

非可食性バイオマスを原料とした海洋分解可能なマルチロック型 バイオポリマーの研究開発

発表者：森田 裕史（国立研究開発法人産業技術総合研究所）

PM：伊藤 耕三

国立大学法人東京大学大学院 新領域創成科学研究科 教授

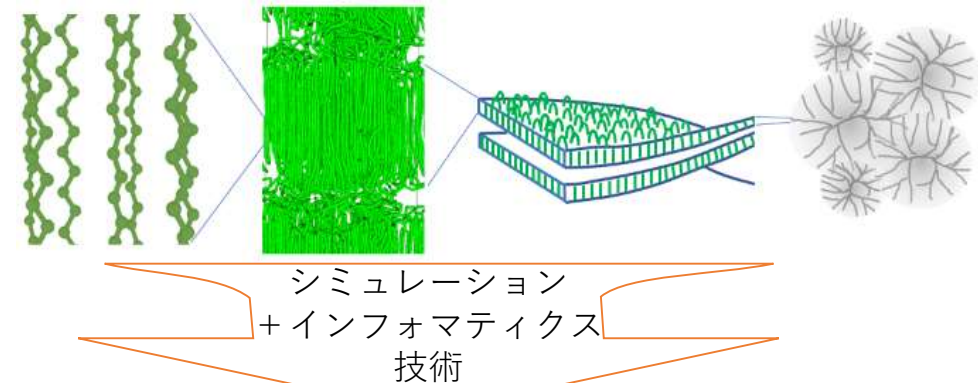
PJ参画機関：国立大学法人東京大学、三菱ケミカル株式会社、株式会社ブリヂストン、
帝人株式会社、株式会社クレハ、国立大学法人九州大学、
国立大学法人東海国立大学機構名古屋大学、国立大学法人山形大学、
公益財団法人地球環境産業技術研究機構、国立研究開発法人産業技術総合研究所、
国立大学法人愛媛大学、国立大学法人東京工業大学



産業技術総合研究所グループでは、階層構造を形成している海洋分解ポリマーの分解解析、及び海洋分解ポリマー材料設計を目的に、シミュレーション技術、及びインフォマティクス技術を駆使し、研究を実施しています。

具体的には、海洋プラスチック中で多く残存し問題となっている高分子結晶体の分解過程のモデル研究、及び動的架橋ポリマーの材料設計のためのモデル研究を実施しています。前者については、粗視化モデルを用いて高分子結晶体構造を作成し、その結晶分解過程のシミュレーション結果について、結晶部と非晶部を機械学習を用いて精密に解析する技術を開発し、分解過程の研究を実施しています。一方、後者については、架橋結合をエントロピー駆動により自動的に切断・生成させるモデルを開発し、その動的モデルを用いたシミュレーションを用いて、材料設計を目指した研究を実施しています。

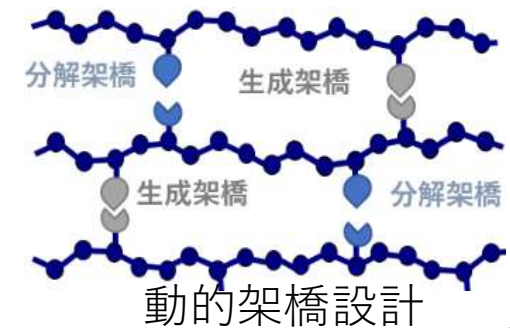
高分子材料の階層構造



海洋分解ポリマーの分解のための解析/材料設計へ



結晶分解解析



動的架橋設計

E4a: 俯瞰的視点による海洋分解ポリマーのための 双方向マルチスケール解析技術の研究開発

当グループの保有技術

- ・ アトミックから粗視化までの **高分子材料シミュレーション技術**
- ・ **インフォマティクス技術**を用いた材料解析



(2029年度) 最終目標

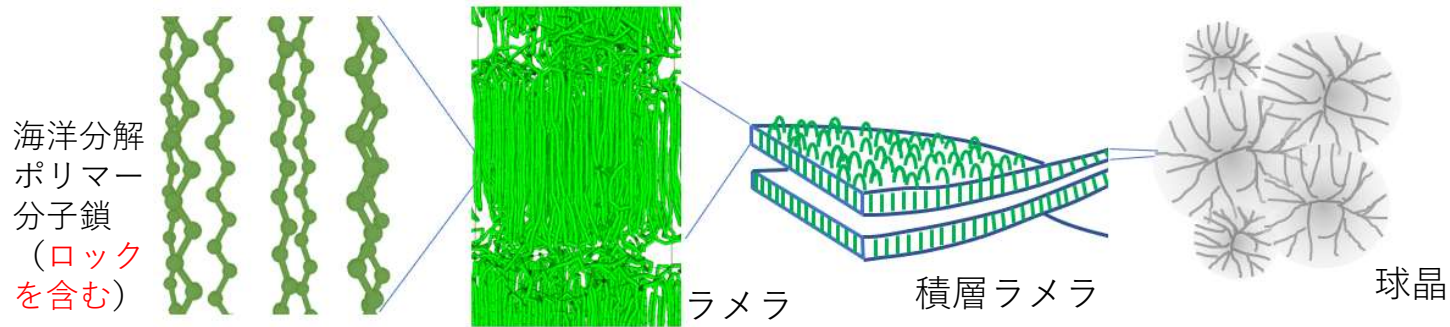
- ・ 俯瞰的視点による設計手法開発を推進し、モデルの統合を進め、多階層における海洋分解ポリマーの解析手法を確立し、海洋分解解析に適用を実施する。
- ・ 各種ロックの状態や分解に関わるプロセスパラメータなどのパラメータ空間中における易分解性の良い条件を提案する。E1,E3グループとの間とのやり取りを行いながら、最終的に目標とする海洋分解マルチロックポリマーを設計し創製するための研究を行う。

2022年度までの目標

- ・ **高分子結晶体の分解過程のモデル研究**：モデル化及びシミュレーション研究を推進し、さらに、分解された構造の解析を進める。2021年度以降は、E2グループによる実験解析との比較検討も進める。
- ・ **マルチロックポリマーの分解過程のモデル研究**：海洋分解可能なバイオタフポリマーの候補材料としてE1、E3のグループの各拠点で開発予定のマルチロックポリマーのための粗視化分子モデルを構築し、ゴム製品などの用途を考慮したマルチロックポリマー分子系に対して、その分解過程を追跡するためのシミュレーション研究を実施する。

開発項目・内容

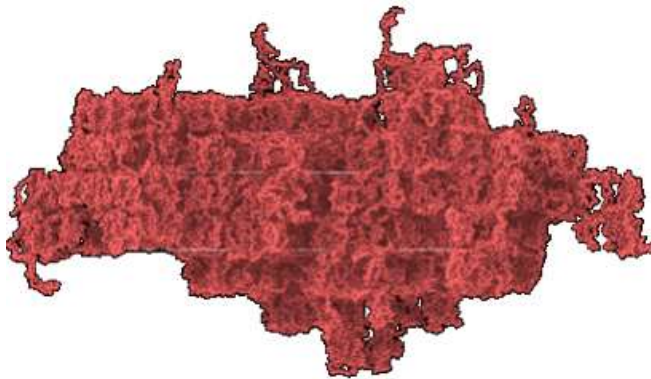
高分子材料の階層構造



シミュレーション+インフォマティクス技術

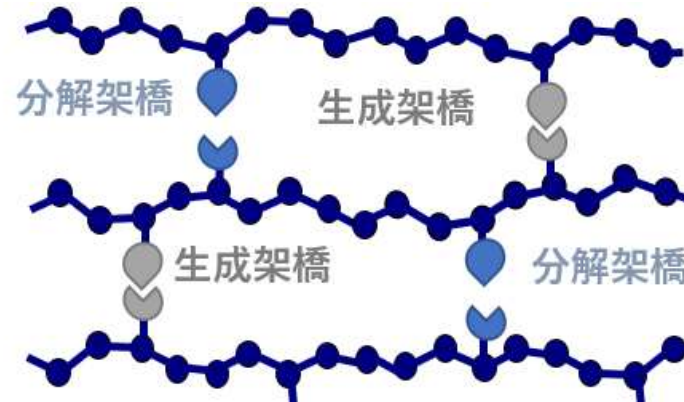
高分子の多階層性を含む海洋分解ポリマーの分解のための解析/材料設計

具体的な
取り組み
内容



高分子結晶の分解の解析

海洋プラで残存しやすい結晶部位を分解させる際の解析研究



マルチロックポリマー設計

ロックを入れた際の高次構造制御
分解性と強靱化を両立させた設計

現時点の主な成果 1

課題と目的：海洋プラで残存しているモノの多くが高分子結晶

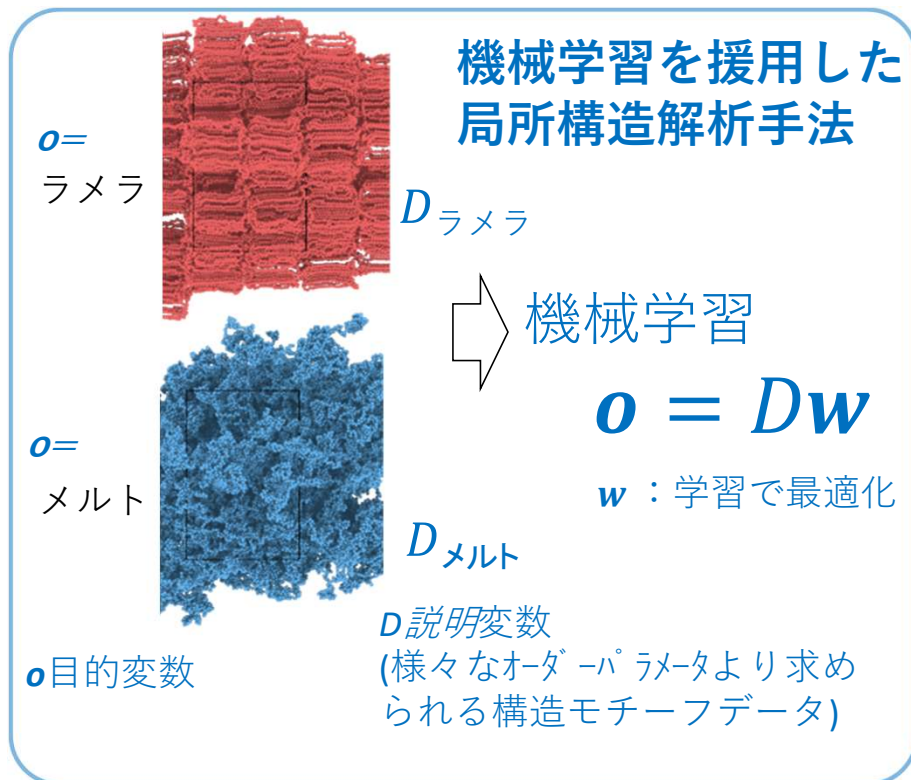
⇒ロック解除のもとで、高分子結晶の海洋分解を検討する必要がある！

海洋分解のメカニズム解析と分解の可能性の検討

(ロック解除：熱、光などの外場)

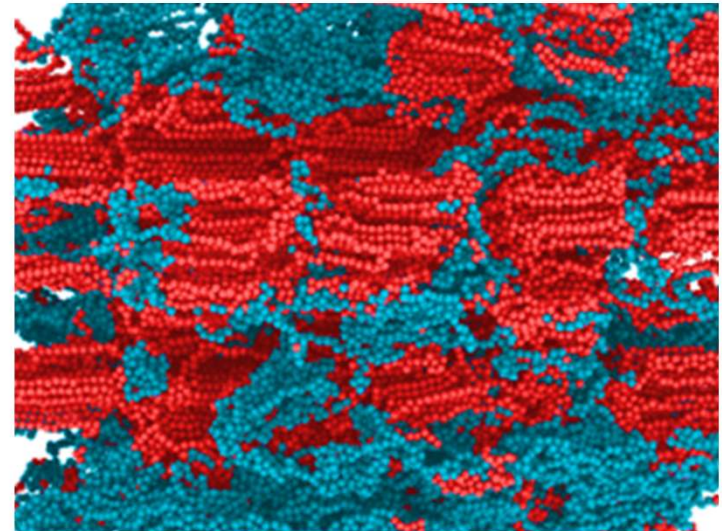
我々の取り組み：

- ・シミュレーションによる分解シミュレーション
(粗視化モデルを用いた結晶の熱分解モデル構築)
- ・分解された構造中の残存している結晶部の詳細な解析
(機械学習を援用した精密な結晶部の分類)



学習
済み
AIの
適用

熱分解シミュレーションの精密構造解析



機械学習を援用した結晶部の分類の結果
熱分解中の精密な解析事例
(赤：結晶部、青：非晶部)

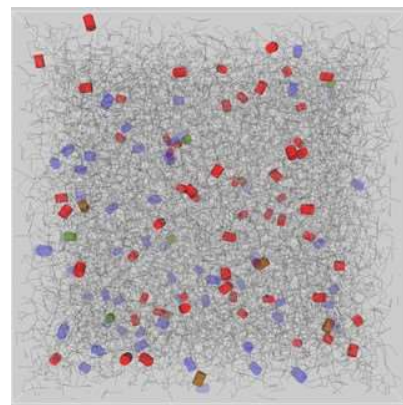
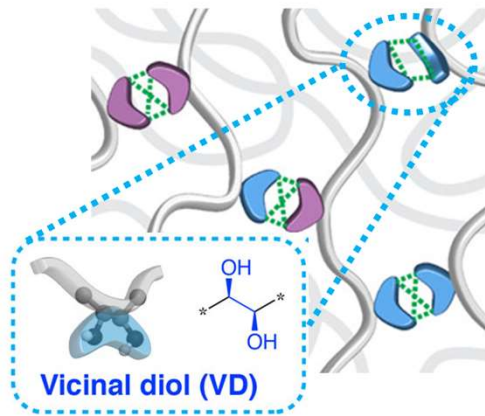
現時点の主な成果 2

課題と目的： E1, E3グループによる海洋分解マルチロックバイオポリマーの開発
 ⇒ ロック機構の利用により強靱性と海洋分解性を合わせ持つポリマーの設計

我々の取り組み：

- ・ 動的架橋エラストマー：架橋点が動的に生成・切断する次世代強靱エラストマー（E1 吉江Gで開発中）のモデル化とそのモデルを用いたシミュレーションの実施
- ・ 吉江Gの材料の特性（繰り返し変形特性・熱緩和による自己修復性）の解析

動的架橋エラストマーのモデル化

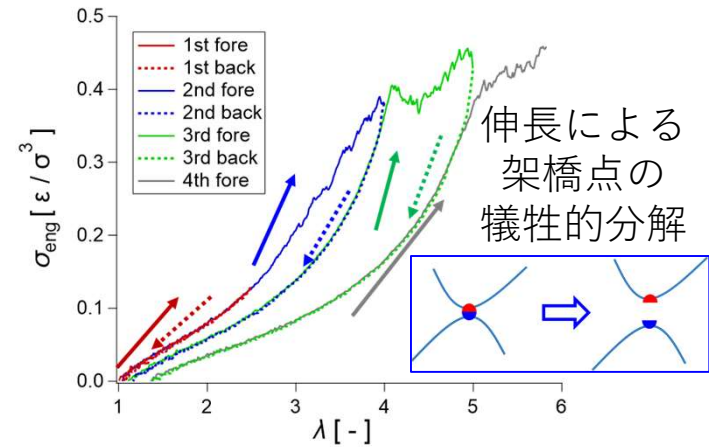


動的な結合
 組みかえを
 実現

灰：高分子網目
 赤：結合形成
 青：結合解離

動的架橋エラストマーの特性

動的な結合の
 形成・解離の下
 で、高伸長域で
 の耐破断性を
 再現。



熱緩和により、
 応力が回復でき、
 自己修復性をモ
 デルの上で再現。

