アカデミックプログラム [ポスター] | 23. CIPポスター: ポスター

歯 2025年3月26日(水) 15:45 ~ 17:15 **血** ポスター会場B(新関西大学会館北棟 [1階] ホール)

[[PB]-1vn] 23. CIPポスター

● 日本語 ● P1. エネルギー

[[PB]-1vn-01]

硫化物系固体電解質を用いた全固体リチウムイオン電池正極ハーフセルの高温劣化現象とその 解析

〇菊谷 和正 1 、福井 太陽 1 、富田 誠也 1 、辻 晋司 1 、折笠 有基 2 (1. ヤンマーホールディングス株式会 社、2. 立命館大学)

● 日本語 ● P1. エネルギー

[[PB]-1vn-02]

イオン液体のマグネシウム金属二次電池用電解質特性におけるイオン種依存性

〇窪田 啓吾 1 、石田 直哉 1 (1. 国立研究開発法人 産業技術総合研究所)

● 日本語 ● P1. エネルギー

[[PB]-1vn-03]

1,1′-Bis(2-aminoethyl)-4,4′-bipyridiniumを用いたビオロゲン型CO₂濃淡電池

〇伊東 みのり 1 、杉山 高康 1 、米川 真由 1 、柿澤 彩花 1 、若山 悠有佑 1 、山田 鉄兵 1 (1. 東大)

● 日本語 ● P1. エネルギー

[[PB]-1vn-04]

加速耐久試験下における固体高分子形燃料電池の電極劣化

〇吉宗 $航^1$ 、加藤 晃彦 1 、早川 鉄一郎 1 、山口 聡 1 、加藤 悟 1 (1. 豊田中央研究所)

● 日本語 ● P1. エネルギー

[[PB]-1vn-05]

配向した2次元共有結合性有機構造体(2D-COFs)のプロトン伝導性

○藤生 浩綺 1 、金 甫根 1 、南 沙央理 2 、佐藤 敬 1 、西尾 隆宏 1 、渡辺 弘紀 1 、田部 博康 3 、陣内 亮典 2 、堀毛 悟史 3 (1. 株式会社デンソー、2. 株式会社豊田中央研究所、3. 京大)

● 英語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-06]

6-ヒドロキシヘキサン酸導入による非生分解コポリエステルへの生分解性付与技術の開発

〇稲垣 翔 1 、西澤 周平 1 、宮脇 敦久 1 、甲斐 英知 1 、小磯 彰宏 1 (1. DIC株式会社)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-07]

アミンにより捕集されたCO2の光触媒還元反応系の開発

〇細川 直輝 1 、石谷 治 2 (1. 東京科学大学、2. 広島大学)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-08]

分子内にピロリドン環を有するポリアミドiNylonの光分解

〇米村 まいな 1 、加藤 太一郎 1 、横山 理沙 1 、横川 由起子 1 、谷池 俊明 2 、Yingjun An 3 、高原 淳 3 、小島 正幸 4 、嶋中 博之 4 、金子 達雄 5 、根来 誠司 6 (1. 鹿児島大学理工学研究科、2. 北陸先端科学技術大学院大学、3. 九州大学ネガティブエミッションテクノロジー研究センター、4. 大日精化工業株式会社、5. 江南大学、6. 兵庫県立大学大学院工学研究科)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-09]

ラジカル開始剤を用いた酸化分解による使用済タイヤのケミカルリサイクル法の開発

〇山下 浩 1 、羽鳥 真紀子 1 、Wahyu S. Putro 1 、上田 善弘 1 、松本 和弘 1 、崔 準哲 1 、深谷 訓久 1 、北條 将広 2 、田原 聖 $-^2$ 、本間 正洋 2 、湊 貴 $-^2$ (1. 産総研、2. ブリヂストン)

● 日本語 ♥ P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-10]

事業化に向けた石油由来ポリカーボネートのアンモニア水によるケミカルリサイクル

〇筒場 豊和 1 、江見 佳玲 1 、谷口 竜王 1 、青木 大輔 1 (1. 千葉大院工)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-11]

酸化還元活性な多核ロジウム錯体によるプロトン還元反応

○矢野 なつみ¹、片岡 祐介¹ (1. 島根大学)

● 日本語 ♥ P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-12]

有害物質を含む廃電子基板中の元素分析法に関する研究

 \bigcirc 松村 大植¹、柴田 信行¹、中野 万敬¹ (1. 名古屋市工業研究所)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-13]

脂溶性ビタミンが誘発する微小液滴形成に基づく高倍率濃縮法の開発

〇荒木 直 1 、加藤 健 1 (1. 福島工業高等専門学校)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-14]

アルカリ試薬を添加した亜臨界水を用いたテトラフルオロエチレン・ヘキサフルオロプロピレン共重合体(FEP)の完全無機化

○齋藤 久¹、堀 久男¹ (1. 神奈川大学)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-15]

微細気泡を含む高分子溶液の相分離による生分解性中空高分子微粒子の作製

〇安井 g^1 、斉藤 右恭²、山口 毅²、安田 啓司² (1. 名古屋市工業研究所、2. 名古屋大学)

● 日本語 ♥ P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-16]

化学-酵素的加水分解による汎用ナイロンの定量的なモノマー化技術

〇白石 雄樹¹、加藤 太一郎¹、横山 理沙¹、古野 洋子¹、横川 由起子¹、根来 誠司² (1. 鹿児島大学、2. 兵庫県立大学)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-17]

循環利用と資源回収を目指す環境配慮型バイオポリマーの展開

〇髙倉 未来 1 、加藤 健 1 、矢島 辰雄 2 (1. 福島工業高等専門学校、2. 関西大学)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-18]

PTFEリサイクルに向けた分子ほぐしの新戦略と分子論的評価

〇大貫 友椰¹、荒木 泰介¹、塩谷 暢貴¹、松田 大¹、長谷川 健¹、火原 彰秀²、加納 純也³ (1. 京大化研、2. 東京科学大学、3. 東北大多元研)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-19]

海洋生分解性の低い脂肪族ポリエステルの生分解性を向上させる

〇鈴木 美和 1 、太田 美乃里 2 、橘 熊野 1,2 、石井 俊一 3 、鹿島 裕之 3 、粕谷 健一 1,2 (1. 群馬大学食健康科学教育研究センター、2. 群馬大学大学院理工学府、3. 海洋研究開発機構)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-20]

分子内にピロリドン環を有するポリアミドiNylonを資化する新規海洋性細菌の単離とそのPHA 産生能力の発見

〇古野 洋子¹、加藤 太一郎¹、横山 理沙¹、横川 由起子¹、山田 美和²、金子 達雄³、 根来 誠司⁴ (1. 鹿 児島大学大学院理工学研究科、2. 岩手大学農学部、3. 江南大学、4. 兵庫県立大学大学院工学研究科)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-21]

有機金属触媒を用いた木質細胞壁中のリグノセルロースの直截的アミノ化反応

〇中川 由佳^{1,2,3}、古川 翔一⁴、近藤 敬子¹、片平 正人¹、渡辺 隆司¹、藤田 健一¹、中村 正治¹ (1. 京大、2. ダイセル、3. JST さきがけ、4. 東北大)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-22]

非相溶系生分解性ポリマーブレンドからのマイクロプラスチック発生の可能性

〇日野 彰大 1 、山野 尚子 1 、川崎 典起 1 、中山 敦好 1 (1. 産総研)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-23]

貴金属-貧金属合金クラスターを利用した貴金属触媒の活性増幅

〇塚本 孝政 1,2,3 、吉田 希生 4 、田邊 真 5 、神戸 徹也 6 、山元 公寿 4 (1. 東大生研、2. 東大院工、3. JST-さきがけ、4. 科学大化生研、5. 福島県医大総合科学教育研究セ、6. 阪大院工)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-24]

接着タンパク質AtaAの小型化による微生物固定化と微生物反応への応用

○吉本 将悟¹、堀 克敏¹ (1. 名古屋大学)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-25]

環境応答性蛍光色素FluoraBlocksで標識したアルギン酸ゲルの環境保全利用

〇山田 幸司 1 、前田 涉希 1 、諸角 達也 1 (1. 北大)

● 日本語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-26]

- 二酸化炭素を原料とするジエチルカーボネート合成用ジルコニウム固定化触媒の開発
- 〇長江 春樹 1 、小泉 博基 1 、竹内 勝彦 1 、羽村 敏 2 、山本 敏秀 2 、松本 和弘 1 、上村 佳大 1 、 片岡 祥 1 、 深谷 訓久 1 、崔 準哲 1 (1. 産業技術総合研究所、2. 東ソー株式会社)
- 日本語 ♥ P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-27]

二酸化炭素の化学吸収を応用したジアルキルカーボネート合成

〇小泉 博基 1 、長江 春樹 1 、竹内 勝彦 1 、松本 和弘 1 、深谷 訓久 1 、坂口 孝太 2 、星野 浩慶 2 、羽村 敏 2 、崔 準哲 1 (1. 産業技術総合研究所、2. 東ソー株式会社)

● 英語 ● P2. 資源・環境・GSC(Green Sustainable Chemistry)

[[PB]-1vn-28]

Synthesis and Characterization of Urushiol Analogs Derived from Biorenewable Carbon Resources

○Beiling WU¹, Francesca PINCELLA¹, Ilaria BONADUCE², Masaharu NAKAMURA¹ (1. KyotoU, 2. UniPi)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-29]

天然物から付着阻害化合物開発へのアプローチ

〇梅澤 大樹 1 、イラ ノビタ サリ 1 、吉村 えり奈 2 、野方 靖行 3 (1. 北大、2. 株式会社セレス、3. 電力中央研究所)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-30]

特異な低誘電損失を示すポリ(フェニレンスルフィド)/ポリ(フェニレンオキシド)共重合体

○渡辺 清瑚 1 、三浦 嵩真 2 、小柳津 研一 1,2 (1. 早大理工総研、2. 早大先進理工)

● 英語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-31]

DFT計算に基づくバイオプラスチック「FADP」のモノマーユニットの予測

○阿知良 浩人¹、今井 岳志¹ (1. 兵庫県立工業技術センター)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-32]

廃棄硫黄を用いた高機能ポリマー材料の創製

○小林 裕一郎^{1,2,3}、山口 浩靖^{1,2} (1. 大阪大学、2. ICS-OTRI、3. さきがけ)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-33]

リン酸を用いた高導電率高耐湿性Ti₃C₂ MXeneの合成と評価

〇柳町 章 \mathbb{P}^1 、一条 直規 \mathbb{P}^1 、上口 憲陽 \mathbb{P}^1 、坂井田 俊 \mathbb{P}^1 (1. 株式会社村田製作所)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-34]

新製法による層状構造を有するホウ素/炭素材料の作製

〇俊成 修平 1,2 、石畑 成渚 2 、木村 匡志 2 、野田 桂椰 2 、川口 雅之 2 (1. 株式会社サーモグラフィティクス、2. 大阪電気通信大学)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-35]

Auアノード溶解反応を利用した機能性Auナノ粒子の作製

○小澤 真一郎 1 、北郷 萌 1 、松本 龍征 1 、竹﨑 陽也 1 (1. 防衛大学校)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-36]

イソプロピル基をもつジアリールエテン結晶が示す弾性の光スイッチ

〇谷 歩武 1 、西村 涼 2 、横島 智 3 、中村 振一郎 4 、内田 欣吾 1 (1. 龍谷大学、2. 立教大学、3. 東京薬科大学、4. 熊本大学)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-37]

自己集合性ペプチドファイバーを利用した液液相分離ドロプレットの開発とバイオリアクター 応用

〇内田 紀之 1 、近藤 詩織 1 、村岡 貴博 1,2 (1. 東京農工大学、2. KISTEC)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-38]

チアゾリル基をもつアリールビニルチアゾール誘導体のフォトクロミズムと蛍光特性

〇高見 静香¹、田宮 優利奈¹、石橋 千英²、山口 忠承³、河合 壯⁴ (1. 新居浜工業高等専門学校、2. 愛媛 大学理工学部、3. 兵庫教育大学大学院、4. 奈良先端科学技術大学院大学)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-39]

ピンポイント分子設計による革新的な機能性材料開発手法の提案

〇上島 基之 1 、佐藤 徹 2 (1. 株式会社MOLFEX、2. 京都大学 福井謙一記念研究センター)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-40]

アントラセン多形化モデルを利用した有機半導体の高次構造制御

○ 樋野 優人 1 、松尾 匠 2,3 、林 正太郎 2,3 (1. 高知工大院工、2. 高知工大理工、3. 高知工大総研)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-41]

新規Push-pull型フェナジン類の合成と蛍光特性

〇佐藤 大幹¹、阿部 唯人¹、熊谷 純¹、工藤 正人¹、片桐 洋史¹ (1. 山形大院有機)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-42]

異なる一次構造を持つ高強度化ペプチド添加剤の開発と評価

○伊藤 瑠華¹、酒井 崇匡¹、土屋 康佑¹ (1. 東京大学)

● 日本語 ● P3. 新素材・材料

[[PB]-1vn-43]

航空機用炭素繊維複合材料への応用を志向した高耐久性・リサイクル性・再生形成を持つ資源 循環型ポリロタキサン配合エポキシ樹脂の開発

〇安藤 翔太 1 、平野 聖來 1 、上野 瑛理 2 、内藤 公喜 2 、伊藤 耕三 1,2 (1. 東大院新領域、2. 物材機構)

● 日本語 ● P4. DX関連

[[PB]-1vn-44]

鳥インフルエンザH5N1とオミクロン株の感染性増加及び病原性低下と立体配座可変性予測との相関

○和泉 博¹ (1. 産総研環境創生)

● 日本語 ● P4. DX関連

[[PB]-1vn-45]

データ科学を取り入れた材料探索プロトコルの開発:常誘電体の適用事例を通じて

〇尾崎 仁亮 1 、池田 潤 1 (1. 株式会社村田製作所)

● 日本語 ● P4. DX関連

[[PB]-1vn-46]

スプレー熱分解法を用いたDXプラットフォーム構築

〇杉田 陽彩 1 、高須賀 聖五 1 、高山 大鑑 1,2 、原嶋 庸介 1,2 、藤井 幹也 1,2,3 (1. 奈良先端大、2. 奈良先端大DSC、3. 奈良先端大CMP)

● 日本語 ● P4. DX関連

[[PB]-1vn-47]

電子実験ノートへの化学実験自動記録システムの開発と有機化学実験への応用

〇髙橋 颯人 1 、藤波 美起登 2 、千田 康祐 1 、柴田 高範 1 、中井 浩巳 1,2 (1. 早稲田大学先進理工学部化学・生命化学科、2. 早稲田大学理工学術院総合研究所)

● 日本語 ● P4. DX関連

[[PB]-1vn-48]

動的モンテカルロシミュレーションを組み込んだサイバーフィジカルループによる不純物ドー プSrTiO₃光触媒性能の最適化

○水上 昌勇 1 、原嶋 庸介 1,2 、高山 大鑑 1,2 、高須賀 聖五 1 、天能 精一郎 4 、西口 和孝 4 、藤井 幹也 1,2,3 (1. 奈良先端大、2. 奈良先端大 DSC、3. 奈良先端大 CMP、4. 神戸大学)

▶ 日本語 ▶ P4. DX関連

[[PB]-1vn-49]

ポリマー・溶媒間の相溶性予測と産業応用への展開

〇白鳥 和矢 1 、Stephen Wu 2 、林 慶浩 2 、杉澤 宏樹 1 、大久保 忠利 1 、吉田 亮 2 (1. 三菱ケミカル株式会社、2. 統計数理研究所)

● 日本語 ● P4. DX関連

[[PB]-1vn-50]

生成AI活用による材料開発効率化のための材料データベース自動構築技術

〇我妻 正太郎 1 、露木 雅文 1 (1. 株式会社 日立製作所)

● 日本語 ● P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-51]

電界紡糸法による光架橋ゼラチン細胞足場の開発

○橋本 直哉¹、藤田 聡¹、宮島 浩樹¹ (1. 福井大)

● 日本語 P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-52]

唾液中コラゲナーゼの半定量分析のための紙基板分析デバイス

○川上 博生 1 、竹内 聡子 1 、蛭田 勇樹 1 、ダニエル チッテリオ 1 (1. 慶應義塾大学)

● 日本語 ● P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-53]

ベンゾオキサボロールを固定化したクロマトグラフィー担体による糖含有化合物の分離

〇土谷 涼翔 1 、赤永 一樹 2 、桶谷 明生 2 、西村 宥哉 2 、嶌 祐輔 2 、小野 慎 1 (1. 金沢工業大学大学院、2. 金沢工業大学)

● 日本語 ● P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-54]

生物発光イメージングの高感度化を実現する高輝度生物発光基質AkaSukeの開発

〇森屋 亮平 1,2 、岩野 智 3,4 、口丸 高弘 5 、北田 昇雄 6 、山﨑 倫尚 6 、神谷 弦汰 6 、小畠 りか 7 、平野 誉 6 、青山 洋史 2 、牧 昌次郎 6 (1. 日本女子大学 理学部、2. 東京薬科大学 薬学部、3. 理研 脳神経科学研究センター、4. 宮崎大学 テニュアトラック推進室、5. 自治医科大学 分子病態治療研究センター、6. 電気通信大学 大学院情報理工学研究科、7. 慶應義塾大学 自然科学研究教育センター)

● 日本語 ● P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-55]

細胞膜DPP IV阻害とゲル薄膜形成による老化細胞除去を目的としたセノリティックポリマーの 設計

- 〇本間 健太 1 、明日 理湖 1 、松崎 典弥 1 (1. 大阪大学)
- 日本語
 P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-56]

バイオ医薬品の生産効率化を見据えた高濃度での酸化的タンパク質フォールディングを促進するジスルフィド基含有ミセルの開発

- 〇喜多村 真衣 1 、齋尾 智英 2 、奥村 正樹 3 、村岡 貴博 1,4 (1. 東京農工大学、2. 徳島大学、3. 東北大学、4. 神奈川県立産業技術研究所)
- 日本語 P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-57]

バーコードを用いた塩化物イオンおよびグルコース半定量検出のための紙基板分析デバイス

- ○衣笠 柊磨¹、ヤナウト マンマナ¹、蛭田 勇樹¹、ダニエル チッテリオ¹ (1. 慶應義塾大学)
- 日本語 P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-58]

独自のエポキシ間結合反応からスマートプラスチック材料開発:橋掛け表面修飾が発現するプロティンA酷似の抗体精密認識性能

- ○岸田 高典¹ (1. JSR株式会社)
- 日本語
 P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-59]

変性タンパク質を認識する刺激応答性ポリマーの創製と応答挙動

- ○村嶋 優徳¹、河村 暁文^{1,2}、宮田 隆志^{1,2} (1. 関西大学、2. 関西大 ORDIST)
- 日本語
 P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-60]

キトサンとグルコマンナンを二層フィルム化した光学ファントムの開発

- 〇長谷川 純太 1 、宮﨑 2 (1. 東京電大)
- 日本語
 P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-61]

表面物性可変な光応答性ポリマーフィルムによる細胞挙動の制御

- 〇小村谷 au^1 、河村 暁文^{1,2}、宮田 隆志^{1,2} (1. 関西大化学生命工、2. 関西大ORDIST)
- 日本語 P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-62]

In vivo photo-CIDNPによる高感度MRI実現に向けた分子群の開拓

- 〇澤田 侑大 1 、2.西村 亘生 2,3 、白水 翔也 4 、兵藤 文紀 4,3 、楊井 伸浩 2,3 (1. 九大院工、2. 東大院理、3. CREST, JST、4. 岐阜大医)
- 日本語
 P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-63]

液-液相分離ドロプレットを利用した生体高分子の二段階濃縮

- 〇勝間田 隆祥 1 、樋口 元気 1 、内田 紀之 1 、村岡 貴博 1,2 (1. 東京農工大、2. KISTEC)
- 日本語
 P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-64]

© 2025 公益社団法人日本化学会

自己集合性ペプチドとタンパク質の複合材料の開発

〇森井 瑛都¹、村西 和佳¹、村岡 貴博^{1,2} (1. 東京農工大、2. KISTEC)

● 日本語 ● P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-65]

FRETを利用した蛍光ナノプローブによるナノ粒子点眼薬の眼内挙動解析

〇石井 邦和¹、小関 良卓¹、佐藤 孝太¹、笠井 均¹ (1. 東北大)

● 日本語 ● P5. 医療・ヘルスケア・バイオテクノロジー

[[PB]-1vn-66]

低酸素で活性化される抗がんプロドラッグナノ粒子の開発

〇菅野 長貴 1 、加賀谷 理人 1 、小関 良卓 1 、笠井 均 1 (1. 東北大学)

● 日本語 ● P6. 本年度のハイライト分野「合成関連技術」

[[PB]-1vn-67]

マイクロスケールCSTR®による連続フロー合成/nor-AZADOを使用した二相系酸化反応

〇中山 伸之¹、小谷 功²、小谷 研太朗² (1. (同) 理楽工房、2. マックエンジニアリング (株))

● 日本語 ● P6. 本年度のハイライト分野「合成関連技術」

[[PB]-1vn-68]

結晶性多孔質アルミノシリケートの水熱合成における有機分子の途中添加効果

 \bigcirc 松尾 琴梨 1 、吉岡 壱晟 1 、山田 大貴 2 、孔 昌 $-^1$ 、茂木 堯彦 1 (1. 静岡大学、2. 高輝度光科学研究センター)

● 日本語 ● P6. 本年度のハイライト分野「合成関連技術」

[[PB]-1vn-69]

サブナノサイズの金属シード粒子を用いたナノ触媒とカーボンナノチューブのin situ合成

〇森合 達也 1 、塚本 孝政 2,3,4 、今岡 享稔 1 、神戸 徹也 5 、山元 公寿 1 (1. 科学大化生研、2. 東大生研、3. 東大院工、4. JST-さきがけ、5. 阪大院工)

● 日本語 ● P6. 本年度のハイライト分野「合成関連技術」

[[PB]-1vn-70]

低反応性窒素求核剤とカルボン酸の高効率one-potアミド化反応の開発

〇梅原 厚志 1 、志水 颯真 1 、佐々木 誠 1 (1. 東北大学大学院生命科学研究科)

● 日本語
P6. 本年度のハイライト分野「合成関連技術」

[[PB]-1vn-71]

バナジウムが炭化ニオブ触媒の固相合成におけるエネルギー投入と温室効果ガスの排出を低減 する

地主 貴博 1 、曽我 樹希 1 、仲嶋 竜之介 1 、千束 徹真 1 、池田 明生 1 、 \bigcirc 齊藤 健二 1 (1. 新潟大学)

● 日本語 ● P6. 本年度のハイライト分野「合成関連技術」

[[PB]-1vn-72]

テトラクロロエチレンからのクロミフェン、タモキシフェンの合成法の検討

鈴木 ひよの¹、東郷 茜音¹、○松本 浩一¹ (1. 近畿大学)

● 日本語
P6. 本年度のハイライト分野「合成関連技術」

[[PB]-1vn-73]

GC-MSを駆使したハイスループット指向型の小スケール有機電解合成による反応の開拓と装置開発への展開

富山 諒一 1 、 \bigcirc 濱崎 健吾 1 、岡 秀明 2 、三木 浩一 3 、鳥居 桂 2 、米山 心 4 、徐 鵬宇 4 、松本 浩一 1 (1. 近畿大学、2. (株)テクノシグマ、3. (株)創造化学研究所、4. シンクレスト(株))

硫化物系固体電解質を用いた全固体リチウムイオン電池正極ハーフセルの高温劣化現象とその解析

(ヤンマーホールディングス株式会社 1 ・立命館大学 2) ○菊谷 和正 1 ・福井 太陽 1 ・富田 誠也 1 ・辻 晋司 1 ・折笠 有基 2

High-Temperature Degradation Phenomena and Analysis of Cathode Half-Cells in All-Solid-State Lithium-Ion Batteries Using Sulfide-Based Solid Electrolytes (¹*Yanmar Holdings Co Ltd.*, ²*Ritsumeikan Univ.*) ○Kazumasa Kikutani,¹ Taiyo Fukui,¹ Seiya Tonda,¹ Shinji Tsuji,¹ Yuki Orikasa²

Degradation in all-solid-state lithium-ion battery cathode half-cells has been reported to occur mainly under high temperatures or high voltage conditions¹⁾. However, as far as we know, there have been no detailed reports on degradation during constant voltage (CV) charging under high temperatures within the normal voltage range. When the cell was subjected to constant voltage charging and EIS measurements at 60 °C with different voltages, It became clear, as shown in Table 1, that the degree of degradation was affected by the CV charging voltage. Through AC impedance analysis, it was assumed that the impedance value increases over the course of CV time, contributing to degradation.

Keywords: All-solid-state battery, Lithium-ion battery, Cathode, Degradation

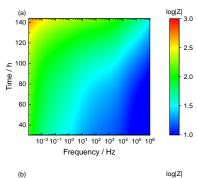
全固体リチウムイオン電池正極ハーフセルにおける劣化は、主に高温または高電圧下で進行することが報告されている¹⁾。しかしながら、高温・通常電圧範囲における定電圧充電(CV 充電)時の劣化について詳細に報告された事例は我々が知る限りでは

無い。高温環境下での電池性能の低下は、電池の長期的な信頼性と安全性に重大な影響を及ぼすため、そのメカニズムの解明が重要である。本研究では、正極ハーフセルに対し高温で CV 充電した際の劣化に対する電圧影響を明確化することを目的とした。 実験には、LiNio.sMno.2Coo.2O2とLisPS5C1とアセチレンブラックを体積比 1:1:0.1 にて混合した正極合材、固体電解質にはLisPS5C1、対極はインジウムーリチウム合金を用いた。本セルを 60° Cで異なる電圧で CV 充電と電気化学インピーダンス (EIS) 計測を繰り返したところ、表 1 に示すように CV 充電電圧に対して劣化度合いが異なることが明らかとなった。図 1 の EIS 計測より、CV 時間の経過とともにインピーダンス値が上昇し劣化に寄与していることが示唆される。

表 1. CV 充電電圧と CV 充電後の容量維持率

CV 電圧	容量維持率
3.7 V (vs Li-In)	18.9%
3.2 V (vs Li-In)	96.0%

 Degradation rate at the Solid–Solid interface of sulfide-based solid Electrolyte–Cathode active material, Y. Morino, Journal of Power Sources, 2022, 541, 231672



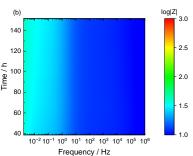


図 1 60℃における CV 充電中のインピーダンス 時系列変化 (a) 3.7 V (b) 3.2 V

イオン液体のマグネシウム金属二次電池用電解質特性におけるイオン種依存性

(産業技術総合研究所) ○窪田 啓吾・石田 直哉

Species Dependence of Ionic liquid Electrolyte for Magnesium Secondary Battery (*National Institute of Advanced Industrial Science and Technology*) OKeigo Kubota, Ishida Naoya

Magnesium secondary battery, which is expected to be post lithium secondary battery due to high capacity and Mg bountiful resources, is difficult to be construct because of poor Mg reactivity of battery materials. Electrolyte for Mg battery needs to have low electric resistance on Mg decreasing overpotential, high oxidative stability allowing positive electrode reaction, and high thermal stability. Ionic liquids have the thermal stability, and its various natures caused by many species and combinations have possibility of the other good aptitudes. Here, we investigated dependence of Mg electric resistance and oxidative resistance on anion spices for room temperature ionic liquids containing corresponding anions as our previous study for high-temperature molten salts. Fluoro-anion systems have high oxidative stability but also high resistance. Chloride system has much low resistance, but also low stability.

Keywords: Ionice Liquid; Magnesium; Battery; Electrolyte

マグネシウム二次電池はリチウム二次電池と比べて高い容量と生産性が期待できるが、その開発は電池反応が円滑に進む部材の開発が Li に比して困難な状況にある。その中で電解質には、Mg 金属負極に対する界面抵抗が低いこと、正極反応を阻害しない酸化耐性、高温作動を許容できる耐熱性が求められる。イオン液体は有機溶媒に比して耐蒸気圧が低く熱分解温度が高いため、これを溶媒とすることで耐熱性の条件を満たすことができ、また様々なイオン種から他の条件を満たすことも期待できる。

今回は過去に高温溶融塩で行った研究りと同様に、室温イオン液体と電解質塩である Mg 塩について種々のアニオンを統一して電解質を調整し、サイクリックボルタンメトリーにより酸化耐性を明らかにした。Mg の円滑な反応が報告されている塩化物は酸化耐性が低く、一方 Mg 上の抵抗が高いフッ素系は酸化耐性が高いことが分かる。

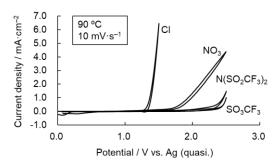


Figure. Cyclic voltammograms using platinum electrode.

1) Preparation of Magnesium Salts Composed of Perfluoro Anions and These Electrochemical Behaviors in Molten Salts. K. Kubota, H. Matsumoto, *J. Electrochem. Soc.* **2020**, *167*, 020541.

1,1'-Bis(2-aminoethyl)-4,4'-bipyridinium を用いたビオロゲン型 CO₂ 濃淡電池

(東大理¹、東大院理²) ○伊東 みのり¹・○杉山 高康¹・○米川 真由¹・柿澤 彩花²・若山 悠有佑²・山田 鉄兵²

A CO₂ Concentration cell utilizing 1,1'-Bis(2-aminoethyl)-4,4'-bipyridinium (¹School of Science, The University of Tokyo, ²Faculty of Science, The University of Tokyo)
∘Minori Ito¹, ∘Takayasu Sugiyama¹, ∘Mayu Yonekawa¹, Ayaka Kakizawa², Yusuke Wakayama², Teppei Yamada²

Gibbs energy of the CO₂ concentration differences between waste gas and air is intended to convert electric power. In our laboratory, we reported a CO₂ concentration cell in which the coordination of ethylenediamine with copper ions is linked to the redox reaction. However, the corrosion of the copper electrode prevents continuous use.

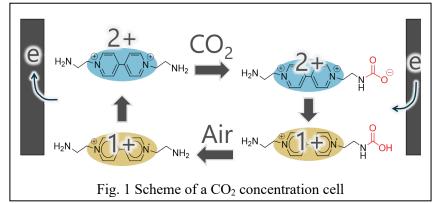
Here we report the reversible redox reaction in solution for the CO₂ concentration cell with 1,1'-Bis(2-aminoethyl)-4,4'-bipyridinium (1). 1 was synthesized by reacting 4,4'-bipyridine with 2-bromoaminoethane. 1 (10 mM) and KCl (100 mM) in water were introduced into the cell and CO₂ and N₂ gases were introduced into each side. An OCV of 140 mV was obtained. The amino group of 1 became electron-withdrawing carbamate, which is thought to have changed its redox potential.

Keywords: CO₂ concentration cell; bipirydine; CO₂ absorption

化石燃料の使用時には、 CO_2 濃度が高い気体を大気へと放出する過程で CO_2 の濃度差に基づくギブスエネルギーを捨ている。当研究室では、このエネルギーを電気エネルギーに変換する CO_2 濃淡電池を開発している。これまでにエチレンジアミンと銅イオンとの配位と、銅イオンの酸化還元反応とを連動させた系を報告した。しかし、銅電極の腐食を伴うため、連続的な使用ができない課題があった。

本研究では溶液中の可逆な酸化還元反応を利用するため、 CO_2 との反応性を有するアミノ基をビオロゲンに修飾した 1,1'-Bis(2-aminoethyl)-4,4'-bipyridinium (1) を用いた CO_2 濃淡電池を設計した。

1 は 4,4'-bipyridine と 2-bromoaminoethane とを反応させることで得た。1(10 mM)および KCl 100 mM の水溶液をセルに導入し、一方に CO_2 ガスを、もう一方に N_2 ガス



- [PB]-1vn-03 -

加速耐久試験下における固体高分子形燃料電池の電極劣化

(豊田中研)○吉宗 航・加藤 晃彦・早川 鉄一郎・山口 聡・加藤 悟 Electrode degradation in polymer electrolyte fuel cells under accelerated stress conditions (*Toyota Central R&D Labs., Inc.*) ○Wataru Yoshimune, Akihiko Kato, Tetsuichiro Hayakawa, Satoshi Yamaguchi, Satoru Kato

The components of a polymer electrolyte fuel cell, namely the proton exchange membrane (PEM), catalyst layer (CL), and gas diffusion layer (GDL), contribute to the degradation of the fuel cell performance. The PEM degrades mechanically and chemically due to repeated dry/wet cycles and open-circuit voltage holding, respectively. The cathode CL degrades mainly due to the coarsening of the catalyst particles and corrosion of the carbon support. Researchers have made efforts to improve the durability of the PEM and CL. On the other hand, there have been few reports on improving the durability of the GDL. This is because the degradation rate of the GDL is believed to be much slower than that of the PEM and CL. However, it is common for degradation studies to be conducted on an individual component. Therefore, we have no clear evidence of differences in their degradation rates. We have proposed a method for simultaneously evaluating the degradation rates of these components by combining electrochemical characterization with operando synchrotron X-ray radiography¹⁾. In this presentation, we report on the results of an accelerated stress test using a load cycle protocol. *Keywords: Polymer Electrolyte Fuel Cell; Degradation; Water Visualization; Synchrotron X-ray Radiography*

固体高分子形燃料電池の電極は、電解質膜、触媒層、ガス拡散層から構成される。電解質膜は、乾湿サイクルによって機械的に、開回路放置によって化学的に劣化する。触媒層は、主に触媒粒子の粗大化と炭素担体の腐食によって劣化する。電解質膜と触媒層の耐久性向上については、研究開発が精力的に進められてきた。一方、ガス拡散層の耐久性向上に関連する研究はあまり報告されていない。この背景には、ガス拡散層の劣化速度は電解質膜と触媒層の劣化速度よりも遅いと考えられてきたことにある。しかし、それぞれが個別に劣化評価されるのが一般的であり、実際にどの程度劣化速度に違いがあるのかは明確に示されていない。そこで、電気化学計測と放射光 X線ラジオグラフィー計測を組み合わせた電極構成材料の劣化速度の同時評価手法を提案したり。本発表では、負荷変動プロトコルを用いた加速ストレス試験の結果について報告する。

1) Wataru Yoshimune, Akihiko Kato, Tetsuichiro Hayakawa, Satoshi Yamaguchi, Satoru Kato, *npj Materials Degradation* **2024**, *8*, 106.

配向した 2 次元共有結合性有機構造体(2D-COF)のプロトン伝導性

(株式会社 デンソー¹・株式会社 豊田中央研究所 ²・京大 WPI-iCeMS ³・京大院理 ⁴) ○藤生 浩綺¹・金 甫根¹・南 沙央理²・佐藤 敬¹・西尾 隆宏¹・渡辺 弘紀¹・田部 博康³·陣内 亮典²·堀毛 悟史^{3,4}

High Proton Conduction of Oriented 2D Covalent Organic Framework Membranes

(1DENSO CORPORATION, 2TOYOTA CENTRAL R&D LABS., INC. 3Institute for Advanced Study, Kyoto University, ⁴Graduate School of Science, Kyoto University) OKoki Fujiu, ¹ Masane Kin, Saori Minami, Takashi Sato, Takahiro Nishio, Hiroki Watanabe, Hiroyasu Tabe,³ Ryosuke Jinnouchi,² Satoshi Horike^{3,4}

Two-dimensional covalent organic frameworks (2D-COFs) have attracted attention as high proton conductors, COFs with the same chemical structure and composition show different proton conductivities1). Although the difference in proton conductivity may result from crystallinity and orientation, it has not been discussed. In this study, we prepared the oriented COF, showed the

correlation between crystallinity, orientation and proton conductivity of COF.

We prepared oriented and non-oriented COF membranes by interfacial polymerization and hydrothermal synthesis, respectively (Fig.1) and analyzed the COF structure by TEM electron diffraction and grazing-incidence wide-angle X-ray scattering (GI-WAXS) ²⁾. The proton conductivity of COF membranes was evaluated. Proton conductivity in the direction of the continuous pores is 20 times higher than in the other directions (Fig.2). These results are supported by the predicted proton conductivity calculated through the molecular dynamics simulations by using the machine learning force field ³⁾.

Keywords: Covalent organic framework (COF), proton conductivity, orientation

2次元共有結合性有機構造体(2D-COFs)が高プロトン伝導体として注目されているが、 同じ構造・組成を有するとされる COF でも、プロトン伝導度は大きく異なるり。伝導度 の違いは、結晶性や配向性に由来すると考えられるが、その議論はなされていない。今回、 我々は COF の結晶性と配向性を制御し、プロトン伝導性との相関を明らかにした。

水熱合成法や界面重合法を用いて COF 膜を作製し、TEM 電子線回折と微小角入射広角 X線散乱法を用いてマルチスケールで COF 構造を明らかにし²⁾、配向 COF 膜と無配向 COF 膜(Fig.1)を作り分けた。各々に対してプロトン伝導性を評価し、配向 COF 膜の連通 孔方向では他方向に対してプロトン伝導性が 20 倍以上高いことが分かった(Fig.2)。また 高精度にプロトン伝導性を評価できる機械学習力場を用いた分子動力学シミュレー ションを実施し3)、上記実験結果の傾向と一致することが分かった。

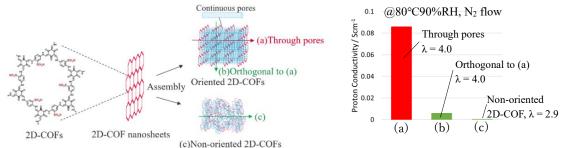


Fig. 1 Oriented/Non-oriented COFs

Fig. 2 Proton Conductivities (Experiment) $(\lambda (= [H_2O] / [-SO_3H])$ is water uptake)

1) Y. Peng, et al. ACS Appl. Mater., 2016, 8, 18505-18512. L. Cao, et al. Adv. Mater., 2020, 32, 2005565. 2) 藤生浩綺ら,日本化学会第 104 春季年会(2024), P2-1vn-01.

3) S. Minami, et al. Chem Mater., 2024, 36, 9535-9546. 謝辞:この成果は、NEDO(国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構)の委託 業務(JPNP20003)の結果得られたものです。

6-ヒドロキシへキサン酸導入による非生分解コポリエステルへの 生分解性付与技術の開発

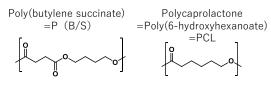
(DIC 株式会社¹) ○稲垣 翔¹、西澤 周平¹、宮脇 敦久¹、甲斐 英知¹、小磯 彰宏¹ Biodegradability enhancement technology for low-biodegradable polyester by introducing 6-hydroxyhexanoic acid (¹DIC Corporation) ○ Sho Inagaki¹, Shuhei Nishizawa¹, Atsuhisa Miyawaki¹, Hidetomo Kai¹, Akihiro Koiso¹

Social issues such as the marine plastic problem and the depletion of disposal sites caused by the mass disposal of plastics are becoming more serious, and biodegradable plastics are attracting attention as one solution. Biodegradable plastics are required to be degradable in specific environments, but the level of decomposition varies depending on the type. This is the reason why we should control how to control biodegradation the plastics. In this study, we found that by partially incorporating polycaprolactone into soil-degradable polybutylene succinate, it was possible to express seawater decomposition properties. The decomposition rate could be controlled by the block chain length and adjusted by the reaction conditions. Furthermore, the mechanical properties of the film were comparable to those of polybutylene succinate, demonstrating the wide range of application of this technology.

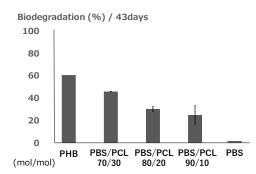
Keywords: Biodegradability, Ocean plastics problem, Polyester, Film

現在、プラスチックの大量廃棄による海洋プラスチック問題、処分場の枯渇といった社会課題が深刻化しており、その解決策の1つとして生分解プラスチックに着目が集まっている。生分解プラスチックには所定の環境下(海水・活性汚泥・土壌・コンポスト)での分解性が求められるものの、実際はその種類によって分解レベルが異なるのが現状である。この分解レベルを任意樹脂で制御することが出来れば、プラスチック廃棄物問題へ貢献が期待できる。

本研究では土壌分解性ポリブチレンサクシネートにポリカプロラクトンをエステル交換反応で組込み、海水分解性を発現することを見出した。分解速度はブロック鎖長によって制御可能であり、反応条件や配合比率で調節可能であった。そのフィルムの機械物性はポリブチレンサクシネートと遜色ない値を示し、本技術の適用範囲の広さを示すものであった。



エステル交換反応



Development of a photocatalytic reduction reaction system for amine-captured CO₂

(¹School of Science, Institute of Science Tokyo, ²Graduate School of Advanced Science and Engineering, Hiroshima University) ○Naoki Hosokawa,¹ Osamu Ishitani²

Keywords: CO₂ reduction; Carbon capture and utilization; Photocatalytic reaction; CO₂ capture by amines

Concentration of CO_2 by capturing reactions with primary and secondary amines has attracted attention in the fields of carbon capture and storage (CCS). These amines can efficiently react with CO_2 to give carbamate salts (eq. 1). As a typical example, the equilibrium constant of CO_2 capture by ethanolamine (MEOA) is 6.0×10^4 M⁻¹. For removing CO_2 from the carbonate, however, high temperature is required, and the required energy is 70-80% of the total energy consumption in the CCS processes.

$$2 R_1 R_2 NH + CO_2 R_1 R_2 NH_2^+ + R_1 R_2 NC(O)O^-$$
 (1)

We previously reported a photocatalytic system, which can directly reduce low concentration CO_2 (< 1%) to formate (HCOO⁻).² In this work, we successfully applied this photocatalytic system for reducing CO_2 that was released from carbamates at room temperature.

A DMA solution containing a Ir(III) photosensitizer, Ru(II) BI(OH)H (reductant), and MEOA was irradiated at $\lambda_{ex} = 530$ nm for 100 hours after the reaction solution was bubbled with 1% CO₂ (99% Ar) gas for 2 h (equation in Figure 1) to give 157 µmol of formate with high selectivity (Figure 1). Usage of triethanolamine (TEOA) instead of MEOA, on the other hand, only 6.4 umol of formate was produced. These results clearly indicate that the large amount of carbamate salt produced by the bubbling with 1% CO₂ could be effectively utilized as a CO2 source at room temperature. This is a novel carbon capture and utilization (CCU) system.

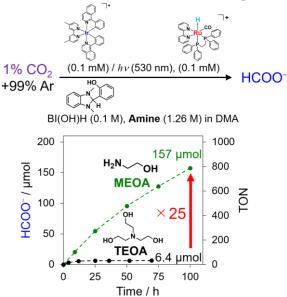


Figure 1. Photocatalytic CO₂ reduction reaction with MEOA or TEOA

[Reference]

1) Dell'Amico, D. B. and Pampaloni, G. et al., *Chem. Rev.* **2003**, *103*, 3857-3897. 2) Hosokawa, N. and Ishitani, O. The 74th Conference of Japan Society of Coordination Chemistry, **2024**, 1C-07, Gifu

分子内にピロリドン環を有するポリアミド iNylon の光分解

(鹿児島大学大学院理工学研究科¹, 北陸先端科学技術大学院大学², 九州大学ネガティブエミッションテクノロジー研究センター³, 大日精化工業株式会社⁴, 江南大学⁵, 兵庫県立大学大学院工学研究科⁶)○米村まいな¹, 加藤太一郎¹, 横山理沙¹, 横川由起子¹, 谷池俊明², Yingjun An³, 高原淳³, 小島正幸⁴, 嶋中博之⁴, 金子達雄⁵, 根来誠司⁶

Photo-degradation of polyamide iNylon with pyrrolidone structure

(¹Kagoshima Univ., ²JAIST, ³Kyushu Univ., ⁴Dainichiseika Color & Chemicals Mfg.Co.,Ltd., ⁵Jiangnan Univ., ⁶Univ. Hyogo.) ○ Maina Yonemura¹, Dai-ichiro Kato¹, Risa Yokoyama¹, Yukiko Yokogawa¹, Toshiaki Taniike², Yingjun An³, Atsushi Takahara³, Masayuki Kojima⁴, Hiroyuki Shimanaka⁴, Tatsuo Kaneko⁵, Seiji Negoro⁶

Nylon is widely used in daily necessities such as clothing, automobile parts, and fishing nets, owing to its superior heat and chemical resistance compared to other plastics. However, its high durability poses a significant challenge, as it is neither chemically degradable nor biodegradable. This has led to growing concerns over its accumulation in soil and marine environments after disposal. To address this issue, our laboratory is working on the development of next-generation biodegradable nylons, focusing on iNylon, which is a kind of polyamide contains pyrrolidone structure in its molecule (Fig.). iNylon exhibits biodegradability through water solubilization under photoirradiation, although the mechanism of its chemical degradation pathway remains unclear. In this study, we aimed to elucidate the photodegradation mechanism of iNylon by thoroughly analyzing the metabolites produced upon light irradiation. Our findings strongly suggest that UV light oxidizes the carbon atom adjacent to the amide bond in the iNylon unit, resulting in main chain scission and subsequent photoinduced water solubilization.

Keywords: polyamide; biodegradable plastic; nylon hydrorase; enzymatic hydrolysis

ナイロンは耐熱性、耐薬品性などが他のプラスチックより優れていることから衣類をはじめとする日用品や自動車の部品、漁網など、我々の身の回りで幅広く利用されている。一方で、その高い耐久性のために化学分解性に乏しく自然界で生分解を受けないため、使用後に廃棄された際の土壌や海洋環境への蓄積問題が顕在化している。我々の研究室ではこの問題を解決するために生分解性を示す次世代型ナイロンの開発を行っており、分子内にピロリドン環を有するポリアミド iNylon に着目している(図)。iNylon は光照射によって劣化・水溶性化することで生分解性を示すが、そのメカニズムは明らかにされていなかった。本研究では、光照射によって産生する代謝物を詳細に解析することで iNylon の光分解メカニズムの解明を試みた。検討の結果、iNylon ユニットのアミド性アミン隣接炭素原子が UV 光によって酸化され、主鎖切断や光水溶性化が発現している可能性を強く示唆する結果を得た。また本経路に立脚した酸化剤処理を施した場合にも、iNylon は汎用ナイロンよりも容易にモノマーにまで分解されうることを見出した。

$$HO \longrightarrow OH + H_2N^{-R} \setminus NH_2 \longrightarrow H_2N^{-R} \longrightarrow H_$$

図. イタコン酸とジアミンから誘導される光誘起型生分解性ナイロン iNylon

ラジカル開始剤を用いた酸化分解による使用済タイヤのケミカル リサイクル法の開発

(産総研¹・ブリヂストン²) ○山下 浩¹・羽鳥 真紀子¹・Putro Wahyu¹・上田 善弘¹・松本 和弘¹・崔 準哲¹・深谷 訓久¹・北條 将広²・田原 聖一²・本間 正洋²・湊 貴

Development of a Chemical Recycling Process for Used Tires by Oxidative Degradation Using Radical Initiators (¹National Institute of Advanced Industrial Science and Technology, ²Bridgestone Corporation) OHiroshi Yamashita¹, Makiko Hatori¹, Putro Wahyu¹, Yoshihiro Ueda¹, Kazuhiro Matsumoto¹, Jun-Chul Choi¹, Norihisa Fukaya¹, Masahiro Hojo², Seichi Tahara², Masahiro Homma², Takakazu Minato²

In relation to the development of chemical recycling processes for used tires, degradation of vulcanized rubbers was investigated. As a result, a carbon black (CB)-containing vulcanized natural rubber smoothly underwent oxidative degradation in the presence of a radical initiator under air at room temperature for 1 d to give a soluble liquid polyisoprene product (M_n = 15000-20000, M_w/M_n = ~2.5) in \geq 80% yield along with a recovered CB. Without the radical initiator, the reaction hardly proceeded to give the polyisoprene in \leq 2% yield even after 4 d. Pyrolysis of the resulting product at 700-750 °C gave an isoprene monomer as a main product.

Keywords: Tire; Chemical Recycling; Oxidative Degradation; Radical Initiator; Isoprene

使用済タイヤのケミカルリサイクルは CO₂ 削減の観点からも重要な課題である。本研究では、タイヤゴムの効率的低温分解法とモノマー化を検討した。その結果、ラジカル開始剤を用いた酸化分解により、(1)室温程度の温度でもタイヤゴムの分解・可溶化がスムーズに進行すること、(2)液状ポリマーの熱分解により、イソプレン等のモノマー化合物が効率よく得られることなどがわかった。

たとえば、カーボンブラック (CB) 入加硫天然ゴム (天然ゴム 63wt%、CB 31wt%、硫黄 1w%) を、空気中、触媒量の過酸化物系ラジカル開始剤存在下、トルエン等を溶媒として撹拌すると、室温、1日程度の条件で、可溶性ポリイソプレン (M_n =15000-20000、 M_w/M_n =~2.5) が 80%以上の収率で得られるとともに、少量の有機分を含むCB を回収できた。ラジカル開始剤が存在しない場合、室温、4日の撹拌でも、ポリイソプレンの収率は 2%以下であった。また、得られた可溶性ポリイソプレンの熱分解を Py-GC により検討した結果、700~750℃程度の温度で、イソプレンモノマーが主生成物として得られることを確認した。これらの結果は、使用済タイヤの効率的なケミカルリサイクルに役立つ知見と考えられる。

$$\begin{array}{c|c} \text{Oxidative degradation} & \text{Pyrolysis} \\ \hline \\ \text{With CB} & \text{S}_{\text{X}} \\ \end{array} \begin{array}{c} \text{Radical initiator / O}_{\text{2}} \text{ (Air)} \\ \hline \\ \text{Radical initiator / O}_{\text{2}} \text{ (Air)} \\ \hline \\ \text{CB} & \text{p >> m} \end{array}$$

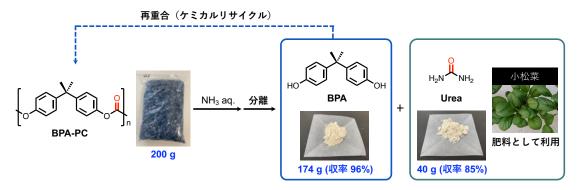
謝辞 この成果は、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)の委託 業務(JPNP21021)の結果得られたものです。

事業化に向けた石油由来ポリカーボネートのアンモニア水による ケミカルリサイクル

(千葉大院工¹) ○筒場 豊和¹・江見 佳玲¹・谷口 竜王¹・青木 大輔¹ Chemical recycling of petroleum-based polycarbonate by ammonolysis toward industrialization (¹*Graduate School of Engineering, Chiba University*) ○Toyokazu Tsutsuba,¹ Karin Emi,¹ Tatsuo Taniguchi,¹ Daisuke Aoki¹

Petroleum-based polycarbonate (BPA-PC) composed of bisphenol A (BPA) has been widely used due to its excellent heat and impact resistance, optical clarity, and mechanical strength. Currently, the amount of BPA-PC waste in Japan reaches hundreds of thousands of tons per year. However, most of them have not been recycled. On the other hand, we have demonstrated that bio-based polycarbonates are efficiently degraded into diol monomers and urea by ammonia water. In this work, ammonolysis of BPA-PC waste was studied for the industrialization of the chemical recycling of BPA-PC. As a result, chemical recycling was successfully demonstrated by using obtained BPA as the monomer for repolymerization. In addition, utilizing the obtained urea as a fertilizer was demonstrated by plant experiments. Keywords: Polycarbonate; Ammonolysis; Chemical recycling; Bisphenol A; Urea

ビスフェノール A (BPA) からなる石油由来ポリカーボネート (BPA-PC) は、高い耐熱性や耐衝撃性、透明性、機械的強度から広く利用されている。BPA-PC の国内廃棄量は年間数十万トンに及ぶが、その多くがリサイクルされることなく廃棄されているのが現状である。一方、当研究室では、植物由来のポリカーボネートがアンモニア分解によりイソソルビドと尿素へと効率的に分解されることを報告している $^{1-3}$)。本研究では、 $^{1-3}$ 0。本研究では、 $^{1-$



1) T. Abe, R. Takashima, T. Kamiya, C. P. Foong, K. Numata, D. Aoki, H. Otsuka, *Green Chem.* **2021**, 23, 9030. 2) T. Abe, T. Kamiya, H. Otsuka, D. Aoki, *Polym. Chem.* **2023**, 14, 2469. 3) K. Rikiyama, A. Matsunami, T. Yoshida, T. Taniguchi, T. Karatsu, S. Nishitsuji. D. Aoki, *Polym. J.* **2024**, 56, 443.

酸化還元活性な多核ロジウム錯体によるプロトン還元反応

(島大院自然科学) ○矢野 なつみ・片岡 祐介

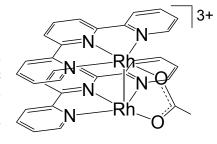
Proton-reduction reaction catalyzed by a redox-active polynuclear rhodium complex (*Graduate School of Natural Science and Technology, Shimane University*) ONatsumi Yano, Yusuke Kataoka

Hydrogen evolution reaction using metal complex catalysts has attracted attention not only from applied perspectives for solving the energy problem but also from fundamental perspectives. In recent years, metal complex catalysts with cobalt and nickel ions have been actively developed. However, there are still no metal complex catalysts that exhibit high catalytic turnover frequency (k_{obs}) at low overpotential (η) and excellent reaction durability. Against this background, we have developed dirhodium complex catalyst for electrocatalytic and photocatalytic hydrogen evolution catalyst that exhibits high efficiency and excellent durability ^{1,2)}. In this study, we present a dirhodium complex coordinated with redox-active terpyridine ligand $[Rh_2(O_2CCH_3)(tpy)_2]^{3+}$ for proton-reduction reaction. Electrocatalytic hydrogen evolution with $[Rh_2(O_2CCH_3)(tpy)_2]^{3+}$ in DMF shows a higher rate of H_2 evolution under trifluoroacetic acid as a proton source with k_{obs} of 5.27×10^6 s⁻¹ at η of 174 mV. Details of the electrocatalytic and photocatalytic proton reduction reaction will be discussed in this presentation.

Keywords: Proton-reduction reaction; Hydrogen evolution reaction; Rh complex

金属錯体を用いた電気化学・光化学的水素発生反応は、エネルギー問題の解決のみならず、基礎化学的な観点からも注目を集めている研究分野の一つである。近年では、コバルトイオンやニッケルイオン等を有する金属錯体触媒の開発が盛んに行われているが、低過電圧で高い触媒回転効率(kobs)を示し、かつ反応耐久性に優れた金属錯体触媒は未だ皆無の状況にある。この様な背景に対して我々は、優れた安定性を示し、高活性に水素発生反応を行うロジウム二核錯体触媒の開発を実施し、電気化学・光化

学的に高効率な水素発生を行うことを明らかにした ^{1,2)}。本研究では、酸化還元活性な配位子であるターピリジンが配位したロジウム二核錯体による電気化学・光化学的プロトン還元反応を実施し、電気化学的水素発生反応において、僅か 174 mV の過電圧で 5.27×10⁶ s⁻¹ もの驚異的な触媒回転頻度で水素発生を行うことを明らかにした。



- 1) Y. Kataoka, N. Yano, M. Handa, T. Kawamoto, Dalton trans., 2019, 48, 7302.
- 2) Y. Kataoka, K. Sato, N. Yano, J. Chem. Phys., 2023, 159, 204304.

有害物質を含む廃電子基板中の元素分析法に関する研究

(名市工研) ○松村大植・柴田信行・中野万敬

Research on Analytica Methods for Elements including harmful substances in Waste Printed Circuit Boards. (*Nagoya Municipal Industrial Research Institute*) O Daiki Matsumura, Nobuyuki Shibata, Kazunori Nakano

A standard analytical method for multi-elements in waste circuit boards using ICP-OES was investigated. Before analysis, pretreatment methods involving pulverizing waste printed circuit board, acid dissolution, and microwave digestion were performed. As a result, it was found that detection values of As depended on pretreatment methods. *Keywords: Printed Circuit Board; ICP-OES*

製品中にどのような元素が含まれるのか把握することはリサイクルを進める上で重要となる。そこで、本研究では廃電子基板の元素分析方法について検討を行った。前処理方法として、基板を均一に分析するための小型の粉砕機を用いた粉砕方法を検討し、粉砕時間ごとに粒度分布を測定していったところ、10分の粉砕で均一な分析試料を作製できることがわかった。また、ICP-OESを用いて分析を行うために、溶液化を行う条件の検討を行った。溶液化した試料の元素分析では、特にヒ素において前処理方法が違うことで分析結果が異なったため、この結果について報告する。

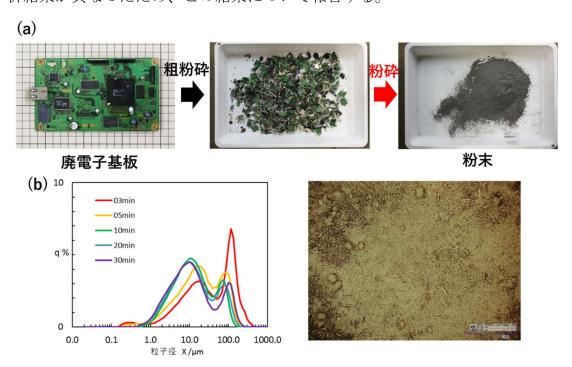


図 1. 廃電子基板の粉砕検討結果: (a) 粉砕工程、(b) 粒度分布

脂溶性ビタミンが誘発する微小液滴形成に基づく高倍率濃縮法の 開発

(福島高専¹) ○荒木 直¹・加藤 健¹

Development of highly effective concentration based on microdroplet induced by fat-soluble vitamin (¹National Institute of Technology(KOSEN), Fukushima College) ○ Nao Araki,¹ Takeshi Kato¹

Ethanol extraction and supercritical fluid extraction have been used as extraction methods for fat-soluble functional components in a solution, however, there are improvements in operability and concentration. Therefore, in this study, we examined homogeneous liquid-liquid extraction with environmentally friendly vitamin K_1 as the core of the extraction system. This system aimed for powerful concentration with simple operation. Among homogenous liquid-liquid extraction methods, we focused on the ternary component system with solubility differences. When vitamin K_1 -ethanol-water ternary component system examined, a microdroplet was formed with only a simple operation of adding water. Moreover, powerful concentration of 2267 times (20 ml \rightarrow 0.0075 ml) was confirmed to fat-soluble component, dithizone (Fig. 1).

This method is expected to be applied to the extraction of fat-soluble functional components with powerful concentration by environmentally friendly system.

Keywords: Microdroplet; Fat-soluble vitamin; High effective concentration

溶液中からの脂溶性機能性成分等の抽出法としてエタノール抽出や超臨界流体抽出が用いられているが、操作性や濃縮には改善点があると考えられる。そこで本研究では、環境に配慮したビタミン K_1 を抽出系の核とした均一液液液抽出法を検討し、シンプルな操作での高倍率濃縮を目指した。我々は均一液液抽出法の中でも溶解度差を利用した三成分系均一液液抽出法に着目した。ビタミン K_1 /エタノール/水の三成分で実際に検討したところ、水添加という簡単な操作のみで微小液滴を確認できた。また、実際に脂溶性成分であるジチゾンを目的物質として抽出を行ったところ、2667 倍(20 $ml \rightarrow 0.0075 \ ml$)の高倍率濃縮が確認できた(図 1)。

本法は、環境に優しく高効率で高倍率濃縮を可能にすることから、脂溶性機能性成分等の抽出に応用が期待される。

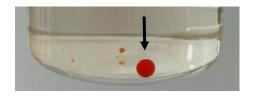


Fig. 1 脂溶性成分を抽出した微小液滴

Complete mineralization of tetrafluoroethylenehexafluoropropylene copolymer (FEP) in subcritical water with alkaline reagent

(Graduate School of Science, Kanagawa University) OHisashi Saito, Hisao Hori **Keywords**: Fluoropolymer; Subcritical water; Mineralization

Fluoropolymers are used in many sectors in common industrial equipment (for example, sinks, tubes, valves, O-rings, cable and wire insulations) and in high-tech applications such as proton exchange fuel cell membranes, cores and claddings of optical fibers, backsheets for solar cell panels, piezoelectric devices, cathode binders for lithium-ion batteries, UV- and aging-resistant coatings, and so forth. However, their recycling technologies have not yet been well established owing to their high stability. Furthermore, the mine production of high-purity fluorite (CaF₂ ore), the raw material for all fluoropolymers, is limited in a few countries. If fluoropolymer waste can be decomposed to F⁻ ions (i.e., mineralization) under mild conditions, F⁻ can be converted to CaF₂ by reaction with Ca²⁺ ion, which can contribute the recycling of fluorine element. Herein we report efficient mineralization of tetrafluoroethylene-hexafluoropropylene copolymer (FEP) by use of subcritical water in the presence of alkaline reagent.¹⁾

Fig.1 shows the reaction time dependence of the amount of F⁻ and total organic carbon (TOC) formed in the reaction solution, where FEP was reacted in 3.0 M of KOH at 360 °C under argon. When the reactions were performed for 18 h, the F⁻ yield reached 98%. Therefore, complete fluorine mineralization was achieved. On the other hand, the remaining ratio of TOC was 17%. These results indicate that the resulting organic compounds in the reaction solution do not contain fluorine atoms, because most of the fluorine atoms in FEP were mineralized. ¹⁹F-NMR of the reaction solutions showed only the peak of F⁻,

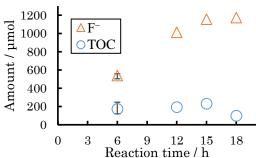


Fig. 1. Reaction-time dependences of the F⁻ and TOC amounts in the reaction solution. FEP (30.0 mg) was heated with 3.0 M of initial [KOH] in subcritical water at 360 °C for 6–18 h.

even in cases where the mineralization was incomplete. Raman spectroscopy for the residue indicated that the residue was a mixture of FEP and amorphous carbon. FEP decomposed, releasing F⁻ into the reaction solution, resulting in the formation of amorphous carbon in the residue.

1) H. Hori, H. Saito, A. Manseri, B. Ameduri, Eur. Polym. J. 2024, 221, 113575.

微細気泡を含む高分子溶液の相分離による生分解性中空高分子微 粒子の作製

(名市工研¹・名大院工²)○安井 望¹・斉藤 右恭²・山口 毅²・安田 啓司² Preparation of biodegradable hollow polymer particles by phase separation in polymer solution containing fine bubbles (¹Nagoya Municipal Industrial Research Institute, ²Graduate School of Engineering Nagoya University) ○Nozomu Yasui¹, Ukyo Saito², Tsuyoshi Yamaguchi², Keiji Yasuda²

Biodegradable hollow polymer particles were created, which are expected to serve as a substitute material for microplastics, as well as functional particles. This production method results in the formation of hollow particles from a polymer solution containing fine bubbles and produces hollow particles efficiently and inexpensively, but it requires a lot of organic solvents. In this research, waste solvents resulting from particle production were regenerated, and the solvents were reused to produce particles. Measurements of the particle size distribution indicated that the shape remained unchanged when the regenerated solvents were used.

Keywords: Hollow Polymer Particles, Fine Bubbles, Biodegradable, Phase Separation

マイクロプラスチック問題の対策として生分解性高分子微粒子が期待されるが、懸濁液を用いた反応による微粒子作製は難しい。また、中空粒子は断熱材や軽量材などの利用が期待されるが、コア物質の調整と除去が必要であり、作製にエネルギーを要する。

筆者らは高分子溶液、水、貧溶媒を用いた生分解性中空高分子微粒子の作製方法を見出した ^{1,2)}。Fig.1 はポリブチレンサクシネート(PBS)微粒子の電子顕微鏡像である。電子線により変形しているが、中空球状粒子を確認できる。

本方法は微細気泡をコアとして中空高分子微粒子を析出させる方法であるが、有機溶媒を多く使用するため環境負荷が高い。そこで本研究では粒子作製後の廃液を再生して粒子作製に再利用した。Fig.2 の粒度分布結果から、溶媒再利用による粒子形状の変化や粒子同士の接合は発生しないと考えられる。

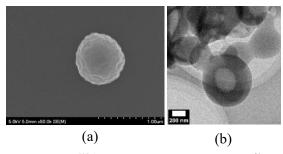


Fig.1 PBS 微粒子の SEM(a)と TEM(b)像

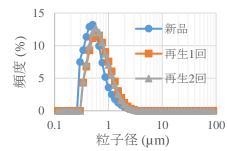


Fig.2 PBS 微粒子の個数基準粒度分布

- 1) 安井望, 安田啓司, 晶析操作による化合物の粒子の製造方法および製造装置,特開 2024-140860 2024.
- 2) 安井智哉, 安井望, 安田啓司, 日本ソノケミストリー学会誌 2023, 17, 33.

化学-酵素的加水分解による汎用ナイロンの定量的なモノマー化技術

(1. 鹿児島大学、2. 兵庫県立大学) 白石 雄樹 1 、加藤 太一郎 1 、横山 理沙 1 、古野洋子 1 、横川 由起子 1 、根来 誠司 2

Chemo-enzymatic quantitative monomerization technique for nylons (1. Kagoshima univ., 2. Univ. of Hyogo) ○Yuki Shiraishi¹, Dai-ichiro Kato¹, Risa Yokoyama¹, Yoko Furuno¹, Yukiko Yokogawa¹, Seiji Negoro²

Nylons are widely utilized in textiles and automotive parts due to its toughness, heat and chemical resistance, and flexibility. These properties stem from the intermolecular interactions within its regular amide bond structure. However, its high stability renders it non-biodegradable and resistant to chemical degradation, which results in limited recycling opportunities. Since the 1970s, we have been studying microorganisms capable of metabolizing nylon and have explored the use of nylon hydrolytic enzymes (Nyl series) to convert nylon into monomers. Despite this progress, the enzymatic hydrolysis of high-molecular-weight nylon using the Nyl series remains inefficient, with degradation rates typically limited to a few percent. This inefficiency is primarily attributed to nylon's insolubility in water.

This presentation introduces a method to enhance enzymatic degradability by chemically pretreating nylon to improve its solubility, thereby enabling more efficient hydrolysis into monomers by the Nyl series. This approach has also proven effective for commercial nylon products, highlighting the potential of enzymatic hydrolysis as a viable solution for the chemical recycling of nylon products.

Keywords: Nylon; Nylon hydrolase; Nyl series enzymes

ナイロンは耐熱性、耐薬品性などの強靭性だけでなく柔軟性も示すことから繊維製品や自動車部品など我々の身の回りで幅広く利用されている素材である。この性質はアミド結合の規則的な繰り返し構造に起因する分子間相互作用よって発現するが、化学的安定性の高さから生分解性が無いだけでなく人工的な分解も難しいため、リサイクルはほとんどなされていない。我々は1970年代から、ナイロンを資化可能な微生物を探索し、そこから得られたナイロン加水分解酵素群(Nyl series)を利用したナイロンモノマー化研究を行ってきた。ただし高分子ナイロンに対してそのままの状態でNyl series を作用させても加水分解活性は低いレベルにとどまり、高々数%の分解効率にとどまってしまう。これはナイロンが水に不溶であることと強い関連があると考えられた。

本発表にて我々は、高分子ナイロンに化学的前処理を施し水溶性化することで Nyl series による酵素分解の感受性を高め、ナイロンを定量的にモノマーへと変換する方法を紹介する。本法は市販のナイロン製品に対しても高効率にてモノマー化可能であることから、Nyl series を用いた酵素加水分解手法がナイロンの商業的なケミカルリサイクルを実現する選択肢の一つになりうると期待している。

循環利用と資源回収を目指す環境配慮型バイオポリマーの展開

(福島高専¹・関西大学²) ○髙倉 未来¹・加藤 健¹・矢島 辰雄² Development of environmentally friendly biopolymer for recycling and resource recovery (¹National Institute of Technology(KOSEN), Fukushima College, ²Kansai University) ○Mirai Takakura,¹ Takeshi Kato,¹ Tatsuo Yajima²

In recent years, natural products and chemicals have become important to reduce the burden on the environment. Based on this trend, we investigated the use of natural biopolymers for recycling and resource recovery. The used biopolymer with epoxy groups at its terminals is highly reactive and water-soluble. In order to use this polymer for resource recovery, the polymer itself must be in both a homogeneous and coagulated state. It was found that the polymer can switch between homogeneous and coagulated states by salting out with sodium chloride (Fig. 1). Furthermore, it was discovered that the polymer could be modified at its terminal with metal ligand and used to recover rare metals. Also, the results showed that the base material, natural biopolymers, can be recycled.

Keywords: Biopolymer; Recycling; Resource recovery

自然災害などの異常気象等が増加しているが環境汚染はその一因と懸念されている。環境負荷を軽減するために近年自然由来の製品や化学物質が重視されている。この流れをふまえて本研究では自然由来バイオポリマーを循環利用と資源回収に用いるための検討を行った。使用するバイオポリマーは末端にエポキシ基を有し高い反応性を持ち水溶性であるため、物質と接触しやすい均一溶液を調製することが可能である。本ポリマーを資源回収に用いるにはポリマー自体が均一と凝集の両方の状態を取る必要があるが、塩化ナトリウムによる塩析により均一と凝集の切替が可能であることがわかった(図 1)。 さらに本ポリマーの末端に金属配位子を修飾し、レアメタル回収に応用できる可能性が見出された。本研究の母材である自然由来バイオポリマーは循環利用を想定した結果も得られており、環境配慮型システムとする展開が見込まれる。



Fig. 1 使用したバイオポリマーの凝集状態

PTFE リサイクルに向けた分子ほぐしの新戦略と分子論的評価

(京大化研¹・東京科学大学²・東北大多元研³) ○大貫 友椰¹・荒木 泰介¹・塩谷 暢貴¹・松田 大¹・長谷川 健¹・火原 彰秀²・加納 純也³

A new strategy of molecular disaggregation for PTFE recycling studied by molecular analysis (¹Institute for Chemical Research, Kyoto University, ²Institute of Science Tokyo, ³Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University)

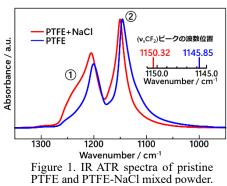
○Tomoya Oonuki¹, Taisuke Araki¹, Nobutaka Shioya¹, Hiroshi Matsuda¹, Takeshi Hasegawa¹, Akihide Hibara², Junya Kano³

Poly(tetrafluoroethylene) (PTFE) is used in various fields because of its unique and useful properties such as high chemical stability. However, the stability makes it difficult to recycle the used matter. The unique properties of PTFE are derived from its strong molecular aggregation induced by the dipole-dipole interactions. In this study, we have tried to disaggregate PTFE using solid NaCl. PTFE powder and solid NaCl were co-milled, the aggregated structural changes were pursued by using infrared spectroscopy. The spectral change (Fig.1) significantly shows that the addition of NaCl helps the expected molecular disaggregation a lot. This result reveals that the molecular interaction of PTFE is suppressed by addition of NaCl.

Keywords: PTFE; Material Recycling; Mechanochemistry; SDA Theory; Non-Fluorinated Solvents

ポリテトラフルオロエチレン(PTFE)は化学的に高い安定性を示し、撥水撥油性などの特異で有用な物性を持つことから様々な分野で利用されている。しかしその安定性のために分解や回収が難しく、効率的な処理方法やリサイクル方法が求められている。

PTFE の特異な物性は、PTFE 分子が双極子間相互作用によって強固な 2 次元凝集構造を形成することで発現する ¹⁾. すなわち、この凝集構造をほぐすことは、物性の制御や、効率的な処理法、新たなリサイクル方法の開発にとって必要である. 我々は大きな双極子モーメントを持つ NaCl を用いることで、PTFE 分子間の双極子間相互作用を阻害し、凝集構造をほぐすことができるのではないかと考えた. そこで PTFE 粉末と固体の NaCl を共粉砕し、赤外分光法を用いて凝集構造の変化を調べた.



結果を図1に示す. NaClの添加によってPTFE の赤外スペクトルに, ①新たなバンドの出現, および②ピークの高波数シフトという変化が現れることが分かった. これらの変化を解析したところ①は PTFE 粒子の粒径の減少を, ②は凝集構造のほぐれを反映していることが明らかになった. 本実験によって NaCl の添加により, PTFE 分子間の相互作用が阻害されることが示唆された.

1) T. Hasegawa, "Physicochemical Nature of Perfluoroalkyl Compounds Induced by Fluorine" *Chem. Rec.* **2017**, *17*, 903.

海洋生分解性の低い脂肪族ポリエステルの生分解性を向上させる

(群大食健康セ ¹・群大院理工 ²・海洋機構 ³) 〇鈴木 美和 ¹・太田 美乃里 ²・橘 熊野 ¹.²・石井 俊一 ³・鹿島 裕之 ³・粕谷 健一 ¹.²

Enhancing marine biodegradability of poly(butylene succinate) by blending with organic compounds (¹ *Gunma University Center for Food Science and Wellness,* ² *Graduate School of Science and Technology., Gunma University,* ³ *Japan Agency for Marine-Earth Science and Technology*) ⊙ Miwa Suzuki¹, Minori Ota², Yuya Tachibana¹,², Shun'ichi Ishii³, Hiryoyuki Kashima³, Ken-ichi Kasuya¹,²

We present a novel method to enhance the marine biodegradability of poly(butylene succinate) (PBS) by blending it with 10 wt.% of 16-hydroxyhexadecanoic acid (16HHD) and poly(ε -caprolactone) (PCL). The weight loss rates of the PBS samples with 16HHD and PCL were 18.4- and 7.8-times faster than that of PBS. Additionally, unlike pristine PBS, samples with 16HHD and PCL demonstrated biochemical oxygen demand (BOD) biodegradabilities of 90.4 % and 83.2 %, respectively, under marine conditions. The addition of 16HHD and PCL changed the microbial community compared to PBS. These findings demonstrate how blending PBS with 16HHD and PCL enhances its marine biodegradability. *Keywords: Biodegradable plastics, Marine biodegradability, Poly(butylene succinate), 16-Hydroxyhexadecanoic acid, Poly(\varepsilon-caprolactone)*

化学合成生分解性プラスチックであるポリブチレンスクシネート(PBS)の海洋生分解性は極めて低い。本研究では、PBS に PBS 分解微生物誘引物質として 16-ヒドロキシヘキサデカンサン(16HHD)とポリ(e-カプロラクトン)(PCL)を 10wt%で添加し、海洋環境中での生分解性をしらべた。

16HHD と PCL を添加した PBS の海洋環境中での重量減少速度は PBS 単体の重量減少速度の 18.4 倍と 7.8 倍であった。16HHD と PCL を混合した PBS を 4 ヶ月間海洋に曝露させた後の走査型電子顕微鏡像では、表面が粗くなっており、酵素分解が生じたことが示唆された。16HHD と PCL を添加した PBS は海洋条件下でそれぞれ90.4%および83.2%の生物化学的酸素要求量(BOD)生分解度を示した。BOD 生分解度測定試験後の溶液の微生物群集を解析したところ、16HHD と PCL の添加は、それらを変化させることがわかった。本研究結果は材料の生分解性を表面の微生物群集構造(プラスティスフィア)を変化させることにより制御可能であることを示唆しており、環境におけるプラスチック汚染問題の解決策の一つとなりうる 1)。

1) Enhancing marine biodegradability of poly(butylene succinate) by blending with 16-hydroxyhexadecanoic acid and poly(ε-caprolactone) Miwa Suzuki, Shun'ichi Ishii, Minori Ota, Kohei Gonda, Hiroyuki Kashima, Takahiro Arai, Yuya Tachibana, Hiroyuki Takeno, Ken-ichi Kasuya, *Polym. Degrad. Stab.* **2024**, *228*, 110912.

分子内にピロリドン環を有するポリアミド iNylon を資化する新規 海洋性細の単離とその PHA 産生能力の発見

(鹿児島大学大学院理工学研究科¹・岩手大学農学部²・江南大学³・兵庫県立大学大学院工学研究科⁴)○古野洋子¹・加藤太一郎¹・横山理沙¹・横川由起子¹・山田美和²・金子達雄³・根来誠司⁴

Isolation of a novel marine bacterium capable of degrading polyamide iNylon with a pyrrolidone structure and its potential for PHA production (¹ Kagoshima Univ, ² Iwate Univ, ³ Jiangnan Univ, ⁴Univ.Hyogo) OYoko Furuno¹, Dai-ichiro Kato¹, Risa Yokoyama¹, Yukiko Yokogawa¹, Miwa Yamada², Tatsuo Kaneko³, Seiji Negoro⁴

Nylon, a commonly used plastic with annual global production exceeding 8.9 million tons, has low biodegradability, leading to significant environmental impact through accumulation in soil and oceans. To address this problem, we are developing biodegradable next-generation nylons, focusing on iNylon, which contains a pyrrolidone ring and degrades into water-soluble products upon UV exposure. In this study, we isolated microorganisms capable of metabolizing the iNylon monomer, Nylon6i-monomer unit (6i-MU), from Kagoshima Ocean⁽¹⁾. These microorganisms were enriched using 6i-MU as a carbon source, resulting in the isolation of *Sulfitobacter gulosus* Umi7-B1(Fig.). The whole genome analysis identified it as a new species. Genetic analysis suggested that this strain possesses enzymes involved in polyhydroxyalkanoate (PHA) biosynthesis. Chloroform extraction of the culture strain yielded polymer-like substances, and 1H-NMR confirmed that they were polyhydroxybutyrate (PHB). *Keywords:nylon hydrorase; Polyhydroxyalkanoic acid; Nylon6i-monomer unit; Sulfitobacter gulosus Umi7B-1*

ポリアミドの一種であるナイロンは、繊維など日常的に使用されるプラスチックであり、世界中で年間890万トン以上生産されている。しかし、その生分解性は低く土壌や海洋中に蓄積することで環境に高い負荷を与えている。我々は、この問題を解決するために生分解性を示す次世代型ナイロンの開発を行っており、分子内にピロリドン環を有するポリアミドiNylonに着目している。iNylonは光照射によって劣化・水溶性化することで生分解性を示す。本研究ではiNylonが加水分解された際に生じうる構成モノマーNylon6i-monomer unit (6i-MU)を資化可能な微生物を鹿児島海域より単離し、その性質付けを行った。

資化微生物は、海中に数か月~1年間浸漬したフィルム状の iNylon から単離した。 6i-MU を炭素源とした培地を用いて、フィルムに付着した微生物叢の集積培養を行い資化細菌 Umi7-B1 株を取得した(1)。全ゲノム解析の結果から、本株は新種と判断され Sulfitobacter gulosus Umi7-B1 と命名した(図)。また遺伝子解析の結果、本株がバイオプラスチックの一種である PHA 生産に関与する酵素群を保有することが強く示唆された。そこで培養菌株をクロロホルム抽出に供したところ、ポリマー様物質が得られた。また 1H-NMR 解析結果から polyhydroxybutyrate (PHB)を主成分とするポリエステルであることが確認できた。

1) D.Kato et al., JP2022-034081.

(Fig.) Colony isolation by Nylon6i seawater plates

有機金属触媒を用いた木質細胞壁中のリグノセルロースの直接的 アミノ化反応

(京大 ¹・ダイセル ²・JST さきがけ ³・東北大 ⁴) 〇中川 由佳 ¹,2,3・古川 翔一 ⁴・近藤 敬子 ¹・片平 正人 ¹・渡辺 隆司 ¹・藤田 健一 ¹・中村 正治 ¹

Metal-Catalyzed Amination Reactions of Lignocellulosic Molecules in Woody Plant Cell Walls (¹Kyoto Univ., ²Daicel Corporation, ³PRESTO, JST, ⁴Tohoku Univ.) O Yuka Kawahara-Nakagawa^{1, 2, 3}, Shohichi Furukawa⁴, Keiko Kondo¹, Masato Katahira¹, Takashi Watanabe¹, Ken-ichi Fujita¹, Masaharu Nakamura¹

Toward the departure from the petroleum resource-dependent society, utilizing woody biomass – an abundant renewal resource in Japan – as a source of chemical feedstock is essential. However, the demand for the wood is mainly for the lumber and plywood (40%), pulp and chips (35%), fuelwood (20%) and limited for chemical use. This is because the high energy consumption required to disintegrate the hieratical structures of wood, which is held together by strong and numerous bonds among its main components: cellulose, lignin and hemicellulose. Furthermore, these woody biopolymers are difficult to separate, purify and modify due to their insolubility. In this study, we developed a novel method to functionalize wood directly in a single reaction, wherein the disintegration of the woody structure and the modification of its polymer occur simultaneously. Specifically, we performed the amination reaction directly on the wood powder and obtained aminated cellulose as a solid and lignin in the solution. We also performed model experiments to determine the structure of the aminated cellulose produced.

Keywords: Woody biomass; Catalyst; Cellulose; Lignin

森林バイオマスは日本に豊富に存在する再生可能資源であり、石油資源依存社会からの脱却には、木材の化成品利用技術が必要不可欠である。しかしながら、木材需要のほとんどが製材・合板用材(40%)、パルプ・チップ用材(35%)、燃料材(20%)であり、化成品としての利用は限られている。木材の化成品利用が進まない理由は、木材の構成成分であるセルロース・リグニン・ヘミセルロースが互いに強固に結合しているため、その組織構造の解体に多大なエネルギーがかかる点と、これらの化合物の分離・精製・官能基変換が困難である点が挙げられる。本研究では、木材の組織構造の解体と官能基変換を同時に達成できる新規木材機能化手法を開拓した。具体的には、木質細胞壁中のリグノセルロースを直截的にアミノ化することで、セルロースのアミノ化及びリグニン成分の分離を達成した。さらに、アミノ化されたセルロースの構造を詳細に決定するために、セルロースをモデル基質としたアミノ化反応も行った。

Cellulose

R= Amino and/or OH

Aminated cellulose

非相溶系生分解性ポリマーブレンドからのマイクロプラスチック 発生の可能性

(産総研)○日野 彰大・山野 尚子・川崎 典起・中山 敦好

Potential for microplastic generation from incompatible biodegradable polymer blends (AIST) Shodai Hino, Naoko Yamano, Norioki Kawasaki, Atsuyoshi Nakayama

As most polymer blends have a phase-separated structure, the progress of biodegradation is considered to be non-uniform, with the slower parts remaining while becoming finer, which may lead to the accumulation of microplastics (MP) rather than composites. Therefore, this study focuses on the phase-separation structure of incompatible biodegradable composites as one of the factors influencing biodegradability, clarifies their biodegradation behaviour, and examines the possibility of MP generation by biodegradable composites.

Keywords: Biodegradation, Polymer blends, Incompatibility, Microplastics

ポリマーブレンドはほとんどが相分離構造を有するため、生分解の進行が不均一になり、遅い部分が微細化しながら残ると考えられ、複合化によってむしろマイクロプラスチック(MP)の蓄積を招く可能性がある。そこで、本研究では生分解性へ影響を与える要因の一つとして、非相溶系生分解性複合材料における相分離構造に着目し、その生分解挙動を明らかにすることで、生分解性複合材料による MP の発生可能性について検討を行った。

本研究では、生分解しないポリスチレン(PS)と生分解性を持つポリカプロラクトン(PCL)のポリマーアロイ PS/PCL を様々な比率で作成し、酵素溶液および実環境での生分解を受けた際の挙動を解析したので報告する。

謝辞:本研究は, JSPS 科研費(Grant No.22K18051)の支援によって得られた。

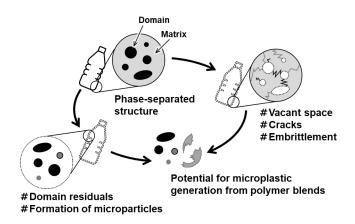


Fig. The schematic illustration showing possible MP generation from incompatible polymer blend.

貴金属-貧金属合金クラスターを利用した貴金属触媒の活性増幅

(東大生研¹・東大院工²・JST さきがけ³・科学大化生研⁴・福島県医大総合科学教育 研究セ5・阪大院工6) ○塚本 孝政 1,2,3・吉田 希生 4・田邊 真 5・神戸 徹也 6・山元

Enhancement of Catalytic Activity of Noble Metals by Alloying with Poor Metals in Cluster (¹Institute of Industrial Science, The University of Tokyo, ²Graduate School of Engineering, The University of Tokyo, ³JST-PRESTO, ⁴Laboratry for Chemistry and Life Science, Institute of Science Tokyo, ⁵Integrated Center for Science and Humanities, Fukushima Medical *University*, ⁶*Graduate School of Engineering, Osaka University*) ○Takamasa Tsukamoto, ^{1,2,3} Nozomi Yoshida, Makoto Tanabe, Tetsuya Kambe, Kimihisa Yamamoto

In this study, we focused on alloy clusters with a diameter of ~1 nm, and investigated how to maximize the catalytic activity of noble metals based on the strong charge transfer between noble metals and poor metals. We alloyed noble metals typified by gold and poor metals typified by tin in clusters, and clarified their electronic states for various alloy compositions. Moreover, the catalytic activity of clusters in oxidation reactions using a substrate such as ethanol was also evaluated.

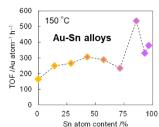
Keywords: Cluster materials; Noble metals; Poor metals; Alloys; Catalysts

直径が約1 nm に達するクラスター物質は、従来のナノ粒子とは大きく異なる物理 特性や化学反応性を示すことから、次世代材料の候補として注目を集めている[1]。本 研究では、新たに合金クラスター[2]における金属の触媒活性増幅効果に着目し、特に 異種金属間の強力な電荷移動誘起が期待される貴金属-貧金属合金クラスターを用 いて、当該効果の実証と解明を目指した。初めに、モデル金属として金等の貴金属元 素、スズ等の貧金属元素をそれぞれ選択し、カプセル型高分子を用いる鋳型合成法に より、両者の組成比を連続的に変化させた合金クラスターを得た[3,4]。その結果、貧 金属の含有率の増加に伴う金アニオンの生成が観測され、クラスター内部における異 種金属間の電荷移動の発現が示唆された。続いて、チタニア担持した合金クラスター を触媒としてエタノールの酸化反応の検討により、貧金属の含有率が高いほど金の触 媒活性が高くなる傾向が観測された。このことから、本手法は貴金属の有効利用に代 表される、資源・環境課題の解決に向けた有力な手法の一つになると考えられた。

Δ110

4f70





- T. Tsukamoto, et al., Nature Rev. Chem. 2021, 5, 338. 1)
- T. Tsukamoto, et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2020, 59, 23051. 2)
- 3) T. Tsukamoto, et al., Nature Commun. 2018, 9, 3873.
- 4) T. Tsukamoto, et al., Acc. Chem. Res. 2021, 54, 4486.

接着タンパク質 AtaA の小型化による微生物固定化と微生物反応 への応用

(名大院工¹) ○吉本 将悟¹・堀 克敏¹

Miniaturization of adhesion protein AtaA for microbial immobilization and application to microbial reactions (¹Graduate School of Engineering, Nagoya University) ○ Shogo Yoshimoto,¹ Katsutoshi Hori²

Cell immobilization enhances the efficiency of whole-cell biocatalysts. We developed a method using AtaA, a trimeric autotransporter adhesin from *Acinetobacter* sp. Tol 5. However, its application to non-Acinetobacter species is limited due to the difficulty of expressing large AtaA, a homotrimer of 3,630-amino-acid chains. Here, we identified the adhesive domain of AtaA and created mini-AtaA to improve heterologous expression. Functional mapping with inframe deletion mutants revealed that the N-terminal head domain is essential for adhesion. Mini-AtaA, a 775-amino-acid homotrimer, was efficiently expressed in E. coli, achieving higher surface display and immobilization on polyurethane foam than full-length AtaA (FL-AtaA). It minimally affected cell growth and enzyme activity, enabling efficient, reusable whole-cell biocatalysts.

Keywords: Immobilization; bioprocess; bacteria

生体触媒を用いたバイオプロセスは、環境負荷の少ない物質生産技術として注目されているが、細胞固定化には物質移動律速や細胞の漏出、活性低下などの課題がある。我々は Acinetobacter sp. Tol 5 由来の接着タンパク質 AtaA を用いた固定化法を開発してきたが、AtaA の巨大さから異種細菌での発現が困難だった。本研究では、AtaA の接着ドメインを特定し、N 末端 head ドメイン(Nhead)が接着に必須であることを明らかにした。さらに、Nhead を含む 775 残基の小型 AtaA(mini-AtaA)を設計し、大腸菌での発現を試みた結果、表層提示量が向上し、多孔性ポリウレタン担体への固定化効率が大幅に改善された。固定化された大腸菌は活性を維持したまま物質変換を繰り返し実施可能であり、本成果はバイオプロセスの発展に寄与すると期待される。

環境応答性蛍光色素 FluoraBlocks で標識したアルギン酸ゲルの環境保全利用

(北大院環境) ○山田 幸司・前田 渉希・諸角 達也

Environmental conservation use of alginate gel labeled with environmentally responsive fluorophore FluoraBlocks (*Graduate School of Environmental Science, Hokkaido University*) Okoji Yamada, Shoki Maeda, Tatsuya Morozumi

Sodium alginate, which is a polysaccharide with carboxyl groups produced from brown algae, form a gel when calcium ions are added, enabling it to act as an adsorbent. In this study, a fluorescent dye (Dye 1), whose emission wavelength is responsive to solvent polarity, was synthesized with an amino terminal group and condensed with sodium alginate to evaluate gel performance. The gel was formed by mixing 0.5wt% dye with alginates having different mannuronic acid/glucuronic acid ratios. While the fluorescence color remained largely unaffected by the mannuronic acid/glucuronic acid ratio and divalent ions, exposure to cationic surfactants or heating (80°C, 5 minutes) caused a significant short-wavelength shift. This suggests the dye localizes within the gel's water phase and responds to both solvent polarity and structural changes, making it promising for applications in sensors and contaminant adsorption.

Keywords: alginate gel; fluorescent dye; wavelength response

アルギン酸ナトリウムは、褐藻類から大量に生産されるカルボキシ基を持つ多糖類で、カルシウムイオンを添加して吸着材となるゲルを形成することができる。そこで、アミノ末端を持つ溶媒極性などに蛍光波長応答する色素 1 を合成し、アルギン酸ナトリウムに縮合し、ゲルの性能を評価した。0.5wt%の色素を縮合し、マンヌロン酸/グルロン酸比が異なるアルギン酸などと混合してゲルを形成した。マンヌロン酸/グルロン酸比やゲル化2価イオンの種類によって蛍光色がほとんど変わらない一方で、カチオン性界面活性剤の吸着 1 やゲルへの過熱 (80℃、5分)によって大きく短波長シフトしたので、色素はゲルの内部水層に局在し、溶媒極性だけではなくゲルの構造変化などにも波長応答していると考えられる。今回得られた環境応答性蛍光ゲルの知見は、センサーや汚染物質吸着の性能向上への応用展開が期待できる。

$$\begin{array}{c} \text{Boc} \\ \text{N} \\ \text{H} \end{array} \begin{array}{c} \text{H} \\ \text{Br} \end{array} + \begin{array}{c} \text{H} \\ \text{N} \\ \text{N} \\ \text{S} \end{array} \begin{array}{c} \text{O} \\ \\ \text{DMF}, \\ \text{90°C,N_2} \end{array} \begin{array}{c} \text{Boc} \\ \text{N} \\ \text{H} \end{array} \begin{array}{c} \text{N} \\ \text{N} \\ \text{N} \\ \text{N} \end{array} \begin{array}{c} \text{O} \\ \text{S} \\ \text{O} \\ \text{DCM, r.t. 45min, sonication} \end{array}$$

1) K. Kishi, A. Ichimura, Z. Shuai, Y. Otsuka, T. Morozumi, K. Yamada, Polymers, 2022, 14(21), 4649.

二酸化炭素を原料とするジェチルカーボネート合成用ジルコニウム固定化触媒の開発

(産総研¹・東ソー(株)²)○長江 春樹¹・小泉 博基¹・竹内 勝彦¹・羽村 敏²・山本 敏秀²・松本 和弘¹・上村 佳大¹・片岡 祥¹・深谷 訓久¹・崔 準哲¹ Zirconium-Grafted Heterogeneous Catalysts Driving CO₂ Conversion to Diethyl Carbonate (¹National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), ²TOSOH Corporation) ○ Haruki Nagae,¹ Hiroki Koizumi,¹ Katsuhiko Takeuchi,¹ Satoshi Hamura,² Toshihide Yamamoto,² Kazuhiro Matsumoto,¹ Yoshihiro Kamimura,¹ Sho Kataoka,¹ Norihisa Fukaya,¹ Jun-Chul Choi¹

The increase in carbon dioxide (CO_2) levels has been identified as a significant contributor to climate change, particularly global warming. Therefore, in recent years, considerable efforts have been dedicated by scientists to develop CO_2 converting method into useful chemicals. Dialkyl carbonate (DRC) is chemically synthesisable from CO_2 , and finding applications as reagents and solvents in organic synthesis, electrolytes in batteries, as well as comonomers in copolymerization. We recently reported an efficient synthesis method of DRC from CO_2 and tetraalkyl orthosilicate in the presence of tetraalkoxy zirconium $(Zr(OR)_4)$ as the catalyst. Herein, we improved our DRC synthesis method by using immobilized catalyst, $Zr(OEt)_4$ grafted on metal oxide support, and found that immobilized catalyst exhibited higher catalytic activity compared to $Zr(OEt)_4$ in the conversion of CO_2 to diethyl carbonate.

Keywords: CO₂; Diethyl Carbonate; Tetraethyl Orthosilicate; Zirconium Grafted Catalyst

近年、カーボンニュートラルを実現するために、二酸化炭素 (CO_2) の排出量を削減するだけでなく、大気に存在する CO_2 を原料として、燃料やさまざまな化学品を合成する技術が盛んに研究されている。我々は、これまでにテトラアルキルオルトシリケートを再生可能な反応剤として用いることで、 CO_2 を用いたジアルキルカーボネートの合成手法を開発してきた 1 。今回我々は、従来使用していた $Zr(OEt)_4$ を金属酸化物上に担持した固定化触媒が CO_2 とテトラエチルオルトシリケート (TEOS) を原料としたジエチルカーボネート合成において、未担持の $Zr(OEt)_4$ よりも高い触媒活性を示すことを見出したので報告する 2 。

$$CO_{2} + Si(OEt)_{4} \xrightarrow{\text{(catalyst)}} O + (EtO)_{3}Si - O - Si(OEt)_{3}$$
5.0 MPa

- 1) W. S. Putro, A. Ikeda, S. Shigeyasu, S. Hamura, S. Matsumoto, V. Y. Lee, J.-C. Choi, and N. Fukaya, *ChemSusChem* **2021**, *14*, 842-846.
- 2) H. Nagae, H. Koizumi, K. Takeuchi, S. Hamura, T. Yamamoto, K. Matsumoto, Y. Kamimura, S. Kataoka, N. Fukaya, and J.-C. Choi, *ChemCatChem* **2024**, *16*, e202400673. 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)の助成事業(JPNP21021)の結果得られたものです。

二酸化炭素の化学吸収を応用したジアルキルカーボネート合成

(産総研 ¹・東ソー(株)²) 〇小泉 博基 ¹・長江 春樹 ¹・竹内 勝彦 ¹・松本 和弘 ¹・深谷 訓久 ¹・坂口 孝太 ²・星野 浩慶 ²・羽村 敏 ²・崔 準哲 ¹

Synthesis of Dialkyl Carbonates Employing Chemical Absorption of Carbon Dioxide (\frac{1}{National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST), \frac{2}{TOSOH} Corporation) \cap Hiroki Koizumi\frac{1}{\cdot} \cdot Haruki Nagae\frac{1}{\cdot} \cdot Katsuhiko Takeuchi\frac{1}{\cdot} \cdot Kazuhiro Matsumoto\frac{1}{\cdot} \cdot Norihisa Fukaya\frac{1}{\cdot} \cdot Kouta Sakaguchi\frac{2}{\cdot} \cdot Hiroyoshi Hoshino\frac{2}{\cdot} \cdot Satoshi Hamura\frac{2}{\cdot} \cdot Jun-Chul Choi\frac{1}{\cdot}

Dialkyl carbonates, which can be synthesized from CO₂, are valuable materials for polymers or lithium-ion batteries. Typically, the synthesis of dialkyl carbonates usually requires high pressure CO₂ and/or highly reactive reagents such as halogenated alkyls. In this presentation, we demonstrate a synthetic method that uses atmospheric pressure of CO₂ with tetraalkyl orthosilicates (TROS) as regenerable reagents. Atmospheric pressure of CO₂ was bubbled into a mixed solution containing an alcohol and a strong organic base, resulting in the formation of the corresponding alkyl carbonate salt. TROS as a dehydrant and CeO₂ as a catalyst were added to the reaction mixture with the formed salt in metal vessel. After tightly shielding and heating the vessel, the target compounds, dialkyl carbonates, were successfully obtained. This method could be applied to the utilization of low-concentration of CO₂, which simulated exhaust gases from coal-fired power plants.

Keywords: CCU; Dialkyl Carbonate; Atmospheric Pressure

二酸化炭素(CO_2)を原料とした有用化成品合成は、 CO_2 排出量削減や再資源化のための技術の一つとして注目されている。ジアルキルカーボネートは、リチウムイオン電池用材料やポリマー原料として有用な工業化成品である。一般的に、 CO_2 を原料としてジアルキルカーボネートを合成する際には、高圧 CO_2 の利用や、副生成物の処理に課題のあるハロゲン化アルキル等の高反応性な反応剤が利用される。本研究では、常圧の CO_2 と再生可能な反応剤であるテトラアルキルオルトシリケート(TROS)からジアルキルカーボネートを合成する手法を開発した。常圧 CO_2 をアルコールと有機強塩基に通気することでアルキル炭酸塩として CO_2 を捕集させた後、触媒として酸化セリウムを、反応剤として TROS を加えた後、金属密閉容器にて加熱反応を行うことで、目的とするジアルキルカーボネートを合成することに成功した。本手法を用いることで、発電所等の排ガスを想定した 15%の CO_2 を含むガスを利用した反応においてもジアルキルカーボネートを得ることに成功した。

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構(NEDO)の助成事業(JPNP21021)の結果得られたものです。

Synthesis and Characterization of Urushiol Analogs Derived from Biorenewable Carbon Resources

(¹Graduate School of Engineering, Kyoto University, ²Department of Chemistry and Industrial Chemistry, University of Pisa) ○Beiling WU,¹ Francesca PINCELLA,¹ Ilaria BONADUCE,² Masaharu NAKAMURA¹

Keywords: Artificial urushiol; Synthesis; Coating material; Biorenewable resources

Urushi, a natural coating and adhesive material from the sap of *Toxicodendron vernicifluum*, is a sustainable material with a long history and a wide range of applications thanks to its durability and high stability. However, its labor-intensive and time-consuming cultivation and tapping, and highly technical processing make *urushi* a scarce and costly raw material and therefore limit its uses. As the major component of *urushi* sap, urushiol has been revealed to be important for the special characteristics of the *urushi* film. Therefore, synthetic research on natural urushiol and urushiol analogs has attracted renewed interest. We previously developed an iron-catalyzed cross-coupling reaction between alkyl halides and aryl Grignard reagents, which is applicable to introduce the aliphatic side chain to the 3-position of catechol. Considering that the side chains of natural urushiol have different degree of unsaturation, we envisioned that the synthesis and characteristics of urushiol analogs with different numbers of carbon-carbon double bonds in the side chain would provide valuable information for developing new artificial urushi.

Urushiol analogs were synthesized from fatty acids with controlled degree of unsaturation via chemical transformations to fatty halides, followed by iron-catalyzed cross-coupling with phenyl Grignard reagents. The artificial urushi films were prepared from these urushiol analogs by mixing them with acetone powder extracted from natural *urushi*. The films were characterized by Pyrolysis-Gas chromatography-Mass spectrometry and other analytical techniques, to determine whether the new urushiol analogs possess curing and coating properties comparable to those of the precious natural urushi materials.

1) a) J. Kumanotani, J. Progress in Organic Coatings 1995, 26, 163–195. b) J. Kumanotani, J. Progress in Organic Coatings 1998, 34, 135–146. c) R. Lu, T. Yoshida, T. Miyakoshi, Pol. Rev. 2013, 53, 153–191. 2) M. Jin, L. Adak, M. Nakamura, J. Am. Chem. Soc. 2015, 137, 7128–7134.

天然物から効率的合成を可能にする付着阻害化合物開発へのアプローチ

(北大院環境 ¹・株式会社セレス ²・一般財団法人電力中央研究所 ³) ○梅澤 大樹 ¹・ Ira Novita Sari ¹・吉村 えり奈 ²・野方 靖行 ³

Approaches toward development of antifouling compounds inspired by natural product (¹Graduate School of Environmental Science, Hokkaido University, ²CERES, Inc., ³Central Research Institute of Electric Power Industry) (Taiki Umezawa¹, Ira Novita Sari¹, Erina Yoshimura², Yasuyuki Nogata³

Shipping is essential for human activity. While ships are anchored, accumulation of fouling organisms proceeds to induce fuel waste. In order to prevent the accumulation, antifouling compounds have been employed on the bottoms of ships. Now, toxic organic compounds are employed, and a green antifouling compound is expected to be developed. Our group has envisioned antifouling natural products, 10-isocyano-4-cadinene (1) and dolastatin 16 (2). We present synthesis of antifouling compounds inspired by 1 and 2. Through structure-activity relationship researches of 1 and 2, we revealed importance of isocyanide and tripeptide including unusual amino acids, respectively. The isocyanide was installed into glucosamine, and commercially available amino acids instead of the unusual amino acids were used for tripeptide synthesis to create new antifouling compounds.

Keywords: Fouling organism; Antifouling compound; Natural product

フジツボなどの付着生物は、船舶の効率的な運航に悪影響を及ぼす。付着防止のため、毒性のある化合物が使用される現状であり、環境にやさしい付着阻害化合物の開発が急務である。海洋生物から、フジツボに対する付着阻害活性を有する天然有機化合物が多数単離されている。発表者らは、10-イソシアノ-4-カジネン(1)、 ドラスタチン 16 (2)に着目し、全合成や構造-活性相関研究を展開してきた。本発表では、1と2から着想を得て、フジツボのキプリス幼生に対する付着阻害化合物を効率的に合成するための誘導化に成功したので報告する。1の構造―活性相関研究からイソシアニドが重要な官能基であることを明らかにした。この知見をもとに、グルコサミンを出発原料として、イソシアニド含有誘導体を各種合成した。1)一方、2の構造―活性相関研究から、異常アミノ酸を含むトリペプチドに付着阻害活性を見出した。さらに利便性等を考慮し、異常アミノ酸を市販アミノ酸へと置換した各種ペプチドの合成と活性評価を検討した。2)これら2方向からの付着阻害化合物開発について発表する。

1) T. Umezawa, Y. Hasegawa, I. S. Novita, J. Suzuki, T. Morozumi, Y. Nogata, E. Yoshimura, F. Matsuda, *Mar. Drugs* **2017**, *15*, 203. 2) T. Umezawa, I. N. Sari, E. Yoshimura, Y. Nogata, *RSC Sustain*. **2025**, *In press*.

特異な低誘電損失を示すポリ(フェニレンスルフィド)/ポリ(フェニレンオキシド)共重合体

(早大理工総研¹・早大先進理工²) ○渡辺 清瑚¹・三浦 嵩真²・小柳津 研一¹²
Poly(phenylene sulfide/phenylene oxide) Copolymers with Unprecedented Low Dielectric Properties (¹Res. Inst. of Sci. and Eng., Waseda Univ., ²Dept. of Applied Chem., Waseda Univ.)
○Seigo Watanabe¹, Shuma Miura², Kenichi Oyaizu¹²

For high speed telecommunications (e.g. 5G and 6G), polymers with low dielectric loss in the GHz range have been in demand. In general, less polarizable and less polar polymers, such as poly(2,6-dimethyl-1,4-phenylene oxide) (PPO), result in low dielectric constant (D_k) and low loss tangent (D_f). However, due to the electronegativity differences in the chemical bonds, polymers with ultralow D_f (< 0.001) have been unprecedented to date.

Herein, we anticipated to replace the oxygen of PPO with sulfur to decrease the overall polarity to achieve further low D_f polymers (Fig. 1). Indeed, poly(2,6-dimethyl-1,4-phenylene sulfide) (**PMPS**), a PPO analog, simultaneously exhibited low D_k (2.80 at 10 GHz) and ultralow D_f (0.00087 at 10 GHz) owing to the low-polar sulfide bond. Extending the structure with other PPS derivatives and the **PMPS**-PPO alternating copolymers (**P1-P4**), we found that the copolymer **P1** exhibited the unprecedented frequency-independent D_f changing behavior. *Keywords: Sulfur; Oxygen; Aromatic Polymer; Low Dielectric Loss*

次世代情報通信システム (5G,6G) の実装には、高周波数帯 (~GHz) で低誘電損失 (誘電率 D_k < 2.5, 誘電正接 D_f < 0.001) を示す高分子材料が不可欠である。高分子の低誘電損失化の一般的な手法として、分極率の減少による低 D_k 化や、極性低下に基づく低 D_f 化が挙げられる D_f こかし、多くの低誘電損失高分子は電気陰性度差の高い結合 (C-F, C-O など) を有し、ミクロスケールでは双極子の偏りが生じるため、依然として超低誘電正接 (D_f < 0.001) を示す構造は殆ど解明されていない。

我々は、汎用低誘電ポリマーであるポリ(2,6-ジメチル-1,4-フェニレンオキシド) (PPO) の類縁体 PMPS が、スルフィド結合の低極性に基づき、比較的低誘電率 (D_k = 2.80 at 10 GHz) ながらも超低誘電正接 (D_f = 0.00087) を示すことを見出した $^{2)}$ (Fig. 1)。また、PMPS と PPO の交互共重合体 P1 は、 D_f の周波数依存性が例外的に小さく、高周波数帯でも低 D_f (< 0.002) を維持した。さらに、PMPS 誘導体の置換基や硫黄含量を変化させ、分子構造と誘電特性の相関も明らかにしたため、当日報告する。

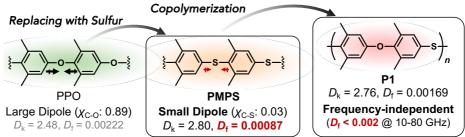


Fig. 1 Research concept: design of PMPS-based low- D_k/D_f polymers

- 1) Q. Fang et al., ACS Appl. Polym. Mater. 2021, 3, 2835.
- 2) S. Watanabe, S. Miura, T. Miura, Y. Tsunekawa, D. Ito, K. Oyaizu, submitted.

Prediction of a monomer unit of bioplastic "FADP" based on DFT calculation

(¹Hyogo prefectural Institute of Technology, ²College of Life Sciences, Department of Biotechnology, Ritsumeikan University) ○Hiroto Achira,¹ Takeshi Imai¹, Hisaaki Mihara² **Keywords**: Bioplastic; Unsaturated fatty acid; Density functional theory; IR spectrum; LC-MS

Fatty acid-derived polyelectrolyte (FADP) is a bioplastic derived from edible oils and their wastes. It has been experimentally observed that FADP exhibits a high affinity for carbon materials and demonstrates attractive mechanical properties, such as high wettability in contact angle tests. However, the molecular structure of FADP remains unclear due to the complex reaction processes during its synthesis. In this study, we constructed a model structure of FADP monomer based on linoleic acid and predicted the monomer unit by DFT study, IR spectroscopy, and LC-MS in accordance with the experimental results regarding its affinity for carbon materials.

In general, the peroxidation of linoleic acid begins with hydrogen abstraction from bis(allyl) methylene, leading to the formation of lipid peroxide radicals (Scheme 1a)¹, which in turn promotes the polymerization of linoleic acid. While the synthesis of FADP is based on these chain reactions, the downstream processes involving more complex reactions remain unclear. Given the characteristic dark brown color, we hypothesized that FADP might contain condensed-ring structures formed through carbonization reactions, including Diels-Alder reaction² and dehydrogenation (Scheme 1b). Its high affinity can be attributed to structural similarities to carbon materials. Our prediction of the FADP polymerization process suggests several candidate models with condensed-ring structures as intermediates, one of which was supported by LC-MS analysis.

Scheme 1 (a) peroxidation of linoleic acid (b) Diels-Alder reaction and dehydrogenation

1) a) B. Mihaljević, et al. Org. Biomol. Chem. 2011, 9, 3541. b) C. Schneider Mol. Nutr. Food Res. 2009, 53(3), 315. 2) a) M. Arca, et al., J. Am. Oil Chem. Soc. 2012, 89, 987. b) B. Briou, et. al., Chem. Soc. Rev. 2021, 50, 11055.

廃棄硫黄を用いた高機能ポリマー材料の創製

(阪大院理¹・ICS-OTRI²) ○小林 裕一郎 ^{1,2,3}・山口 浩靖 ^{1,2}

Contribution to Carbon Neutrality through Sulfur Resource Recycling: Development of High-Performance Plastic Production Technologies Using Waste Sulfur (¹Graduate School of Science, Osaka University, ²ICS-OTRI, Osaka University, ³PRESTO, JST) (C) Yuichiro Kobayashi, ^{1,2,3} Hiroyasu Yamaguchi²

Every year, 7 million tons of sulfur are discarded, highlighting the need for new applications of this material. This presentation will discuss research aimed at achieving carbon neutrality through the valorization of waste sulfur by developing functional materials. Specifically, to enable sulfur polymers to achieve a level of development similar to carbon-based polymers, the presenter will introduce theoretical foundations in sulfur polymer chemistry, eco-friendly synthesis methods geared toward real-world applications, and the latest functional sulfur-based materials that have already been developed.

Keywords: Sulfur; Polysulfide; Polycondensation; Carbon neutral; SDGs



図 1. 廃棄硫黄を用いたポリマー材料開発を通し、硫黄の資源循環を実現する

持続可能な社会構築(SDGs)のため、年間700万トン地上廃棄されている硫黄の有効活用が求められている。その方法の一つとして硫黄を含むポリマー材料の開発が行われている(図1)。硫黄ポリマーは高い静電容量や光屈性などの特異な性質を示すことから、次世代電池やLEDなどへの応用が期待されている。SDGsを達成しつつ高機能ポリマー材料を創製出来るにも関わらず硫黄ポリマーの社会実装が進んでいない。既存の硫黄ポリマーは高温にて合成する必要があったため、CO2や毒ガスである硫化水素が大量に発生することがボトルネックとなっていた。本発表では、発表者が近年開発

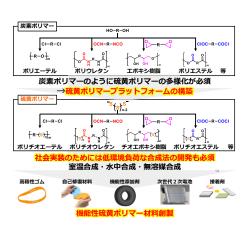


図 2. 本研究の目標

した、室温合成可能な硫黄ポリマーに関する近年の開発状況に関して報告する(図 2)。

リン酸を用いた高導電率高耐湿性 Ti₃C₂ MXene の合成と評価

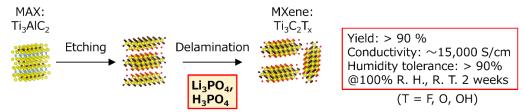
(株式会社村田製作所¹)○柳町 章麿¹・一条 直規¹・上口 憲陽¹・坂井田 俊¹ Synthesis and characterization of highly electronically conductive and humidity-tolerant Ti₃C₂ MXene prepared using phosphoric acid (¹*Murata Manufacturing Co., Ltd.*) ○ Akimaro Yanagimachi,¹ Naoki Ichijo,¹ Kazuhiro Kamiguchi,¹ Shun Sakaida¹

MXene, a new family of two-dimensional materials identified by Naguib *et al.*,¹ attracts researchers because of its high conductivity, capacitance, and biocompatibility. These features indicate that MXene is a potential material for electromagnetic shielding, supercapacitors, and biological devices. These consumer use applications require that chlorine-free to comply with the environmental regulations and humidity tolerance in order to adapt to harsh usage environments. The delamination of MXene is also important to bring out properties arising from its ultra-thin structure.

In this study, we established a pioneering method for the efficient delamination of MXene under chlorine-free conditions. Phosphoric acid and lithium phosphate were used in the delamination process. We also found that the obtained MXene exhibits an electronic conductivity of approximately 15,000 S/cm and a humidity tolerance of more than 90 % at R. T., 100% RH for 2 weeks at maximum. These values are higher than those of conventional MXene. In this presentation, we also present research into property exhibition mechanisms. Keywords: Two-dimensinal materials; MXene; Conductivity; Humidity tolerance; Process

MXene は 2011 年に Drexel 大学で Naguib らにより発見された新規な二次元材料であり、その構造や骨格元素に由来する導電性やキャパシタンス、生体適合性といった特性のために興味を持たれている。「これらの特性は MXene が電磁波シールド、スーパーキャパシタ、生体デバイスといったアプリケーションに有望であることを示している。これらは一般的に民生用途で用いられるが本用途では環境規制に対応する塩素フリー、過酷な使用環境に耐える耐湿性が求められる。また、MXene の二次元構造に由来する特性を引き出すにはデラミネーションプロセスによる層剥離が必要である。

今回、リン酸及びリン酸リチウムをデラミネーション工程で用いることにより塩素フリー条件で高収率にデラミネーション済 MXene を得られることを見出した。また、本手法で合成した MXene はろ過フィルム導電率 15,000 S/cm、導電率保持率 90 %以上(室温、相対湿度 100 %条件下、2 週間)と従来品を著しく上回る特性を示した。発表では特性発現メカニズムの研究についても報告する。



1) Two-Dimensional Nanocrystals Produced by Exfoliation of Ti₃AlC₂, M. Naguib, M. Kurtoglu, V. Presser, J. Lu, J. Niu, M. Heon, L. Hultman, Y. Gogotsi, M. W. Barsoum, *Adv. Mater.* **2011**, *23*, *37*, 4248.

新製法による層状構造を有するホウ素/炭素材料の作製

(株式会社サーモグラフィティクス 1 ・大阪電気通信大学 2) 〇俊成 修平 1,2 ・石畑 成渚 2 ・木村 匡志 2 ・野田 桂椰 2 ・川口 雅之 2

Preparation of Boron/Carbon Materials with a Layer Structure via a Novel Manufacturing Method (¹*Thermo Graphitics Co.,Ltd.,* ²*Osaka Electro-Communication University*) OShuhei Toshinari, ^{1,2} Sena Ishihata, ² Masashi Kimura, ² Keiya Noda, ² Masayuki Kawaguchi, ²

Boron/carbon (B/C) materials with a graphite-like layer structure were prepared using a following novel method: a precursor was prepared by mixing and reacting coal tar pitch and boron oxide at 200 °C, followed by pyrolysis at 1000 °C under an argon atmosphere to prepare B/C materials. X-ray diffraction analysis indicated that the obtained B/C materials had crystallinity similar to that of low-crystalline carbon. Furthermore, electron spectroscopy for chemical analysis suggested that boron atoms were incorporated within the graphitic layers. It was also found that reducing the heating rate during pyrolysis improved the yield.

Keywords: Boron/Carbon Material, Layer Structure, Novel Manufacturing Method

グラファイト網面を構成する炭素の一部をホウ素や窒素に置換したヘテロ置換型炭素材料は、グラファイト様の層状構造を有しており、層間に様々な化学種を挿入するインターカレーション特性を利用した応用が期待されている。特にホウ素と炭素から成る材料 (B/C 材料) は Li イオン二次電池負極材として 580mAh/g という高容量を示す報告がされているが ¹⁾、その作製法として報告されている化学気相蒸着法 (CVD 法) は結晶性や配向性の精密制御が可能だが、価格や量産化に課題がある。本研究で

は、目標組成を BC8 とし¹、比較的低温で数種類の原料を混合・反応させた前駆体を高温で熱分解する新製法により、安価な出発原料から B/C 材料の作製を実現した。実際には、 200° でコールタールピッチと酸化ホウ素を混合・反応させた前駆体をアルゴン気流中 1000° で熱分解して B/C 材料を作製した。B/C 材料の粉末 X 線回析パターンを Fig. 1 に示す。回折パターンは低結晶性カーボンに類似しており、最大強度を示すピークの面間隔は $0.356\,\mathrm{nm}$ であり、グラファイトの $0.335\,\mathrm{nm}$ より少し広く、一般の低結晶性カーボンに類似した値であった。また、ESCA 測定では B_{1s} スペクトルが明確に表れており、グラファイト層平面内にホウ素を有することが示唆

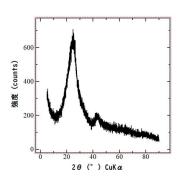


Fig. 1 X-ray diffraction pattern of B/C material prepared from the reaction of coal tar pitch and boron oxide.

された。また、熱分解の昇温速度を低速にすることで収率が向上することも分かった。

参考文献

1) S. Nagakura, et al., Carbon Reports 2 (2023) 123-129.

Auアノード溶解反応を利用した機能性Auナノ粒子の作製

(防衛大機能材料)○小澤 真一郎・北郷 萌・松本 龍征・竹崎 陽也 Preparation of functional Au nanoparticles using Au anodic dissolution reaction (*Department of Materials Science and Engineering, National Defense Academy*) ○Shinichiro Ozawa, Moe Hokugo, Ryusei Matsumoto, Haruya Takezaki

In this study, Au was ionized into the electrolyte solution by anodic dissolution reaction using an Au electrode. Using the Au ions as a starting material, the functionalization of the Au nanoparticles produced by using various reducing reagents (thiols, amino acids) was investigated. The produced Au nanoparticles were investigated using electrochemical techniques, UV-visible spectroscopy, fluorometry, X-ray diffraction analysis and field emission scanning electron microscopy. The functionalization of the Au nanoparticles produced by different types and concentrations of reducing agents is reported.

Keywords: Au anode dissolution reaction; Au nanoparticles; Functionalization; Reducing Reagents; Amino Acids

電解質として無機塩(Na_2SiO_3 , Na_2CO_3 , Na_2SO_4 など)を溶解した電解質溶液を、同じ材料(Au, Ag, Siなど)の電極を陽極と陰極としたビーカーに充填し、電極間に2A、10~30 V印加し、数時間通電したところ、電極材料に由来するナノ粒子生成を確認し報告した 10 。液中通電法で生成するAuナノ粒子は、その粒子径を制御することができれば、様々な分野で有用なナノ材料として応用できる可能性がある。本研究では、液中通電法のイオン化過程を模して、3 電極セルに電解質溶液0.1 M NaClを充填し、電解

電位+1.3 V(vs. Ag/AgCl)でアノード溶解反応によりAuを電解質溶液中にイオン化(AuCl4)した。このAuイオンを原料とし、さまざまな還元剤(チオール化合物、アミノ酸)を用いることにより、生成するAuナノ粒子の機能化について検討を行った。今回、作製したAuナノ粒子(Fig.1)は、電気化学的手法、紫外可視分光法、フォトルミネッセンス、X線回折法、電界放出形走査電子顕微鏡を用いて調査した。使用する還元剤の種類や濃度によって生成するAuナノ粒子の機能化について報告する。

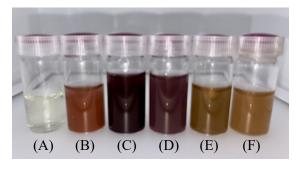


Fig.1 Photographs of gold nanoparticle samples with various amino acids. From left to right: (A)gold ion (AuCl₄) solution (raw solution), (B)L-cysteine, (C)L-histidine, (D)L-methionine, (E) L-glutamine and (F) L-serine.

1) Y. Okamoto, K, Kimura, H. Nakatsugawa, H. Miyazaki: *J. Jpn. Soc. Powder Powder Metallurgy*, **65**, 548 (2018).

イソプロピル基をもつジアリールエテン結晶が示す弾性の光スイッチ

(龍谷大学¹、立教大学²、東京薬科大学³、熊本大学⁴) ○谷 歩武¹・西村 凉²・横島智³・中村 振一郎⁴・内田 欣吾¹

Photoswitching of elastic property of crystals of a diarylethene having isopropyl groups (¹Ryukoku Univ., ²Rikkyo Univ., ³TUPLS, ⁴Kumamoto Univ.) ○Ayumu Tani¹, Ryo Nishimura², Satoshi Yokojima³, Shinichiro Nakamura⁴, Kingo Uchida¹

The crystals of diarylethene derivatives undergo cyclization reaction upon UV light irradiation, leading to change in molecular structures. Crystals exhibiting mechanical behaviors such as bending, phase transition and the salient phenomena due to the volume change associated with the photoisomerization have been reported. We have reported crystals showing a two-step bending with phase transition of thin crystals of 10 upon UV light irradiation. It is believed that the intermolecular distance changes due to photoisomerization, altering their mechanical properties. Here, we investigated the flexibility changes of diarylethene crystals by light irradiation. Needle-like crystals of 20 having isopropyl groups were prepared by sublimation. These crystals of 20 were bent when a force was applied, with curvature dependent on thickness. After UV light irradiation, the crystals could still be bent similarly as before irradiation, but when visible light was applied while the force was exerted, the crystals were broken. Therefore, it is considered that the flexibility of the crystals changes due to photoisomerization.

Keywords: diarylethene, photoswitching, elasticity, single crystal

ジアリールエテン誘導体の結晶は紫外光の照射によって光閉環反応が進行し、分子形状が変化する。その光異性化に伴う体積変化によって、屈曲や相転移、サリエント現象などの力学的な挙動を示す結晶が報告されている。我々は、10 の薄片状結晶に紫外光を照射すると、相転移を伴う二段階屈曲を示す結晶を報告した。また、光異性化に伴って、分子間距離が変化し、その力学的な特性が変わると考えられる。ここでは、ジアリールエテン結晶に紫外光を照射し、柔軟性が変化するか調査した。イソプロピル基をもつ20の針状結晶は昇華法で得た。この結晶に力を加えると曲がり、厚みに依存して曲率が変化した。また紫外光を照射した後、結晶に力を加えると照射前と同様に曲げることができたが、力を加えた状態で可視光を照射すると結晶は折れた。そのため、光異性化に伴って結晶の柔軟性が変化していると考えられる。









UV 照射後の針状結晶 a)に力を加えると屈曲しb)、可 視光を照射すると破断した c)。

自己集合性ペプチドファイバーを利用した液液相分離ドロプレットの開発とバイオリアクター応用

(東農工大院工¹、KISTEC²) ○内田紀之¹・近藤詩織¹・村岡貴博 ^{1,2}

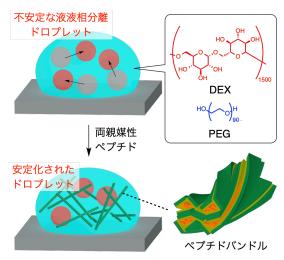
Development of Liquid-Liquid Phase Separation Droplets Using Self-Assembling Peptide Fibers and Their Applications to Bioreactors. (¹Tokyo University of Agriculture and Technology, ²KISTEC)

○Noriyuki Uchida¹, Shiori Kondo¹, Takahiro Muraoka¹,²

Liquid-liquid phase separation droplets are formed in dispersions of dextran and polyethylene glycol, although they quickly fuse due to the instability of the interface. We successfully prepared a highly stable liquid-liquid phase separation droplet by mixing self-assembling peptide which forms a hierarchical bundle structure. The stabilized droplet allows for accumulating biomacromolecules inside the droplets while small molecules freely move across the interface, and thus it is useful as a bioreactor.

Keywords: Peptide; Self-Assembly; Photoisomerization; Liquid-Liquid Phase Separation; Azobenzene

デキストラン (DEX) とポリエチ レングリコール(PEG)の分散液中で は、液液相分離によるドロプレット が形成されるが、界面の不安定性か ら速やかに融合する。この分散液中 に両親媒性ペプチド 1)-3)を混合する と、溶液中において階層的なバンド ル構造構造へと自己集合し、系の流 動性を維持しながら高い安定性を持 った液液相分離ドロプレットを形成 することを見出した(図1)。このドロ プレットは界面を小分子が自由に移 動可能であると同時に、内部に生体 高分子を濃縮させることが可能であ り、バイオリアクターとして有望で ある。実際、ドロプレット内で M13



✓生体高分子の濃縮 ✓小分子の自由移動 ✓高い流動性

図1 ペプチドバンドルによって安定化される液液相分離ドロプレットの概要図とその特徴

バクテリオファージウイルス ⁴⁾⁻⁷⁾の感染を誘導したところ、溶液中での二次感染が抑制され、系中のウイルス濃度を高感度検出(従来法の 100 倍以上)することに成功した。
1) N. Uchida, et. al., Biomacromolecules **2024**, 25, 3499. 2) N. Uchida, et. al., Chem. Commun. **2022**, 58, 5164. 3) JP Patent 2023-181844. 4) S. Wang, N. Uchida, et. al., Nat. Commun. **2024**, 15, 9891. 5) N. Uchida, et. al., J. Am. Chem. Soc. **2023**, 145, 6210. 6) N. Uchida, et. al., Chem. Commun. **2023**, 59, 9665. 7) N. Uchida, et. al., Nat. Prod. Commun. **2020**, 20, DOI: 10.1177/1934578X20947232.

チアゾリル基をもつアリールビニルチアゾール誘導体のフォトクロミズムと蛍光特性

(新居浜高専¹・愛媛大院理工²・兵庫教育大³・奈良先端大物質⁴) ○高見 静香¹・田宮 優利奈¹・石橋 千英²・山口 忠承³・河合 壯³ Photochromism and Fluorescence Properties of Arylvinylthiazole Derivatives with Thiazolyl Groups (¹NIT. Niihama College, ²Ehime Univ. ³Hyogo Univ. of Teacher Edu., ⁴Nara Inst. Sci. Tech.) ○Shizuka Takami,¹ Yurina Tamiya,¹ Yukihide Ishibashi,² Tadatsugu Yamaguchi,³ Tsuyoshi Kawai⁴

The structure of arylvinylthiazole derivatives are similar to those of terarylene and diarylethene derivatives, which underwent reversible photochromic reaction in solution. However fluorescence properties of arylvinylthiazole derivatives have not been developed. In this study, we report on the observation of similar fluorescence behavior in a derivative with a thiazolyl group. Upon irradiation with 313 nm light, the toluene solution of 1a exhibited blue fluorescence. The fluorescence maxima of 1a was observed 411 nm. The orange solution of closed-ring isomers 1b exhibited red fluorescence. The fluorescence maxima of 1b and 2b were observed 641 nm. The fluorescence intensities of 1a decreased upon prolonged irradiation with UV light and changed depending on the population of closed-ring isomers 1b. Photochromic behavior of derivatives in which the olefin moiety and thiazolyl group are swapped is also reported.

Keywords: Photochromic molecule, Fluorescence switching, Solution, DFT calculation

チアゾリルビニルチアゾール誘導体はターアリレンやジアリールエテンと化学構造が類似しており溶液中において可逆なフォトクロミズムを示す。我々は近年、チエニルビニルチアゾール誘導体 2a の蛍光特性を検討したところ、両異性体より発光を観測している。本研究では、チアゾリルビニルチアゾール誘導体の蛍光特性を検討した。1a のトルエン溶液に紫外光を照射すると青色に発色し、その時の最大蛍光波長は411 nm であった。閉環体 1b の溶液は橙色で赤色に発光し、その時の最大蛍光波長は641 nm であった。1a の蛍光強度は、2a と同様に紫外光照射に伴い光転換率の上昇とともに線形的に低下した。当日は、オレフィン部位とチアゾリル基を入れ替えた誘導体のフォトクロミック挙動についても報告する。

- 1) M. Irie, T. Fukaminato, K. Matsuda, S. Kobatake, Chem. Rev., 114, 12174-12277 (2014).
- 2) S. Fukumoto, T. Nakashima, T. Kawai, Angew. Chem. Int. Ed., 50, 1565-1568 (2011).
- 3) S. Takami, M. Nishiyama, M. Mizuno, T. Yamaguchi, Y. Hashimoto, T. Kawai, *Bull. Chem. Soc. Jpn.*, 92, 1773-1778 (2019).

ピンポイント分子設計による革新的な機能性材料開発手法の提案

(MOLFEX¹・京大福井セ²) ○上島 基之 ¹、佐藤 徹 ² Innovative Methods for Developing Functional Materials by Providing Pinpo

Innovative Methods for Developing Functional Materials by Providing Pinpoint Molecular Design (¹MOLFEX, Inc., ²Fukui Fundamental Institute, Kyoto University) O Motoyuki Uejima¹, Tohru Sato²

Vibronic couplings play an important role in expressing any molecular functionality involving electrons and photons. Controlling vibronic couplings facilitates the theory-driven design of various functional molecules. The design method is an unprecedented type of theoretical design method that can propose new functional molecules by visualizing the site that is an obstacle to the expression of function in the starting molecular structure and removing the obstructive factor with pinpoint accuracy by chemical modification. This method enables the steady development of materials in a short period at a low cost.

Keywords: Photophysical Chemistry, Organic Phtochemistry, Radiation and Non-radiation, UV-Vis-NIR Spectroscopy, OLED Materials

振電相互作用は、電子や光が関わるあらゆる分子機能の発現において重要な役割を果たす。それの制御により様々な機能性分子の設計が可能となる。その設計手法は、出発分子構造で機能発現の障害となっている部位を可視化し化学修飾によりピンポイントでその阻害要因を取り除くことにより新規な機能性分子を提案できる、従来にないタイプの理論設計手法¹である(Fig. 1)。これにより短期間かつ低コストで着実な材料開発が可能となる。

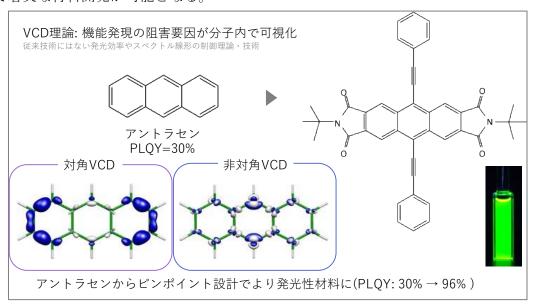


Fig. 1: Development of functional materials using the vibronic coupling theory^{1,2}

- 1) T. Kato, N. Haruta, T. Sato, "Vibronic Coupling Density –Understanding Molecular Deformations, Springer", Singapore (2021).
- 2) Uejima et al., Chem. Phys. Lett., 80, 602 (2014).

アントラセン多形化モデルを利用した有機半導体の高次構造制御

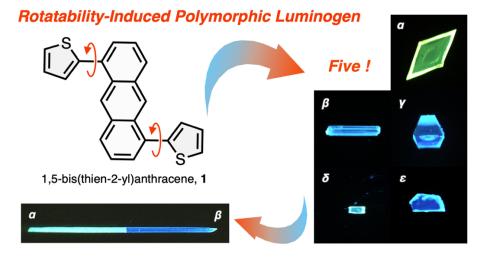
(高知工大院工 ¹・高知工大理工 ²・高知工大総研 ³) \bigcirc 樋野 優人 ¹・松尾 匠 ²,³・林 正太郎 ²,³

Control over higher-order structures based on anthracene polymorphic model toward organic semiconductors (¹Graduate School of Engineering, Kochi University of Technology, ²School of Engineering Science, Kochi University of Technology, ³FOREST Center, Research Institute, Kochi University of Technology) Oyuto Hino, ¹ Takumi Matsuo, ^{2,3} Shotaro Hayashi^{2,3}

We have developed a new polymorphic model molecule by molecular simulation that experimentally forms five different luminescent crystal polymorphs $(\alpha, \beta, \gamma, \delta, \varepsilon)$. The molecule (1) is an anthracene derivative with thienyl at 1 and 5 positions. They form all crystal polymorphs in the region where the potential energy between anthracene and thienyl is less than 5 kJ/mol. Furthermore, homogenous heterojunction crystals were formed by controlling crystal growth in solution.

Keywords: Crystal polymorphism; Anthracene; Molecular simulation; Solid-state emission; Organic semiconductor

有機半導体分子の結晶多形は高次構造の違いによりキャリア移動の制御が可能であることから注目されている 1 。しかし、有機半導性や発光特性を指向した 5 種類以上の結晶多形を示す分子を設計・開発した例はない。我々は分子シミュレーションにより、5 種類の発光性結晶多形 $(\alpha,\beta,\gamma,\delta,\varepsilon)$ を実験的に形成する新しい多形化モデル分子を実証した。この分子はアントラセンの 1,5 位にチエニルを有する誘導体 (1) であり、置換基間のポテンシャルエネルギーが 5kJ/mol 以下の領域で全ての結晶多形を形成する。さらに、溶液中での結晶成長を制御することで同種へテロ接合結晶を形成した。この多形化モデルは有機半導性や発光材料の設計戦略として有効であり、さまざまな結晶多形の探索と制御に応用できる可能性がある。



1) Rational Control of Packing Arrangements in Organic Semiconducting Materials toward High-Performance Optoelectronics. J. Guo, C. Shi, Y. Zhen, W. Hu, *Acc. Mater. Res.* **2024**, *5*, 907–919.

新規 Push-pull 型フェナジン類の合成と蛍光特性

(山形大院有機¹) ○佐藤 大幹¹・阿部 唯人¹・熊谷 純¹・工藤 正人¹・片桐 洋史¹ Synthesis and Fluorescent Properties of Novel Push-pull Phenazines (¹Graduate School of Organic Materials Science Yamagata University) ○Hiroki Sato,¹ Yuito Abe,¹ Jun Kumagai,¹ Masato Kudo,¹ Hiroshi Katagiri¹

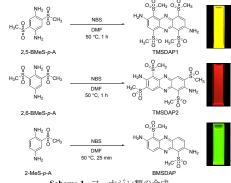
Phenazine is one of the aromatic heterocycles that show great promise for applications in life and material sciences. We have previously reported sulfonylaniline-based fluorophores containing amino and sulfonyl groups on a benzene ring¹⁻³. Here we report the selective one-step synthesis of novel push-pull type phenazine derivatives using these sulfonylaniline derivatives as substrates and their photophysical properties.

The reaction of 2,5-BMeS-*p*-A, 2,6-BMeS-*p*-A and 2-MeS-*p*-A with NBS in DMF selectively afforded the corresponding phenazine derivatives TMSDAP1, TMSDAP2 and BMSDAP, respectively (Scheme 1). The obtained compounds exhibited high molar absorption coefficients exceeding 10000 M⁻¹cm⁻¹ in DMF, and longer wavelength emissions were observed in the order of TMSDAP2 (red), TMSDAP1 (yellow), and BMSDAP (green) (Table 1). In particular, TMSDAP1 exhibited remarkably high molar absorption coefficient and quantum yield. The crystal structure revealed intramolecular hydrogen bonding between amino and sulfonyl groups, enhancing the push-pull effect and fluorescence properties.

Keywords: Fluorescent dye; Phenazine; Sulfonylaniline; Push-pull system; Positional isomer

フェナジンは、生命科学および材料科学において広く応用が期待される芳香族複素環の一つである。当研究室ではこれまでに、ベンゼン環上にアミノ基とスルホニル基を有するスルホニルアニリン系蛍光色素を報告してきた ¹⁻³. 本研究では、これらスルホニルアニリン類を基質として用いた新規 Push-pull 型フェナジン類の選択的一段階合成および光物性について報告する.

2,5-BMeS-p-A, 2,6-BMeS-p-A および 2-MeS-p-A をそれぞれ DMF 中で NBS と反応させたところ,対応するフェナジン誘導体 TMSDAP1, TMSDAP2 および BMSDAP が選択的に得られた (Scheme 1). 得られた化合物群は,DMF 中において 10000 M⁻¹cm⁻¹ 以上のモル吸光係数を示し,TMSDAP2(赤色),TMSDAP1(黄色),BMSDAP(緑色)の順に長波長の発光が確認された(Table 1).特に TMSDAP1 は,高いモル吸光係数と量子収率を示した.単結晶構造において,アミノ基とスルホニル基間に分子内水素結合が確認され,この相互作用により Push-pull 効果の増強が優れた蛍光特性に寄与していることが示唆された.



fable 1. DMF 中におけるフェナジン系蛍光色素の光学特性

Compounds	λ ^{max} abs [nm]	$\varepsilon^{\text{max}} [\text{M}^{-1} \text{cm}^{-1}]$	λ ^{max} _{em} [nm]	Φ[-]
TMSDAP1	521	15580	568	0.68
TMSDAP2	535	10680	626	0.28
BMSDAP	486	16390	525	0.42

1) T. Beppu, et al., Angew. Chem. Int. Ed., **2015**, 54, 7332–7335. 2) S. Kudo, et al., ChemPhysChem, **2019**, 20, 1581–1589. 3) T. Mochizuki, et al., Tetrahedron Lett., **2022**, 90, 153625.

異なる一次構造を持つ高強度化ペプチド添加剤の開発と評価

(東大院工¹) ○伊藤 瑠華¹・酒井 崇匡¹・土屋 康佑¹

Development and Evaluation of Peptide-Based Additives with Different Primary Structures for Enhanced Mechanical Strength (¹*Graduate School of Engineering, The University of Tokyo*) \bigcirc Ruka Ito¹, Takamasa Sakai¹, Kousuke Tsuchiya¹

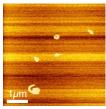
The β -sheet structure, found in the crystalline regions of spider silk proteins, is known to exhibit high strength comparable to steel¹⁾. In this study, we focused on this structure and synthesized polyserines with different primary structures. The self-assembly behavior and differences in secondary structures were analyzed using atomic force microscopy (AFM) and infrared spectroscopy (IR). These polyserines were incorporated into poly(vinyl alcohol) (PVA), and the crystalline morphology and secondary structures formed within the film were examined through microscopic observation and IR analysis. Furthermore, the influence of these polyserines on the mechanical properties of the film was evaluated through tensile testing. Simultaneous wide-angle X-ray diffraction (WAXD) and tensile deformation measurements were also conducted to investigate the relationship between the mechanical properties of the film and the formation of β -sheet crystals.

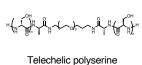
Keywords: Chemoenzymatic polymerization; Peptide; Aggregation; PVA; Polyserine

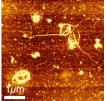
B-sheet 構造は、クモ糸タンパク質の結晶領域に存在し、鋼に匹敵する強度を有することが知られている $^{1)}$ 。本研究では、この構造に着目し、一次構造の異なるポリセリンを合成し、自己組織化挙動および二次構造の違いを原子間力顕微鏡(AFM)と赤外分光法(IR)を用いて解析した。また、これらのポリセリンをポリビニルアルコール (PVA)に添加し、フィルム内で形成される結晶形態および二次構造を顕微鏡観察および IR 解析により検討した。さらに、引張試験を通してこれらのポリセリンがフィルムの力学特性に与える影響を評価した。加えて、WAXD 測定と引張試験の同時測定を実施し、フィルムの力学特性と β -sheet 結晶の形成の関係について調査した。

結果として、酵素重合により合成したテレケリック型とリニア型のポリセリンは、図に示すように異なる自己組織化挙動を示した。テレケリック型ポリセリンは、両末端のペプチドの伸長方向が逆向きとなっている。PVA フィルムへの添加において、両ポリセリンとも 5 wt%以上の添加により β-sheet 構造の形成が確認された。さらに、テレケリック型ポリセリンの添加では高い透明性を維持しつつ強度とタフネスが向上した。一方、リニア型ポリセリンの添加ではフィルムの白濁が観察され、強度は上昇したもののタフネスが低下した。









 1μ m

1) A. Rising and J. Johansson, *Nat Chem Biol*, 2015. **11**, 5, 309

航空機用炭素繊維複合材料への応用を志向した高耐久性・リサイクル性・再生形成を持つ資源循環型ポリロタキサン配合エポキシ 樹脂の開発

(東大院新領域¹・物材機構²) ○安藤 翔太¹²・平野 聖來¹・上野 瑛理²・内藤 公喜²・伊藤 耕三¹²

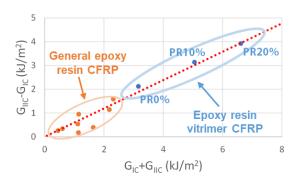
Development of Resource-Recirculating Polyrotaxane-Containing Epoxy Resin with High Durability, Recyclability, and Regeneration Formation for Application to CFRP for Aircraft (¹Grad. Sch. of Front. Sci., The Univ. of Tokyo, ²NIMS) Oshota Ando, ^{1,2} Masaki Hirano, ¹ Eri Ueno, ² Kimiyoshi Naito, ² Khozo Ito ^{1,2}

The application of a polyrotaxane-containing vitrimer to CFRP has been shown to improve the fracture toughness by a factor of 2.5 and chemical degradability by a factor of 3 compared to a non-polyrotaxane-containing vitrimer. This achievement is an epoch-making technology that enables higher performance than conventional CFRP by simply mixing a small amount of polyrotaxane at the time of prepreg fabrication.

Keywords: Polyrotaxane; CFRP; Aircraft; Epoxy Resin Vitrimer; Transesterification

ビトリマーは結合交換反応にちなんだ再利用性・傷の修復・再成形などのサスティナブル機能が発現し、熱可塑性樹脂・熱硬化性樹脂の性質を兼ね備えた新素材として資源循環社会を実現する材料として大いに期待されているい。近年ではこのサスティナブル機能を応用して高強度ビトリマーを用いた樹脂構造接着剤や繊維強化複合材料 (FRP) への展開が盛んであり、今まで困難とされてきた被着体や複合繊維の非劣化リサイクルの貢献が期待される。当研究室ではビトリマーの改質剤としてポリロタキサン (PR) という超分子化合物を用いることで、硬度は維持しつつ約 5 倍の強靭化、約10倍の自己修復性、約10倍の化学分解速度、さらには海水生分解性の付与を達成した2。今回我々が開発した PR 含有ビトリマーの FRP 適用試験を実施した。PR

含有により破壊靭性値が最大 2.5 倍、化学分解速度が約 3 倍向上し、飛躍的な性能向上を示した。さらに一般的なエポキシ樹脂 FRP と比べると最大 10 倍以上の破壊靭性値を示した。この結果は、航空機用 FRP に高耐久性と高リサイクル性の付与可能性を示し、資源循環社会の実現に貢献する材料改質技術として期待できる。



1) Silica-like malleable materials from permanent organic networks. D. Montarnal, *et al.*, Science **2011**, 334 (6058), 965- 968. 2) Environmentally Friendly Sustainable Thermoset Vitrimer-Containing Polyrotaxane. S. Ando, *et al.*, ACS Materials Lett. **2023**, 5, 12, 3156–3160.

鳥インフルエンザ H5N1 とオミクロン株の感染性増加及び病原性低下と立体配座可変性予測との相関

(産総研環境創生) ○和泉 博

Correlation between Predicted Conformational Variability and Changes of Infectivity and Pathogenicity for Avian Influenza Virus H5N1 and Omicron Variants of SARS-CoV-2 (National Institute of Advanced Industrial Science and Technology (AIST)) OHiroshi Izumi

For approval of the revised sequence rule of P-94.2 of the IUPAC Rules for Nomenclature of Organic Chemistry, a conformational descriptor for proteins had been applied to a deep neural network-based program for the prediction of conformational variability. Highly pathogenic avian influenza A H5N1 virus with bovine and human infections since March 2024 in the U.S. has been reported. The conformational variability for H5N1 and Omicron variants of SARS-CoV-2 using protein supersecondary structure code (SSSC) derived from properly selected maximal common substructures was analyzed. The predicted rigid patterns of the furin cleavage mutation sites correlate well with the changes to higher infectivity and lower pathogenicity. The accuracy of conformational variability prediction is enough to discuss the correlation with the phenotypes by mutations.

Keywords: Conformation; Deep Neural Network; Avian Influenza Virus; Hemagglutinin; IUPAC Nomenclature

IUPAC 命名法 P-94.2 順位則修正案の必要性を認めてもらうため、これまでタンパク質にむけた配座記述子を開発し、立体配座可変性を予測するディープラーニングプログラムを構築してきた¹⁾。2024年3月以降米国において、高病原性鳥インフルエン

ザウイルス H5N1 のウシ、ヒト感染が報告された。そこで、H5N1 及び SARS-CoV-2 オミクロン株の立体配座可変性予測結果とアミノ酸変異による表現型変化との比較を行い、感染性増加及び病原性低下の観点から解析を行った。既にデルタ株からオミクロン株への変遷に伴う病原性の低下と立体配座可変性予測との相関を報告しているが²⁾、病原性の低下がみられたウシ感染 H5N1 ではフーリン切断サイトの C末端がリジッドになる同様の予測結果が得られた(図)。カリフォルニア州における H5N1 はさらにアミノ酸変異が加わり、リジッドな末端の直前の配列がフレキシブルになっていた。これらのことから、立体配座可変性の予測精度は表現型との相関を議論できる程度といえる。

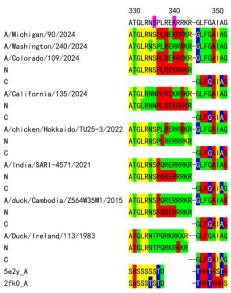


図. フーリン切断サイトの立体配座可変性

1) H. Izumi, *Methods Mol. Biol.* **2025**, *2870*, 63. 2) H. Izumi, H. Aoki, L. A. Nafie, R. K. Dukor, *ACS Omega* **2023**, *8*, 7111. 本研究は JSPS 科研費 JP22K05073 の助成を受けたものです。

データ科学を取り入れた材料探索プロトコルの開発: 常誘電体の適用事例を通じて

(株式会社村田製作所¹) ○尾崎 仁亮¹・池田 潤¹

The Development of a Materials Exploration Protocol Utilizing Data Science: A Case Study on the Search for Paraelectric Materials

(¹Murata Manufacturing Co., Ltd.) ONoriaki Ozaki,¹ Jun Ikeda¹

As the usage environment of electronic components becomes more severe, such as high temperatures and high voltages, the search for new materials with high characteristics becomes increasingly important. Considering that such materials are rare among synthesizable materials, it is necessary to utilize existing knowledge for the efficient exploration of material. However, over-reliance on existing knowledge can limit the exploration to only a small portion of materials, reducing the likelihood of discovering innovative materials. We believe that the key to overcoming this dilemma lies in data science, and we have developed a materials exploration protocol. This protocol divides the exploration process into three stages: wide-area exploration, narrow-area exploration, and local optimal solution exploration, applying or developing effective data analysis methods at each stage. This enables efficient material exploration using existing knowledge while also discovering innovative materials from new perspectives. As a demonstration of the protocol, the presentation will introduce the search for dielectric materials. *Keywords: Materials Informatics; Dielectrics; Materials Exploration; Data Science; Protocol Development*

電子部品の使用環境が、高温、高電圧など過酷になるにつれ、高特性な新材料の探索が重要になってきている。優れた特性を持つ材料が、合成しうる材料に対して希少であることを考慮すると、材料探索の効率化には、既存知識の積極活用が必要である。しかし、既存知識を重用しすぎると、合成しうる材料のごく一部しか探索できず、革新的材料発見の見込みが小さくなることが懸念される。我々は、この既存知識活用に関するジレンマを克服する鍵がデータ科学にあると考え、材料探索プロトコルを開発した。このプロトコルでは、探索のプロセスを、広域探索、狭域探索、局所最適解探索の3つに分け、各段階で有効なデータ解析手法を適用、または開発している。これにより、材料探索の中で、既存知識の活用による効率的材料探索と、新視点の獲得による革新的材料の発見を両立することが可能になった。発表では、プロトコルの適用事例として、常誘電材料の探索を紹介する。

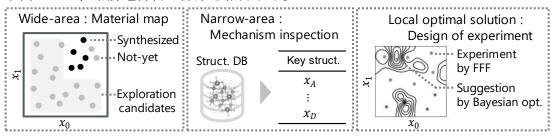


Fig. 1. Schematic illustration of the protocol for material exploration.

スプレー熱分解法を用いた DX プラットフォーム構築

(奈良先端大 1 ・奈良先端大 1 ・奈良先端大 1 ・奈良先端大 1 ・高須 聖五 1 ・高山 大鑑 1,2 ・原嶋 庸介 1,2 ・藤井 幹也 1,2,3

DX Platform Construction Using Spray Pyrolysis Deposition

(¹NAIST, ²NAIST DSC, ³ NAIST CMP) \bigcirc Hiiro Sugita¹, Shogo Takasuka¹, Tomoaki Takayama^{1,2}, Yosuke Harashima^{1,2}, Mikiya Fujii^{1,2,3}

The rapid advancement of Digital Transformation (DX) necessitates enhanced research and development efficiency. DX in research is value creation through the synergy of 'AI,' 'Data,' and 'Remote/Smart capabilities.' While significant progress has been made in individual areas, an integrated R&D infrastructure has not yet been fully explored. This study introduces a next-generation research platform combining experimental automation, Electronic Laboratory Note (ELN), and machine learning, targeting photocatalyst research.

We developed a programmable automation system for titanium oxide thin film fabrication (Fig.1), incorporating temperature regulation, sample transportation, and spray coating. We combined the experimental equipment with ELN, which enabled automated data storage and seamless transfer between the equipment, ELN, and machine learning systems. Furthermore, utilizing Bayesian optimization, we tried to optimize the experimental conditions with that efficiency as the objective variable.

This DX platform holds the promise of enhancing efficiency in various research domains beyond materials development and accelerating innovation in the fields of new materials, energy systems, and environmental technologies.

Keywords: Research Digital Transformation; Lab Automation; Electronic Laboratory Notebook; Materials Informatics; Photocatalyst

デジタルトランスフォーメンション(DX)の急速な進展に伴い研究開発の効率化が求められている。研究 DX とは、「AI」×「データ」×「リモート化・スマート化」による価値創造である。具体的には、実験の自動化によるリモート化・スマート化、電子ラボノートによるデータの体系的な収集・管理、そして AI によるデータの利活用を指す。これ

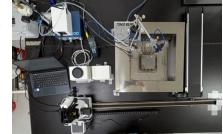


Fig.1 自動実験装置

らの個別の研究はそれぞれ発展 を遂げているが、統合した研究開発基盤に関する研究はほとんど行われていない。本研究では、光触媒を題材として、実験自動化、電子ラボノート、機械学習を組み合わせた次世代の研究プラットフォームを構築した。

プログラム制御による実験自動化装置(Fig. 1)を開発し、ホットプレートの温度 制御、サンプル搬送、塗布を一連のプロセスとして、酸化チタン薄膜を作成した。また、電子ラボノートと装置を統合させ、データの自動保存機能を構築することで、実験装置、電子ラボノート、機械学習間のデータ移動をシームレスに行った。さらに、ベイズ最適化を活用し、その性能を目的変数として作製条件を最適化した。

本 DX プラットフォームは、材料開発に留まらず、幅広い研究分野の効率化と、新素材、エネルギー、環境分野におけるイノベーションの加速が期待される。

電子実験ノートへの化学実験自動記録システムの開発と有機化学 実験への応用

(早大先進理工 1 ・早大理工総研 2) ○髙橋 颯人 1 ・藤波 美起登 2 ・千田 康祐 1 ・柴田 高範 2 ・中井 浩巳 1,2

Development of Automated Chemical Experiment Recording System for Electronic Laboratory Notebooks and Application to Organic Chemistry Experiment

(¹School of Advanced Science and Engineering, Waseda University, ²Waseda Research Institute for Science and Engineering, Waseda University) ○ Hayato Takahashi,¹ Mikito Fujinami,² Kosuke Senda,¹ Takanori Shibata,¹ Hiromi Nakai¹,²

Current chemical experiments are commonly recorded manually, requiring significant human effort and being at risk of errors. This study attempted to develop a system that integrates digital sensors to automate the recording of chemical processes in an electronic lab notebook. The system incorporates an electronic balance, a camera-based image processing, voice note capture, and note correction using large language models. The performance was evaluated by recording organic chemistry experiments and compared to manual lab notebooks. Keywords: Electronic Laboratory Notebook; Digital Transformation; Laboratory Automation

今日の化学実験は、主に紙や電子実験ノート (ELN) に手動で記録され、記入の労力、誤記入、記法の任意性に課題がある。センサや画像認識を用いた実験記録の自動化は、これらの課題の解決や、より詳細な実験情報の記録が期待される。

本研究では、シングルボードコンピュータを介して複数のセンサを統合し、実験情報を ELN へ自動記録するシステムを実装した。Fig.1 に構築したシステムに含まれるセンサ類を示す。赤色部分は試薬情報と結びついた秤量値出力、緑色部分は温度計および光センサを用いた反応装置の状態監視、黄色部分はカメラを用いた TLC プレートの画像記録および自動解析、青色部分はマイクを用いた音声認識と大規模言語モデルによる校正、灰色部分は室内の温湿度の経時記録機能をそれぞれ有する。各センサ

で取得した情報は、オープン ソースの ELN である $eLabFTW^{1}$ に記録した。

本システムを有機化学実験の記録に適用した結果、秤量値記録の自動化や、実験時間全体を通した温度の記録が適切に動作した。TLCプレートの自動解析や光センサ情報の記録も、特定の条件で適切に動作した。一方、実験室の明度依存性があり、視覚情報の記録における校正の必要性も見出された。

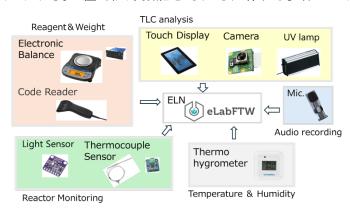


Fig. 1. Overview of the connection of devices in the developed recording system.

1) eLabFTW, https://doc.elabftw.net/ (accessed on 2025/01/07).

動的モンテカルロシミュレーションを組み込んだサイバーフィジカルループによる不純物ドープ SrTiO3 光触媒性能の最適化

(奈良先端大¹・奈良先端大 DSC²・奈良先端大 CMP³・神戸大⁴) ○水上 昌勇¹・原嶋 庸介¹,²・高山 大鑑¹,²・高須賀 聖五¹・天能 精一郎⁴・西口 和孝⁴・藤井 幹也¹,²,³
Process informatics of calcination of impurity doped SrTiO₃ photocatalyst incorporating dynamic Monte Carlo simulation (¹NARA INSTITUTE of SCIENCE and TECHNOLOGY, ²DSC, NARA INSTITUTE of SCIENCE and TECHNOLOGY, ³CMP, NARA INSTITUTE of SCIENCE and TECHNOLOGY, ⁴Kobe University) ○ Masatake Mizukami¹, Yosuke Harashima¹,², Tomoaki Takayama¹,², Shogo Takasuka¹, Seiichiro Ten-no⁴, Kazutaka Nishiguchi⁴, Mikiya Fujii¹,²,³

Photocatalysts use solar energy to split water and produce hydrogen as an energy source that does not emit CO₂. Therefore, the photocatalytic materials are attracting attention as we move towards a decarbonized society. It is empirically known that the catalytic activity of photocatalysts changes depending on the amount of oxygen vacancies and the amount of impurity replacement that occur during calcination. Optimizing the calcination conditions that give the highest catalytic activity requires a lot of experimental effort, which makes it difficult to find the optimal condition. In this study, using SrTiO₃ as a specific example, we calculated the amount of oxygen vacancies and the amount of Mg impurity for different calcination temperatures by using dynamic Monte Carlo simulation, and constructed a predictive model by combining with a linear regression model to predict the photocatalytic activities.

Keywords: Photocatalysts; SrTiO₃; Dynamic Monte Carlo

太陽光エネルギーによって水を分解し、CO₂を排出しないエネルギー源となる水素を生成する光触媒は、脱炭素社会の達成に向けて注目される物質となる。光触媒は焼成の条件によって酸素欠陥量や不純物置換量が異なることに起因して光触媒活性が変化することが経験的に知られている。光触媒活性が最も高くなる最適な焼成条件の探索には多くの実験コストがかかるため、探索効率の向上は重要課題である。そこで本研究では、SrTiO₃を具体例として、焼成温度による酸素欠陥量やMg 不純物置換量を統計力学と確率過程論に基づく動的モンテカルロシミュレーションで計算し、線形回帰モデルと組み合わせた光触媒活性の予測モデルを構築した。

- 1) 表面技術, Vol.64, No.10, pp.531-536, (2013).
- 2) A.Chatterjee, D.G. Vlachos; Computer-Aided Mater. Des., 14, 253 (2007)

ポリマー・溶媒間の相溶性予測と産業応用への展開

(三菱ケミカル 1 ・統数研 2) 〇白鳥 和矢 1 ・Stephen Wu 2 ・林 慶浩 2 ・杉澤 宏樹 1 ・大 久保 忠利 1 ・吉田 亮 2

Predicting the miscibility between polymers and solvents and its application in industry (¹Mitsubishi Chemical Corporation, ²The Institute of Statistical Mathematics) ○ Kazuya Shiratori¹, Stephen Wu², Yoshihiro Hayashi², Hiroki Sugisawa¹, Tadamichi Okubo¹, Ryo Yoshida²

The miscibility between polymers and solvents is a critical property in applications such as plastic recycling, polymer synthesis, purification, and coating. Therefore, its prediction is valuable for industrial applications. We have developed a machine learning model to predict the Flory-Huggins χ parameter, which describes the miscibility between polymers and solvents. The challenge is the insufficient and biased experimental data. We successfully built a model applicable to a wide range of structures by training both the experimental data and simulated data simultaneously through multitask learning. Additionally, we confirmed a scaling law indicating that the prediction accuracy of experimental values improves as the amount of simulation data increases.

The developed method is not only useful for predicting miscibility, but also has the potential to be a solution to the small data problem that poses a challenge in materials informatics. *Keywords: miscibility; Flory-Huggins; multitask learning; polymer; solvent*

ポリマーと溶媒間の相溶性はプラスチックリサイクル、ポリマーの合成、精製、コーティングなどの場面で重要な性質でありその予測は産業応用上有用である。そこで我々はポリマー・溶媒間の相溶性を記述する Flory-Huggins の χ パラメータをポリマーと溶媒の分子構造から機械学習により予測するモデルを構築した。モデル構築にあたっては実測のデータが少なく偏っているいわゆるスモールデータ問題が課題であったが、実測値だけでなくシミュレーションデータもマルチタスク学習で同時に学習することにより幅広い構造に適用可能なモデルの構築に成功した。さらにシミュレーションデータを増やすほど実測値の予測精度が向上するスケーリング則も確認した。ハイスループットシミュレーションデータを用いたマルチタスク学習に基づく本手法は相溶性の予測に有用であるだけでなく、マテリアルズ・インフォマティクスにおけるスモールデータ問題の解決手段の一つとなると期待する。当日は構築したモデルの産業応用への展開についても議論する。

- 1) Multitask Machine Learning to Predict Polymer–Solvent Miscibility Using Flory–Huggins Interaction Parameters, Y. Aoki, S. Wu, T. Tsurimoto, Y. Hayashi, S. Minami, T. Okubo, K. Shiratori, and R. Yoshida, *Macromolecules* **2023**, 56, 5446. *J. Org. Chem.* **2010**, *75*, 7644.
- 2) Scaling Law of Sim2Real Transfer Learning in Expanding Computational Materials Databases for Real-World Predictions, S. Minami, Y. Hayashi, S. Wu, K. Fukumizu, H. Sugisawa, M Ishii, I. Kuwajima, K. Shiratori, and R. Yoshida, arXiv:2408.04042
- 3) Sample code and dataset are available: https://github.com/yoshida-lab/MTL_ChiParameter

生成 AI 活用による材料開発効率化のための材料データベース自動構築技術

(株式会社 日立製作所¹) ○我妻 正太郎¹・露木 雅文¹

Automatic Construction of a Material Database for Data-Driven Materials Design Using Generative AI (¹*Hitachi. Ltd.*) OShotaro Agatsuma, ¹ Masafumi Tsuyuki ¹

Data-driven materials design relies on large-scale materials databases (DBs). Extracted experimental procedures from patents and papers, structured as graph-like data (experimental recipes), are valuable for predicting material properties. For constructing a DB of experimental recipes, it's best to use a flexible method that adapts to varying procedures based on the materials. This study proposes a method to automatically construct a DB by inputting literature and data structures into generative AI (GPT-40) to extract experimental recipes (Fig. 1). To determine the optimal input format for the AI, we tested three formats: ① natural language, ② bullet points, and ③ JSON. We extracted recipes with five node types and four edge types from five patents each. Comparing F1 scores with the correct data (Fig. 2), format ③ (JSON) proved most effective, suggesting it as the preferred input format.

Keywords: Materials Informatics; Data-driven Materials Design; Large Language Model;

データ駆動型の材料開発には、大規模な材料データベース (DB) が必要である。特に、特許や論文から抽出した実験手順を構造化したグラフ状のデータ (以下、実験レシピ) は、物性値予測などに有用 ¹⁾で、ニーズが高い。実験レシピに関する DB 構築には、実験手順は開発対象の材料に応じて異なるため、抽出するデータの構造を柔軟に変えられる手法を適用するのが望ましい。そこで、本研究では、文献と抽出すべきデータの構造を生成 AI (GPT-4o)に入力して実験レシピを抽出させ、DB を自動構築する手法を提案する(Fig. 1 参照)。本報告では、生成 AI に入力するデータ構造の形式を決めるべく、①自然文、②箇条書き、③JSON 形式の 3 つの形式を用い、特許 5 件の実施例から、5 種類のノードと 4 種類のエッジを持つ実験レシピを抽出した。各パターンについての F1 値を正解データとの比較により算出した結果(Fig.2 参照)、③が最も良く、入力データ形式は③が適切である見込みを得た。

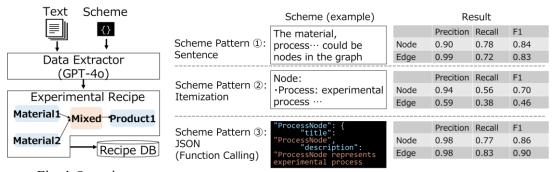


Fig. 1 Overview Fig. 2 Data Extraction Result

1) Gyoung S. Na., "Artificial Intelligence for Learning Material Synthesis Processes of Thermoelectric Materials," Chemistry of Materials 2023 35 (19), pp.8272-8280.

電界紡糸法による光架橋ゼラチン細胞足場の開発

(福井大工¹) ○橋本 直哉¹・藤田 聡¹・宮島 浩樹¹

Development of Photo-Crosslinked Gelatin Cell Scaffolds by Electrospinning (¹School of Engineering, University of Fukui) ONaoya Hashimoto¹, Satoshi Fujita¹, Hiroki Miyajima¹

Hydrogels function as cell scaffolds, supporting cell adhesion, proliferation, and differentiation for applications in regenerative medicine. Gelatin methacrylate (GelMA), a gelatin derivative, exhibits high biocompatibility and cell adhesion. Combined with a photoinitiator, GelMA has been widely studied as a photo-crosslinked cell scaffold for bioprinting. In this study, GelMA hydrogel fibers were fabricated by electrospinning to create fibrous scaffolds that mimic oriented tissue in vivo. GelMA was mixed with polyethylene oxide (PEO) (molecular weight (MW): 400,000, 600,000, or 1,000,000) and LAP photoinitiator to prepare 20%w/v GelMA, 1-3%w/v PEO, 0.5%w/v LAP hydrogel precursor solution. The solutions were electrospun at flow rates of 0.5, 0.7, and 0.9 mL/h on a rotating collector (100 rpm) for 1 h. Electrospun fibers were gelled after UV irradiation at 365 nm for 3 min and washed to remove PEO and LAP. Scanning electron microscopy (SEM) showed that the finest fiber was obtained from hydrogel precursor containing 3%w/v PEO (MW: 1,000,000). From polarizing microscopy, polarization of PEO disappeared after gelation and washing, suggesting that PEO-free GelMA hydrogel fibers were fabricated.

Keywords: Hydrogel; Electrospinning; Cell scaffold

[緒言] ハイドロゲルは、細胞の接着や増殖・分化を促進する細胞足場として機能し、再生医療での応用が期待されている ¹⁾。ゼラチン誘導体であるゼラチンメタクリレート (GelMA) はゼラチン由来の高い生体適合性と細胞接着性を示し、光重合開始剤と組み合わせることで光架橋ゼラチン細胞足場として、細胞プリンティングなどへの応用が広く研究されている ²⁾。本研究では生体内の配向組織を模倣した微細な細胞足場を構築するため、電界紡糸(エレクトロスピニング)法によって GelMA ハイドロゲルファイバーの作製し、繊維状細胞足場材の開発を目指した。

[手順] 合成した GelMA に、紡糸性向上のためのポリエチレンオキシド (PEO, 分子量 40万,60万,100万) および光開始剤 LAP を混合し、20%w/v GelMA,1-3%w/v PEO, 0.5%w/v LAP ハイドロゲル前駆溶液を調製した。ハイドロゲル前駆溶液をエレクトロスピニング装置によって流速 0.5, 0.7, 0.9 mL/h, 回転速度 100 rpm の回転コレクタ上に 1h 紡糸した。得られた繊維を 3 min の 365 nm 紫外線照射でゲル化した後、水での洗浄により PEO と LAP を取り除き、GelMA のみのハイドロゲルファイバーを得た。得られたファイバーを偏光顕微鏡および電子顕微鏡 (SEM) にて観察・評価を行った。 [結果と考察] ハイドロゲル前駆溶液において PEO 分子量 100 万、濃度 3w/v%の条件が最も優れた紡糸性を示し、電界紡糸による繊維の形成を確認した。偏光顕微鏡観察では、紡糸直後には PEO に由来する偏光が見られたが、ゲル化・洗浄後には偏光の消失を確認した。したがって、得られた繊維から PEO が除去され、GelMA のみからなるハイドロゲルファイバーの構築が示唆された。

- 1) H. Miyajima, et al., ACS Biomater. Sci. Eng. 2024, 10, 762–772.
- 2) J.W. Nichol, et al., Biomaterials 2010, 31, 5536-5544.

唾液中コラゲナーゼの半定量分析のための紙基板分析デバイス

(慶應義塾大学¹)○川上 博生¹・竹内 聡子¹・蛭田 勇樹¹・チッテリオ ダニエル¹ Paper-based analytical devices for semi-quantitative analysis of collagenase in saliva (¹*Keio University*) ○Hiroki Kawakami,¹ Satoko Takeuchi,¹ Yuki Hiruta,¹ Daniel Citterio¹

Periodontitis affects around 10% of the world's population, and severe periodontitis is a potentially tooth-losing disease. On the other hand, early stages of periodontitis are usually asymptomatic, so a simple and inexpensive test kit is needed. Current test kits for periodontitis utilize antigen-antibody reactions, which pose stability and price challenges. In this study, an enzyme-substrate reaction was used instead of antibodies for colorimetric detection of collagenase, a biomarker for periodontitis, on paper substrates. Collagen, the substrate of collagenase, is bound to a negatively charged blue dye, Remazol brilliant blue R (RBBR), and stored on paper. The colorimetric detection of collagenase was achieved by the cleavage of collagen in the presence of collagenase, resulting in the release of RBBR and its electrostatic capture by polyallylamine hydrochloride (PAH), a cationic polymer, in the detection layer. Keywords: µPAD; Periodontal disease; Collagenase; Colorimetric detection

歯周炎は世界人口の一割程度が罹患しており、重度の歯周炎は歯を失う危険性のある病気である」。一方で、初期の歯周炎は通常無症状であるため、簡単で安価な検査キットが必要である。現在の歯周炎の検査キットは抗原抗体反応を利用しており、安定性や価格に課題を抱えている。本研究では抗体を使わず、酵素基質反応を利用し、歯周炎のバイオマーカーであるコラゲナーゼの紙基板上での比色検出を行った。コラゲナーゼの基質であるコラーゲンに負電荷を持つ青色色素のレマゾールブリリアントブルーR (RBBR) を結合させ、紙上に保存した。コラゲナーゼの存在下でコラーゲンが切断され、検出層においてカチオン性ポリマーのポリアリルアミン塩酸塩 (PAH)

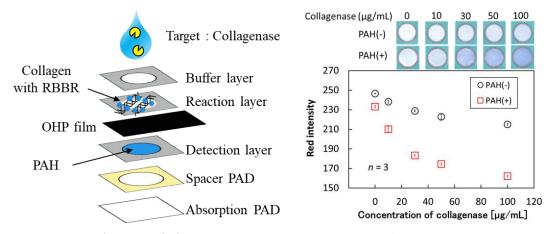


Fig. 1 デバイスデザインとコラゲナーゼに対する濃度応答

に RBBR が補足されることで、コラゲナーゼの比色検出を達成した。

(1) Luchian, I. et al., Int. J. Mol. Sci. 2022, 23 (3), 1806.

ベンゾオキサボロールを固定化したクロマトグラフィー担体による糖含有化合物の分離

(金工大院工 1 ・金沢工大応化 2) 〇土谷涼翔 1 ・小野慎 1 ・西村宥哉 2 ・赤永一樹 2 ・桶谷明生 2 ・嶌祐輔 2

Separation of sugar-containing compounds using chromatography supports immobilized with benzoxaboroles (¹Graduate School of Engineering, Kanazawa Institute of Technology, ²Department of Applied Chemistry, Kanazawa Institute of Technology) ORyoga Tsuchiya, ¹Shin Ono¹, Yuya Nishimura², Kazuki Akanaga², Haruki Oketani², Yusuke Shima²

Benzoxaborole (Bob) has the property of selectively binding to molecules with a cis-diol structure at neutral pH, and its sugar-binding property has attracted much attention. In order to construct a system to recognize and separate glycan chains of glycoproteins and glycopeptides, 5-amino-2-(hydroxymethyl)phenylboronic acid cyclic monoester (Bob-NH₂) was immobilized on Sepharose gel, Toyopearl gel, and aminopropyl silica gel to prepare Bob-Seph-gel, Bob-Toyo-gel, and Bob-APSilica-gel, respectively. To evaluate the diol recognition ability of these Bob-immobilized gels, the elution behavior of adenosine (Ad) and deoxyadenosine (dAd) was examined. Ad could be separated from dAd by using Bob-Seph-gel and Bob-Toyo-gel.

.Keywords: Benzoxaborole; Glycan recognition; Separation; Chromatography

ベンゾキサボロール (Bob) は、中性 pH でシス-ジオールに選択的に結合する特性を持ち、医薬品や糖センサーへの応用が注目されている ¹⁾. 当研究室では、糖タンパク質や糖ペプチドの糖鎖を認識して分離するシステムの構築を目指し、シリカゲル、セファロースゲル、トヨパールゲルなどの液体クロマトグラフィー担体に Bob を固定化して、その分離特性を調べている.

今回、5-アミノ-2-(ヒドロキシメチル)フェニルボロン酸 環状モノエステル(Bob- NH_2)を、セファロースゲル(サイティバ)、トヨパールゲル(東ソー)、およびアミノプロピルシリカゲル(富士シリシア化学)へ固定化して、それぞれ Bob-Seph-gel, Bob-Toyo-gel, Bob-APSilica-gel を調製した. これらの Bob 固定化担体のジオール認識能を評価するため、アデノシン(Ad) とデオキシアデノシン(Ad

Bob-NH₂

の溶出挙動を調べた. その結果、Ad は Bob-Seph-gel と Bob-Toyo-gel に吸着して dAd と分離されたが、APSilica-gel では有効な分離は観察されなかった. フロンタルアフィニティクロマトグラフィー法によって、 $1\,\mathrm{mL}$ の Bob-Seph-gel と Bob-Toyo-gel に対する有効な Bob-NH2 の量は、それぞれ $1.8\,\mu\mathrm{mol}$ 、 $2.78\,\mu\mathrm{mol}$ と推定された. 次に、各ゲルをカラム ($5\,\mathrm{mm}$ I.D.× $50\,\mathrm{mm}$) に充填し、単糖の p-ニトロフェニル誘導体や糖ペプチドの溶出挙動を検討しているので合わせて報告する.

1) Recent Developments in the Chemistry and Biological Applications of Benzoxaboroles. A. Adamczyk-Woźniak, K. M. Borys, A. Sporzyński, Chem. Rev. 2015, 115, 5224–5247.

生物発光イメージングの高感度化を実現する高輝度生物発光基質 AkaSuke の開発

(¹日本女子大学 理学部、²東京薬科大学 薬学部、³理研 脳神経科学研究センター、⁴宮崎大学 テニュアトラック推進室、⁵自治医科大学 分子病態治療研究センター、6電気通信大学 大学院情報理工学研究科、7慶應義塾大学 自然科学研究教育センター) ○森屋 亮平 ¹²、岩野 智 ³⁴、口丸 高弘 ⁵、北田 昇雄 ⁶、山﨑 倫尚 ⁶、神谷 弦汰 ⁶、小畠 りか ⁷、平野 誉 ⁶、青山 洋史 ²、牧 昌次郎 ⁶

Sensitive bioluminescence imaging using a bright synthetic bioluminescent substrate AkaSuke (¹Japan Women's University, ²Tokyo University of Pharmacy & Life Sciences, ³RIKEN, ⁴University of Miyazaki, ⁵Jichi Medical University, ⁶The University of Electro-Communications, ¬Keio University) ∘Ryohei Saito-Moriya¹², Satoshi Iwano³³, Takahiro Kuchimaru⁵, Nobuo Kitada⁶, Norihisa Yamasaki⁶, Genta Kamiya⁶, Rika Obata¬, Takashi Hirano⁶, Hiroshi Aoyama², Shojiro A. Maki⁶

Firefly bioluminescence reaction has applied for optical imaging in the fundamental research field of life science. The firefly luciferase (enzyme) catalyzes oxidation of D-luciferin (substrate) and produce yellow-green light (560 nm). To date, various luciferin analogues have been reported, which produce light from visible to near-infrared (NIR) light. In particular, since near-infrared light have higher permeability to living tissues than visible lights, luciferin analogues that produce near-infrared light are useful for optical imaging.

On the other hand, few luciferin analogues with higher luminescence intensity than that of D-luciferin have been reported. Here, we present a heterocyclic luciferin analogue, named AkaSuke, that produces intense NIR bioluminescence in reaction with firefly luciferase (wild type), greatly improving the detection sensitivity beyond that of D-luciferin the reaction for targeting deep tissue. Additionally, we report its luminescence property under conditions in test tube, cell and mouse.

Keywords: Near-infrared bioluminescence, Firefly luciferin analogues, Deep-tissue imaging, Dual imaging

ホタルの生物発光反応は、生命科学の基礎研究分野で光イメージングに応用されている。ホタルルシフェラーゼ(酵素)は D-ルシフェリン(基質)の酸化を触媒し、黄緑色の光(560nm)を発生する。現在までに様々なルシフェリン類似体が報告されており、可視光から近赤外光(NIR)までの光を発生する。特に、近赤外光は可視光よりも生体組織への透過性が高いため、近赤外光を発するルシフェリン類似体は光イメージングに有用である。一方、D-ルシフェリンよりも高い発光強度を有するルシフェリン類似体はほとんど報告されていない。本発表では、ホタルルシフェラーゼ(天然型)との反応により強い近赤外生物発光を示し、D-ルシフェリンよりも検出感度が大幅に向上し、深部組織をターゲットとした反応を可能にする複素環ルシフェリン類似体(AkaSuke)を紹介する。さらに、試験管、細胞、マウスを用いた条件下での発光特性についても報告する。

細胞膜 DPP IV 阻害とゲル薄膜形成による老化細胞除去を目的としたセノリティックポリマーの設計

(阪大院工¹) ○本間 健太¹・明日 理湖¹・松崎 典弥²

Design of Senolytic Polymers Towards Senescent Cell Removal by DPP IV Inhibition and Gel Film Formation on Cell Membranes (¹Graduate School of Engineering, Osaka University)

OKenta Homma, ¹ Riko Akehi, ¹ Michiya Matsusaki ¹

Cellular senescence affects diverse ranges of physiological processes. Especially, senescent cells accumulated in aged organisms induce aging-related diseases such as cancer¹⁾. Removal of accumulated senescent cells is expected to contribute to the extension of a healthy life span. We hypothesized that senescent cell death could be induced²⁾ by segregating senescent cells from the microenvironment through selective gelation on the senescent cell-membrane (Fig. 1). To this aim, we synthesized multi-arm poly(ethylene glycol) conjugated with alogliptin (an inhibitor of dipeptidyl peptidase-4 overexpressed on senescent cell surface³⁾) and click reactive groups. The synthesis and characterization of these senolytic polymers will be reported.

Keywords: Senescence; Dipeptidyl peptidase-4; Senolytics; Hydrogel

細胞老化は生理学や疫病プロセスに影響を及ぼし、特に高齢生物に蓄積された老化細胞はがんなどの老化関連疾患を誘発する¹⁾。そのため、蓄積した老化細胞の除去は健康寿命の延伸に寄与する。これまでにシグナル伝達阻害による老化細胞死を目的とした低分子セノリティック(老化細胞を選択的に死滅するの意)薬が研究開発されてきたが、オフターゲット効果などの課題が報告されている¹⁾。

本研究では、細胞膜上のタンパク質や糖鎖が微小環境と相互作用しながら細胞の生命活動が維持されていることに着想を得て、老化細胞膜上の酵素ジペプチジルペプチダーゼ(DPP IV)を選択的に認識し、ゲル薄膜を形成して微小環境との相互作用を断絶することで²⁾老化細胞死を誘導できると考えた(Fig. 1)。DPP IV は種々の細胞の老化に伴い高発現することが報告されており³⁾、DPP IV を標的とすることで広範な老化細胞に対して適用が可能と期待できる。この目的のもと、多分岐型ポリエチレングリコールの末端に alogliptin(DPP IV の阻害剤)およびクリック反応性基(ジベングシクロオクチンまたはアジド基)を担持したセノリティックポリマーを設計した。合成したセノリティックポリマーはクリック反応による架橋によりゲル化を示したほか、老化細胞へ適用した際にその生存率の低下が示唆されたため報告する。

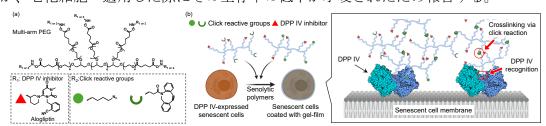


Fig. 1 (a) The Chemical structure of the senolytic polymer and (b) the conceptual illustration of thin-film formation on the senescent cell surface.

1) M. Borghesan et al., Trends Cell Biol. **2020**, 30, 777. 2) K. Ono et al., Biomater. Sci. **2020**, 8, 577. 3) K. M. Kim et al., Genes Dev. **2017**, 31, 1529.

バイオ医薬品の生産効率化を見据えた高濃度での酸化的タンパク質フォールディングを促進するジスルフィド基含有ミセルの開発

(東農工大院工¹・徳島大先端酵素研²・東北大学際科学フロンティア研³, 神奈川産技総研⁴) ○喜多村真衣¹・齋尾智英²・奥村正樹³・村岡貴博^{1,4}

Promotion of oxidative protein folding under crowded environment by micelle bearing disulfide groups aiming to enhance productivity of biopharmaceuticals (¹Graduate School of Engineering, Tokyo University of Agriculture and Technology, ²Institute of Advanced Medical Sciences, Tokushima University, ³Frontier Research Institute for Interdisciplinary Sciences, Tohoku University, ⁴Kanagawa Institute of Industrial Science and Technology)

OMai Kitamura, Tomohide Saio², Masaki Okumura³, Takahiro Muraoka^{1, 4}

Aggregation of recombinant proteins during their production is a major challenge in biotechnological processes. In previous studies, synthetic catalysts that promote the formation of native disulfide (SS) bonds in target recombinant proteins have been developed as protein folding promotors *in vitro*. However, the usage of these catalysts has been limited in dilute protein conditions. Here, we developed a lipid bearing an SS group that forms micelles. The micelles promoted oxidative protein folding even at high protein concentrations. Detailed interactions between the synthetic lipid and an unfolded protein were investigated by spectroscopic measurements to elucidate the mechanisms of protein folding promotion.

Keywords: Promotors of oxidative protein folding; Environment of high protein concentration; Suppression of protein aggregation; Disulfide bonds

我々は SS 結合に加えて疎水性相互作用にも着目した人工 脂質 C16N-SS を開発した (図 la) 2 。 C16N-SS はミセルを形成 し (図 lb)、高濃度条件でも標的タンパク質の凝集を抑制

しながら酸化的タンパク質フォールディング促進を実現した。実際に C16N-SS ミセルを sub-millimolar の変性タンパク質に対して作用 させた結果、高いフォールディング促進効果を示した。 さらに NMR 測定により溶媒常磁性緩和促進効果を評価したところ、変性タンパク質の疎水性部分を、開発した人工脂質が覆い、凝集が抑制されたことが示唆された (図 1c)。

- 1) T. Muraoka, M. Okumura, T. Saio, *Chem. Sci.* **2024**, 15, 2282.
- 2) 特願 2024-191797

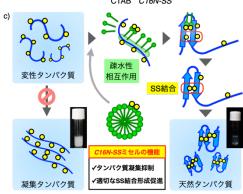


図1. a) *C16N-SS*ミセルの構成要素, b) *C16N-SS*ミセルの TEM画像, c) 考えられる*C16N-SS*ミセルによる 酸化的フォールディング促進メカニズム

バーコードを用いた塩化物イオンおよびグルコース半定量検出の ための紙基板分析デバイス

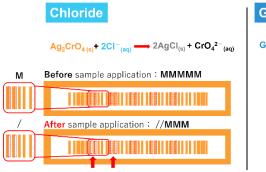
(慶應義塾大学¹) ○衣笠 柊磨¹・ヤナウト マンマナ¹・蛭田 勇樹¹・ダニエル チッテリオ¹

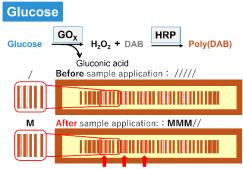
Paper-Based Analytical Device for Semi-Quantitative Detection of Chloride and Glucose Using Barcode as Readout Approach (¹Keio University) ○ Shuma Kinugasa,¹ Yanawut Manmana,¹ Yuki Hiruta,¹ Daniel Citterio¹

Paper-based analytical devices have attracted attention for their simple fabrication and low cost, and they have been studied extensively. However, conventional devices have the disadvantage of subjective differences in signal readings. To solve this problem, this study proposes a user-independent signal readout method by introducing barcode technology to paper-based analytical devices, and semi-quantitative detection of chloride and glucose was successfully achieved. The detection of chloride relies on the orange to white color change caused by the precipitation reaction between chloride and silver chromate. For glucose detection, the colorless to brown color change of 3,3'-diaminobenzidine (DAB) in the presence of horseradish peroxidase (HRP) and glucose oxidase (GOx) was made use of. Both reactions were converted into barcode signals. As a result, semi-quantitative detection of each target was achieved.

Keywords: Barcode; Microfluidic devices; Paper-based analytical devices (PAD); diabetes; Point-of-care testing (POCT)

紙基板分析デバイスは、その簡便な作製手法と低コスト性から注目を集め、これまで幅広く研究が進められてきた。しかし、従来のデバイスではシグナルの読み取りに個人差が生じるという課題があった。そこで、本研究では、バーコード技術を用いて、シグナルの読み取りが人に依存しない紙基板分析デバイスを開発し、塩化物イオンおよびグルコースの半定量的検出に成功した」。塩化物イオンの検出においては、クロム酸銀と塩化銀の間における沈殿反応によるオレンジ色から白色への変色を、グルコースの検出では、西洋わさびペルオキシダーゼ(HRP)およびグルコースオキシダーゼ(GOx)存在下における3,3'-ジアミノベンジジン(DAB)の無色から茶色の変色をバーコードのシグナルに変換することで、それぞれの半定量的検出を達成した。





1) Manmana, Y.; Kinugasa, S.; Hiruta, Y.; Citterio, D. *Anal. Chem.* **2025**, https://doi.org/10.1021/acs.analchem.4c04113

独自のエポキシ間結合反応からスマートプラスチック材料開発: 橋掛け表面修飾が発現するプロテインA酷似の抗体精密認識性能

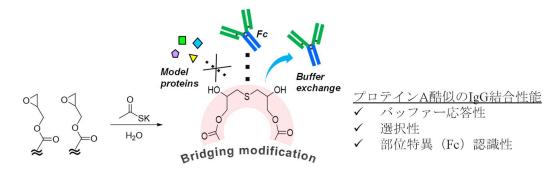
(JSR 株式会社) ○岸田 高典

Development of Smart Plastic Materials Using Original Epoxide Linking Reaction: A Bridging Surface Modification Offers Protein A-Mimetic Affinity for Antibody (JSR Corporation) Takanori Kishida

Recently, in collaboration with Dr. Sugiyasu's research group, we found that two epoxides can be efficiently liked using potassium thioacetate in water even at their imbalanced stoichiometric ratios. ¹⁾ In my effort to develop functional materials using this original reaction, a thioether-bridging surface modification of polymeric materials was identified as a new approach for mimicking protein A affinity for immunoglobulin G (IgG). ²⁾ As low-cost alternatives to protein A created with the simple surface modification technology, the materials are expected to be used in widespread bio-applications such as antibody purification and diagnostic biosensors. This presentation will show the precise IgG recognition performance of the modified polymeric microspheres, acting as a protein A and a relationship between the modified chemical structure and the performance.

Keywords: smart plastics; surface modification; bridging; IgG affinity; protein-A-mimetic

これまで私は、杉安ら(NIMS。現、京大院工)とともに、水中でチオ酢酸カリウムを用いたエポキシド間結合反応が、非化学量論条件下においても非常に効率よく進行することを発見した 1)。この独自反応を用いたチオエーテル橋掛け表面修飾により、抗体結合性タンパク質プロテイン 1 4のように、抗体(1 5のを精密認識するスマートプラスチック材料の開発に成功した 2 5。本材料は、生体分子材料由来の混入リスクがなく、かつ簡便な表面修飾技術で作成された低コストプロテイン 1 4代替材料として、抗体精製や診断向けバイオセンサーなどの用途展開が期待される。本発表では、プロテイン 1 5人かつもな子と酷似した、橋掛け表面修飾カラム粒子の 1 7。「 1 8分別係について報告する。



- 1) T. Kishida, T. Shimada, K. Sugiyasu, Chem. Commun. 2022, 58, 1108.
- 2) T. Kishida, Adv. Mater. Interfaces, 2024, 11, 2301028.

変性タンパク質を認識する刺激応答性ポリマーの創製と応答挙動

(関西大化学生命工¹,関西大 ORDIST²)○村嶋優徳¹,河村暁文^{1,2},宮田隆志^{1,2} Design of Stimuli-Responsive Polymers That Recognize Denatured Proteins and Their Responsive Behavior (¹Faculty of Chemistry, Materials and Bioengineering, Kansai University, ²ORDIST, Kansai University) ○Yuto Murashima, ¹Akifumi Kawamura, ^{1,2} Takashi Miyata^{1,2}

Proteins exhibit various unique functions owing to their ordered tree-dimensional structure with specific conformations. When proteins undergo conformational changes by heat or pH change, they are denatured to lose their original function and their aggregates sometimes cause diseases. Therefore, the development of materials for detecting protein denaturation is necessary for diagnosis and treatment of these diseases. In this study, we synthesized temperature-responsive polymers with cyclodextrins (CDs) as protein binding sites, which have a lower critical solution temperature (LCST), by the copolymerization of acryloyl-CD, *N*-isopropylacrylamide and oligo(ethyleneglycol) methacrylate. The transmittance of the aqueous polymer solution remained constant at approximately 100% over the entire temperature range, but the polymer exhibited a cloud point in the presence of protein. Furthermore, when a protein denatured by annealing at 90 °C was added to the polymer solution, the cloud point shifted to a low temperature with increasing annealing time for preparing denatured proteins. The CD-containing polymers have potentials in sensing and separating denatured proteins.

Keywords: Temperature-responsive Polymer; Molecular Recognition; Lower Critical Solution Temperature; Cyclodextrin; Denatured protein

タンパク質は特定の構造を形成することにより固有の機能を発現する。しかし、熱や pH 変化によりタンパク質のコンフォメーションが変化すると、本来の機能を失った変性状態となり、その凝集体は疾病を引き起こす原因となる。そのため、この疾病

の診断や治療にはタンパク質の変性を認識できる材料の開発が必要である。本研究では、変性したタンパク質を識別するリガンドとしてβ-シクロデキストリン (CD)を有するモノマーとポリマー状態で下限臨界溶液温度 (LCST)を示すモノマーとの共重合により、CD含有温度応答性ポリマーを合成した。このポリマー水溶液の透過率は全ての測定温度範囲において約100%で一定であったが、タンパク質存在下でポリマーが不溶となる曇点を示した。さらに、加熱により変性させたタンパク質をポリマー溶液に加えると、加熱時間が長い変性タンパク質ほど曇点が低温側にシフトした。これは、ポリマーの CD がネイティブタンパク質と変性タンパク質を認識し、その疎水性の差異に基づいてポリマー鎖の親水性が低下するためと考えられる。したがって、このポリマーを利用すると簡易的に変性タンパク質を検出できることが明らかとなった。

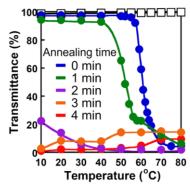


Fig. 1. Effect of temperature on the transmittance (650 nm) of P(CD-co-NIPAAm-co-OEGMA) (CD content: 10.4 mol%) in a phosphate buffer solution (pH 7.4, 50 mM) without (square) and with native and denatured lysozymes (color circle) prepared by annealing at 90 °C for various periods (protein concentration.: 5.0 mg/mL).

キトサンとグルコマンナンを二層フィルム化した光学ファントム の開発

(東京電大¹) ○長谷川 純太¹、宮﨑 淳¹

Development of the optical phantom made of chitosan and glucomannan in a bilayer film (1. Tokyo Denki Univ.) OJunta Hasegawa, Jun Miyazaki 1

Optical phantoms, which are suitable for research aims, can be prepared by changing the concentrations of scatterers and absorbers in substrate. The chitosan (CS) and konjac glucomannan (KGM) known as biological molecules have film-forming properties but have some drawbacks for using monolayer films. In this study, optical phantoms made of CS and KGM in a bilayer were developed for investigating the photochemical reactions in human skin tissue. The prepared bilayer film was more transparent and stable than the KGM monolayer. In the UV-Vis spectra of 7-dehydrocholesterol, 7-DHC, in bilayer phantoms, the clear peaks of 7-DHC dispersed in KGM than in CS layer were observed. The bilayer films including absorber (bovine hemoglobin: Hb) and scatterer (Intralipos: In) were also prepared. The properties for CS/KGM optical phantom were discussed.

Keywords: Optical Phantom; Bilayer Film; Photochemistry; Chitosan; Konjac Glucomannan

光学ファントムは、基質に散乱体や吸収体を添加することで研究目的に合わせた特性を適用可能なことから、生体組織と類似した光学特性を付与した光学ファントムが、画像診断システムの検査や生体組織の分光研究などで利用されている」。生体分子であるキトサン (CS) とコンニャクグルコマンナン (KGM) は共にフィルム形成能を有するが、KGM では強度に欠点があることから、CS と KGM を二層化したフィルムが開発され、食品包装用フィルムへの応用が検討されている²⁾。本研究では、CS と KGM からなる二層構造フィルムに 7-デヒドロコレステロール (7-DHC) を添加した光学ファントムを作成し、紫外可視分光法 (UV-Vis) のスペクトル変化から光化学反応過程を追跡し、作成した光学ファントムの特性を評価した。

二層フィルムは、35°Cに加温したシャーレ内に KGM 水溶液を保持し、質量が半分になるまで水を蒸発させたのち、CS の酢酸水溶液を流しいれて作成した。CS/KGM 二層フィルムは、単一の KGM フィルムよりも安定性に優れ、均一な表面が得られた。 KGM 側と CS 側に 0.05 w% 7-DHC を添加したフィルムをそれぞれ作成して UV-Vis スペクトルを測定したところ、KGM 側に添加した際に 7-DHC の鮮明なピークを確認した。また、吸収体と散乱体の影響を調べるために KGM 側に 0.01 w% ウシヘモグロビン (Hb: 吸収体) またはイントラリポス (In:散乱体) を添加したところ、Hbを添加したフィルムでは 7-DHC のピークがより鮮明に観測されたのに対し、In を加えたフィルムではピークが不鮮明となった。これにより、二層フィルムでは Hb と Inが 7-DHC のピークに異なる影響を与えることが明らかとなった。紫外光照射による7-DHC の光化学反応の追跡結果と合わせて、CS/KGM 二層フィルムの光学ファントムとしての特性について考察した。

- 1) B. W. Pogue. M. S. Patterson, J. Biomed. Opt., 11, 041102, (2006)
- 2) Y. Chen. et al., Int. J. Biol. Macromol., 257, 128660, (2024)

表面物性可変な光応答性ポリマーフィルムによる細胞挙動の制御

(関西大化学生命工¹・関西大 ORDIST²)○小村谷 準¹・河村 暁文¹²・宮田 隆志¹² Regulation of cells using photo-responsive polymer films with changeable surface properties (¹Faculty of Chemistry, Materials and Bioengineering, Kansai University, ²ORDIST, Kansai University) ○Jun Komuratani,¹ Akifumi Kawamura,¹² Takashi Miyata¹²²

Cells recognize the properties of extracellular environments and change their behavior such as adhesion, extension, and differentiation. In recent years, mechanobiology, which focuses on the effect of the mechanical properties of the extracellular environment on the cell behavior, has attracted attention toward biological and biomedical applications. Therefore, regulating the surface physical properties of cell culture substrate by external stimuli enables spatiotemporal control of cell behavior. In this study, photo-responsive polymer films with changeable surface elasticity and surface topography were prepared by using copolymers of 2-cinnamoyloxethyl methacrylate, which undergo photodimerization upon UV exposure, and poly(dimethly siloxane) macromonomer with large free volume. Fig. 1 shows phase contrast microscopy images of mouse fibroblasts (L929) cultured on the film after UV exposure through a photomask. The cells preferentially adhered to the unexposed regions. On the other hand, the chemical properties of the film surface were hardly changed by UV exposure. Therefore, cells recognize the difference in surface elasticity between exposed and unexposed regions and change their adhesive behavior.

Keywords: Photo-Responsive Polymer; Photodimerization; Surface Patterning; Poly(dimethylsiloxane); Cell culture

生体内において細胞は周辺環境の性質を認識し、接着、増殖および分化などの挙動を変化させる。近年、細胞周辺環境の力学的性質により細胞の分化挙動を制御するメカノバイオロジーが注目されている。そこで、外部刺激によって細胞培養基材の物性を任意に変化させることができれば、時空間的に細胞挙動を制御することが可能になると考えられる。本研究では、光二量化反応を示す 2-シンナモイルオキシエチルメタクリレートと自由体積の大きなポリジメチルシロキサンマクロモノマーとの共重合体を用いて、光照射により表面弾性率および表面形状を変化できる光応答性ポリマーフィルムを調製した。Fig. 1 には、格子状のフォトマスクを通して光照射した後のフィルム上にマウス線維芽細胞(L929)を播種した際の位相差顕微鏡画像を示した。図より、細胞は未照射部位に優先的に接着することがわか

る。一方、様々な表面分析の結果、光照射によってフィルム表面の化学的性質はほとんど変化しないことが明らかとなった。したがって、細胞は照射部位と未照射部位の弾性率の差異を認識し、接着挙動を変化させると考えられる。

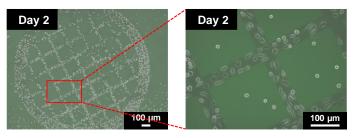


Fig. 1. Phase contrast microscopy image of L929 on the micropatterned film after UV (280 nm) exposure for 60 min through a photomask.

In vivo photo-CIDNP による高感度 MRI 実現に向けた分子群の開拓

(九大院工¹・東大院理²・CREST, JST³・岐阜大医⁴) ○澤田 侑大¹・西村 亘生²,³・ 白水 翔也⁴・兵藤 文紀⁴,³・楊井 伸浩²,³

Investigation of molecular candidates for achieving hyperpolarized MRI via in vivo photo-CIDNP (¹Grad. Sch. Eng., Kyushu Univ. • ²Grad. Sch. Sci., The Univ. of Tokyo • ³CREST, JST • ⁴Grad. Sch. Med., Gifu Univ.) ○ Yuta Sawada¹, Koki Nishimura², ³, Shoya Shiromizu⁴, Fuminori Hyodo⁴,³, Nobuhiro Yanai²,³

Magnetic Resonance Imaging (MRI) still have a problem about low sensitivity despite its importance for medical diagnoses. In this context, we focus on Photo Chemically Induced Dynamic Nuclear Polarization (Photo-CIDNP). This technique achieves hyperpolarization based on a nuclear spin-selective photochemical reaction between a dye (**D**) and a Quencher (**Q**). It operates without the need for microwaves, offering superior biocompatibility. However, representative dyes for Photo-CIDNP absorb light in the blue to green spectral region. For in vivo MRI application, it is necessary to develop Photo-CIDNP active dyes that absorb in the near-infrared (NIR) region, known as "biological window". In this study, we focus on the development of NIR dyes for Photo-CIDNP and further attempt to probe reaction occurring within living organisms.

Keywords: Photo-CIDNP; Electron transfer; Magnetic Resonance; Radical Pair; Spin Chemistry

核磁気共鳴画像法 (MRI) は医療診断に不可欠だが、感度の低さが課題である。MRI の感度は核スピンの2状態の差に依存するため、その分布が偏った超核偏極状態の生成が感度向上の鍵を握る。動的核分極(DNP) は超核偏極の代表的な生成法であるが、生体

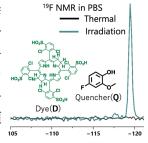


Fig.1. In vivo Photo-CIDNP

適合性の低いマイクロ波を要するため、高感度化 MRI の生体利用は非常に困難である。

光化学誘起 DNP (Photo-CIDNP) は、色素 (**D**) と消光剤 (**Q**) の核スピン選択的反応により超核偏極を生成する。マイクロ波フリーで駆動するため生体適合性が極めて高く、in vivo Photo-CIDNP による高感度化 MRI の実現が期待される。しかし、生体透過性の高い近赤外光を吸収する **D**による Photo-CIDNP は未観測である。本研究では、近赤外 Photo-CIDNP アクティブな分子群を開発し、生体内化学種のプローブを目指した。

PDTで生体応用例があり、CIDNPも観測されたポルフィリン誘導体に着目し、生体利用に向けて近赤外に吸収を持つように設計し、水溶化させた。Qは、電子供与性とターンオン型プローブ分子に適したフェノール類を用いた。PBS溶液中に735 nm レーザーを照射後、有意な NMR 増強が確認され、世界初の近赤外 Photo-CIDNP を観測した。これより、ポルフィリン誘導体とフェノール類が in vivo Photo-CIDNPに適した分子群であることが示唆された。



1) J. Bernarding, J., Bruns, C., Prediger, I., Mützel, M. and Fig.2. Enhanced ¹⁹F NMR Plaumann, M., *Sci Rep.*, 2024, 14, 1527

液-液相分離ドロップレットを利用した生体高分子の二段階濃縮

(東京農工大¹・KISTEC²) ○勝間田 隆祥¹・樋口 元気¹・内田 紀之¹・村岡 貴博¹,² Two-Step Condensation of Biomacromolecules by Using Liquid–Liquid Phase Separation Droplet (¹Tokyo Univ. Agri. and Tech., ²KISTEC) ○Ryusho Katsumata,¹ Genki Higuchi,¹ Noriyuki Uchida,¹ Takahiro Muraoka¹,²

Aqueous two-phase separation (ATPS) is the separation of two aqueous solutions of different concentrations. A typical example is a system consisting of polyethylene glycol (PEG) and dextran (DEX). In this system, biopolymers are concentrated in the DEX phase, making it a promising material for detecting trace amounts of nucleic acids and proteins in biological samples. There have been reports of successful use of this system to improve detection sensitivity. However, there have been no reports of multi-stage concentration of biopolymers, which would enable even more sensitive detection. In this study, we succeeded in synthesizing a water-soluble block polymer that forms an ATPS with DEX. Because biopolymers are concentrated from the DEX phase to the block polymer phase, high concentration efficiency can be achieved by combining this with PEG/DEX-based concentration. In a demonstration of nucleic acid detection using two-step enrichment, we showed improved detection sensitivity compared to one-step enrichment.

Keywords : Liquid—Liquid Phase Separation; Droplet; Block Polymer; Nucleic Acid; Polyethylene Glycol

水性二相分離 (ATPS) とは、濃度の異なる2種類の水溶液が分離する現象のことである。代表例として、ポリエチレングリコール (PEG) とデキストラン (DEX) からなる系がある。この系においては、生体高分子が DEX 相へ濃縮されるため、生体試料中の核酸やタンパク質の微量検出において有望な材料であり、この ATPS 系を用いて検出感度の向上に成功した例も報告されている。しかし、生体高分子の濃縮を多段階で行った例は報告されておらず、これが実現すればさらに感度の高い検出ができるようになる。本研究では、DEX とATPS を形成する水溶性ブロックポリマーの合成に成功した。生体高分子はDEX 相からブロックポリマー相に濃縮されるため、PEG/DEX 系の濃縮と組み合わせることで高い濃縮効率が実現できる。

この二段階での濃縮を利用した核酸検出のデモンストレーションにおいて、 一段階での濃縮と比較した検出感度の向上を示した。

自己集合性ペプチドとタンパク質の複合材料の開発

(東京農工大¹・KISTEC²) ○森井 瑛都¹・村西 和佳¹・村岡 貴博¹²
Development of composite materials of self-assembling peptides and proteins
(¹Graduate School of Engineering, Tokyo University of Agriculture and Technology, ²Kanagawa Institute of Industrial Science and Technology) ○ Eito Morii,¹ Kazuyoshi Muranishi,¹ Takahiro Muraoka¹²

Conventional cell cryopreservation media have problems such as contamination of frozen cells with pathogens by serum and unintended cell differentiation induced chemical iceinhibition molecules. Additionally, the cryopreservation of three-dimensional (3D) biological models, such as organs and organoids, requires scaffold materials capable of maintaining cells in a 3D structure. To address these issues, this study aimed to develop a serum-free cryopreservation medium using a hydrogel based on self-assembling peptides with excellent biocompatibility and mechanical strength. We devised a cell cryopreservation gel that incorporating sericin protein, a known cell cryoprotective agent, into Self-assembling peptides gel, which is composed of amphiphilic peptides. However, self-assembling peptides gels showed precipitation issues in protein containing media. To overcome this limitation, we designed a novel supramolecular gelling peptide, by optimizing the arrangement of the hydrophilic moiety. This peptide forms a stable hydrogel in the presence of sericin protein. The physical properties of the composite material comprising the hydrogel and sericin protein were evaluated. Storage modulus measurements confirmed that the material possesses sufficient mechanical strength to support cells. The hydrogel developed in this study is a promising candidate for cell cryopreservation, offering a novel solution through its ability to gel upon complexation with sericin protein.

Keywords: Peptide; Self-assembling peptides; Protein; Biomaterial; Composite material

細胞凍結保存液に含まれる血清や溶媒由来の凍結保護剤は、細胞への病原体の混入や不用意な細胞分化の誘導を起こす。この作用は、オルガノイドや臓器など高次の生体組織に近い三次元構造体の培養において特に注意を払わなければいけない。加えて、三次元組織培養には、組織を物理的に保持できる足場材が必要とされる。これらの課題を解決するため、細胞を支える足場材としての役割を持ち、血清と溶媒由来の凍結保護剤を使用しない新規の細胞凍結保存材料の開発を目指した。

本研究では、立体培養が可能な力学的強度を持ち、生体親和性に優れた自己集合性ペプチドを基盤とした人工ヒドロゲルを用いた。凍結保護効果を持つセリシンタンパク質を導入することで、自己集合性ペプチドとタンパク質から構成された複合材料を開発して、細胞の凍結保存に応用することを着想した。しかし、自己集合性ペプチドにはタンパク質を含んだ培地条件下では沈殿をするという課題があった。そのため、親水部の配列を最適化することで、セリシンタンパク質を含んだ状態でゲル化可能な超分子ペプチドゲル化剤を設計した。

形成された超分子ペプチドゲルとセリシンタンパク質の複合材料の物性評価を行い、貯蔵弾性率を測定した結果、細胞を支持するのに十分な強度を確認した。

本研究で新規に開発した超分子ペプチドゲル化剤は、セリシンタンパク質との複合化によりゲル化したことから細胞凍結保存の新規材料としての利用が期待できる。

Analysis of Intraocular Behavior of Nano Eye-drops by Fluorescent Nanoprobes based on FRET

(¹Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials, Tohoku University ²Graduate School of Medicine, Tohoku University) ○Kunikazu Ishii,¹ Yoshitaka Koseki,¹ Kota Sato,² Toru Nakazawa,² Hitoshi Kasai¹

Keywords: Nanoparticles; Fluorescence Resonance Energy Transfer (FRET); Pharmacokinetics

Although typical eye-drops are a convenient treatment method for ocular diseases, they have the disadvantage of low intraocular penetration. To solve this problem, nano eye-drops, which are eye-drops with enhanced intraocular penetration by making nanoparticles (**NPs**) of the drug, have been attracting attention.^{[1][2]} However, the pharmacokinetics of nano eye-drops are still unknown.

In this study, we aimed to analyze the intraocular penetration pathway of **NPs**, track the dissolution of them, and investigate the effect of particle size. We focused on fluorescence resonance energy transfer (FRET), which is available to track the dissolution behavior of **NPs**.^[3] We selected the 3-boryl-2,2'-bithiophene-based compounds (BBTP) because of their high fluorescence quantum yields of over 60% both in solution and in the solid state.^[4] **NPs** of a 9: 1 mixture of MES-BBTP and TPA-BBTP (**Fig. 1**) were fabricated by the reprecipitation method^[5] and emitted fluorescence at a different wavelength than in solution by FRET. Furthermore, it was discovered that the particle size of FRET **NPs** can be controlled by changing the ratio of deionized water and THF used as the poor solvent in the reprecipitation method. (**Fig. 2, 3**).



[1] A. L. Onugwu et al., J. Controlled Release 2023, 354, 465–488. [2] Y. Ikuta et al., Sci. Rep. 2017 7, 44229. [3] F. Taemaitree et al., Nanoscale 2020, 12, 16710–16715. [4] A. Wakamiya, K. Mori, S. Yamaguchi, Angew. Chem. Int. Ed. 2007, 46, 4273–4276. [5] H. Kasai et al., Jpn. J. Appl. Phys. 1992, 31, L1132.

distribution diagrams of FRET NPs.

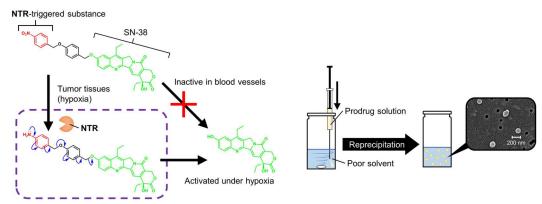
Fig. 2 Conditions for fabricating FRET NPs

Development of hypoxia-activated anticancer prodrug nanoparticles

(¹Institute of Multidisciplinary Research for Advanced Materials (IMRAM), Tohoku University) ○Nagaki Sugeno,¹ Riido Kagaya,¹ Yoshitaka Koseki,¹ Hitoshi Kasai¹ **Keywords**: Drug Delivery System; Nanoparticles; Prodrug; Hypoxia

To reduce the side effects of cancer treatment, drug delivery system (DDS) which is a strategy for delivering drugs selectively to cancer has been proposed. Our group reported that carrier-free prodrug nanoparticles can be fabricated by reprecipitation method, and these nanoparticles have the potential to accumulate selectively into tumor tissues due to the enhanced permeability and retention (EPR) effect. However, because most prodrugs is easily activated by factors that are abundant in the body, these nanoparticles may cause non-selective drug release in blood vessels or normal cells.²

Given this background, we aimed to develop the prodrug nanoparticles that are activated only in tumor-specific environments. It is known that hypoxia is a common feature of solid tumors and causes overexpression of reduction enzymes such as nitroreductase (NTR). In this study, we designed NTR-triggered prodrug of SN-38, an anticancer drug and fabricated the nanoparticles by reprecipitation method. Furthermore, we evaluated the drug release kinetics using chemical reduction and cytostatic activity *in vitro*. The results supported that the prodrug is activated through reduction of nitro group.



1) H. Kasai, T. Murakami, et al., Angew. Chem. Int. Ed. 2012, 51, 10315–10318. 2) Y. Koseki, Y. Ikuta, et al., Bull. Chem. Soc. Jpn. 2019, 92, 1305–1313.

マイクロスケール CSTR®による連続フロー合成 / nor-AZADO を使用した二相系酸化反応

((同) 理楽工房 1 ・マックエンジニアリング (株) 2) 〇中山 伸之 1 ・小谷 功 2 ・小谷 研太朗 2

Continuous flow synthesis by microscale CSTR® / Two-phase oxidation using nor-AZADO (¹Rigakukobo, LLC, ²MAK Engineering Corp.) O Nobuyuki Nakayama, ¹ Isao Kotani, ² Kentaro Kotani²

As an example of continuous flow synthesis using the microscale CSTR®, one of the flow reactors, we report on an organic-water two-phase oxidation reaction (oxidation of secondary alcohols to ketones) using nor-AZADO (an organic nitroxyl radical), which gave good results. Since it has been difficult to achieve a continuous flow of this type of two-phase oxidation reaction, we hope that this will set a good precedent. In this reaction system, there were two problems in the transition from batch to flow: (1) how to properly maintain the state (balance) of the organic-water two-phase system from injection into the reactor to withdrawal, and (2) how to appropriately select the method of injecting raw materials into the reactor. We solved (1) by making the specific gravity of the organic phase the same as that of the aqueous phase (by adding XHF to MTHP), and (2) by using a three-component injection system (two organic solutions and one aqueous solution).

Keywords: continuous flow synthesis; flow reactor; continuous stirred tank reactor/CSTR; nor-AZADO; oxidation reaction

フローリアクターのひとつである「マイクロスケール CSTR®」を使用した連続フロー合成の事例として、nor-AZADO (有機ニトロキシルラジカルのひとつ)を使用した有機-水二相系酸化反応 (2級アルコールからケトンへの酸化)を行ったところ、良好な結果を得たので報告する。これまで、この種の二相系酸化反応を連続フロー化することは困難であったので、良い先例となることを期待している。



MTHP: 4-methyltetrahydropyran、XHF: 1,3-bis(trifluoromethyl)benzene

TOMAC: trioctylmethylammonium chloride

この反応系では、バッチからフローへの移行 に際して、(1)反応器への注入から抜き出し までの有機・水二相系の状態 (バランス) をい かに適切に維持するか、(2)反応器への原料



の注入方法をいかに適切に選択するか、という2つの問題があった。(1)については、 有機相の比重を(MTHPに XHFを添加して)水相の比重と同じにすることで解決し、 (2)については、3液注入系(有機溶液2液、水溶液1液)とすることで解決した。 【謝辞】本研究を行うに当たりご協力頂きました滋賀県工業技術総合センターの皆様に深く感謝致します。

結晶性多孔質アルミノシリケートの水熱合成における有機分子の 途中添加効果

(静岡大学¹・高輝度光科学研究センター²) ○松尾 琴梨¹・吉岡 壱晟¹・山田 大貴²・孔 昌一¹・茂木 幸彦¹

The effect of organic molecule added during the hydrothermal treatment of crystalline porous aluminosilicate (¹Shizuoka University, ²Japan Synchrotron Radiation Research Institute) O Kotori Matsuo, ¹ Issei Yoshioka, ¹ Hiroki Yamada, ² ChangYi Kong, ¹ Takahiko Moteki ¹

Inorganic porous materials are industrially important due to their high surface area and thermochemical stability. Especially, zeolites, which are crystalline porous aluminosilicates, has more than 250 types of porous crystalline frameworks. The unique structural and chemical properties of zeolites make them widely utilized in industrial applications as absorbents and catalysts. The use of structure-directing agent, a unique reagent added into a synthesis gel, is a key to the selective synthesis of zeolite.

In this study, we focused on a zeolite EMC-2, synthesized using 18-crown-6 ether as an organic structure-directing agent.^{1,2} Investigation of its crystallization behavior revealed that EMC-2 requires a relatively long induction period before nucleation and subsequent crystallization. Based on this finding, we developed a two-step synthesis method involving preheating without an organic-structure directing agent, followed by the addition of the organic structure-directing agent partway through the hydrothermal treatment. In the conventional synthesis of zeolite, structure-directing agent is typically included in the precursor gel prior to the hydrothermal treatment. By using our two-step method, we successfully shortened the long heating period required for the crystallization of EMC-2.

Keywords: Zeolite; Organic structure-directing agent; EMC-2; Crystallization; Nucleation

無機多孔性材料は、その高い比表面積と熱化学的安定性から工業的に重要である。特に、結晶性多孔質アルミノシリケートであるゼオライトは、250種類以上の結晶性細孔構造が知られており、その特性を利用した吸着材や工業触媒等として広く利用されている。合成の際には、構造規定剤と呼ばれる原料を加えることで特定の細孔構造を誘起させる。

本研究では、18-crown-6 ether を有機構造規定剤として合成されるゼオライト、EMC-2 に着目した。^{1,2}結晶化挙動を検討する中で、結晶核生成に至るまでのアルミノシリケートゲルの再構築期間が非常に長いことがわかり、その結晶化挙動に関して詳細に分析を行った。我々は、新たに 18-crown-6 ether の途中添加という手法を試みた。通常、ゼオライト合成において、構造規定剤は原料にあらかじめ混合されている。本手法では、構造規定剤を含まない原料ゲルを調製し、加熱中に 18-crown-6 etherを途中添加することで、結晶化までの期間が長かった EMC-2 の合成日数を短縮に成功した。

- 1) A. Nearchou, et al., Microporous Mesoporous Mater., 2018, 255, 261.
- 2) F. Delprato, et al., Zeolites, 1990, 10, 546.

サブナノサイズの金属シード粒子を用いたナノ触媒とカーボンナノチューブの in situ 合成

(科学大化生研¹・東大生研²・東大院工³・JST-さきがけ⁴・阪大院工⁵) ○森合 達也¹・塚本 孝政^{2,3,4}・今岡 享稔¹・神戸 徹也⁵・山元 公寿¹

Carbon nanotube growth by nanocatalysts *in situ* formed from sub-nano metal seed particles (¹Lab. for Chemistry and Life Science, Science Tokyo, ²Inst. of Industrial Science, The Univ. of Tokyo, ³Grad. Sch. of Engineering, The Univ. of Tokyo, ⁴JST-PRESTO, ⁵Grad. Sch. of Engineering, Osaka Univ.) O Tatsuya Moriai, ¹ Takamasa Tsukamoto, ^{2,3,4} Takane Imaoka, ¹ Tetsuya Kambe, ⁵ Kimihisa Yamamoto¹

Carbon nanotubes (CNTs) are useful nanomaterials owing to their distinct functions depending on their structure and diameter. Although catalytic chemical vapor deposition (CCVD) using metal nanocatalysts has been an effective technique for large-scale synthesis of CNTs with a controlled diameter, it has been difficult to control the diameter of nanocatalysts in a sub-nano level. In this work, we developed a method in which CNTs grew through the *in situ* preparation of nanocatalysts using sub-nano seed particles prepared by the template method using the original macromolecule¹⁾. As a result, it was succeeded to finely control the diameters of formed nanocatalysts and grown CNTs depending on the reaction temperature and time. *Keywords: Carbon nanotube; Sub-nanoparticle; Catalyst; CCVD*

カーボンナノチューブ(CNT)は、その幾何構造や直径に依存した特異な機能を有することから注目を集めているナノマテリアルである。直径を制御した CNT の大量合成には金属ナノ粒子を触媒とした化学気相成長(CCVD)が有効な手段とされているが、ナノ触媒の粒径を 1 ナノメートル単位で制御することは簡単ではない。そこで本研究では、独自の鋳型高分子 1 を用いてサブナノ粒子を合成し、これをシードとすることでナノ触媒形成と CNT 成長を in situ CCVD で行う手法を開発した(Fig. A)。結果的に、反応温度と時間を規定することにより、形成するナノ触媒の粒径とそれに伴って成長する CNT の直径を精密に制御することに成功した(Fig. B)。

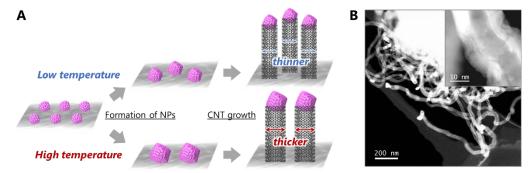


Fig. (A) The scheme of CNT growth in this work. (B) STEM images of CNTs from Co nanoparticles after reaction using a mixture of $CO/H_2 = 1$ at 600 °C for 60 min.

1) Synthesis of sub-nanoparticles using dendrimers has been reported. T. Moriai, T. Tsukamoto, M. Tanabe, T. Kambe, K. Yamamoto, *Angew. Chem. Int. Ed.* **2020**, *59*, 23051–23055.

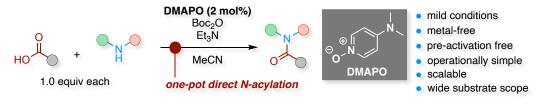
低反応性窒素求核剤とカルボン酸の高効率 one-pot アミド化反応 の開発

(東北大院生命科学) ○梅原 厚志・志水 颯真・佐々木 誠 DMAPO/Boc₂O-Mediated One-Pot Direct N-Acylation of Less Nucleophilic N-Heterocycles with Carboxylic Acids (*Graduate School of Life Sciences, Tohoku University*) ○Atsushi Umehara, Soma Shimizu, Makoto Sasaki

In contrast to the significant progress of amide bond formations, the methods for *N*-acylation of low nucleophilic nitrogen heterocycles are limited due to their poor nucleophilicity. Herein we have developed one-pot direct *N*-acylation of low nucleophilic nitrogen heterocycles using DMAPO/Boc₂O system. The new one-pot method, which does not involve pre-activation of substrates, enables the direct *N*-acylation of a wide variety of nitrogen nucleophiles with carboxylic acids. The new method also exhibits excellent functional group tolerance and broad substrate scope. As the present method is practical, operationally simple, and scalable, it should find wide applications in both academic and industrial laboratories.

Keywords: Amides; Acylation; Heterocycles; Nitrogen oxides; Synthetic methods

近年の創薬研究の環境は大きく変化し、アンメットメディカルニーズの高い疾患領域に焦点を当てた抗体薬物複合体、核酸医薬、再生医療などのニューモダリティを用いた新薬開発が活発になっている。その一方で、低分子関連創薬は、経口投与可能、製造ならびに流通上のコストを低く抑えられる等々の利点から、モダリティとしての役割は今後も大きいと考えられる。低分子関連創薬の研究基盤となるのは言うまでもなく、有機合成化学の力である。バイオ関連モダリティにおいても、ペプチドや核酸の大半はケミカルに合成されている。そのため、急速にモダリティが多様化しつつある昨今でも、有機合成化学が担う役割は大きい。低分子創薬において最も活用されている合成反応として、アミド結合形成反応が挙げられる。アミド結合形成反応は、通常カルボン酸とアミン存在下に脱水縮合剤をワンポットで作用させる条件で行われる。しかしこの条件では、インドールやカルバゾールなどの含窒素複素環化合物とのアミド化反応は効率よく進行しない。我々は"反応性の低い窒素求核剤"でも穏和な条件で円滑に進行するアミド結合形成反応の開発を行なった。その結果、DMAPO触媒とBoc₂Oを組み合わせて用いる新規ワンポット反応の開発に成功した。[1-3]



[1] A. Umehara, S. Shimizu, M. Sasaki, *ChemCatChem* **2023**, *15*, e202201596. [2] A. Umehara, S. Shimizu, M. Sasaki, *Adv. Synth. Catal.* **2023**, *365*, 2367–2376. [3] A. Umehara, S. Shimizu, M. Sasaki, *Eur. J. Org. Chem.* **2024**, *27*, e202400123.

バナジウムが炭化ニオブ触媒の固相合成におけるエネルギー投入 と温室効果ガスの排出を低減する

(新大院自然) 地主 貴博・曽我 樹希・仲嶋 竜之介・千束 徹真・池田 明生・ ○齊藤 健二

Vanadium Suppresses Energy Input and Greenhouse Gas Emissions for Solid-State Synthesis of Niobium Carbide Catalyst (*Graduate School of Science and Technology, Niigata University*) Takahiro Jinushi, Itsuki Soga, Ryunosuke Nakajima, Toma Senzoku, Akio Ikeda, OKenji Saito

Niobium carbide (NbC), with high hardness, high melting point, and conductivity, has been used in cemented carbides as an additive for industries, as well as superconductivity and catalysts for research. Carbothermal reaction with Nb₂O₅ and carbon precursors, e.g., C, is a usual synthesis approach, but the consequent high temperatures and greenhouse gas emissions are the points that should be suppressed. This study shows that the presence of vanadium (V), which forms highly stable oxides rather than carbon oxides, changed the routes of the carbothermal reaction of NbC (Figure 1), producing NbC with reduced preparation temperature (1450 to 1000°C) and significantly suppressed greenhouse gas emissions. The obtained NbC contained V as a dopant at the maximum of 50% (NbC:V), and the relative abundance was correlated with the preparation temperature. The NbC:V performance was assessed for catalytic and photothermal properties.

Keywords: Carbides; NbC; VC; catalyst; photothermal material

高硬度、高融点、および電気伝導性をもつ炭化ニオブ(NbC)は、超硬合金用添加剤として産業利用されているだけでなく、超伝導や触媒等の研究も進められている。 Nb_2O_5 と炭素源 (C 等) を用いたカルボサーマル反応は一般的な NbC 合成法の一つだが、高温焼成と温室効果ガスの排出を伴うため、それぞれの低減が望まれる。本研究では、C よりも O との親和性の高いバナジウム (V) を炭素キャリアとして本反応に

用いると、炭素源に C を用いた場合と比較して NbC の合成経路が変化し(図1)、合成温度の大幅な低下(1450から1000°C)に加え、温室効果ガスもほぼ排出されないことを見いだした。NbC の Nb サイトには V が最大 50%まで置換され、その置換量は合成温度との間に正の相関が認められた (NbC:V)。得られたNbC:V 性能は、触媒および光熱変換特性により評価した。

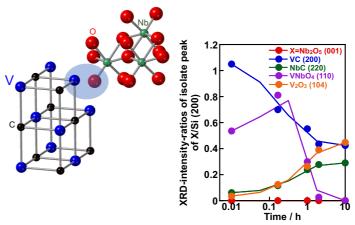


Figure 1. A cartoon of the studied carbothermal reaction and plots of reaction time vs. XRD intensity rations of isolate peak of material.

テトラクロロエチレンからのクロミフェン、タモキシフェンの合成 法の検討

(近畿大院総理工) 鈴木ひよの・東郷茜音・○松本浩一*

Synthetic Study of Clomiphene and Tamoxifen from Tetrachloroethylene (Kindai Univ.) Hiyono Suzuki, Akane Togo, OKouichi Matsumoto*

We have studied the development of new routes for the synthesis of clomiphene and tamoxifen by using tetrachloroethylene as a synthetic element. The Suzuki coupling reaction between tetrachloroethylene and phenylboronic acid with Pd catalyst gave the corresponding 1,2-dichlorodiphenylethylene as isolated and purified compound, which was then reacted with arylboronic acid derivative in the presence of Pd catalyst afforded the mixture of E and E-clomiphene. The synthetic investigation for tamoxifen will also be presented. 1-3

Keywords: Tetrachloroethylene, Clomiphene, Tamoxifen, Pd catalyst, Suzuki coupling reaction

テトラクロロエチレンは、安価な有機溶剤として様々な分野で利用されている。 我々は、テトラクロロエチレンが 2 個の sp^2 炭素と 4 個の塩素を有するため、有機合成におけるビルディングブロックになる可能性に着目して、いくつかの反応開発を行ってきた 1 。この研究の中で、テトラクロロエチレンに対して、フェニルボロン酸を鈴木カップリング反応により導入した 1,2-ジクロロジフェニルエチレンは、医薬品のクロミフェンやタモキシフェンの合成中間体として利用可能であることに気づいた。クロミフェンは、E/Z 体の混合物として使用されている。また、タモキシフェンは Z 体のみに効果があることが知られている。

テトラクロロエチレンとフェニルボロン酸から、合成、分離精製した Z体の 1,2-ジ

クロロジフェニルエチレン に対して、アリールボロン酸 誘導体を Pd 触媒の存在下に て鈴木カップリング反応を 行うと、目的とするクロミフェンが E/Z混合物として得られた 2 。 タモキシフェンの合成についても詳細を発表する 3 。

- 1) 例えば, H. Suzuki, A. Togo, J. Kikuzawa, K. Miyamoto, S. Marumoto, A. Kuwabara, M. Kobayashi, K. Matsumoto, *Chem. Lett.*, **2024**, *53*, upae079.
- 2) 特願 2024-002858, 発明の名称「クロミフェンの製造方法」発明者 松本浩一, 鈴木ひよの, 他
- 3) 特願 2024-002873, 発明の名称「タモキシフェン前駆体及びタモキシフェンの製造 方法」発明者 松本浩一, 鈴木ひよの, 他

GC-MS を駆使したハイスループット指向型の小スケール有機電解合成による反応の開拓と装置開発への展開

(近畿大学 1 ・(株) テクノシグマ 2 ・(株) 創造化学研究所 3 ・シンクレスト (株) 4) 富山諒一 1 ・○濱﨑健吾 1 ・岡秀明 2 ・三木浩一 3 ・鳥居桂 2 3・米山心 4 ・徐鵬宇 4 ・松本浩一 1 *

High-Throughput-Oriented Small Scale Electro Organic Synthesis Using GC-MS and its Application to Development of Electrosynthetic Equipment (¹Kindai Univ., ²Techno Sigma Co., Ltd., ³The Institute of Creative Chemistry Co., Ltd., ⁴SynCrest Inc.) Ryoichi Tomiyama, ¹ OKengo Hamasaki, ¹ Hideaki Oka, ² Koichi Miki, ³ Katsura Torii, ^{2,3} Shin Yoneyama, ⁴ Pengyu Xu, ⁴ Kouichi Matsumoto ^{1*}

In electro organic synthesis, it is often time-consuming from reaction preparation to purification and isolation during the experimental process. Therefore, it is difficult to carry out a lot of electro organic syntheses in order to find new reactions. In this study, we have investigated extensive electro-syntheses by using a small electrochemical cell with GC-MS, and some interesting reactions were found. In addition, this approach is applied to development of equipment.

Keywords: Electro-organic synthesis, High throughput, GC-MS, Development of electro-organic equipment, New organic reactions

有機電解合成は、電極表面で反応性の高い有機活性種を発生させて、有機合成に利用することができるため、近年注目を集めている技術である。しかしながら、実験室レベルで、1つの有機電解合成の実験を実施するには、電解セル(ガラス器具)のみならず電源装置が必要になり、それなりにスペースも必要になる。また原料の仕込み量にも当然依存するが、1つの電解合成の通電時間は数十分~数時間はかかり、多数の実験数を稼ぎながら、電解合成から新反応を発見する研究スタイルにはあまり向いていない合成技術であった。このような背景から、小スケールでの電解合成の実験とGC-MS を組み合わせることで、ハイスループットのコンセプトで、電解合成を用いた反応開発、反応の発見に取り組んだ。この取り組みにより、いくつかの興味深い反応を見出すことに成功した。またこの電解合成に使用できる新しい炭素電極も考案し

た」。以上の取り組みと並行して、上記の知見も使いながら、現在、国産の有機電解装置の製品化に向けた検討も行っており、その詳細を発表する。





⇒ 迅速かつ精密な新規反応 開拓が可能な、国産の有機電 解装置の開発が目標

ハイスループット

1) 特願 2024-108682、発明の名称「炭素電極の製造方法」発明者 米山心、徐鵬宇、松本浩一、濱﨑健吾(シンクレスト(株)、学校法人近畿大学) 出願日 2024 年 7 月 5 日