

# 未来について若手研究者 48 人に聞きました

Special Issue on Future Dreams of 48 Young Fiber Scientists

## 編集委員会

昨年の「今年の漢字」は「災」でした。平成最後の本年からはずっと良い年になることを願い、48人の若手研究者の皆様に「未来への希望、予測、夢」を語って頂きました。未来としては、厳密なものはありませんが、数十年後から百年後が目処です。例えば今から百年前と言うと、大正時代で第一次世界大戦の終了直

後です。その時代に、現在の私たちの生活がどれだけ予測できたでしょうか。困難な内容についてのご執筆のお願いですので、著者の皆様には「未来の予測等について、その実現の責任をお取り頂く必要はございません」ともお伝えしております。しかし、これら若手研究者の「夢」が現実となることを、編集委員一同期待しております。



シチリア島のギリシア遺跡(高岸 徹 2018 第57回大調和展 武者小路賞)

## 繊維科学と情報科学の融合による次世代型 モノづくりを目指して

繊維技術における進歩は、幅広い産業分野において革新をもたらしてきました。今日に至るまで、先端材料の開発が社会基盤の構築に大きく貢献してきたことは言うまでもありません。このことから、繊維科学における未来を語る上で、材料開発技術の発展は切っても切り離せません。そこで、本稿では繊維科学と情報科学との融合による次世代型モノづくりについてお話ししたいと思います。

コンピュータシミュレーションに基づく設計によって、電気回路や機械部品などは逐一試作品をつくることなしに製品の開発・評価ができることが当たり前の時代となってきました。一方で、こうした製造技術において、材料の探求が必要不可欠ですが、シミュレーション単独による高分子・繊維の材料設計はプリミティブな段階にあるのが現状です。これはシミュレーションの適用範囲が限定的であることや、理論的モデルの欠如、インフラの未整備、人材の不足などが以前から指摘されています。しかし、ここ十数年における情報技術のさらなる進歩に伴って、材料シミュレーションの適用が急激に広がっています。例えば、機能性材料の構造や界面相互作用を評価することで、高次構造形成メカニズムを解析するツールとして、シミュレーションは効果を発揮しています。高分子・繊維材料シミュレーションでは、対象とする時間・空間的スケールによって方法論がある程度確立しており、材料の原子・分子レベルの構造だけでなく、階層的ダイナミクスに基づく機能を解析することが可能となってきました。特に、ナノ構造を構築して、メソ・マクロスケールの機能を発現させることが強く望まれていることから、シミュレーションが材料の時空間精密制御に関する斬新なアイデアを提供することに期待されています。今後、こうした基礎的知見の蓄積によって、材料シミュレーションは現実に得られた観測結果の検証だけでなく、物性予測に基づいた新機能探索の手段になることが見込まれます。

最近、材料科学とデータ科学を融合したマテリアルズ・インフォマティクス(MI)が注目されていることもまた見過ごせません。MIは材料のビックデータや人工知能を駆使して、新材料を探索する新たなアプローチです。2011年以降、MIによる無機材料や低分子有機材料の開発が報告されています。その中でも、固体電解質材料において、物性値や結晶構造だけでなく、シミュレーション結果もデータ解析の対象としたことで新材料発見に成功した事例は大きなインパクトを与えました。現在、高分子・繊維材料におけるMIの適用が模索されていますが、高次構造の違いを反映

した材料物性データをどのように選択・収集するかといった課題を解決しなければなりません。MIによる研究開発の動向から、データ科学とシミュレーションの組合せは有望な材料設計手段になり得ることが予想されます。将来、材料のシミュレーションやデータ解析が繊維科学技術として飛躍的に発展した場合、従来に比べて大幅に短縮された開発期間でこれまでにない超機能性材料の創出が実現可能となるでしょう。繊維科学と情報科学の融合によるモノづくりは乗り越えるべき課題がありますが、成功事例を着実に積み重ねていくことで材料開発の技術基盤を開拓していきたいと強く思います。

宇都 卓也(宮崎大学)

☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆☆

## 高分子構造解析の処方箋

最近、高分子関連の雑誌には毎号、環境・エネルギー問題に関連した論文が多数掲載されていますが、永く座右に備えたいような基礎的な含蓄に富む論文は減少している(または論文数が多すぎて見つけづらい?)ようにも感じます。勿論、これらの問題は人類の未来に係わる極めて重要なテーマですが、すべての研究者がそれのみに注力しては学問の多様性が喪失するのではと不安にもなります。技術革新をもたらす思いがけない発見は、多種多様な研究が展開されていてこそ、なされると考えられます。大きな課題に目を向けつつも、それを咀嚼し自らの研究の基礎と上手く結びつける発想の柔軟性(それと、こじつけにならないような慎重さも)が必要なのだと思います。そのような観点からすると、すこし地味な印象をもたれがちな高分子構造・物性の研究分野は、非常に恵まれているかもしれません。高分子材料の本質は、多様な分子鎖形態、絡み合いや自由体積などの局所構造、それらが生み出す動的な揺らぎや統計的な乱れを含む階層構造にあります。これらを直接観察または仮定無しに定量評価する手法(例えば、蛋白質における単結晶X線構造解析のような手法)は確立されていません。したがって、新材料が創製されるたびにこれらを精密評価する手法・技術が求められるため、常に出口を見据えつつも基礎的検討にも注力できる分野だと思います。また、その複雑さゆえに、構造理解に基づく機能制御を提案できる利点もあります。

高分子特有の曖昧な構造(結晶と異なり原子配列を精密に決定できない構造)を実空間で可視化する技術があれば高分子物性に係わる多くの問題が解決すると期待されますが、やはり動的な揺らぎを含む不均一な階層構造を単一手法により全時空間スケールで捉えるのは極めて困難だと予想されます。平凡な結論ですが、