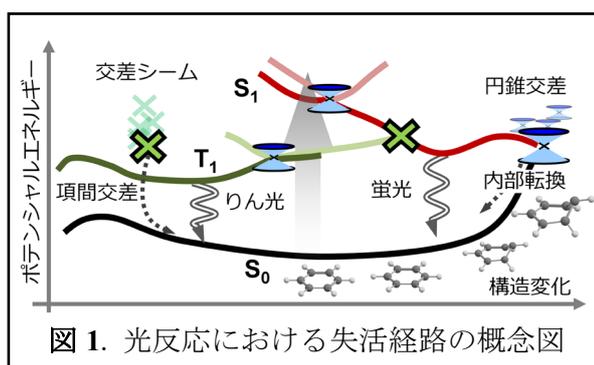


図1は、光反応における失活経路の概念図を示している。縦軸はポテンシャルエネルギー、横軸は構造変化を示す。基底状態（S₀）から励起状態（S₁）へは垂直励起が行われ、S₁からは蛍光過程を経てS₀へ失活する。S₁からT₁へは内部転換（IC）が行われ、T₁からはりん光過程を経てS₀へ失活する。S₁とT₁の間には交差シーム（SX）が存在し、S₁とS₀の間には円錐交差（CI）が存在する。分子の構造変化は、これらの交差点を介して効率的に起こる。

手法を開発してきた¹⁻⁵⁾。

我々は、上述のポテンシャル交差探索に基づく無輻射失活経路の解析により、多様な分子の光応答機構を解析できることを示してきた。多環芳香族炭化水素の蛍光量子収率に関する研究では、内部転換経路の反応障壁に基づき蛍光量子収率の大小を定性的に説明できることを示した⁶⁻⁸⁾。また、大環状芳香族分子の蛍光に関する研究を通じて、実際に分子設計が進められるような大きさの分子に対してもこの議論が適用できることを示した⁹⁾。最近では、熱活性遅延蛍光で重要となる逆項間交差過程の速度定数が交差シーム構造計算に基づき高精度に予測できることを明らかにし、この速度定数予測が分子設計にも利用可能であることを示した⁹⁾。さらに複数の応用計算を通じて、分子の超高速過程や金属錯体における一重項・三重項状態が複雑に関与する過程の機構解析にも同手法が応用可能であることを示した¹⁰⁻¹²⁾。最近では、Knowlesらによって報告されたイリジウム光電子移動触媒を用いたヒドロアミノ化反応¹³⁾に対して、無輻射失活経路探索に基づく解析を適用した(図2)。基質の一重項基底状態および二重項基底状態の電子エネルギーを触媒の酸化還元電位に基づき補正することで、触媒-基質間の電子授受と基質の反応過程を簡便に記述する方法を開発し、光電子移動触媒を用いた触媒反応サイクルの全貌を明らかにした¹⁴⁾。講演では、無輻射失活経路探索の開発と応用に加え、キラルな化合物への応用に向けた取り組みについて紹介する。

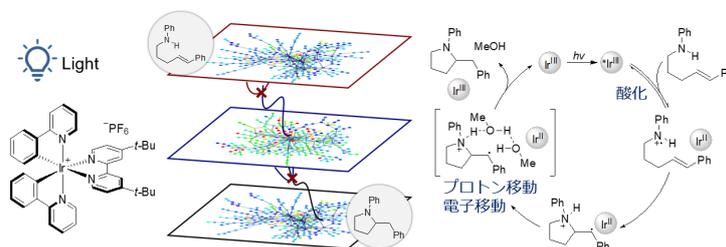


図2. 光電子移動触媒を用いた触媒反応サイクルの機構解析

- 1) Y. Harabuchi, S. Maeda, T. Taketsugu, N. Minezawa, and K. Morokuma, *J. Chem. Theory Comput.* **2013**, *9*, 4116.
- 2) S. Maeda, Y. Harabuchi, T. Taketsugu, and K. Morokuma, *J. Phys. Chem. A* **2014**, *118*, 12050.
- 3) Y. Harabuchi, T. Taketsugu, and S. Maeda, *Chem. Phys. Lett.* **2017**, *674*, 141.
- 4) Y. Harabuchi, M. Hatanaka, S. Maeda, *Chem. Phys. Lett. X* **2019**, *2*, 100007.
- 5) K. Ikemoto, T. Tokuhira, A. Uetani, Y. Harabuchi, S. Sato, S. Maeda, H. Isobe, *J. Org. Chem.* **2020**, *85*, 150.
- 6) Y. Harabuchi, T. Taketsugu, and S. Maeda, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2015**, *17*, 22561.
- 7) Y. Harabuchi, T. Taketsugu, S. Maeda, *Chem. Lett.* **2016**, *45*, 940.
- 8) Y. Harabuchi, K. Saita and S. Maeda, *Photochem. Photobiol. Sci.* **2018**, *17*, 315.
- 9) N. Aizawa, Y. Harabuchi, S. Maeda, Y. -J. Pu, *Nat. Comm.* **2020**, *11*, 3909.
- 10) Y. Yamakita, N. Yokoyama, X. Bing, N. Shiokawa, Y. Harabuchi, S. Maeda, T. Kobayashi, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2019**, *21*, 5344.
- 11) Y. Harabuchi, J. Eng, E. Gindensperger, T. Taketsugu, S. Maeda, and C. Daniel, *J. Chem. Theo. Comp.* **2016**, *12*, 2335.
- 12) K. Saita, Y. Harabuchi, T. Taketsugu, O. Ishitani, and S. Maeda, *Phys. Chem. Chem. Phys.* **2016**, *18*, 17557.
- 13) A. J. Musacchio, L. Q. Nguyen, G. H. Beard, and R. R. Knowles, *J. Am. Chem. Soc.* **2014**, *136*, 12217.
- 14) Y. Harabuchi, H. Hayashi, H. Takano, T. Mita, S. Maeda, *Angew. Chem. Int. Ed. Engl.*, **2022**, *62*, e202211936.

シンポジウム | 特別企画：粒子・分子の凝集・分散・集合を用いた機能性システムと利用

2024年3月21日(木) 9:00 ~ 11:40 会場 A1423(14号館 [2階] 1423)

[A1423-4am] 粒子・分子の凝集・分散・集合を用いた機能性システムと利用

座長、シンポジウム関係者：武田 真一、米澤 徹

このシンポジウムでは、4つの講演を予定し、それぞれが異なる視点から粒子と分子の集合による革新的なシステムの開発と利用について紹介する。ナノ粒子と機能分子の集合を用いた光機能や光誘起電荷分離分子集合体を活用した光電変換素子の開発などの学術的基本研究成果について議論したのち、テーマをシフトして、分子集合が導触感がヒトそっくりの人工皮膚に与える影響について、さらに感性価値を高めるO/W乳化の進化についての最新の研究成果を共有します。最後に、企業の観点から、化粧品にかかわる粒子分散・凝集系と機能構築を紹介する。本シンポジウムを通じて、粒子と分子の凝集・分散・集合が科学と産業の両面でどのように利用され、新たな機能性システムの可能性を広げているかについて議論したい。

9:00 ~ 9:05

開会挨拶

◆ 日本語

9:05 ~ 9:40

[A1423-4am-01]

光の高効率利用をめざしたプラズモニクナノ粒子の組織化・集合化

○秋山 毅¹ (1. 滋賀県立大学)

◆ 日本語

9:40 ~ 10:20

[A1423-4am-02]

化粧品・皮膚洗浄における乳化と分散

○野々村 美宗¹ (1. 山形大学)

◆ 日本語

10:20 ~ 11:00

[A1423-4am-03]

ベシクル/ディスク構造転移により生成した界面吸着層で安定化された乳化物の物性

○渡辺 啓¹ (1. 武庫川女子大学)

◆ 日本語

11:00 ~ 11:35

[A1423-4am-04]

化粧品エマルジョンの調製とその評価

○坂 貞徳

11:35 ~ 11:40

閉会挨拶

光の高効率利用をめざしたプラズモニックナノ粒子の組織化・集合化

(滋賀県大工) ○秋山 毅

Assembling and aggregation of plasmonic nanoparticles towards efficient use of photoenergy
(School of Engineering, The University of Shiga Prefecture) ○Tsuyoshi Akiyama

Plasmonic gold and silver nanoparticles absorb light due to their plasmon resonance. When such nanoparticles absorb light, localized enhanced electric fields are generated around the nanoparticles within nano-space. These electric fields can excite photoactive molecules and substances same as light, which can be used as nano light source. Further strong electric fields are generated between micro gap between nanoparticles, whose estimated maximum intensity achieve few tens of thousands of times comparing to irradiated light power. Hence, the control of distance and arrangement of plasmonic nanoparticles is important issue.

Our research group has developed and fabricated assemblies consisting of plasmonic gold and silver nanoparticles as dispersed particles on flat substrates, two-dimensional ultra-thin film assemblies of nanoparticles, and three-dimensional nanostructures consisting of fused nanoparticles. The preparation principal of these nanoparticle assemblies, and practical fabrication protocols will be summarized and introduced in the presentation.

Keywords : Plasmonic Nanoparticles; Gold Nanoparticles; Liquid-liquid Interfacial Precipitation; Salting Out; Electrostatic Adsorption

金や銀のナノ粒子は、そのプラズモン共鳴にもとづいて可視光を吸収する。この時、ナノ粒子の表面直近のナノ空間には、局所的に増強された電場が生じる。この電場は、光と同様に分子や物質を励起することが可能であり、実質的なナノ光源として扱うことができる。また、ナノ粒子間のギャップにはより強い電場が生じ、その強度は照射光量に対して最大数万倍に達する。従って、これらの増強電場の応用の際には、ナノ粒子間の距離や配置の制御は重要である。

我々の研究グループでは、既報に基づいてクエン酸イオンで保護された金・銀ナノ粒子を合成し、各種のプラズモニック材料の素構造として用いてきた^{1,2)}。具体的には、これらのナノ粒子を微粒子の分散・凝集状態の制御の概念に基づいて、孤立分散・二次元凝集薄膜・三次元融合体の状態で基板表面に担持し、蛍光・ラマン散乱の増強や光電変換の高効率化などに適用してきた³⁻⁵⁾。本発表では、これらのナノ粒子の組織化・集合化の原理と具体的な作製法について概説し、あわせて応用の事例をいくつか紹介したい。

- 1) J. Turkevich, P. C. Stevenson and J. Hillier, *Discuss. Faraday. Soc.*, **1951**, 11, 55.
- 2) P. C. Lee and D. Meisel, *J. Phys. Chem.*, **1982**, 86, 3391.
- 3) Y. Kuwahara, T. Akiyama and S. Yamada, *Langmuir*, **2001**, 17, 5714.
- 4) T. Akiyama, A. Masuhara, Y. Matsuda, T. Arakawa, T. Munaoka, T. Onodera, H. Oikawa and S. Yamada, *Jpn. J. Appl. Phys.*, **2011**, 50, 04DH15.
- 5) K. Sugawa, T. Akiyama, Y. Tanoue, T. Harumoto, S. Yanagida, A. Yasumori, S. Tomita and J. Otsuki, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **2015**, 17, 21182.

化粧品・皮膚洗淨における乳化と分散

(山形大院理工) ○野々村 美宗

Emulsification and dispersion in cosmetics and skin cleaning (*Graduate School of Science and Engineering, Yamagata University*) ○Yoshimune Nonomura

An important science for developing cosmetics is interfacial chemistry, in addition to dermatology and hair science because cosmetics contain water, oil, and powder, that are inherently immiscible. Therefore, emulsions and dispersions have long been studied as a core technology for cosmetics and skin cleansers. As a result, not only preparation technologies for long-term stable emulsions and dispersions, but also formulations such as nanoemulsions, bi-continuous emulsions, and Pickering emulsions have been developed and applied. This presentation will review a bird's-eye view of the history of these emulsions and dispersions in the field of cosmetics and body cleansers, and will also introduce raw materials of plant origin that have recently attracted attention.

Keywords : Emulsion; Dispersion; Cosmetic; Body cleanser

一般には、「画期的な化粧品やヒット商品の基盤となるサイエンス」、と聞いてすぐに思いつくのは、細胞を対象とした実験を行って植物エキスなどから有効成分を探索したり、臨床の観点から皮膚のバリア機能を高めたりアンチエイジングの手法を提案する皮膚科学や毛髪科学なのではなかろうか。確かに、これらの研究によって、1990年代以後、さまざまな機能性化粧品のカテゴリーが生まれ、世界中のひとびとの皮膚や毛髪を健康かつ美しくするための貢献がなされてきた。

一方で、もう一つ忘れてはならない重要な化粧品の基盤として界面化学が挙げられる。化粧品や皮膚洗淨料は目的とするスキンケア・メイクアップ・クレンジング効果を実現するとともに、塗り心地や香りが心地よいことも求められることから、水・油・粉体という本来は混じり合わない材料を配合し、実感できるレベルの効果効能が現れるような高いレベルの処方仕上げるのが求められる。そのため、水の中に液滴や固体粒子を分散したエマルションやディスパージョンはヒトの皮膚や毛髪を健康かつ美しくする化粧品や汚れを落として清潔にする皮膚洗淨料を開発するためのカギとなるコアテクノロジーとされ、長年にわたって研究がなされてきた。その結果、1970年代以後、長期間安定なエマルションやディスパージョンの調製技術だけでなく、細かい液滴が分散したナノエマルション、水相と油相の両方が連続相を形成したバイコンティニューアエマルション、いわゆる界面活性剤の代わりに粘土鉱物や固体粒子を利用してエマルションを安定化する粘土鉱物乳化やピッカリングエマルションなど、実に数多くの製剤が開発され、最新の化粧品や身体洗淨料に応用展開されてきたのだ。本講演では、これらの化粧品・身体洗淨料分野におけるエマルション・ディスパージョンの歴史を俯瞰的に振り返るとともに、最近注目されている植物由来の原材料などについて紹介する。

ベシクル/ディスク構造転移により生成した界面吸着層で安定化された乳化物の物性

(武庫川女子大・薬) ○渡辺啓

Physicochemical property of emulsions stabilized with interfacial membrane generated through vesicle/disc structural transition (*School of Pharmacy and Pharmaceutical Science, Mukogawa Women's University*) ○Kei Watanabe

Emulsions are non-equilibrium. For this reason, the products vary depending on the preparation process, and their state changes with time. Furthermore, it is known empirically that emulsification properties (preparation and stability) vary with the type of oils. In this study, emulsions with a lamellar liquid crystal phase as the adsorption layer at the emulsion interface were investigated. The properties of O/W emulsions formed with water and oil phases, which are the excess solvent phase separated from the lamellar liquid crystal phase were studied based on the phase equilibria of a ternary system.

Keywords : Emulsion, Lamellar liquid crystalline phase, Vesicle, High internal phase emulsion, Electron microscopy

乳化物は熱力学的に非平衡系であるため、時間とともに状態が変化する。また、乳化剤や油相の組成などによって生成物の物性や安定性が異なる。このように乳化研究では制御すべき変数が多いため、産業応用では経験則に負うところが大きかった。本研究ではポリエーテル変性シリコーン (PEMS) によるベシクル水分散液を油とともに強撹拌することでラメラ液晶を界面吸着層として有する乳化物が生成することを見出し、調製と安定性の観点から評価を行った。まず、同一組成の乳化物を調製する際 (Fig. 1) に、本法ではベシクルを経由しない場合と比較して合一に対する安定性が高いことを見出した。これはベシクルが油と衝突することで均一な界面膜を形成し安定性に有利な状態となるためと考えられた。次に、油としてジメチルシロキサン (6cs)、トリイソオクタン酸グリセリル (TIOG) および両者の

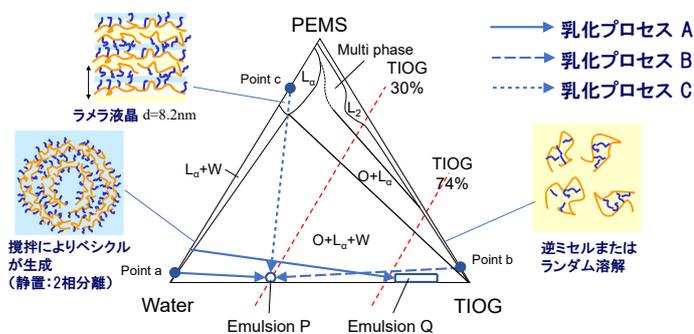


Fig. 1 PEMS 系相平衡図における乳化物調製プロセス

混合物を用いた場合、混合物の場合に合一に不安定になり、乳化安定化が難しいとされる TIOG 単独の場合も混合物よりも安定性は良好であった。この結果は PEMS と油との相溶性に帰結できる。さらには合一に強い性質を活かし、高内相比乳化物調製を試みたところ、TIOG を用いた場合に 86vol%もの内相比を有する乳化物が調製された。当日は、電子顕微鏡観察のデータを含めた考察も紹介する。

1) K. Watanabe et al., *J. Oleo. Sci.* **2023**, 72, 693-708.

化粧品エマルションの調製とその評価

○坂 貞徳

Preparation of cosmetic emulsions and their evaluation

Sadanori Ban

Most cosmetics are dispersed colloids, which are thermodynamically unstable systems. Among cosmetics, skin care cosmetics include emulsions composed of water and oil, and the composition of water and oil changes according to the skin care application. Depending on the composition of water and oil, the viscosity, a physical property of cosmetics, can range from high to low. On the other hand, emulsions are prepared by either the dispersion method or the condensation method, and in the cosmetics field, the latter is used due to the manufacturing process. In this presentation, we will explain the preparation method of emulsions used in cosmetics and report on the evaluation method of the stability of cosmetic emulsions. In particular, the evaluation methods for each cosmetic material type from the prototype to the product level, such as particle system measurement, zeta potential measurement, thermal measurement, X-ray diffraction, and electron microscopic observation, will be explained with actual examples.

Keywords : *Cosmetic, emulsion, Stability, dispersion*

化粧品の多くは分散コロイドであり、熱力学的には不安定な系である。化粧品の中でもスキンケア化粧品では水と油を成分としたエマルションがあり、スキンケアの用途に合わせて水と油の組成が変わり、化粧品の物性である粘性は高いものから低いものまで幅広く使われる。一方、エマルションの調製は分散法と凝縮法があり、化粧品分野では製造プロセスから後者の凝縮法が使われる。本公演では化粧品に使われるエマルションの調製法を解説し、化粧品エマルションの安定性の評価方法について報告する。特に、化粧品のプロトタイプから製品レベルまで、粒子系測定、ゼータ電位測定、熱測定、X線回折、電子顕微鏡観察など、それぞれの化粧品材型に対する評価法を実例をあげて解説する。

シンポジウム | 特別企画：化学における情報・AIの活用

2024年3月21日(木) 13:00 ~ 15:40 皿 A1423(14号館 [2階] 1423)

[A1423-4pm] 化学における情報・AIの活用

座長、シンポジウム関係者：岩澤 伸治、栗原 和枝、寺山 慧、松原 誠二郎、大野 充、楳山 儀恵

現在、高度に発達した情報学手法が既存のビッグデータである化合物情報を全て利用できることを可能にしつつあり、実験・理論に加えて情報学という3つの視点で駆動するこれまでにない手法が化学を変えつつある。これまでの手法では開発できなかった物質を、考えられないような短期間で、しかも自動的に得ることが現実に起きている。それらの結果と化学産業のプロセスの制御・保全にまで結び付ける試みも進められつつある。この新しい手法の革新性は、化学の研究力、化学産業の生産力に大きな変革をもたらすものと期待される。このような中で、これからの化学の担い手である若い研究者・学生に向けて、我が国の情報化学を利用する化学の現状と今後の展望をこの分野を先導する研究者から紹介していただく。

13:00 ~ 13:05

開会挨拶

◆ 日本語

13:05 ~ 13:30

[A1423-4pm-01]

データ駆動科学の歴史と展望

○船津 公人¹ (1. 奈良先端科学技術大学院大学)

◆ 日本語

13:30 ~ 13:55

[A1423-4pm-02]

データ駆動型材料研究の諸問題：限られたデータの壁を乗り越える

○吉田 亮¹ (1. 統計数理研究所)

◆ 英語

13:55 ~ 14:20

[A1423-4pm-03]

マテリアルズインテグレーション：欲しい性能から材料・プロセスをデザインする

○出村 雅彦¹ (1. NIMS)

14:20 ~ 14:30

休憩

◆ 日本語

14:30 ~ 14:45

[A1423-4pm-04]

マテリアル革新力強化戦略に基づく政府の取組について

○宅間 裕子¹ (1. 文部科学省)

◆ 日本語

14:45 ~ 15:05

[A1423-4pm-05]

ロボット実験とAIの連携による蓄電池材料開発の革新

○松田 翔一¹ (1. 物質・材料研究機構)

◆ 日本語

15:05 ~ 15:20

[A1423-4pm-06]

バッチ型自動反応実験装置の活用と化学反応空間の構築

○榎山 儀恵¹ (1. 分子科学研究所・総合研究大学院大学)

◆ 日本語

15:20 ~ 15:35

[A1423-4pm-07]

機械学習に基づく繊維状ウイルスの合目的配列制御と機能物性創出

○澤田 敏樹¹ (1. 東京工業大学)

15:35 ~ 15:40

閉会挨拶

データ駆動化学の歴史と展望

(奈良先端大院・データ駆動型サイエンス創造センター) 船津公人

History and Prospects of Data-Driven Chemistry (Data Science Center, Institute of Science and Technology) Kimito Funatsu

In 1965, the DENDRAL project was started at Stanford University¹⁾. It was the world's first challenging project in chemistry by Edward A. Feigenbaum, Bruce Buchanan, Joshua Lederberg, and Carl Djerassi, to analyse data obtained from mass spectrometry and use knowledge of organic chemistry to determine the structure of organic compounds of unknown structure. It was the first challenging project of its kind in the world for chemistry. As software, DENDRAL is considered the world's first expert system and artificial intelligence, as it automates the decision-making and problem-solving process as a chemist would do. Sixty years have passed since then and the state of the world of data-driven chemistry has changed dramatically, and there is no longer any turning back of the trend and awareness of the need for it. This lecture provides an overview of the history of data-driven chemistry at home and abroad, as well as a full overview of the current targets of data-driven chemistry initiatives, with a focus on what issues have been addressed in the history of the field. It will also touch on what data-driven chemistry aims to achieve in the future and consider what chemical researchers should consider while developing data-driven chemistry.

Keywords: Data-driven chemistry, Chemoinformatics, Materials Informatics, Process Informatics, Research transformation cycle.

1965年、スタンフォード大学でDENDRALプロジェクトがスタートした¹⁾。質量分析装置から得られるデータを分析し、有機化学の知識も使って構造未知の有機化合物の構造を決定することを目的に、Edward A. Feigenbaum, Bruce Buchanan, Joshua Lederberg, Carl Djerassiによる化学を対象とした世界初の挑戦的プロジェクトであった。ソフトウェアとしてのDENDRALは、化学者が行うような判断と問題解決の過程を自動化したものであるため、世界初のエキスパートシステム、人工知能と言われている。それから60年が経過しデータ駆動化学の世界の在り様は大きく変貌し、もはやその流れと必要性の意識が後戻りすることはない。国内外のデータ駆動化学の歴史を概観すると同時に、その歴史の中で何が課題として取り組まれたのかにフォーカスしながら、現在のデータ駆動化学の取り組み対象の全貌を概観する。また、今後データ駆動化学が目指す事柄にも触れつつ、化学研究者はデータ駆動化学を展開しながら何を考えるべきかを考える。

- 1) Lindsay, Robert K., Bruce G. Buchanan, Edward A. Feigenbaum, and Joshua Lederberg, Applications of Artificial Intelligence for Organic Chemistry: The Dendral Project. McGraw-Hill Book Company, 1980.

データ駆動型材料研究の諸問題：限られたデータの壁を乗り越える

(情報・システム研究機構 統計数理研究所) ○吉田 亮¹

Opportunities and Challenges in Data-Driven Materials Research: Overcoming the Barrier of Limited Data (¹*The Institute of Statistical Mathematics, Research Organization of Information and Systems*) ○Ryo Yoshida¹

Needless to say, the most crucial resource in data-driven materials research is data. In this talk, we will present machine learning methodologies and strategy for overcoming the hurdle of limited data, and our collaborative efforts between academia and industry for co-creating common foundational database of polymer properties. One strategy to overcome the barrier of limited data resources is the integrated analysis of limited amounts of experimental data and massive data obtained from computer simulations. To achieve this, we are developing the open-source software RadonPy, which automates polymer property calculations through all-atom classical molecular dynamics simulations [2]. Currently, we have formed an industry-academia collaboration consortium (involving 5 universities and 32 companies) and are developing a comprehensive polymer property database covering the chemical space of 10^5 - 10^7 polymers using the supercomputer "Fugaku." In this talk, we will showcase several key applications of RadonPy, such as polymer property prediction based on Sim2Real transfer learning using the RadonPy database, polymer material automated design system consisting of automated computational experiments with RadonPy, molecular design using generative AI, and a sequential experimental planning through multi-objective Bayesian optimization.

Keywords : Machine Learning; Descriptor; Explainable AI; Database; Crystal Structures

データ駆動型材料研究における最も重要な資源はデータである。本講演では、高分子材料研究において、限られたデータ資源の壁を乗り越えるための機械学習の方法論や産学連携による共通基盤データ共創の取り組み等を紹介し、マテリアルズインフォマティクスの現状と将来展望を論じる。データ資源の壁を乗り越えるための一つの方策は、実験データとシミュレーションデータの統合解析である。我々は全原子古典分子動力学シミュレーションによる高分子物性計算を全自動化するオープンソースソフトウェア RadonPy の開発を推進している[2]。産学連携コンソーシアム（現時点で1国研・5大学・32企業に属する189名が参画）を形成し、スーパーコンピュータ「富岳」を用いて 10^5 - 10^7 ポリマーが張るケミカルスペースを網羅する高分子物性データベースを開発している。本講演では、RadonPy データベースを用いた Sim2Real 転移学習に基づく高分子物性予測、RadonPy 自動計算機実験・生成 AI・多目的ベイズ最適化から構成される高分子材料自動設計システムとその実証例などを紹介する。

[1] Aoki et al., Multitask machine learning to predict polymer-solvent miscibility using Flory-Huggins interaction parameters. *Macromolecules* 56, 5446–5456 (2023).

[2] Hayashi et al., RadonPy: automated physical property calculation using all-atom classical molecular dynamics simulations for polymer informatics. *npj Computational Materials* 8, 222 (2022).

マテリアルズインテグレーション：欲しい性能から材料・プロセスをデザインする

(NIMS¹) ○出村 雅彦¹

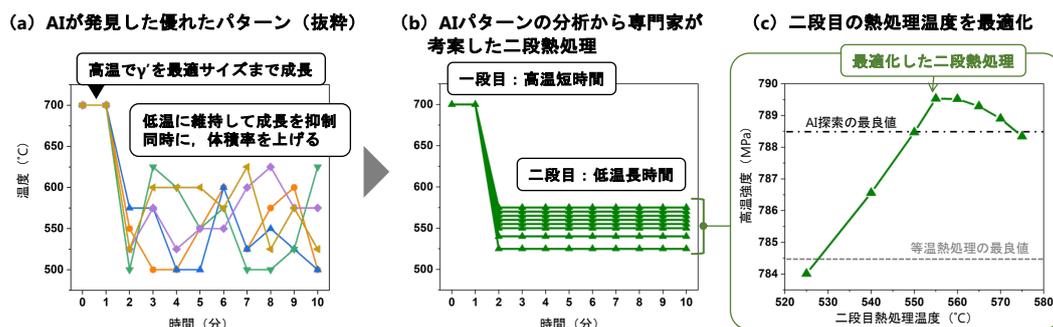
Materials Integration for inverse materials/process design from desired performance

(¹National Institute for Materials Science)○Masahiko Demura

Designing materials and processes from the desired performance is a typical inverse problem of materials development, which follows the reverse of the causality relation. Solving this requires a trial-and-error approach with repeated analysis of forward problems. The idea of accelerating it by utilizing computation and artificial intelligence is materials integration, and MInt is the system that implements this concept. Although the proof of concept has been demonstrated mainly for metallic structural materials, the approach and concept can be widely applied to materials in general. In this presentation, the author will introduce a case study in which a new heat treatment method was devised through collaboration between AI and experts, utilizing MInt.

Keywords : Computational Materials/Process Design; Structural Materials; Academia-Industry collaboration digital platform; Data-driven R&D

欲しい性能から材料・プロセスをデザインすることが材料開発と言えるが、これは因果律の逆を辿る典型的な逆問題である。これを解くには順問題の解析を繰り返しながら試行錯誤していくことになる。この試行錯誤を計算機と人工知能を活用して加速するという考えがマテリアルズインテグレーションであり、これを具現化したシステムが MInt である¹⁾。これまで金属系構造材料を中心にコンセプト実証されてきたものの、そのアプローチや考え方は広く材料全般に展開できる。講演では MInt を活用して、AI と専門家の協業によって新しい熱処理方法を考案した事例²⁾を紹介する。



- 1) マテリアルズインテグレーションの挑戦. 出村 雅彦, 鉄と鋼. **2023**, 109, 490.
- 2) Artificial intelligence inspired design of non-isothermal aging for $\gamma - \gamma'$ two-phase, Ni-Al alloys. V. Nandal, S. Dieb, D.S. Bulgarevich, T. Osada, T. Koyama, S. Minamoto, M. Demura, Sci. Rep. **2023**, 13, 12660.

マテリアル革新力強化戦略に基づく政府の取組について

(文科省・内閣府) 宅間裕子

Government initiatives based on Materials Innovation Strategy (*Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology*) Hiroko Takuma

Materials are an important fundamental technology that contributes to the realisation of Society 5.0 and the transformation to the sustainable society that balances economic development and the resolution of social issues. Innovation in this field needs to be accelerated through the use of data and AI, based on Japan's strengths.

In April 2021, the Japanese Government formulated the Materials Innovation Strategy. This presentation will introduce the Government's efforts to promote 'data-driven R&D' based on this strategy, with a focus on the Ministry of Education, Culture, Sports, Science and Technology's initiative, Materials DX Platform.

マテリアルは、Society5.0 を実現し、経済発展と社会課題解決を両立する持続可能な社会への転換に貢献する重要な基盤技術であり、我が国の強みに立脚した、データやAIの活用によるイノベーションの加速が求められています。

政府は、2021年4月に「マテリアル革新力強化戦略」を策定しました。本講演では、本戦略に基づく「データ駆動型研究開発」を推進する政府の取組を文部科学省のマテリアルDXプラットフォームを中心としてご紹介する予定です。

ロボット実験と AI の連携による蓄電池材料開発の革新

(物質・材料研究機構¹) ○松田 翔一¹

Integration of automated robotic experiments and artificial intelligence accelerates discovery of novel materials for advanced rechargeable batteries (¹*National Institute for Materials Science*) ○Shoichi Matsuda,¹

The electrolyte material is an important factor that determines the performance of storage batteries, but there are a huge number of combinations of liquid compositions, and the search space for materials is extremely wide. Recent advances in automated experiment technology and artificial intelligence (AI) technology are establishing methodologies to efficiently discover electrolyte compositions that maximize battery performance from such a vast material space. In this lecture, we will provide an overview of the electrolyte search method using automated experiment technology and provide an overview of its future prospects.

Keywords : rechargeable batteries, electrolyte, automated experiments

電解液材料は、蓄電池の性能を決める重要な因子であるが、液組成の組み合わせは膨大であり、材料の探索空間が非常に広大である。近年の自動実験技術と人工知能(AI)技術の進展により、このような広大な材料空間から、電池性能を最大化する電解液組成を効率的に発見するための方法論が確立されつつある。本講演では、自動実験技術を活用した電解液探索手法の概要と今後の展望について紹介する。

筆者らの研究グループでは、バイオ分野で確立された液体ハンドリング技術、プレート搬送技術を積極的に採用することで、蓄電池用電解液探索用の自動実験ロボットを開発してきた(ref.1)。具体的には、96 ウェルタイプのマイクロプレートの各ウェル内部に電極・電解液を配置した微小電気化学セル(マイクロプレート型電気化学セル)を独自に開発し(図 1a)、NIMS 電気化学自動実験ロボット (NAREE) を構築した(図 1b)。非接触分注装置、ロボットアーム、電気化学測定ユニットが連動的に制御され、電解液の調合・電池特性評価を連続的に実施することができ、測定スループット 1000 sample/day での自動実験が可能となる(ref.1)。

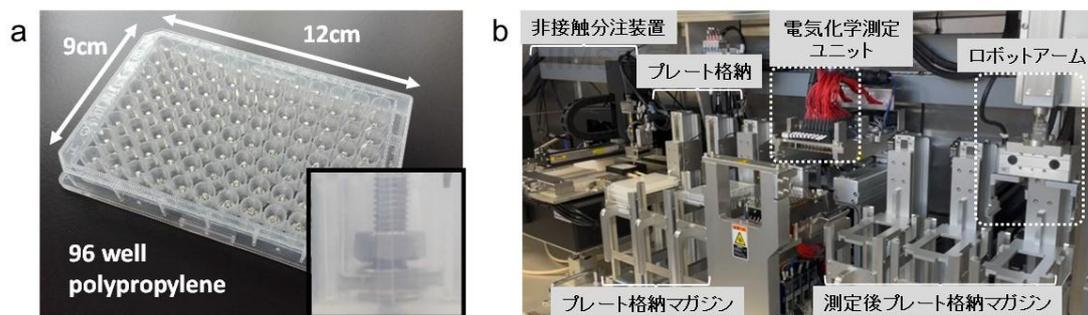


図 11 : (a) マイクロプレート型電気化学セル、(b)NIMS 電気化学自動実験ロボット (NAREE)

ロボット実験の高い能力をより有効に活用するためには、材料探索 AI とロボット実験の有機的な連携が必要となる。従来、実験データの解析から材料設計指針を抽出し、次に検討すべき材料を提案する材料探索 AI が数多く開発されてきた (ref.9-11)。一方で、このような材料探索 AI の開発は、ロボット実験装置の開発とは独立に行われてきた。そのため、実験研究者の視点からは、材料探索 AI をロボット実験装置に直接組み込むことは、技術的なハードルが高く、両者が有機的に連携した自律自動実験の実施例は非常に限られていた。上記課題認識のもと、筆者らの研究グループでは、材料探索 AI とロボット実験をシームレスに連携させる汎用的ミドルウェアとして、NIMS-OS (NIMS Orchestration System) を開発した(ref.2)。NIMS-OS では、ロボット実験装置、材料探索 AI をそれぞれモジュールとして扱うことで、様々な種類の材料探索 AI を容易にロボット実験装置に実装することが可能となっている(図 2)。特に、ベイズ最適化手法(PHYSBO)を含め、複数の材料探索 AI が標準的に搭載されており、実験研究者においても簡単に材料探索 AI を利用することができる。実際に、NIMS-OS によって制御された電気化学自動実験ロボットにおいて、材料探索 AI としてベイズ最適化を用い、電解液探索の自律自動実験を実施した。実験は、並列実験数を 32 に設定し、ランダム実験を 1 回、ベイズ最適化とロボット実験の連携を 11 サイクル実施することで、合計 384 個について電解液の調整・電池評価を実施した。その結果、ベイズ最適化の 6 サイクル目において、最も高い電池性能を示す添加剤の組合せを発見することに成功した。重要なことに、一連のロボット実験において、途中溶液を補充する操作を 1 回行った以外に、人間の介入は一切ない。本結果は、電解液材料探索の自律自動実験における NIMS-OS の有効性を示すものである。

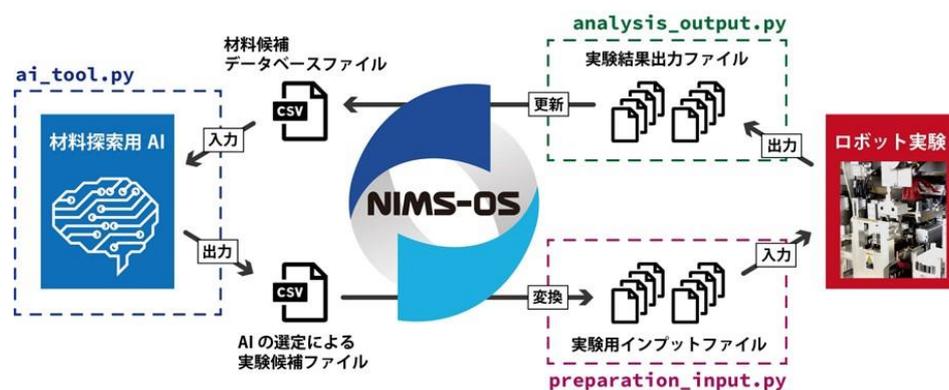


図 2 : 材料探索 AI とロボット実験の連携を可能とする NIMS-OS (NIMS Orchestration System)

- 1) S. Matsuda et al. Scientific Reports, 9, 6211 (2019)
- 2) R. Tamura, S. Matsuda et al. STAM method, 3, 2232297 (2023)

バッチ型自動反応実験装置の活用と化学反応空間の構築

(分子研・総研大¹) ○榎山 儀恵¹

Utilization of Batch-type Automated Reactor System and Construction of Chemical Reaction Space (¹Institute for Molecular Science·SOKENDAI (The Graduate University for Advanced Studies)○Norie Momiyama¹)

The development of reactions is fundamentally important to produce valuable functional molecules in the field of organic synthesis. In the course of conventional research process, exploring chemical reaction is essential, enabling a variety of molecular transformations in organic synthesis. Over the past 25 years, digital technology has been dramatically advanced, playing a crucial role in organic synthesis. However, the approach in organic synthesis has not significantly changed over the past 25 years. Since 2020, we have examined the development of chemical reactions utilizing automated reactor system and the construction of chemical reaction space by machine-learning. In this presentation, we introduce our recent success in synthesizing small-molecule drug analogs, providing an overview of our new approach to the development of chemical reactions.

Keywords : Automated Synthesis; AI; Machine-Learning; Organic Synthesis; Physicochemical Parameters

有機合成反応の開発は、機能性分子の精密合成を達成するうえで重要な鍵となる。文献情報と研究データをもとに分子設計の戦略が立てられ、試行錯誤しながら標的分子の合成が進められる。一連の研究プロセスにおいて、化学反応の探索は必要不可欠な研究工程であり、各組織で培われてきた技術・経験・知見に基づいて、多彩な有機化学反応が創り出されてきた。一方、この25年余りの間、デジタル技術が著しく進歩し、有機合成を支える存在になっている。分子に固有の物性データから化学反応の実験・計算データに至るまで、有機合成化学者が入手できる情報も増え続けている。しかし、有機合成化学者による合成反応の開発手法は、この25年余りの間、大きく変わっていない。有機合成の近未来に向け、有機合成化学者とデジタル技術との協調が強く望まれる。

当グループでは、2020年頃より、有機合成反応の開発における新しい試みとして、バッチ型自動反応装置を活用した反応実験データの収集と機械学習を活用した化学反応空間の構築を推進している。本講演では、この新たなアプローチについて概説しながら、低分子医薬品の類縁体合成に関する私たちの最近の成果¹⁾を紹介する。



1) Manuscript is under preparation for submission.

機械学習による繊維状ウイルスの合目的的な配列制御に基づく機能物性創出

(東工大物質理工) ○澤田敏樹

Function-Oriented Control of the Amino Acid Sequence for Filamentous Virus through Machine Learning (*School of Materials and Chemical Technology, Tokyo Institute of Technology*) ○Toshiki Sawada

M13 phage, a filamentous virus, is composed of its genetic DNA and plural proteins. M13 phages are well-known to be self-assembled into regular structures in a liquid crystalline fashion and are genetically modified to introduce various functions. We have found that M13 phages are utilized as material components with various functions such as hydrogels and films. In this study, we constructed a phage library displaying dipeptides by genetic engineering and their functional properties are measured. The data was used as train data for machine learning to construct a prediction model of the genetically engineered M13 phage. As a result, we found that amino acid sequences of phage proteins to express desired material functions can be predicted by machine learning.

Keywords : *Filamentous Virus; M13 bacteriophage; Genetic Engineering; Machine Learning; Thermal Diffusivity*

繊維状ウイルスの一種である M13 ファージは (Figure 1)、遺伝子改変により自在に機能化でき、また液晶配向するほど規則的に集合化する。近年では、それらを利用してファージそのものを素材として様々なソフトマテリアルを構築する研究も展開されている。ファージがもつ構造 (特にアミノ酸配列) を、機能や物性に対してを合目的的に改変・制御する方法論を新たに確立できれば、マテリアル素材としてのファージの利用可能性を大きく拡張できるものと期待される。本研究では、ファージの新たな機能物性創出を目指し、遺伝子工学によりファージ表層のタンパク質を改変したライブラリーを構築し、それらアミノ酸の改変がファージの機能物性を与える効果を明らかにするとともに、機械学習を利用してその特性を予測し、それに基づいて向上させることを目的とした。

ファージの主要外殻タンパク質表層にジペプチドを提示したファージライブラリーを構築した。遺伝子改変したファージもしくはその集合体の物性や機能をそれぞれ評価した。それらの値を訓練データとし、Leave-One-Out 交差検証により適切な機械学習アルゴリズムや記述子を決定した。その結果適切なモデルを構築することができ、さらに予測の妥当性を評価した結果、遺伝子改変されたファージが示す分子機能を機械学習により予測に基づいて高機能化できることがわかり、遺伝子改変と機械学習の組み合わせにより生体高分子の機能物性を合目的的に制御できる可能性を見出した。

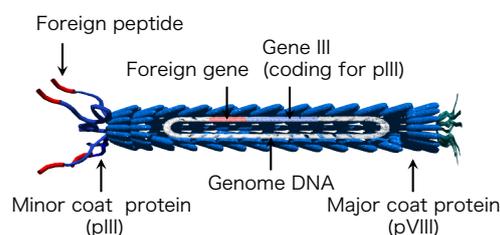


Figure 1. Schematic illustration of M13 phage

シンポジウム | 特別企画：機器分析が拓く次世代の医療技術

2024年3月21日(木) 13:00 ~ 15:40 会場 A1424(14号館 [2階] 1424)

[A1424-4pm] 機器分析が拓く次世代の医療技術

座長、シンポジウム関係者：岡田 友記、松村 有里子、大倉 一郎、大塚 諭、谷 浩行、中村 浩之

近年、実際に医療に応用可能となる技術が多く開発され、様々な臨床現場での応用が期待されている。特に、質量分析をはじめとする機器分析は、未病における発症予測から診断に至るまで幅広く活用されており、医療分野への貢献度が高い技術である。さらにこれらの技術は、疾患の早期発見や早期診断に関する学際的研究も活発に行われており、次世代の医療技術になることが期待される。本企画では、産官学が連携した医工連携により研究を進めている講演者が集い、医療技術における機器分析の果たせる役割に焦点を当て、未病・診断で活用されている技術を紹介するとともに、最先端の研究事例について紹介する。

13:00 ~ 13:10

開会挨拶

◆ 日本語

13:10 ~ 13:40

[A1424-4pm-01]

リポミクスを応用したアレルギー性疾患の病態解明と診断・治療への応用

○村田 幸久¹ (1. 東京大学)

◆ 日本語

13:40 ~ 14:10

[A1424-4pm-02]

分析データの集積と共有による医療課題の解決：新型コロナからの教訓

○末松 誠¹ (1. (公財) 実中研)

◆ 日本語

14:10 ~ 14:40

[A1424-4pm-03]

再生医療、次世代治療薬開発に向けた、分析計測、自動化、AI技術の活用

○江連 徹¹ (1. 株式会社 島津製作所)

◆ 日本語

14:40 ~ 15:10

[A1424-4pm-04]

ヘルスケアに向けての島津製作所の取り組み

○中島 宏樹¹ (1. 株式会社 島津製作所)

◆ 日本語

15:10 ~ 15:40

[A1424-4pm-05]

質量分析によるアルツハイマー病血漿解析

○小田 吉哉¹ (1. 東京大学大学院医学系研究科)

リポミクスを応用したアレルギー性疾患の病態解明と診断・治療への応用

(東大院農¹) ○村田 幸久¹

Application of mass spectrometry to the elucidation of the pathogenesis of allergic diseases and their diagnosis and treatment (¹Graduate School of Agriculture and Life Sciences, The University of Tokyo) ○Takahisa Murata¹

The number of patients suffering from allergic diseases such as food allergy, hay fever, atopic dermatitis, and asthma continues to increase every year, and one-third of the population now suffers from some form of allergic disease. However, there are still many unknowns, and no methods have yet been proposed to reduce the number of patients.

Lipid metabolites that are metabolized and produced from fatty acids extracted from cell membranes and have physiological activity are called "bioactive lipids. Although prostaglandins and leukotrienes are well-known as bioactive lipids that cause inflammatory reactions, it has become clear that there are many fatty acid metabolites in our bodies, including those whose bioactivity has not yet been clarified. By looking at the dynamics of their production in vivo, we can understand when and where biological reactions are occurring.

Our laboratory has been conducting research applying lipidomics technology to animal models and human patients to clarify (1) what allergic reactions are, (2) why changes in the living environment have increased allergic diseases, and (3) how they can be cured. We have also conducted numerous evaluations using specimens such as urine, stool, tears, and nasal discharge, which can be collected noninvasively and easily applied to actual diagnosis, and have identified various candidate disease markers.

This talk, entitled "Lipidomics Applied to the Pathophysiology of Allergic Diseases and its Application to Diagnosis and Therapy," will introduce the results obtained in the above research. *Keywords : Lipidomic, Allergy, Bioactive lipid, Mass spectrometer*

食物アレルギーや花粉症、アトピー性皮膚炎、喘息などのアレルギー性疾患を患う患者さんの数は年々増加の一途をたどり、現在国民の3分の1が何らかのアレルギー性疾患にかかっているとも言われる。これらの疾患が増加した理由として生活環境の変化や、食生活の近代化からくる腸内細菌叢の乱れなどが挙げられている。しかし依然として不明な点は多く、患者数を減らす方法の提案には至っていない。

細胞膜などから切り出される脂肪酸から代謝・産生され、生理活性をもつ脂質代謝物を“生理活性脂質”と呼ぶ。生理活性脂質として、プロスタグランジンやロイコトリエンなど炎症反応を引き起こすものが有名であるが、私達の体には、生理活性が明らかにされていないものを含め、非常に多くの脂肪酸代謝物が存在することが明らかになってきた。生体内におけるこれらの産生動態を見れば、いつどこでどのような生体反応が起きているのかを把握することができる。

私達の研究室では、①アレルギー反応とはそもそも何か、②生活環境の変化がなぜアレルギー性疾患を増やしたのか、③どうしたら治すことができるのか、を明らかに

すべく、動物モデルやヒト患者を対象としてリポドミクス技術を応用した研究を進めてきた。尿や便、涙、鼻汁などの非侵襲的に採取でき、実診断にも応用しやすい標本を用いた評価も数多く行っており、様々な疾患マーカー候補を同定している。

本講演は、「リポドミクスを応用したアレルギー性疾患の病態解明と診断・治療への応用」と題し、上記研究で得られている成果を紹介する。

- 1) PGD2 deficiency exacerbates food antigen-induced mast cell hyperplasia. Nakamura T, et al. *Nature Communications*. 6:7514 2015.
- 2) Production of lipid mediators across different disease stages of dextran sulfate sodium-induced colitis in mice. Hamabata T, et al. *Journal of Lipid Research*. 59(4):586-595.2018.
- 3) Urinary PGDM, a prostaglandin D2 metabolite, is a novel biomarker for objectively detecting allergic reactions of food allergy. Inagaki S, et al. *J Allergy Clin Immunol*. S0091-6749(18)30995-3.2018.
- 4) 5,6-dihydroxy-8Z,11Z,14Z,17Z-eicosatetraenoic acid accelerates the healing of colitis by inhibiting transient receptor potential vanilloid 4-mediated signaling. Kobayashi K, et al. *The FASEB journal*. 35(4):e21238. 2021.
- 5) Urinary lipid profile of atopic dermatitis in murine model and human patients. Nagata N, et al. *FASEB J*. 35(11):e21949. 2021.

分析データの集積と共有による医療課題の解決：新型コロナからの教訓

Facilitating medical research and development by global data sharing

○ (公財)実中研 所長・慶大名誉教授 末松 誠

○ Central Institute for Experimental Medicine and Life Science,
Professor Emeritus Makoto Suematsu

Multiple gaps among different stakeholders in medical development result in considerable delay for the achievements. One of such gaps includes never-sharing behavior of individual researches who might compete each other. To maximize benefits for patients, data sharing among many different institutions and hospitals benefits patients through accelerating medical development. Experience happening in Japan during the COVID-19 period serves as an important lesson for fighting against infection and other medical task in the near-future.

医療研究開発には異なる Stakeholder の間に Gap が存在し、開発速度の律速段階となる。また個々の研究者による「データの囲い込み」も大きな障害となる。医療において患者の利益を最大限に生かすためには、多数の研究者や医療機関のデータ共有が必要な場合が少なくない。新型コロナ感染症においてはウイルスゲノムの国際データベースが大いに威力を発揮したが、残念ながら日本はデータベースを介したグローバルデータシェアリングでは大きな後れを取ったと言わざるを得なかった。広域な連携・分散した統合システムにより、病原体の遺伝情報だけでなく、付随した簡単な臨床タグ情報をつけてデータベース化することによって、近未来の感染症蔓延に備えることができると考えられる。

再生医療、次世代治療薬開発のに向けた、分析計測、自動化、AI 技術の活用

(島津製作所 分析計測事業部) 江連 徹

Analytical measurement, automation, and AI technologies for regenerative medicine and next-generation therapeutic drug development (*Analytical & Measuring Instruments Division, Shimadzu Corporation*) ○Toru Ezure

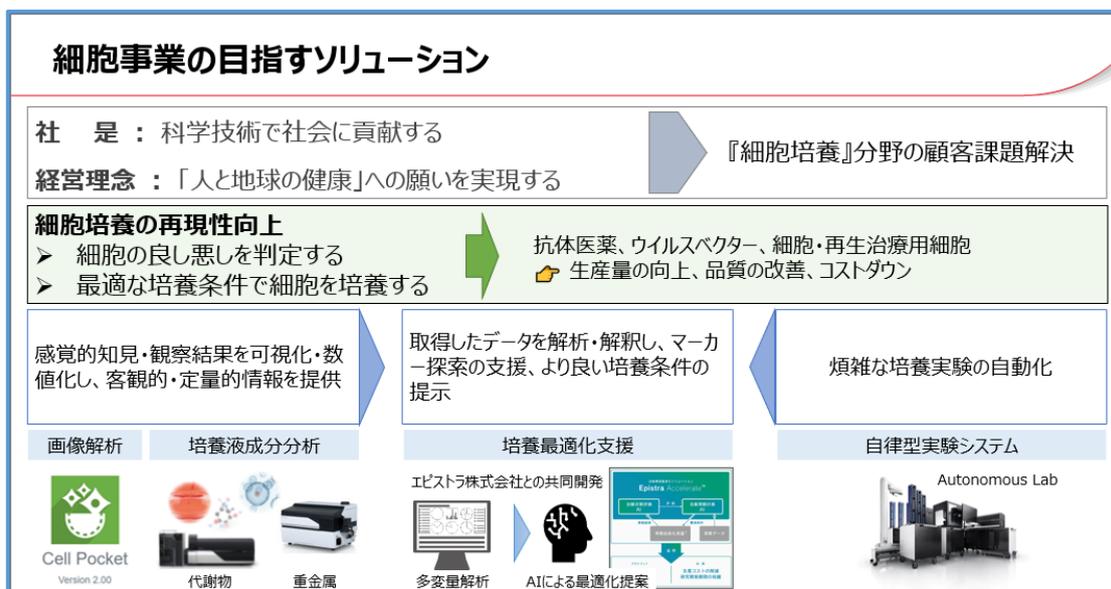
To apply pluripotent stem cells to regenerative medicine and drug discovery applications, it is essential to establish the technology to manufacture high quality and large amount of stem cells. To realize the technology, it is important to establish a method to evaluate the quality of stem cells, and this has become a major challenge.

Therefore, we have established the methods to evaluate cell quality through cell culture media analysis and morphological observation. In this presentation, I will introduce our evaluation technology, including the latest examples of optimization and quantification of cell culture conditions using these analysis technologies and AI.

Keywords : Analytical Measurement, Automation, AI Technologies

多能性幹細胞を再生医療や創薬応用へと展開するために幹細胞を高品質かつ大量に供給する技術が必須である。この技術を実現するためには、幹細胞の品質評価方法の確立が重要であり、大きな課題にもなっている。

そこで我々は培地分析と形態観察による細胞の品質評価法の確立に取り組んできた。本講演では、これら分析技術と AI を活用した培養条件の最適化や培養状態の定量化の最新事例を交え、当社の細胞品質評価技術をご紹介します。



ヘルスケアに向けての島津製作所の取り組み

(株式会社 島津製作所) 中島 宏樹

Shimadzu Effort for Healthcare Business (*Shimadzu Corporation*) Hiroki Nakajima

In the clinical business with utilizing analytical technology that we are promoting, we are focusing on three areas: clinical diagnosis, microbial testing, and cell business. Among these, in the fields of ① clinical diagnosis and ② microbial testing (clinical), we will aim to create new customer value by mainly deploying mass spectrometers as medical devices in the market.

① In clinical diagnosis, immunoassay devices are currently mainly used for clinical tests using blood and urine as a samples, but mass spectrometers have features such as simultaneous multi-component analysis and low running costs. We are leveraging group companies acquired through M&A to expand our testing reagent kits, strengthen connections between hospital networks and equipment, and promote the widespread use of mass spectrometers as a platform.

② In microbial testing (clinical), by combining our mass spectrometer with identification and susceptibility testing equipment and culture media, we can improve the speed of testing and provide one-stop solutions for the entire testing workflow.

Keywords : Healthcare; Mass Spectrometry; Clinical Laboratory Tests; Microbial Testing

当社が推進している分析技術を活用した臨床事業では、臨床診断・微生物検査・細胞事業の3つの領域に注力している。中でも①臨床診断及び②微生物検査（臨床）領域では、主に質量分析装置を医療機器として市場に展開し、新たな顧客提供価値の創造を目指している。

①臨床診断では、現在血液や尿を用いた臨床検査には主に免疫法装置が利用されている一方で、質量分析装置は多成分同時分析や安価なランニングコスト等の特長を有する。当社はM&Aにより獲得したグループ会社を活用し検査用試薬キットの拡充と院内ネットワークと装置の接続を強化し、プラットフォームとしての質量分析装置の普及を進めている。

②微生物検査（臨床）では、当社質量分析装置と菌種同定・薬剤感受性試験装置や培地を組み合わせることで、検査の迅速性向上やワンストップでのソリューション提供など、検査ワークフロー全体の価値向上を図る。



質量分析によるアルツハイマー病血漿解析

(東大院医¹) ○小田吉哉¹

Alzheimer's disease plasma analysis by mass spectrometry (¹Graduate School of Medicine, The University of Tokyo) ○Yoshiya Oda,¹

Plasma proteomics using mass spectrometry is not easy to detect low-expression proteins such as cytokines, and its quantitative accuracy is not good. Therefore, plasma proteomics using the Proximity Extension Assay, an immuno-PCR method, was performed. Mass spectrometry was used for plasma lipidomics. These two methods were performed on 282 Alzheimer's disease plasma samples. 1000 plasma proteins and approximately 700 lipids were detected. Among them, many of which are involved in vascular injury and protection, were altered. In addition, several lipid-associated proteins were significantly altered. In some cases, individual proteins altered neighboring factors, but there were also several factors that moved in the opposite direction of what would be expected. It seems that the body has a feedback mechanism to try to maintain homeostasis. For lipids, the relationship with the degree of unsaturation is of interest, and the degree of unsaturation of fatty acids has been implicated in cardiovascular risk. Some bile acids can damage the vascular endothelium. Considering the results obtained in this study together with the events already reported, slight changes in homeostatic function may be related to vascular endothelial cells, as Alzheimer's disease is a chronic disease that progresses very slowly, from the Preclinical stage to the onset.

Keywords : Alzheimer's disease; LC/MS; Proximity Extension Assay; Proteomics; Lipidomics

質量分析を使った血漿プロテオミクスはサイトカインなど発現量が少ないタンパク質を検出することは容易ではなく、定量精度も良くない。そこでイムノ PCR 法である Proximity Extension Assay による血漿プロテオミクスを実施した。血漿リポミクスでは質量分析を用いた。この2つの方法をアルツハイマー病血漿サンプル 282 検体に対して実施した。その結果約 1000 個の血漿タンパク質と約 700 個の脂質が定量でき、有意に変化した分子の多くが血管傷害と保護に関与していた。さらに、いくつかの脂質関連タンパク質が有意に変化していた。その中の幾つかについては、個々のタンパク質が隣接する因子を変化させることもあったが、予想とは逆の方向に動く因子もいくつかあった。生体には恒常性を維持しようとするフィードバック機構があるため相反する変化が観測されたと思われる。脂質については、不飽和度との関係が興味深く、脂肪酸の不飽和度は心血管リスクに関与している。胆汁酸の中には血管内皮にダメージを与えるものもある。本研究で得られた結果とすでに報告されている事象を合わせて考えると、アルツハイマー病が前臨床段階から発症まで非常にゆっくりと進行する慢性疾患であることから、恒常性維持機能のわずかな変化が血管内皮細胞の機能低下と関係している可能性がある。