

# 分子デザイン研究センター —異分野融合を目指して—

西脇 永敏<sup>1,2</sup>

(受領日：2024年5月31日)

<sup>1</sup> 高知工科大学総合研究所分子デザイン研究センター  
〒782-8502 高知県香美市土佐山田町宮ノ口185

<sup>2</sup> 高知工科大学理工学群  
〒782-8502 高知県香美市土佐山田町宮ノ口185

E-mail: nishiwaki.nagatoshi@kochi-tech.ac.jp

要約：総合研究所には8つの研究センターが設置されていますが、その1つである「分子デザイン研究センター」の研究活動と教育活動について紹介します。「異分野融合」をキーワードにした本センターでは、単独のグループではなし得ない研究を展開するとともに、学生に対する教育活動も並行して行っており、大学の研究・教育レベルの向上に貢献することを目指しています。

## 1. はじめに

野球では、かつて先発完投型のピッチャーであることが求められていました。それは今でも理想の姿ではありますが、今は先発、中継ぎ、抑えと分業化していることが当たり前となっています。科学においても、学術分野が細分化されている現在では、膨大な量の知識と技術を兼ね備えている各々の研究者がユーティリティープレイヤーになることは難しく、新しい機能を有する物質を単独で創出することが益々困難になりつつあります。そのような背景の下、複数の異なった分野の研究者によって協力することを目的として設立されたのが、分子デザイン研究センターです。

本センターの前身となる物質創成工学研究センターも同じコンセプトで運営されていましたが、無機-有機ハイブリッド材料をメインとする人たちが構造ナノ化学研究センターとして新たに活動を始めることになりましたので、有機分子を中心に2020年度からリスタートを切ったのが、分子デザイン研究センターになります。従って、本センターは前身

と同様に、「インターディシプリナリー」すなわち「異分野融合」をキーワードにして、学際的な場の提供を行ない、学内外の異分野の研究者間の連携を促進する拠点として、新しい機能性物質や機能性材料の創成を行なっています。

実際にセンター員も学群と分野の垣根を超えた人達で構成されています。センターは、システム工学群の蝶野成臣教授、辻知宏教授（機械工学、流体工学）、理工学群の小林未知数准教授（シミュレーション物理学）林正太郎講師（高分子化学、結晶工学）、伊藤亮孝講師（光物性化学）、西脇永敏教授（有機合成化学）の6名で発足しました。翌年度からは新たに着任した岩井健人助教（有機合成化学）が加わりました（職位はセンター発足当時のもの）。2023年度からは蝶野教授が学長に就任されましたので構成員から外れました。

これらのセンター員が協力して新分野の創出を目指した研究に励んでいます。本稿では、現在展開されているいくつかの研究テーマのうち、3つのトピックスを取り上げて解説します。また、学生に対して行なっている教育活動についても紹介します。

## 2. 研究活動

### 2.1 液晶分子を用いたマイクロアクチュエータの開発（機械工学×シミュレーション物理学×有機合成化学）

物質の三態とは、固体、液体、気体のことですが、実際にはそれらの枠に収まらない分子も存在します。分子が規則正しく整列した固体を結晶と言います。一方、分子がばらばらになり、流動性を持ったものを液体といいます。液晶とは、文字通り結晶と液体の中間に位置しており、規則正しい配列を持ちながら流動性を有する物質のことです。身の回りでは液晶ディスプレイとして馴染みがあるかと思いますが、他の用途にはあまり用いられていません。

蝶野教授と辻教授は液晶分子が整列する時のパワーを駆動源にすれば、医療器具などの小さな機械のマイクロアクチュエータ（微小モータ）として利用できるを考え、その研究を展開してきました。しかしながら、ディスプレイ用に開発されている市販の液晶分子の内、アクチュエータ用に利用できる数には限りがありますので、性能を向上させることも至難の技です。

一方、有機合成化学の手法を用いれば分子レベルで設計し、合成することができます。しかし、それを利用してくれる人がいなければ、何の役にも立ちません。もちろん、自分たちで用途開発をして利用されている人もいますが、考え付くアイデアには自ずと限界があります。

これらの限界を打破するためのキーワードが、先に述べた「異分野融合」です。すなわち、どのような液晶分子が有望かという方向性が見えれば、合成化学の手法を使って調製することができますし、合成した液晶の評価を行なって、その結果をフィードバックすれば、より高性能な液晶分子の構築が可能になります。

しかし、闇雲に分子を合成して、それを評価しても、検討すべきパラメータが多いので、目標の物性を示す液晶分子に効率良く辿り着くことができません。そこで、様々な角度からシミュレーションをした結果、3つのパラメータが重要であることを明らかにしました。しかし、どのような分子設計をすれば、そのようなパラメータを有する分子になるのかまでの隙間を埋めるには至っていません。現在、小林准教授がシミュレーションをして、その間を埋めることを検討しています。

### 2.2 新規な光物性を示す分子の開発（有機合成化学×結晶工学×光物性化学）

分子の中には紫外線や赤外線などの電磁波を吸収すると光るものがあります。また、分子に与える刺激の違いによって光の色調が変わるものもあります。その用途や応用は拡大の一途を辿っています。特に有機分子は構造を少しずつ変化させることができますので、繊細なチューニングが可能になります。無機材料では、そこまでの精度を求めることができませんので、有機材料の特長の1つであると言えます。

電子を押し出す置換基と引っ張る置換基を併せ持ちますと、分子内で電子密度に偏りが生じ、特異的な光物性を示すことが多くあります。西脇と岩井助教はそのような骨格の分子を合成する手法の開発をしています。一方、伊藤准教授はこれらの分子の光物性を測定し、より高機能を示す分子の構造の開発を検討しています。

分子は固体状態では光らないけれども溶媒に溶かして溶液状態になれば光るものもあれば、逆に溶液状態では光らないけれども固体状態では光るものもあります。後者の場合、結晶の状態が異なれば、すなわち、分子同士のパッキングの状態が異なれば、発光の様子も大きく異なります。そのような場合には、その分野の知見やノウハウを多く持っている林准教授の協力が不可欠になります。

### 2.3 新規歯科材料の開発（産学連携&地域貢献）

他府県に比べますと、高知県にある企業数は多くはありませんが、大きなシェアを誇り、一目も二目も置かれている企業があります。その内の1つがYAMAKIN株式会社です。この会社は歯科材料を開発しており、従来の貴金属、セラミックスに加えて、有機材料（レジン）を用いた製品開発を精力的に行なっています。

本センターは地元の有力企業であるYAMAKIN株式会社と包括的な共同研究契約を締結し、それぞれの分野で協力し、新規な製品開発を目指しています。例えば、レジンの原料である低分子化合物は有機合成化学の分野（西脇、岩井助教）と密接な関係がありますし、それを高分子化しますと、高分子化学の分野（林准教授）と関連します。また、レジンを歯科材料として使用するためには、フィラーと呼ばれる補助基剤を混ぜて強化する必要がありますが、そこでは無機ナノ粒子の分野（小廣教授、大谷教授）の協力を仰ぎます。このように本学の化学分野全体と協力した産学連携、地域貢献のプラットフォーム

ホームの役割を本センターが果たしています。

また、YAMAKIN 株式会社とは研究協力だけではなく、社員教育の面でも協力しています。すでに多くの方が本学で博士号の学位を取得していますが、現在も社会人大学院生として在籍して、二足の草鞋を履いている人もいます。

## 2.4 研究支援

本研究センターは、センター員の研究グループがストレスを抱えることなく、研究を遂行できるようにサポートをしています。

データを集めるためには、大型の分析機器を操作して収集します。機械類は正しく使っても、故障をする時はします。しかも、修理代は高額であることが多いのも事実です。この突発的な出費は研究の大きな妨げとなりますので、そのような場合、センターが可能な範囲でサポートをしています。

手元に化合物があったとしても、分子は非常に小さいために、その構造を知ることはできません。そのような時に私たちの目の代わりとなるのが核磁気共鳴装置（NMR）です。言い換えますと、NMR がなければ研究は何も進展しませんし、それだけ使用頻度も高いと言えます。実際に年間 1000 時間程度使用されています。受益者負担として、1 時間あたり 300 円の使用料が必要ですが、積み重なると結構な額になります。そこで、センターがこの使用料を負担することにより、NMR を気兼ねなく使える環境を提供しています。

化学式や構造式は、分子を扱う人の言語です。従って、分子の構造を描くことが頻繁にあります。その時に活躍するのが Chem Draw という専用のソフトウェアです。センターでは、このソフトウェアのサイトライセンス契約の費用を負担しています。使用するにあたっては、何も制限がありませんので、学内の教職員、学生の誰でも利用することができますので、必要があれば是非ご利用下さい。

その他、国際会議での発表などの補助もしていますが、ここ数年はコロナ禍のために、参加することもままならなかったことから、その回数はあまり多くはありません。

## 2.5 研究業績

このように大学からの支援を受けている以上、それに見合った研究業績を出す必要があります。しかし、分子デザイン研究センター独自の業績と個々のセンター構成員との業績を明確に切り分けることは難しいかと思えます。ですので、センターのアク

表 1. 各年度に出版した論文総数

年度	論文数
2020	26
2021	22
2022	36
2023	21

ティビティを測る指標として、各々の構成員が各研究室で外部発表した論文の総数を表 1 に示しましたが、学会発表や国際会議での発表は論文数の数倍の数に上ります。

こうした研究業績を挙げることができたのは、各研究室の教員、特に学生達の頑張りが大きいことはもちろんですが、センターがサポートしたことにより、研究費を、自分達の研究を前進させることや学生教育のみに費やすことができた結果であると言えます。また、研究センター以外に、学長裁量経費による研究機器の充実や大学支援研究員なども大きく貢献しています。

## 3. 教育活動

### 3.1 高知化学シンポジウム

高知県は大都市圏から遠く離れていますので、地理的に不利なことが多々あります。その 1 つに他研究機関の研究者や学生と情報交換や意見交換する機会が少ないことと、学生が発表する機会が少ないことが挙げられます。

そのような問題を解決するために、「高知化学シンポジウム」を毎年永国寺キャンパスで開催しています。高知工科大学、高知大学、高知工業高等専門学校および県内企業、研究機関から 100 名以上が集まり、学生が口頭発表やポスター発表をして、活発な議論をしています。また、コロナ禍で中断していましたが、県外からも講師を招いて講演をして頂き、最先端の化学に触れる機会も提供しています。

このシンポジウムには県外から参加する人も現れ始めており、今後、高知が情報発信拠点になることを目指しています。

### 3.2 安全教育

化学は多様な試薬や機器を使用するため、他に比べて実験中の失敗や事故が多い分野です。本学には、様々な分野の研究者が様々な研究を行っており、中には薬品類を扱う学生や教員がいます。しかし、化学系以外の分野では薬品類の管理・使用上の注意・廃棄の仕方などについて十分な教育を受けていません。そこで、センター主催で、そのような学

生・教員を対象にした講習会を年に一度の割合で開催しています。また、本学に導入している薬品管理システム（CRIS）の使用法についても説明を行なっています。

#### 4. 社会貢献

社会貢献の1つとして、2020年からベトナム建設省の研究機関 Vietnam Institute for Building Materials（VIBM）と共同研究契約を締結しています。コンクリートの塗装フィルムがどの程度の耐食性を有しているかという課題に関して、化学的見地からアドバイスをしています。その関係で2022年7月にはVIBMの方々の訪問も受けました<sup>1,2)</sup>。



建築現場では、鉄鋼業で排出される鉄スラグが埋め戻し材として利用されていますが、鉄スラグが放出する放射線の安全性や地下水に及ぼす影響などの影響が懸念されます。そこで、これらの安全性評価について技術相談を受けるとともに、論文化<sup>3,4)</sup>の支援を行ないました。

#### 5. おわりに

本稿では、分子デザイン研究センターの研究内容の一部と教育活動についてご説明しました。本センターは「化学」をキーワードにして他分野との融合を目指した研究分野を新たに開拓していくことを目指しています。言い換えますと、物質を扱う分野は全て化学の守備範囲であり、様々な分野の研究者と手を組むことができます。本稿をお読みになって、自分の研究で何か化学が役に立たないかと思われた方は本センターに遠慮なくご相談下さい。

#### 6. 参考文献

- 1) 西脇研究室ホームページ VINM 視察団来訪 (<http://www.env.kochi-tech.ac.jp/naga/event/VIBM22.html>)
- 2) Vietnam Institute for Building Materials (VIBM) ホームページ高知工科大学 (KUT) 訪問報告 ([http://vibm.vn/Details/id/4331/VIBM-lam-viec-vo-i-khoa-Khoa-hoc-va-Ky-thuat-Moi-truong-Truong-Dai-hoc-Ky-thuat-Kochi-Nhat-Ban-KUT?zarsrc=30&utm\\_source=zalo&utm\\_medium=zalo&utm\\_campaign=zalo&gidzl=jEtrQdev71op-HaU2yL4xBp-6jYUH8K\\_VFvEsPv4HQleAfWPNnB6\\_Yazc8pSKrFzA-iE6R-xDbEUJGV5m#.YuC3\\_y\\_3IQ\\_](http://vibm.vn/Details/id/4331/VIBM-lam-viec-vo-i-khoa-Khoa-hoc-va-Ky-thuat-Moi-truong-Truong-Dai-hoc-Ky-thuat-Kochi-Nhat-Ban-KUT?zarsrc=30&utm_source=zalo&utm_medium=zalo&utm_campaign=zalo&gidzl=jEtrQdev71op-HaU2yL4xBp-6jYUH8K_VFvEsPv4HQleAfWPNnB6_Yazc8pSKrFzA-iE6R-xDbEUJGV5m#.YuC3_y_3IQ_))
- 3) S. T. Le, A. T. Le, M. T. T. Cao, H. B. Pharm, T. T. Nguyen, T. T. Le, N. Nishiwaki, Assessment of Water Quality under Real-World Conditions: Effects of Steel Slag Backfills on Ground and Surface Water. *Environmental Science: Water Research & Technology*, 8, 3043–3053, 2022.
- 4) S. T. Le, A. T. Le, C. C. Le, T. T. Nguyen, H. T. Luu, T. T. Le, N. Nishiwaki, Assessment of Natural Radioactivity of Vietnamese Steel Slag for Using as Landfill Material. *Journal of Material Cycles and Waste Management*, 25, 3885–3892, 2023.

# **Research Center for Molecular Design – Aiming for Development of Multidisciplinary Research Fields–**

**Nagatoshi Nishiwaki<sup>1,2</sup>**

(Received: May 31st, 2024)

<sup>1</sup>Research Center for Molecular Design, Kochi University of Technology  
185 Miyanokuchi, Tosayamada, Kami City, Kochi 782-8502, JAPAN

<sup>2</sup>School of Engineering Science, Kochi University of Technology  
185 Miyanokuchi, Tosayamada, Kami City, Kochi 782-8502, JAPAN

E-mail: [nishiwaki.nagatoshi@kochi-tech.ac.jp](mailto:nishiwaki.nagatoshi@kochi-tech.ac.jp)

**Abstract:** The Research Center for Molecular Design, one of the eight research centers in KUT, is developing a new multidisciplinary research field. This manuscript introduces three topics studied at this center as well as the center's educational activities. The research center aims at contributing to the improvement of both research and the educational levels of KUT.