

研究領域名 高分子材料と高分子鎖の精密分解科学



京都大学・大学院工学研究科・教授

ぬまた けいじ
沼田 圭司

領域番号：20B203 研究者番号：40584529

【本研究領域の目的】

プラスチックをはじめとした高分子材料は、その優れた物性と加工性から、幅広い材料分野に利用されている。一方で、多様な使用環境において、高分子素材の利用中もしくは利用後の分解が深刻な問題を引き起こす例が報告されているように、系統的理解に基づき、高分子の分解を精密に設計および予測することは未だ困難である。これは、高分子の機能性及び物性向上に偏重した長年の研究開発により、高分子の分解に関する系統的な学術研究が停滞したことが一因である。同時に、劣化や分解を抑制し、高分子の安定性を向上させることも容易ではなく、主要な構造材料としての立ち位置を鉄から奪えない科学的な要因である。これらの諸問題は、高分子の分解をマクロレベルから、メソスケールを経由して、分子レベルまで多階層的に理解し、学問的に体系化していないことに起因する。様々な分野で、学理に基づいた高分子設計や高分子材料の安定性・分解性の予測が求められているにもかかわらず、高分子分解の系統的な研究の欠如から、直ぐには実現できない状況に追い込まれている。

本研究領域では、高分子の分解を物理劣化、化学分解、生物代謝に分割することで、高分子の分解機構が、材料の階層構造と物性に与える影響を明らかにすることを旨とする（図1）。さらに、分解性を考慮した新しい高分子設計指針を、国内外そして産業界に対しても示すことを長期の目標とする。実験ではアプローチできない分子論については、実験から得られた情報を基に粗視化のレベルを判断し、計算科学を導入することで明らかにする。

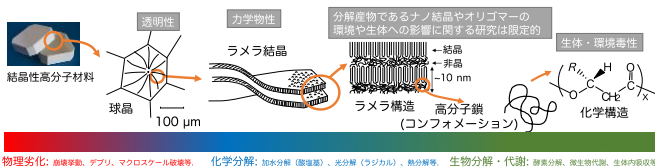


図1 結晶性高分子の分解性の模式図

【本研究領域の内容】

本研究領域は、高分子の精密分解を可能にする学理を構築することを目的として、研究領域の実施に際し、4つの計画研究と2つの融合研究課題を推進する。計画研究は、A01 均一高分子網目を利用した物理劣化の素過程化（物理劣化）、A02 利用環境下における高分子鎖切断の精密設計と時系列解析（化学分解）、A03 分解産物の精密解析と生物環境への影響評価（生物代謝）、及び A04 実効的粗視化による高分子分

解シミュレーション（分解予測）から成る。これらの計画研究を通じて、高分子材料の劣化、摩耗などの物理的破壊過程から、化学的な高分子鎖切断、さらには、分解産物の精密解析と生体や自然環境への影響を一貫して行う。実験的に評価や議論が難しい現象については、計算科学を積極的に利用することで推進する。同時に、4つの研究計画が有機的に連携することで、2つの融合研究課題（P1：時空間効果の学理、P2：均一・不均一構造の学理）に取り組む。P1は、高分子の分解が与える影響を、その時間スケールと空間スケール、つまりは分解速度（分解物の生産速度）と分解濃度に着目して研究を推進する。P2では、高分子の階層構造の有無、つまりは、構造に内在する不均一性を基に、高分子の精密分解に迫る。

審査結果の所見でも指摘されたように、研究対象が広いため、研究成果が発散する可能性がある。そこで、研究対象をある程度絞るため、キックオフシンポジウムなどの議論を通じて、自然環境への影響が危惧されているゴム高分子、及びバイオプラスチックとして利用可能な熱可塑性の生分解性ポリエステルを、研究領域の主たる標的高分子として定め、研究を推進することとした。

【期待される成果と意義】

本学術変革領域が達成された暁には、環境へ流出しても安全な高分子、安心して長期間生体内で利用できる材料、さらにクローズド・ループでリサイクル可能な高分子材料など、分解性を精密に設計・制御した高分子を合成・創出する大規模な学術領域へと展開することが期待される。

【キーワード】

- 高分子材料：人類の生活は多くの高分子材料により成立している。タイヤに代表されるゴム材料、包装材料など多様な利用が認められるプラスチック、衣料の多くを占める化学繊維、そして医療用の高機能材料としても高分子が利用されている。
- 精密分解：高分子の精密合成は長年にわたり研究が進められて来たが、分解過程を体系的に制御する精密分解に関する学理は不十分である。

【領域設定期間と研究経費】

令和2年度－4年度 122,100千円

【ホームページ等】

http://pixy.polym.kyoto-u.ac.jp/pd/pd_index.html
numata.keiji.3n@kyoto-u.ac.jp