

アカデミックプログラム [A講演] | 20. 材料化学—基礎と応用：口頭A講演

■ 2026年3月18日(水) 15:55 ~ 17:15 | ■ F1233 (12号館 [3階] 1233)

[F1233-2vn] 口頭A講演

座長：金森 主祥、郡司 天博

◆ 日本語

15:55 ~ 16:05

[F1233-2vn-01] 機械学習によるキラル分子の幾何構造と物性を用いたらせん誘起力予測

○上田 悠仁¹、松本 浩輔¹、堤 治¹ (1. 立命館大)

◆ 日本語

16:05 ~ 16:15

[F1233-2vn-02] γ -シクロデキストリンを用いる水溶化フラレンの合成○前田 紗希¹、今井 智大¹、山本 一樹¹、郡司 天博¹ (1. 東京理科大学)

◆ 日本語

16:15 ~ 16:25

[F1233-2vn-04] ポリフォスファシロキサンの合成とその難燃剤としての性質

○飯島 真尋¹、今井 智大¹、山本 一樹¹、郡司 天博¹ (1. 東京理科大学)

◆ 日本語

16:25 ~ 16:35

[F1233-2vn-05] 光触媒能を付与した高分子粘着シートの作製

○浜中 一星¹、今井 智大¹、山本 一樹¹、郡司 天博¹ (1. 東京理科大学)

◆ 日本語

16:35 ~ 16:45

[F1233-2vn-06] ポリアルキレンオキシドを用いた溶液塗布型OLED用電子注入層の作製

○岩野 紘大¹、小玉 晋太郎¹、八木 繁幸¹、岡村 奈生²、石樽 修一²、橋本 貴史² (1. 大阪公立大学、2. 明成化学工業株式会社)

◆ 日本語

16:45 ~ 16:55

[F1233-2vn-07] ゲル形態を利用した電気化学キャパシタ電極用バインダーの検討

○比留川 舞¹、大背戸 豊¹ (1. 奈良女子大学)

◆ 英語

16:55 ~ 17:05

[F1233-2vn-08] 水溶液系におけるアルコキシシランの反応制御によるシリコーンポリマーとゲルの合成

○Tiavinka Variany Halim¹、倉橋 あい¹、堀毛 悟史¹、金森 主洋¹ (1. 京都大学)

◆ 日本語

17:05 ~ 17:15

[F1233-2vn-09] コーヒー粕由来ホロセルロースナノファイバーの物性解析とクロロゲン酸複合薄膜への応用

○大橋 悠理¹、松本 真哉¹、川村 出¹、金井 典子¹ (1. 横浜国立大学)

機械学習によるキラル分子の幾何構造と物性を用いたらせん誘起力予測

(立命館大¹) ○上田 悠仁¹・松本 浩輔¹・堤 治¹

Machine Learning Prediction of Helical Twisting Power of Chiral Molecules Using Geometric Structures and Physical Properties (¹*Graduate School of Life Science, Ritsumeikan University*),
○Yuto Ueda,¹ Kohsuke Matsumoto,¹ Osamu Tsutsumi¹

The helical pitch of chiral nematic liquid crystals (N* LC) depends on the concentration and helical twisting power (HTP) of the chiral molecules. To realize diverse optical functions arising from the helical pitch, it is essential to select chiral molecules with appropriate HTP in material design. Although HTP depends on various molecular factors, there has been no systematic explanation of the fundamental factors governing HTP. In this study, we developed a machine learning model to predict HTP using previously reported HTP values of N* LC. A dataset was molecular structures and HTP values of the chiral molecules extracted from previous report. Chemical parameters were calculated from molecular structures and used as explanatory variables. HTP was employed as the target variable to train the model. The developed model successfully predicted HTP with high accuracy for validation data. Furthermore, analysis of the importance of explanatory variables revealed key factors determining HTP. This study enables rational molecular design of chiral molecules tailored for desired helical pitches.

Keywords: Helical Twisting Power; Machine Learning; Chiral-Nematic Liquid Crystal

キラルネマチック液晶 (N* LC) のらせん周期はキラル分子の濃度およびらせん誘起力 (HTP) に依存する。N* LC は、このらせん周期に依存した光学機能を発現するため、材料設計の際には適切な HTP を有するキラル分子を選定する必要がある。各分子がもつ HTP は、様々な要因によって変化することは明らかになっている^{1,2)}。一方、HTP を決定する本質的な因子について、体系的に説明した例はない。そこで本研究では、これまでに報告された N* LC の HTP と分子構造の相関を機械学習を用いて明らかにすることを目的とした。構築した機械学習モデルが予測に用いた因子から、キラル分子の HTP を決定する重要因子について考察した。

これまでに報告されたキラル分子について、分子構造と HTP のデータを抽出し、データセットを作成した。分子構造から算出した化学パラメータを説明変数とし、HTP を目的変数として、機械学習モデルに学習させた。作成した機械学習モデルと検証用の分子骨格データを用いて予測を行ったところ、分子骨格から HTP を高精度で予測することに成功した。また、機械学習モデルの予測に対する説明変数の重要度から、HTP を決定する重要因子が判明した。本研究は、目的とするらせん周期に応じたキラル分子の合理的な分子設計を可能とする。

1) R. Eelkema, B. L. Feringa, *Org. Biomol. Chem.* **2006**, *4*, 3729–3745.

2) A. B. Harris, R. D. Kamien, T. C. Lubensky, *Phys. Rev. Lett.*, **1997**, *78*(8), 1476.

γ-シクロデキストリンを用いる水溶化フラーレンの合成

(東理大創域理工¹) ○前田 紗希¹・今井 智大¹・山本 一樹¹・郡司 天博¹

Synthesis of Water-Soluble Fullerene using γ -Cyclodextrin

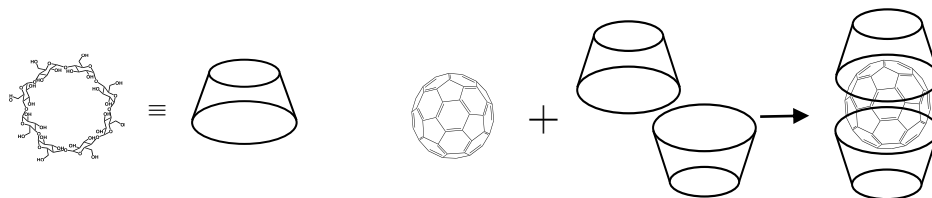
(¹Faculty of Science and Technology, Tokyo University of Science) ○Saki Maeda,¹ Tomohiro Imai,¹ Kazuki Yamamoto,¹ Takahiro Gunji¹

Fullerenes exhibit unique optical and electrochemical properties, such as light-limiting ability and electron-accepting ability and therefore have great potential for applications in pharmaceuticals and cosmetics. Since fullerenes are insoluble in water, their solubility can be improved by forming complexes with γ -cyclodextrin. Although such complexes have been prepared using solution-based methods, a solid-state method without using a liquid has recently been reported. In this study, we aimed to solubilize fullerenes by synthesizing a complex with γ -cyclodextrin using an interfacial method and conducting detailed characterization of its structure and physical properties. Furthermore, we compared the results with those obtained by solid-phase methods. In fact, when a toluene solution of fullerene and aqueous γ -cyclodextrin solution was synthesized at a molar ratio of C_{60}/γ -cyclodextrin=1/2, the desired complex was obtained in 49% yield. When the ratios were 1/4 and 1/5, the complexes were also successfully synthesized. Furthermore, new signals were observed in the ¹H NMR spectra of the complexes synthesized by both the liquid-phase and solid-phase methods.

Keywords : fullerenes; γ -cyclodextrin; complexes; liquid-based methods; solid-state method

フラーレンは、光制限性や電子受容性など光学的、電気化学的に特異な性質を持つことから医薬品、化粧品などへの応用が期待されている。水に不溶なフラーレンは γ -シクロデキストリンと複合化させることで水溶化される¹⁾。この複合化は、以前から溶液を使う液相法で生成されているが¹⁾、最近、液体を用いず固体同士で攪拌する固相法で生成する方法が報告された。そこで本研究では、フラーレンの水溶化を目的として、 γ -シクロデキストリンとの包接複合体を界面法により合成し、その構造および物性の詳細な評価を行った。また、固相法によって得られた包接体との比較を行った。

フラーレンのトルエン溶液と γ -シクロデキストリン水溶液を物質量比 C_{60}/γ -シクロデキストリン=1/2 で合成した場合、目的の包接複合体が収率 49% で得られた。また、1/4、1/5 でも合成を行った。さらに、液相法、固相法で合成された包接体の¹H NMR に新たなシグナルが見られた。



1) Z. Yoshida, H. Takekuma, S. Takekuma, Y. Matsubara, *Angew. Chem. Int. Engl.* **1994**, *33*, 1597–1599.

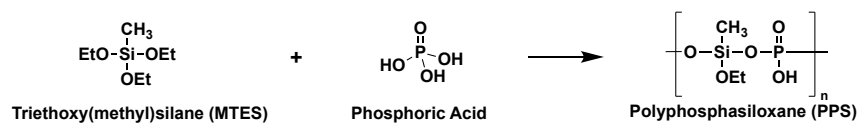
ポリフォスファシロキサンの合成とその難燃剤としての性質

(東理大院創域理工¹) ○飯島 真尋¹・今井 智大¹・山本 一樹¹・郡司 天博¹
 Synthesis of polyphosphasiloxane and its properties as a flame retardant (¹*Graduate School of Tokyo University of Science*) ○Mahiro Iijima,¹ Tomohiro Imai,¹ Kazuki Yamamoto,¹ Takahiro Gunji¹

Wood is widely used in building and interior materials, but its low fire resistance poses a significant challenge, making flame retardancy a critical issue. This study focused on phosphorous and silicon, known for their flame-retardant effects. By combining these elements, polyphosphasiloxane (PPS) was synthesized as a novel flame retardant, with the expectation of synergistic flame-retardant effects. PPS was synthesized by removing the ethanol solvent while heating and stirring at 120°C. IR and ³¹P NMR spectra confirmed that PPS possesses a structure containing Si-O-P bonds. To evaluate flame retardancy, PPS-impregnated wood samples were tested using cone calorimeter. Results showed that compared to untreated wood chips, the maximum heat release rate and total heat release were reduced by up to approximately 50%, and the amount of combustion residue increased. This confirmed the flame retardant properties of PPS.

Keywords : flame-retardant ; polyphosphasiloxane ; alkoxy silane ; phosphoric acid ; inorganic polymer

木材は建築物や内装材として広く利用される一方、耐火性が低いといった欠点を持つため、難燃化は重要な課題となっている。本研究では、難燃効果のあることで知られているリンとケイ素に着目し、これらを組み合わせることで相乗的な難燃効果を期待できるポリフォスファシロキサン (PPS) を新規難燃剤として合成し、有効性を検討した。PPSはScheme 1に従い、トリエトキシ(メチル)シラン (MTES) とリン酸の縮合反応により合成した。



Scheme 1 PPS の合成手順

PPSは120°Cで加熱攪拌しながらエタノール溶媒を除去する方法で合成した。IRスペクトルや³¹P NMRのスペクトルにより、PPSはSi-O-P結合をもつ構造であることがわかった。難燃性の評価として合成したPPSをスギ木材に含浸させた試料を用いてコーンカロリメーター試験を行った結果、未処理の木片と比較して最大発熱速度、総発熱量は最大で約50%抑制され、燃焼残渣量も増加した。この結果からPPSに難燃性能があることがわかった。

光触媒能を付与した高分子粘着シートの作製

(東理大創域理工¹⁾) ○浜中一星・今井智大・山本一樹・郡司天博

Fabrication of a polymeric adhesive sheet with photocatalytic properties (¹*Faculty of Science and technology, Tokyo University of Science*) ○Issei Hamanaka¹, Tomohiro Imai¹, Kazuki Yamamoto¹, Takahiro Gunji¹

Products with photocatalytic properties imparted to organic substrates face durability challenges. In this study, phosphonic acid was introduced into the polysiloxane used as a binder to achieve the immobilization of titania particles on the film surface. This enabled the fabrication of a flexible, attachable self-cleaning film. PET film was ozone-treated, then spin-coated with phosphonic acid-modified polysiloxane (PAPS) and titania sol. Cross-cut testing on the fabricated film showed no surface peeling. When conducting methylene blue decomposition tests on films using PAPS and 3-mercaptopropyl(trimethoxy)silane as the intermediate layer, a significant difference in decomposition rate was observed. This indicates that the presence or absence of phosphonic acid in the substance used for the intermediate layer affects the immobilization of titania.

Keywords: Photocatalyst; Polysiloxane; Phosphonic acid; Spin-coating

光触媒能を有する材料は様々な分野で活用されている。チタニアをガラスなどの無機基板にコーティングしたものは多く存在するが、有機基板を用いると光触媒能を付与したものは高温焼成ができないことや酸化分解しやすいなどの問題点が指摘されている。チタニア粒子を基板に固定するために、バインダーとしてポリシロキサンを用いると、チタニア粒子をポリシロキサンに包埋するため、効率的にチタニアの性能を発現することが難しい。リンとチタンはTi-O-P(ホスファチタノキサン)結合を形成することが報告されている¹⁾ので、本研究ではFig. 1に示すリン酸修飾ポリシロキサン(PAPS)でチタニア粒子を固定し、低温焼成によって、光触媒能を有する柔軟で貼付け可能なセルフクリーニングフィルムの作製を検討したので報告する。市販の粘着PETフィルムをオゾン処理し、PAPSとチタニアゾルをスピスコートで塗布し、それぞれを15分間焼成した。

作成したセルフクリーニングフィルムでクロスカット試験を行うと表面に剥がれは見られず、塗布した膜に高い付着性があることがわかった。PAPSと、3-メルカプトプロピル(トリメトキシ)シランを中間層に用いたフィルムで、それぞれメチレンブルー分解試験を行うと分解速度に大きな差が生じたことから、ホスホン酸がチタニアを効率的に固定することがわかった。

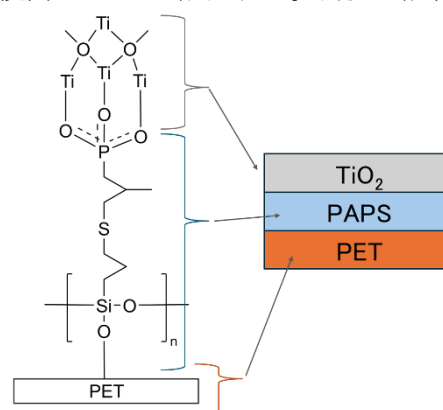


Fig. 1 作製したフィルムの構造

1) G. Guerrero, P. H. Mutin, A. Vioux, *Chem. Mater.*, **13**, 4367–4373 (2001).

ポリアルキレンオキシドを用いた溶液塗布型 OLED 用電子注入層の作製

(阪公大院工¹・明成化学工業株式会社²) ○岩野 紘大¹・小玉 晋太郎¹・八木 繁幸¹・岡村 奈生己²・石樽 修一²・橋本 貴史²

Fabrication of Poly(alkylene oxide) to an Electron Injection Layer for Solution-Processed OLEDs (¹Graduate School of Engineering, Osaka Metropolitan University, ²Meisei Chemical Works, Ltd.) ○Hiroto Iwano,¹ Shintaro Kodama,¹ Shigeyuki Yagi,¹ Naoki Okamura,² Shuichi Ishiguro,² Takafumi Hashimoto²

Solution-processing of organic light-emitting diodes (OLEDs) is a promising method for low-cost device fabrication. In this study, we developed electron injection layers (EILs) using poly(alkylene oxides) **PAO-1-4** incorporated with an alkali metal triflate. The performance of the EILs was evaluated for green phosphorescent OLEDs with the structure of ITO/PEDOT:PSS/emissive layer/EIL/Al. Devices with **PAO-2**- and **PAO-3**-based EILs exhibited significantly improved performance in comparison with a device without any EILs. Furthermore, the devices with EILs based on copolymers such as **PAO-2** and **PAO-3** showed superior performance to the ethylene oxide homopolymer (**PAO-1**)-based one. In the presentation, the EIL based on copolymer **PAO-4** will be also discussed.

Keywords : Poly(alkylene oxide); Alkali metal triflate; Organic light-emitting diodes; Solution-processing; Electron injection layer

溶液塗布法による有機発光ダイオード (OLED) の作製は、低コストでのデバイス作製を可能にすることから注目されている。本研究では、溶液塗布法によって作製可能な電子注入層の開発を目指し、ポリアルキレンオキシド **PAO-1-4** ($M_w = 69000-160000$, Fig. 1) にトリフルオロメタンスルホン酸カリウム (KOTf) を添加した薄膜について、電子注入層としての有用性を検討した。素子構造が ITO (陽極) /PEDOT:PSS (ホール

注入層) /発光層/電子注入層/Al (陰極) である緑色りん光 OLED について、電子注入層として **PAO-3** と KOTf の混合膜 (1.0 : 0.10, wt/wt; 膜厚約 4 nm) を用いた場合、輝度が 1 cd m^{-2} に達する電圧 (V_{on}) が 6.5 V、最大輝度 (L_{max}) が 1740 cd m^{-2} であり、電子注入層を挿入しない素子 ($V_{\text{on}} = 18.5 \text{ V}$, $L_{\text{max}} = 15 \text{ cd m}^{-2}$) と比べて大きく性能が向上した。このことから、**PAO-3** と KOTf の混合によるナノ薄膜が電子注入層として機能することがわかった。また、**PAO-3** の代わりに **PAO-2** を用いた素子も同程度の性能 ($V_{\text{on}} = 7.0 \text{ V}$, $L_{\text{max}} = 1580 \text{ cd m}^{-2}$) を示した。一方、エチレンオキシドの単重合体である **PAO-1** を用いた素子では V_{on} が 9.0 V、 L_{max} が 1100 cd m^{-2} であり、共重合体 **PAO-2** および **PAO-3** による電子注入層を用いた素子の方が性能に優れることがわかった。発表では、共重合体 **PAO-4** を用いた電子注入層についても議論する。

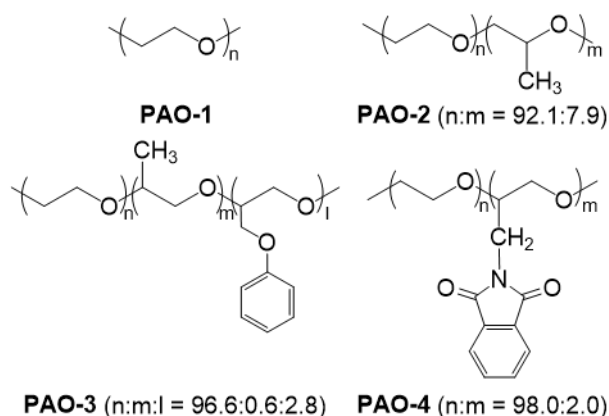


Fig. 1. Chemical structures of **PAO-1-4**.

ゲル形態を利用した電気化学キャパシタ電極用バインダーの検討

(奈良女大院生活工学¹・奈良女大院工²) ○比留川 舞¹・大背戸 豊²

Examination of binder for electrochemical capacitor electrodes using gel formations
(¹Graduate School of Human Centered Engineering, Nara Women's University, ²Faculty of Engineering, Nara Women's University) ○Mai Hirukawa,¹ Yutaka Ohsedo²

Electrochemical double-layer capacitors (EDLCs) are a type of electrochemical capacitor and a form of electrical storage device that enables rapid charge-discharge cycles through the adsorption of charge [1]. Their electrodes are typically made from a mixture of high-surface-area carbon materials and a liquid. Previously, the authors reported that using a gel-like material as a binder enabled uniform dispersion of composite materials, leading to improved EDLC performance [2]. In this study, we fabricated a new EDLC using a gel material based on a polyion complex (PIC) utilizing an aqueous polymeric liquid and the polyanion Nafion, and examined the effects of gelation.

Using Nafion as the polyanion material, the PIC gel formed a transparent and sufficiently stable gel, enabling the incorporation of powdered high-surface-area carbon materials. Furthermore, the fabricated EDLC exhibited consistent performance across polyanion ratios, albeit slightly inferior to that of the EDLC using only Nafion.

Keywords : Carbon materials; Composite hydrogel materials; Electric double-layer capacitors; Polyion complexes

電気化学キャパシタの一種である電気二重層キャパシタ(EDLC)は、電荷の物理吸着による高速充放電が電気貯蔵デバイス的一种である[1]。一般に、その電極材料は高表面積材料とバインダーと呼ばれる液体材料の複合によって作製される。筆者らはこれまでにバインダーをゲル状材料にすることによる複合材料の均一分散およびEDLCの性能向上について検討してきた[2]。本報告では新たに水系高分子液体材料であるNafionと、それを使用したポリイオンコンプレックス(PIC)によるゲル材料によるEDLCを作製し、ゲル化による効果を検討した。

Nafionをポリアニオン材料としたPICゲルは透明で十分に安定なゲルを形成し、粉末状の高表面積材料を複合することが可能であった。また作製されたEDLCは

Nafion EDLCと比較してわずかに性能が劣ったものの、ポリアニオン材料の比率に関係なく一定の性能を示した。

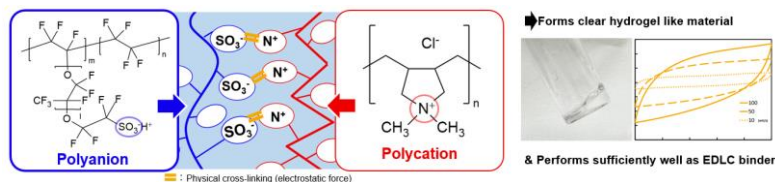


Figure 1 Formation Strategy of Polyion complexes and Its Achievements.

1) K. K. R. Reddygunta et al., *RSC Adv.*, **2024**, *14*, 12781.

2) M. Hirukawa and Y. Ohsedo, *New J. Chem.*, **2025**, *49*, 9071-9078.

Synthesis of Silicone Polymers and Gels via Controlled Alkoxysilane Reactions in Aqueous Media

(¹Faculty of Science, Kyoto University, ²Graduate School of Science, Kyoto University)

○Tiavinka Variany Halim,¹ Ai Kurahashi,² Satoshi Horike,² Kazuyoshi Kanamori²

Keywords: Silicone Polymers; Silicone Gels; Aqueous Process; Sol–Gel

There has been numerous in-depth research on polysiloxanes (silicones), mainly in the form of liquids, films, and monoliths. Many rely on ring-opening polymerization of cyclosiloxanes, hydrolysis and polycondensation of chlorosilanes, and crosslinking in the presence of platinum or organotin catalysts, which are poorly controllable and environmentally hazardous.¹ Thus, we aimed to synthesize silicone polymers in aqueous media, which is green and relatively simpler in procedure, emphasizing the achievement of high molecular weight. We also explored their gelation behaviors as polymeric hydrogels, considering their great potential for artificial skin and wound healing materials.

By optimizing various parameters, such as water ratio, pH, and synthesis procedure, we successfully synthesized silicones with high molecular weight from dimethyldimethoxysilane (DMDMS, Fig. 1). Gel permeation chromatography analyses showed that synthesis in the presence of superbase 1,5,7-triazabicyclo [4.4.0]dec-5-ene under an open condition efficiently promoted polycondensation, reaching as high a molecular weight as 200,000 g/mol. Furthermore, we successfully synthesized all-siloxane hydrogels (Fig. 2) with uniform shapes and good transparency by employing a low concentration of tetramethoxysilane (TMOS). Gelation in low-water conditions is also found to occur due to rapid condensation.

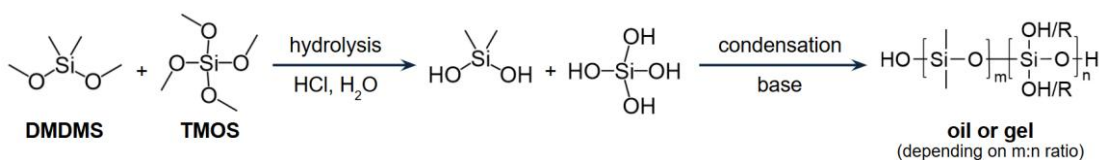


Figure 1. Silicone synthesis by the sol–gel process.

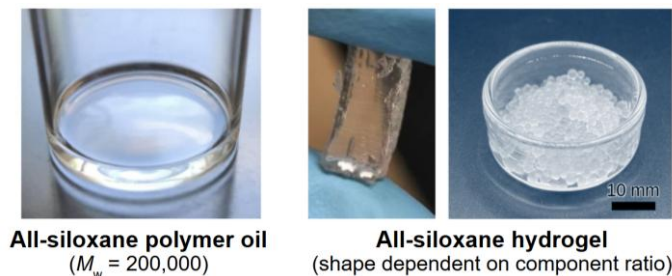


Figure 2. Synthesized silicone polymer oil and hydrogel.

1) K. Fuchise, M. Igarashi, K. Sato, S. Shimada, *Chem. Sci.* **2018**, 9, 2879-2891.

コーヒー粕由来ホロセルロースナノファイバーの物性解析とクロロゲン酸複合薄膜への応用

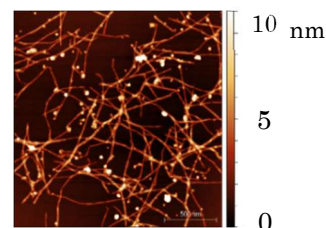
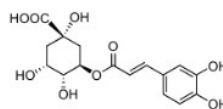
(横国大理工¹・横国大院環境²・横国大院理工³) ○大橋 悠理¹・松本 真哉²・川村 出³・金井 典子²

Characterization of Holocellulose Nanofibers Derived from Spent Coffee Grounds and Their Application in Chlorogenic Acid Composite Films (¹College of Engineering Science, Yokohama National University, ²Graduate School of Environment and Information Sciences, Yokohama National University, ³Graduate School of Engineering, Yokohama National University) ○Yuri Ohashi,¹ Shinya Matsumoto,² Izuru Kawamura,³ Noriko Kanai²

Six million tons of spent coffee grounds are generated annually as food waste. As an upcycling method, holocellulose nanofibers (HCNF) obtained after delignification and mechanical defibrillation are characterized by their unique structure, which contain hemicellulose mannans and a small fiber width of 2 nm. Chlorogenic acid, a type of polyphenol, has anti-UV properties and is contained in liquid waste during the HCNF manufacturing process. In this study, we analyzed the physical properties of HCNF obtained through different pretreatments and produced HCNF thin films containing extracted chlorogenic acid, aiming to develop sustainable value-added materials using only coffee grounds extractions. The alkali-treated HCNFs exhibited increased viscosity and a reduced carboxyl group content. The fabricated film was confirmed to block 99.9% of UV light in the UVB range, with potential application for food packaging.

Keywords : Holocellulose nanofibers; Spent coffee grounds; Chlorogenic acid

食品廃棄物として、年間約 600 万トンの使用済みコーヒー粕が発生している。この使用済みコーヒー粕のアップサイクルとして、脱リグニン処理を行い、機械解繊を行うことで、ヘミセルロースのマンナンが含有された他に類を見ない構造を有する、繊維幅 2nm のホロセルロースナノファイバー(HCNF)が得られる。また HCNF 製造過程の脱脂廃液中にはポリフェノールの一種であるクロロゲン酸が含まれており、抗 UV 機能を有している。¹⁾本研究では異なる前処理で得られた HCNF の物性解析を行い、またコーヒー粕のみを原料とした持続可能な材料の開発を目的とし、製造過程の脱脂廃液中に含まれるクロロゲン酸を混合させた HCNF 薄膜を作製した。アルカリ前処理を行った HCNF は未処理の HCNF よりも粘度が上昇し、ヘミセルロース由来と考えられるカルボキシル基量が減少した。また、作製した薄膜は UVB 領域にて UV 光を 99.9%遮蔽することが確認された。本研究の応用先として UV 遮蔽機能を有する食品包装材への利用が期待される。本発表では NMR などの構造解析や、薄膜の抗 UV 特性の結果について述べる。



1) Koh, E., & Hong, K. H. Textile Research Journal, 89, 13–19, (2019).

Fig.1 (Left) the chemical structure of 5-caffeoylquinic acid and (right) AFM image of HCNF