

第59回 学位取得者 ・ 第16回 学術奨励賞

学位取得者・学術奨励賞受賞者の紹介

みやしろ だいすけ
宮代 大輔

東京理科大学 理学部第二部 物理学科 2001年度 入学
理学研究科 物理学専攻 2006年度 修士課程修了
理学研究科 物理学専攻 2020年度 博士課程修了

オープンイノベーションで迫る カーボンナノチューブの動特性

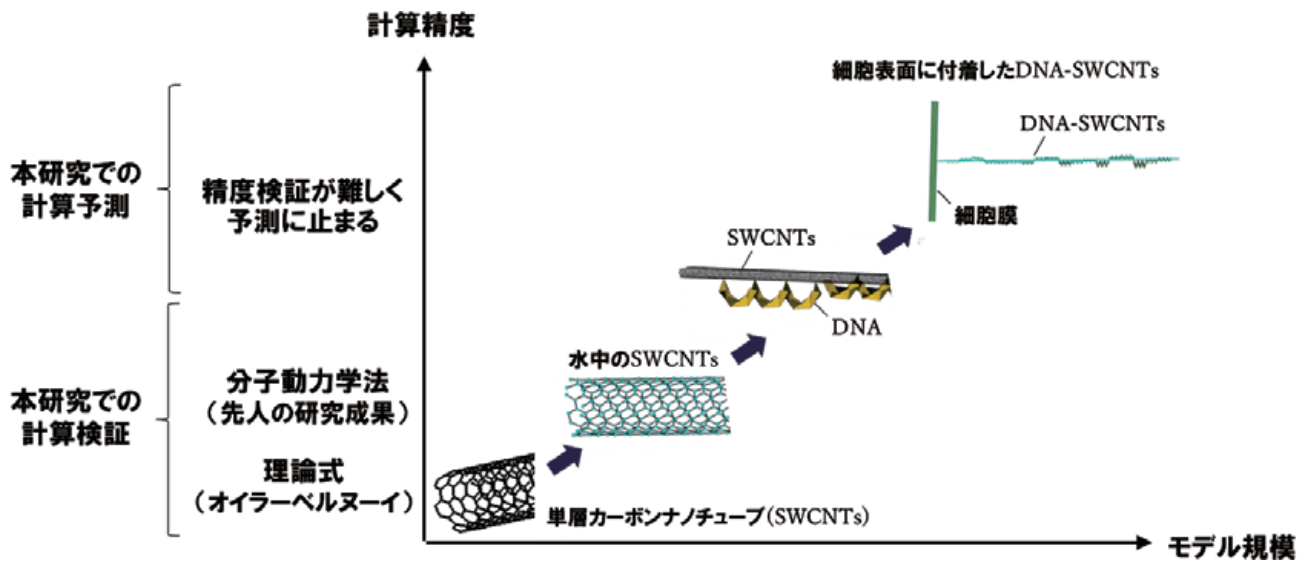
はじめに、第16回学術奨励賞および、本稿執筆の機会を頂き誠に有難うございます。私は、2001年に東京理科大学に入学し、2007年に骨格筋の筋収縮に関する研究テーマで修士課程（理学研究科 山田研究室）を修了しました。その後、株式会社エステックにて、自動車や工業機械の振動騒音に関する技術コンサルティング業務に従事しながら2018年に博士課程に進学し、2021年に「Study of mechanical vibration in single-stranded DNA-wrapped single-walled carbon nanotubes（一本鎖DNAで被覆された単層カーボンナノチューブの力学的振動）」という研究テーマで博士号を取得しました。私の研究は、大学と産業界で得た知見や技術を組み合わせることで実現することができました。これが本稿のタイトルを、“オープンイノベーションで迫る～”とした所以となります。社会人博士として学んだ3年間は、一つのことを突き詰めること、全体を俯瞰して視野を広くもち様々な技術を組み合わせることの重要性を肌で感じる貴重な時間となりました。本稿が、これから新たな挑戦を目指される方々への一助となれば幸いです。

次に、私が社会人博士を始めた経緯をお話します。私は修士修了後も筋収縮に関する研究を続け、論文が採択されたことを機会に、社会人博士にチャレンジすることを決めました。研究テーマであるカーボンナノチューブと出会ったのは、恩師の後任で着任された梅村先生の研究室を訪問したときです。1本の単層カーボンナノチューブ（SWCNTs）は、優れた機械特性、熱電特性、光学特性をもつことが知られていましたが、互いに凝集し易く、1本がもつ優れた性能を発揮できない課題が実用化を妨げていました。従来は、界面活性剤などでSWCNTsを分散していましたが、梅

村研究室では、DNAなど生体材料でSWCNTsを分散し、人体に無害な近赤外領域の光吸収・発光特性を調べる研究を推進していました。これら特性の研究は、SWCNTsをバイオセンサーやドラッグデリバリーといった応用を加速させると期待されています。一方で、SWCNTsは、その長さによって細胞に対する毒性をもつ可能性や、マイクロウェーブの照射によって激しい振動や発火現象を生じるなど安全性に関する課題も多数、報告されていました。私は、分子レベルでのSWCNTsの動的振る舞いや光学特性に加えて、生体材料としての力学特性を工学的に明らかにすることが生物医学分野への応用に不可欠と考えました。この狙いが私の博士論文テーマ¹⁻⁴⁾に繋がることとなります。

社会人としての私は、自動車や工業機械をはじめとする製造業のエンジニアが抱える振動騒音に関する技術課題を実験計測やシミュレーションを用いて解決する支援をしていました。構造や機構を安全かつ機能的に設計するための技術は仕事を通じて理解しているつもりではあったものの、このDNAとSWCNTsの複合体（DNA-SWCNTs）をどう捉えて研究するかに頭を悩ませていました。SWCNTsの生物医学応用を考えると水中の中での動的振る舞いを考えなくてはなりません。これは従来の自動車や機械部品では経験したことのない技術的課題でした。

水中におけるDNA-SWCNTsの先行研究は、既に世界中で報告されていましたが、それら全ては、個々の水分子モデルを表現した分子動力学法による研究です。これらの研究は、水分子とDNA、SWCNTs間の分子間相互作用を精密に計算できる一方で、計算時間が膨大となり5~10 nm位の短いDNA-SWCNTsの振



【図】 本研究で構築した有限要素モデルと精度検証

る舞いを調べることに限定されていました。実際に実験的に観測できる SWCNTs は 100 nm 以上の長さをもちます。また、がん細胞には 100~200 nm の高分子材料が選択的に堆積する効果が知られていますが、ドラッグデリバリーなどの応用を考えると先行研究で研究されている分子モデルよりも 10 倍以上、大規模なモデルを検討しなければなりません。ここで、本当に個々の水分子を考える必要があるのだろうかという発想の転換が必要となりました。水分子の水素結合や分子間力は数ナノメートルの範囲でしか影響しないと考えると、非常に細長い SWCNTs の場合は、水の分子間相互作用よりも SWCNTs に作用する水分子の重さや粘性減衰の影響の方が大きいと考えました。これら仮説から、私が選択したアプローチは、自動車など工業部品の振動特性を調べるために多用される有限要素法 (FEM) になりました。SWCNTs のもつ六員環構造を梁モデルで表現し、その梁に水分子相当の重さを等分散で負荷しました。また SWCNTs が水中で振動するときの減衰は、SWCNTs を円筒とみなしたとき受ける粘性減衰を SWCNTs の長さに応じて一様に作用する構造減衰という形でモデル化することにしました²⁾。私の考案したモデルを実験的、分子動力学的に検証することは実現できませんので、私のモデルを水素結合などの影響が弱くなる 10 nm 程度の長さに短くして分子動力学法の計算結果と一致することを検証しました。最終的には、この DNA が吸着した SWCNTs が細胞膜に突き刺さった状態を有限要素モデルで作成しました⁴⁾。SWCNTs の長さに応じて細胞

膜表面に伝達される振動特性を計算したのですが、当然ながら、この計算結果を検証できる実験は未だ行われておらず、あと 10 年経っても計測できないかもしれません。こんな実験で検証できない様なシミュレーションは意味ないじゃないかと思われるかもしれませんが、私はだからこそ、シミュレーションする意味があると思っています。理論も実験も計算も、それぞれ真理に近づく手段であり、いかにして今、もてる知見を論理的に積み重ね、組み合わせていくかが大切なかと思っています。

私の研究は、多くの研究者が積み重ねた分子レベルの理論、実験、計算の研究と、多くの製造業のエンジニアが積み重ねてきた技術が組み合わせることで実現することができました。さらには、理科大の研究施設や、株式会社エステックでのソフトウェアや計算環境の利用、研究者、同僚、友人など様々な方面からの助言まで、私の研究を支えていた要素を挙げると数え切れません。研究を支えて下さった方々への感謝の意を込めて、今後は、僅かながらでも誰かの研究活動を支え、オープンイノベーションの開拓に貢献できればと思います。

参考文献

- 1) Miyashiro D. *et al.*, Compos. Part B 2019, 173, 106896.
- 2) Miyashiro D. *et al.*, Nanomaterials 2020, 10 (2), 186.
- 3) Miyashiro D. *et al.*, Compos. Part C 2020, 2, 100028.
- 4) Miyashiro D. *et al.*, Forces in Mech. 2021, 2, 100008.