

化学工学
ChEmical
n g i n e e r i n g

人々のために
未来のために
地球のために



—量子・原子・分子レベルから、
生物・地球レベルまで—

大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻 化学工学領域
大阪大学 基礎工学部 化学応用科学科 化学工学コース

Division of **C**hemical **E**ngineering
Graduate **S**chool of **E**ngineering **S**cience
The **U**niversity of **O**saka



<http://www.cheng.es.osaka-u.ac.jp/>

■はじめに

私たちはいま、地球との共生が可能な新しい循環型持続性社会への変革を必要としています。そのためには、物質とエネルギーの変換過程およびその循環利用システムを扱う環境調和型の先端科学技術が必要不可欠です。化学工学はそのような科学技術を扱う学問であり、化学の学問成果を社会に役立てる「化学の工学」という特徴を持っています。

大阪大学で唯一の化学工学系教育組織である、化学工学コース（学部）と化学工学領域（大学院）では、「原子・分子から生物、地球レベルまで」の幅広い視野に立って、持続可能な社会のための物質とエネルギーの生産システム・物質循環システムを構築するという明確な目的意識のもとに、基盤研究の深化と先端学際領域の開拓、およびその理論構築を図りながら、次代を担う人材を養成します。

■目次

沿革／カリキュラム

2

卒業生の進路

3

教員紹介（職位毎の50音順、下表は講座所属教員一覧）

4-29

講座	教授	准教授・講師	助教
反応化学工学講座	西山 憲和 北河 康隆 水垣 共雄	内田 幸明 岸 亮平	三宅 浩史 多田 幸平
環境・エネルギーシステム講座	松林 伸幸	金 鋼 伴 貴彦 満留 敬人	笠原 健人
生物プロセス工学講座	馬越 大 境 慎司	岡本 行広 小嶋 勝	渡邊 望美
太陽エネルギー化学講座 （協力講座）	平井 隆之（※）	白石 康浩 （※※）	菅原 武 （※※）

（※附属太陽エネルギー化学研究センター、※※環境・エネルギーシステム講座）

研究グループ紹介

30-29

沿革

1963年 化学工学科として発足

1996年 大学院重点化に伴う改組により、

学 部：化学応用科学科化学工学コースに

大学院：化学系専攻化学工学分野+機能材料設計学講座に

2001年 太陽エネルギー化学研究センター環境光工学研究分野（新設）が協力講座に

2003年 基礎工学研究科の改組により、

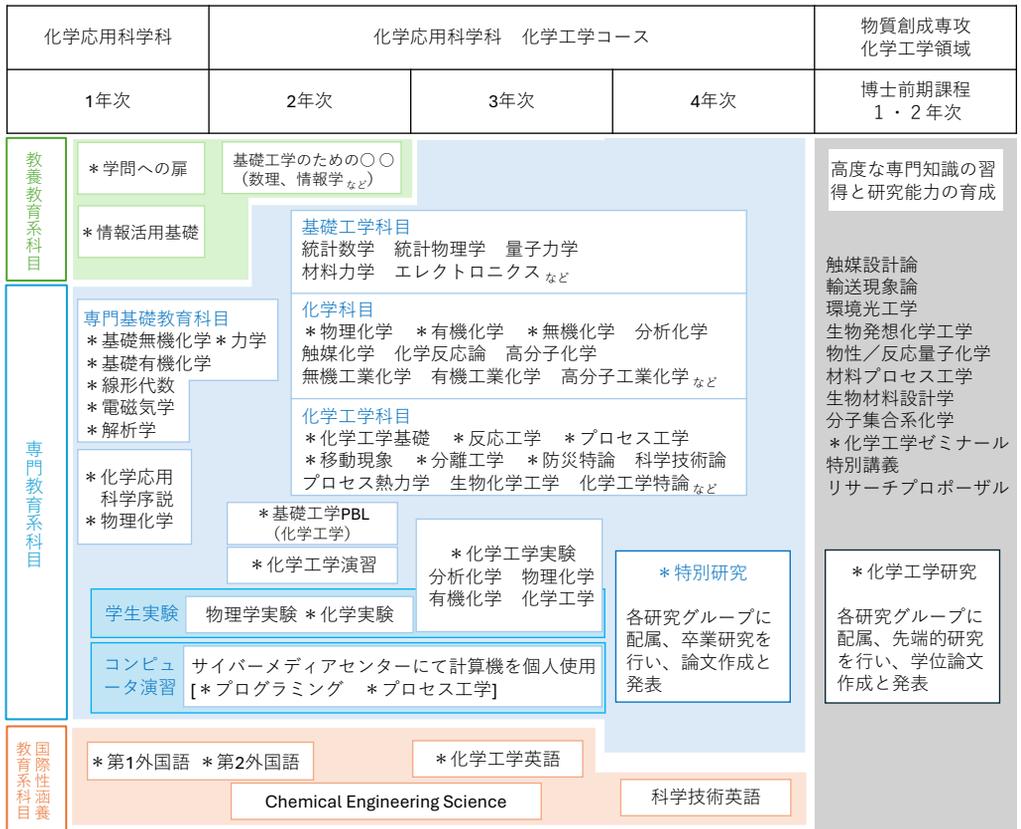
大学院：物質創成専攻化学工学領域に

カリキュラム

化学工学コース（学部）と化学工学領域（大学院）では、学部から大学院まで一貫した教育体制を敷いています。

学部では、化学の基礎学問に加え、化学反応や物質・エネルギーの流れを制御する学問である化学工学を学び、実験・演習を通じてこれらの知識を確かなものとし、4年生は、未知の研究課題に取り組む特別研究を全員が個別に実施します。

大学院では、全講義が選択科目であり、必要な高度専門知識を自ら選び、そして先端的研究の遂行と学会等での発表を通じて研究者としての能力の育成を図ります。



* 必修科目

■ 卒業生の進路

一般企業

アイテック、旭化成、旭化成建材、アップ教育企画、Atomic、アルトナー、出光興産、エア・リキードグローバルE&Cソリューションズジャパン、エーザイ、AGC、江崎グリコ、NTTデータMSE、ENEOS、大阪ガス、大阪厚生信用金庫、大阪モノレール、王子ホールディングス、大塚製薬、オプテージ、オリエント化学工業、花王、カネカ、川崎化成工業、川崎重工業、関西電力、関電エネルギーソリューション、キッコーマン、キヤノン、京都府庁、麒麟、キンセイマテック、クラレ、広栄化学、神戸製鋼所、サントリー、三洋化成工業、ジーシー、ジーユー、JXTGエネルギー（現ENEOS）、JFEスチール、四国電力送配電、資生堂、島津製作所、シマノ、シャープ、昭和電工（現レゾナック）、信越化学工業、シンプルクス・ホールディングス、数理技研、住友化学、住友金属鉱山、住友精化、住友電気工業、住友ベークライト、積水化学工業、双日、ソニー、ソニーセミコンダクタソリューションズ、ダイキン工業、ダイコク電機、ダイセル、大日本住友製薬（現住友ファーマ）、大和証券、ダウ・ケミカル日本、中部電力ミライズ、蝶理、千代田化工建設、DIC、帝人、テレビ西日本、デロイトトーマツファイナンシャルアドバイザー、デンカ、デンソー、東亜合成、東ソー、東洋エン지니어リング、東洋合成工業、東洋紡、東レ、トクヤマ、日油、日揮グローバル、日産化学、日鉄エンジニアリング、日鉄ソリューションズ、日本コムシス、日本触媒、日本製鉄、日本製粉グループ、日本ゼオン、日本電気通信システム、日本取引所グループ、野村総合研究所、野村不動産、ハウス食品、パナソニック、パナソニックインダストリー、パナソニックエナジー、パナソニックオペレーショナルエクセレンス、パナソニックホームズ、浜松ホトニクス、濱本ジェネラルコーポレーション、阪和興業、P&Gジャパン、PwC Japan、PwCコンサルティング、肥後銀行、日立グローバルライフソリューションズ、日立造船（現カナデビア）、姫路市、ファイザー、不二製油、富士通、富士フイルム、防衛省、ポーラ化成工業、ポリプラスチックス、マグネスケール、丸善石油化学、みずほ銀行、三井化学、三井住友海上火災保険、三菱ガス化学、三菱ケミカル、三菱重工業、三菱地所、三菱UFJ銀行、ミネベアミツミ、明治安田生命保険、モンスターラボ、UBE、横河電機、楽天グループ、リファインホールディングス、レゾナックほか

研究教育機関（大学院生）

大阪大学、北海道大学、東北大学、東京大学、東京工業大学、千葉大学、名古屋大学、金沢大学、京都大学、岐阜大学、大阪府立大学、兵庫県立大、岡山大学、山口大学、奈良高専、大阪高専、和歌山高専、鹿児島大学、神戸大学、筑波大学、東京理科大学、Mahidol University、Universitas Brawijaya、豊田高専、分子科学研究所、理化学研究所、産業技術総合研究所、宇宙航空研究開発機構、相模中央化学研究所、科学技術振興財団、日本学術振興会特別研究員 ほか

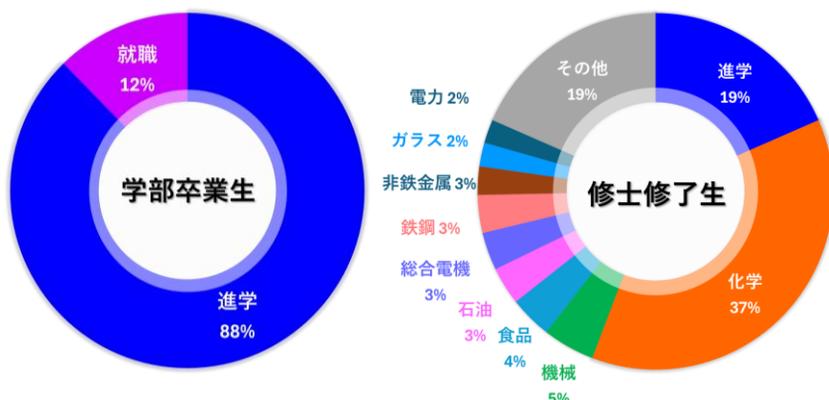


図 学部卒業生の進路(左図)および修士修了生の進路(右図)
(2019-2024年度の統計)

最新の情報はホームページで→
<http://www.cheng.es.osaka-u.ac.jp/exam/employment.html>



反応を含むシステム-その複雑性を制御するために-



教授	西山 憲和	n.nishiyama.es@osaka-u.ac.jp
准教授	内田 幸明	y.uchida.es@osaka-u.ac.jp
助教	三宅 浩史	k.miyake.es@osaka-u.ac.jp

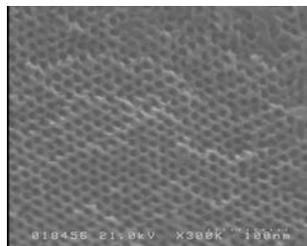
地球規模のエネルギー・環境問題の解決には、現代技術の複雑性をうまく制御するための体系的なアプローチが不可欠です。化学工学、反応工学はその先駆的な成果であるとの認識から、より幅広い分野への展開を試みています。具体的には、(1)分子レベルからコロイド粒子のレベルに至る各階層における「自己組織化」の物理化学に関する研究。自己組織化を利用した①液晶、②コロイド分散系、③有機-無機ナノ複合体の構造制御。(2) ナノ空間材料をマイクロな化学装置と捉え、新しい反応・分離プロセスの開発を目指す研究。(3) ソフトマターを分子レベルで設計するための新たな分子技術の開発を目指す研究、を行っています。

● ナノ空間材料の構造制御と反応・分離プロセスの開発

ナノ空間材料の合成・構造制御



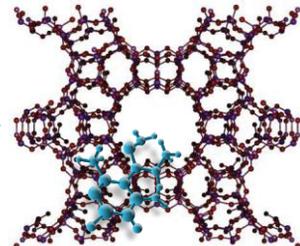
自己組織化



規則性ナノ空間材料

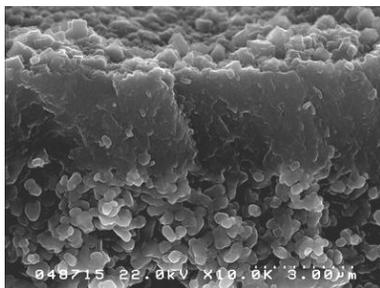


ナノ空間材料を用いた反応・分離

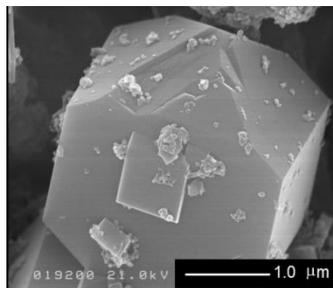


ナノ反応工学

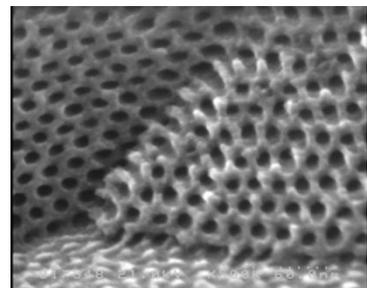
物質科学と反応操作・分離操作を融合させた新しい化学工学の創成が必要であると考え、自己組織化・自己集合を利用した「ナノ空間材料の合成・構造制御」および「ナノ空間の物質移動が関与する反応操作・分離操作」に関する研究開発を行っています。



ゼオライト分離膜

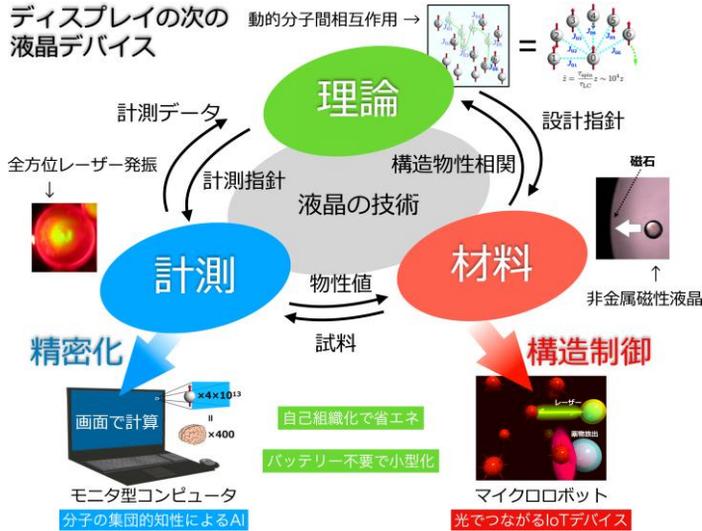


コア・シェル構造ゼオライト触媒

規則性メソポーラスシリカ膜
(低屈折率膜)

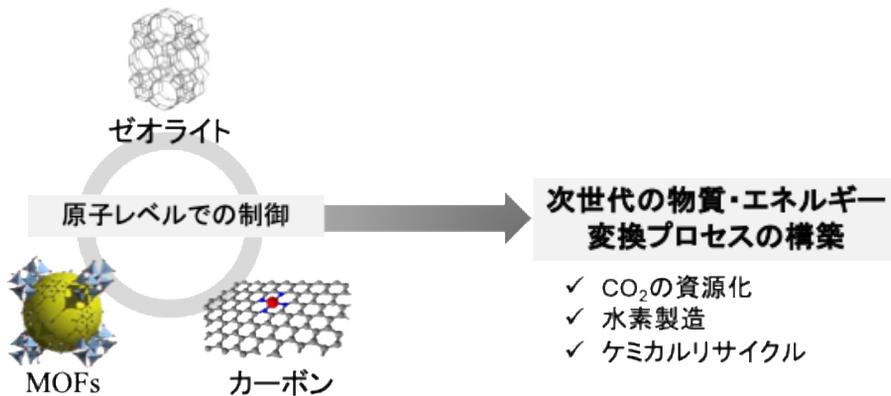
● 液晶材料の新機能創製

液晶は液体と結晶の間の「中間相」であり、結晶の「秩序」と液体の「流動性」を併せ持っているため、独特の電気・磁気・光学的性質を示します。液晶ディスプレイに似たデバイスで計算を行うAIや、光でつながるIoTデバイスとしてのマイクロロボットなど、様々な「ディスプレイの次の液晶デバイス」を目指して研究を進めています。



● 機能性材料の原子レベルでの設計による高機能化

原子レベルでの局所構造の違いにより、材料の機能が大きく変わることがあります。言い換えれば、原子レベルで巧みに材料を設計することができれば、高機能化や潜在的な機能の発現が可能となります。そこで、機能性材料（主にゼオライト、カーボン、MOFなど）に対して、原子レベルでの設計手法を開発し、次世代の物質・エネルギー変換プロセスの構築に向けて、高機能化や機能の発現を図っています。



研究室Q&A

Q 研究室のアピールポイントは？

A ミクロからマクロまで幅広いスケールのテーマを研究対象としています。これらは一見別々のテーマのように見えますが、同じ反応工学の切り口で取り組むことができます。これは化学工学の強みと言えます。

A 有機材料から無機材料、自己集合体ソフトマターから無機多孔体まで様々な機能物質の合成と機能発現について研究を展開しています。

Q 求める学生像

A 自分の研究範囲にとらわれず、様々なことに興味をもって取り組む姿勢をもっている人を求めていますし、そのような人材を育てることを目標としています。

Q 研究活動（教育）の目標は？

A 研究活動を通じて各自の能力を最大限に引き出すとともに、学生には社会人（科学技術者）としての素養を身につけさせることを目標としています。

量子化学による機能発現機構解明と材料設計



教授	北河 康隆	kitagawa.yasutaka.es@osaka-u.ac.jp
准教授	岸 亮平	kishi.ryohei.es@osaka-u.ac.jp
助教	多田 幸平	tada.kohei.es@osaka-u.ac.jp

本研究室では分子性機能材料に注目し、量子化学を中心とした様々な理論（古典力学、電磁気学、統計力学など）とそれらに基づいた計算機シミュレーションにより、機能発現原理を理解するという基礎的な視点から研究を行っています。その際、分子や分子集合体の構造と電子状態、そして機能の相関を、マテリアルズ・インフォマティクス（MI）などの情報科学の理論や技術も積極的に導入することにより明らかにし、その知見から分子性機能材料の設計指針や、ひいては具体的な材料を提案する研究を行っています。また、電子の電荷のみならずスピンの注目し、それに起因する様々な機能の研究を行っています。このような、電子のスピンの現れてくる性質を「開殻性」と呼びますが、この開殻性を生かした新しい機能性材料を創成しようとする点に、研究の特徴があります。加えて、分子の光励起状態や電気伝導性、そして磁性など、様々な機能を扱うとともに、単一分子のみならず、その集積系や結晶、あるいは界面上の分子や金属酵素の活性中心なども、研究対象としています。そしてこれらの研究を通じ、物質材料科学における理論の深化や新概念の創出までも行うことにより、「科学」と「技術」の融合に寄与し、科学技術の根本的な開発とそれによる人類の真の文化を創造することを最終的な目標としています。

● 量子化学と中心とした理論と計算機シミュレーションに基づいた機能発現機構解明と分子性機能材料設計、そして、物質材料科学における理論の深化や新概念の創出

現在、人類が抱える大きな問題 ー例えば環境問題やエネルギー問題ー の解決のため、効率的な物質変換、エネルギー変換やエネルギー貯蔵を実現する革新的な機能性材料の創成が急務の課題となっています。近年では原子や分子サイズレベルでの構造や特徴を利用した材料の研究が盛んになっており、特に、分子の機能を有効に活用した**分子性機能材料**が注目を集めています。

分子の機能は、その構造や、周囲の環境（溶媒、界面、タンパク場など）、そして外場（磁場や電場など）により変化することが知られています。したがって、分子ならびに使用環境を、目的に合わせてデザインすることにより、画期的な機能性材料が実現できる可能性があります。しかし、分子やそれらの複合体・集集体における機能発現原理は未だ十分に解明されておらず、戦略的かつ合理的な材料設計はできません。言い換えるならば、もしこれらの機能発現機構を明らかにすることができれば、これまでになかった新しい材料の設計を、原理に則ってボトムアップ的に行うことが可能になると考えられます。

分子性機能材料の特性は、主として構成分子の電子状態に起因していることから、その理解には量子論が必須です。つまり、材料設計には量子論に立脚した原理の理解が必要となります。本研究室ではこれらの構成要素となる分子に特に注目し、**量子化学理論を中心とした様々な理論（古典力学、電磁気学、統計力学など）と、それらに基づいた計算機シミュレーションを実行することにより、機能発現原理を理解する**という基礎的な視点から研究を行っています。その際、分子や分子集合体の**構造と電子状態、そして機能の相関**を、マテリアルズ・インフォマティクス（MI）などの情報科学の理論や技術も積極的に導入することにより明らかにし、その知見から**分子性機能材料の設計指針や、ひいては具体的な材料を提案する**研究を行っています。

当研究室の研究の特徴として、電子の電荷のみならずスピンもつ役割にも注目し、それに起因する様々な機能に注目している点があります。このように、電子のスピンの現れてくる性質を「開殻性」と呼びますが、この**開殻性を生かすことにより、これまでになかった新しい機能や物質を創成する**ことを目指しています。「開殻性」を考慮した計算機シミュレーションを正しく実行し解析を行い、機能発現原理の解明から分子設計までを一貫して行っている理論研究グループは、世界的に見ても多くはありません。

加えて、当研究室は扱っている対象が広いという特徴もあります。例えば、周期律表の多くの元素を扱っており、金属イオンと有機物（ π 共役化合物）とを組み合わせた**有機・無機ハイブリッド化合物**も研究しています。また、分子の**光励起状態や電気伝導性、反応性、そして磁性**など、様々な機能を扱うとともに、**単一分子のみならず、その集積系や結晶、あるいは界面上の分子や金属酵素の活性中心**なども、研究対象としています。

以上のように、本研究室では量子化学を中心とした理論と計算機シミュレーションに基づいた、分子性機能材料の機構解明、設計指針の構築、そして具体的な提案までを行います。その研究を通じ、**物質材料科学における理論の深化や新概念の創出も行うことにより、「科学」と「技術」の融合に寄与し、科学技術の根本的な開発とそれによる人類の真の文化を創造すること最終目標**としています。

量子化学工学グループでは、分子性機能材料を対象とし、量子化学を中心とした理論とそれに基づいた計算機シミュレーションを通じて、機能発現原理の解明、設計指針の構築や具体的な材料のデザイン、ひいては理論の深化や新概念の創出を行っています。具体的には

- ・光物性（キーワード：非線形光学材料／一重項励起子分裂／蛍光・りん光材料）
- ・反応性（キーワード：触媒／電池／酸化還元／生物無機）
- ・磁性（キーワード：単分子メモリ／スピントロニクス／量子ビット）
- ・伝導性（キーワード：単分子エレクトロニクス）

などを中心として研究を行っております。またこれらの性質を組み合わせた複合機能材料も対象としています。

単一分子の特性に加え、集合・集積した際の特性、界面に担持された際の特性、結晶化した際の特性、そして電場や磁場などの外場が加わった際の特性変化を、量子化学を中心とした理論とコンピュータシミュレーション、そしてマテリアルズ・インフォマティクス（MI）などの情報科学の方法論を用いて明らかにし、機能発現原理解明から材料設計指針の構築、そして材料設計までを一貫して行っています。



研究室Q&A

Q 理論的に設計された分子をどのように実現しますか？

A 本研究室は理論とシミュレーションに基づく研究を行っており、合成実験や測定実験は行っておりません。したがって、シミュレーションにより求められた化合物を実際に合成する研究は行っておりません。その代わりに、世界中の実験研究者と多くの共同研究を行っています。実験により得られた未知なる現象の原因を共に明らかにしたり、あるいは理論研究で得られた情報をフィードバックすることにより、原理解明から新規分子性機能材料の実現までを共に目指しております。

Q 研究内容が社会に与える影響は？

A これまでに無かった、あるいはこれまでの性質を凌駕する機能性を持つ材料の創成は、未来社会の科学技術の根幹をなすものです。そのような材料の実現には、量子化学理論と計算機シミュレーションによる画期的な設計が鍵となると考えています。その意味で、本研究は将来の科学技術の発展に寄与し、大きなインパクトを与えうるものであると考えます。

環境調和型触媒の開発により持続可能な社会へ！



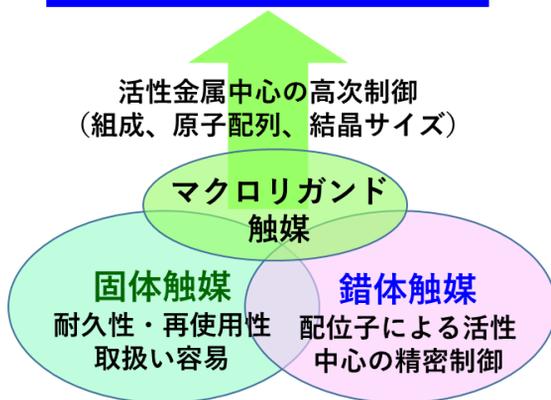
教授 水垣 共雄 mizugaki.tomoo.es@osaka-u.ac.jp

准教授 満留 敬人 t.mitsudome.es@osaka-u.ac.jp

(環境・エネルギーシステム講座 グリーン化学工学グループ)

持続可能な社会の実現が求められる現代において、資源やエネルギーを有効利用したモノづくりは、化学工業における最重要課題です。その中で「触媒」は、物質やエネルギーの変換を担うキーマテリアルであり、現代の化学プロセスのほとんどは、触媒反応により成り立っています。私たちは、環境にやさしいモノづくりを可能にする触媒技術の開発を通して、環境・資源・エネルギー問題の解決を目指しています。その戦略として、有機化学、無機化学をもとに、**金属の機能を最大限に発現する革新的な新規触媒の開発**を行っています。さらに、その触媒を用いて選択的な還元反応や酸化反応、新規結合生成や切断反応を実現し、**再生可能資源や廃プラスチックの高付加価値化、省エネルギー型のプロセス**へとつなげ、環境に優しい物質変換プロセスの創出を世界に向けて発信します。

● 次世代型の高次制御された「超高機能触媒」の開発

次世代型の高機能性の発現
超機能性触媒の開発

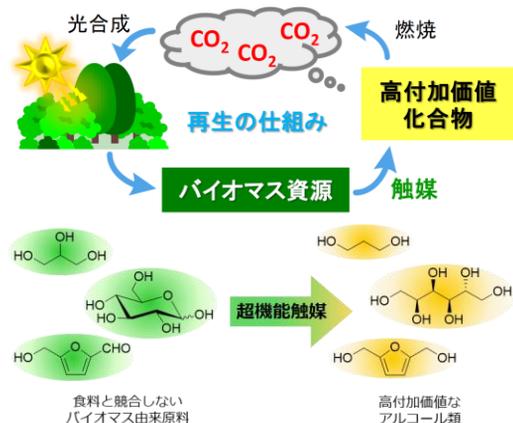
これまでの触媒開発は、金属微粒子を担体に固定した固体触媒や、金属錯体を用いた錯体触媒を中心に進められてきました。固体触媒は「高い耐久性と再使用性」を、錯体触媒は「活性中心金属の精密な制御」を可能にするという利点があります。私たちは、これら二つの特徴を融合し、活性中心金属種と反応場となる担体表面（マクロリガンド）との協奏的作用を活用することで、高効率な反応を実現する「マクロリガンド触媒」の開発を進めてきました。さらにこの設計概念を発展させ、活性中心となる金属ナノ結晶の組成・構造・サイズを精密に制御するとともに、マクロリガンドと複合化することで、高次構造を有する次世代型の超高機能触媒の開発に取り組んでいます。

単核・複核種やナノ粒子など、活性中心の構造制御は、触媒反応の反応性を左右する重要な因子です。また、担体表面は金属種の近傍における反応場として作用し、金属との協奏効果により特異な触媒機能を引き出します。私たちは、金属活性中心の組成だけでなく、原子配列や結晶サイズを含めた構造全体をナノスケールで精密に制御し、担体との融合による新たな協奏効果を設計に取り入れることで、これまでになかった超高活性・高選択性を発現する触媒の創出を目指しています。

● 資源循環型触媒プロセスの開発

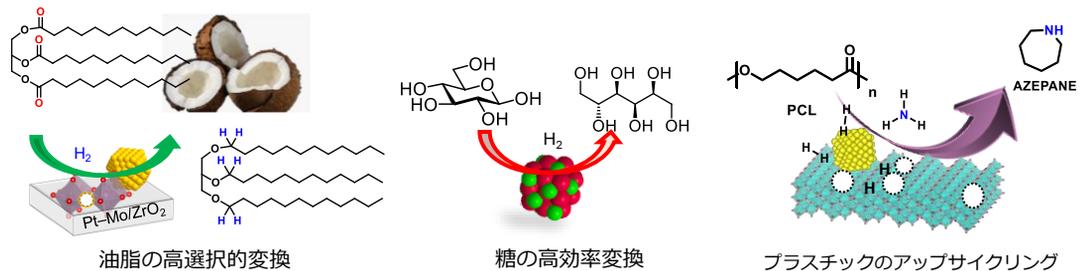
これまでの化学工業は、石油や石炭など化石資源由来の炭化水素原料を基盤として発展してきました。しかし、現在はCO₂排出規制などの環境面の観点や化石資源の枯渇問題から、カーボンニュートラルな再生可能資源や未利用資源を有効活用する持続可能な循環型化学プロセスの構築が求められています。

私たちは、再生可能なバイオマス資源を効率的に有用化合物へと変換する触媒を開発することで、この課題に取り組んでいます。例えば、精密設計したバイメタル触媒を用いて、食物と競合しないバイオマス資源であるグリセリン等を水素化し、種々のジオール類を合成することに成功しました。開発した触媒は世界最高性能を有し、実際のプロセスでの利用に向けた更なる検討を行っています。



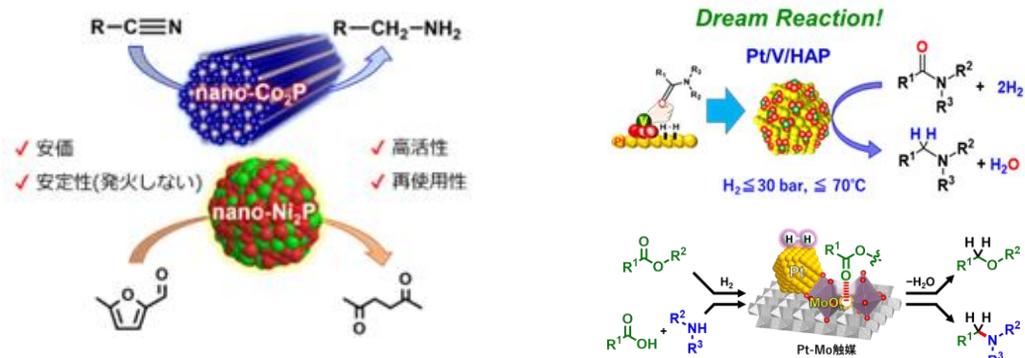
バイオマス資源の有効利用やポリマー分解による資源リサイクル

資源循環利用の研究として、バイオマス由来の糖の変換や、グリセロール、フラン化合物からポリマー原料として有用なジオールへの水素化反応を高効率で進行させる高機能触媒を開発しました。また、植物性油脂やそこから得られる長鎖脂肪酸や脂肪酸エステルなどから持続可能な航空機燃料 (SAF) を合成する触媒の開発も行っています。さらに、近年、問題になっている廃プラスチック、ポリマーを分解し、有用化成品原料へと再利用するポリマーアップサイクルのための高効率な触媒システムの開発にも取り組んでいます。



● 新規なナノ構造体の合成と触媒反応へのチャレンジ

ユニークな構造をもつナノ構造体の合成および精密構造制御と、構造制御により導かれる特異な触媒反応の開拓へ挑戦しています。金属ナノ粒子の表面をさらに小さな金属酸化物種で修飾した新規ナノ粒子の合成や配位子となるヘテロ原子が金属結晶構造内に精密配列したリン化金属ナノ結晶の開発に成功し、理想的な還元剤である分子状水素 (H_2) を用いた高難度選択的還元反応の固定触媒となることを見出しています。



水素化反応において“発火性がなく、高活性な”非貴金属合金ナノ粒子触媒（リン化コバルト、リン化ニッケル）の開発に成功しました。ニトリルあるいはカルボニル化合物の水素化反応において、既存の触媒の数十～数百倍の触媒活性を示しました。

白金ナノ粒子をバナジウム酸化物クラスターやモリブデン酸化物で修飾することで、白金の水素化活性と金属酸化物クラスターのルイス酸性性を利用し、夢の反応とされるアミドからアミンやエステルからエーテルへの温和な条件での選択的還元の世界で初めて成功しました。

研究室Q&A

Q 研究活動の目的は？

A 持続可能な社会の構築につながる真に環境調和な触媒プロセスを提案することです。新しい触媒の設計指針やその駆動原理を世界へ強く積極的に情報発信します。また、世界中の化学者からフィードバックを受け、提案する原理・概念をより発展させたいと考えています。

Q 研究内容と社会の関わりは？

A 高機能な触媒は、化学プロセスを根幹から一新するポテンシャルをもっています。学術面での深化とともに、その応用を目指した産学の共同研究や社会実装に向けても取り組んでいます。

Q 教育方針は？

A 今、世界は大きく揺れ動いています。だからこそ、揺るがない、真の実力を持った人材を育成したいと思っています。流行に惑わされることなく、自ら時代を開拓していくリーダー、持続可能な社会の構築に向けて新しい科学技術や社会ネットワークを生み出させる人材を育てていきたいです。

Q どんな学生に来てもらいたい？

A 好奇心をもち、自分の力を伸ばしたい、研究に意欲のある元気な学生と一緒に粘り強く研究し、共に発見の感動を味わいたいと思っています。私たちはいつでもみなさんの挑戦を待っています。

分子集合系の多彩な機能-発現原理の解明と応用-

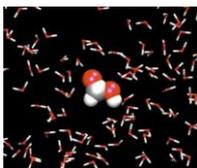
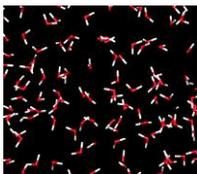
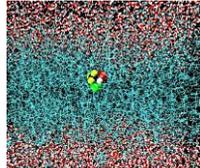
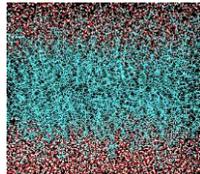
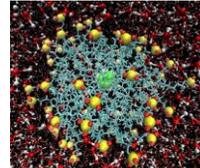
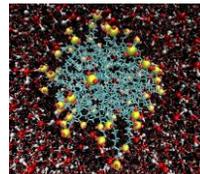
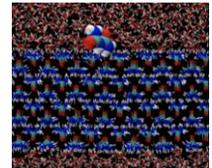
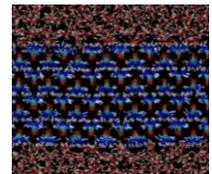


教授	松林 伸幸	nobuyuki@cheng.es.osaka-u.ac.jp
准教授	金 鋼	kk@cheng.es.osaka-u.ac.jp
助教	笠原 健人	kasahara@cheng.es.osaka-u.ac.jp

分子が集合系を構成すると、物質混合比・温度・圧力のような条件に応じて、多彩な機能の発現に至ります。本研究グループは、溶液・ミセル・脂質膜・ポリマー・ガラスなど、秩序とゆらぎを併せ持つソフトな分子集合系を研究対象として、多彩な機能発現を導く統一的原理を解明し、個々の分子の特性に立脚して集合系全体の機能を設計するための指針の構築を目指しています。

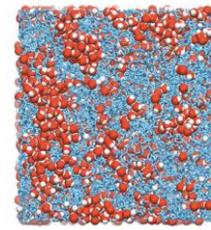
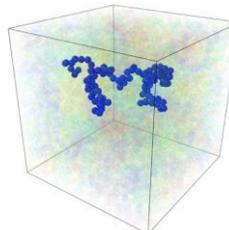
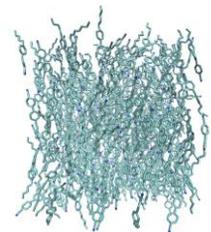
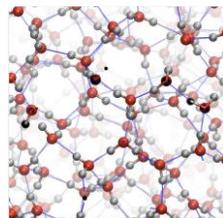
● 溶媒和概念の普遍化と分子集合系の物質分配機能の横断的解析

分子集合系に最初から存在するものを「溶媒」とみなし、後から入ってくるものを「溶質」として、分子集合系における物質分配を「溶媒和」と捉え直します。この概念に基づいて溶液統計力学理論と分子シミュレーション技法の新規構築と拡張を行い、通常の溶液・超臨界流体・イオン液体・ポリマーへの物質溶解のみならず、脂質膜やミセル、タンパク質への分子（基質）の分配（結合）、気液および固液界面への吸着、さらには、電子の付加（還元）までを横断的に解析しています。

均一系での
溶媒和脂質膜への分
子の分配ミセルへの分子の分
配(可溶化)界面への物
理吸着

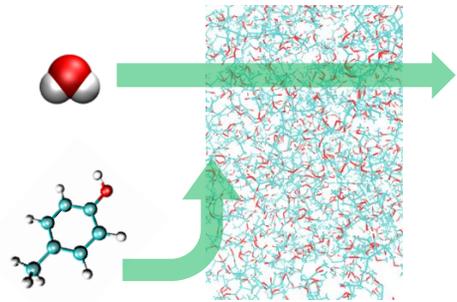
● 分子集合系が示す遅いダイナミクスとマルチスケール性の解析

高分子・液晶・コロイド・ガラスなどソフトな分子集合系では、分子スケールと巨視的スケールの中間に位置するメソスケール (10^{-6} m) において、多くの分子が関与する協働的運動を発現します。それに伴い特徴的な時間スケールは分子スケールより遅くなり ($10^{-6} \sim 10^{-3}$ s)、分子集合系の機能発現の解明および制御には遅いダイナミクスの普遍性を抽出する必要があります。そこで、分子シミュレーションを中心に、連続体力学・物性論・化学反応論などに基づいたマルチスケール性の解析をしています。また、分子シミュレーションと機械学習を連携させた特徴量抽出する手法の開発もおこなっています。



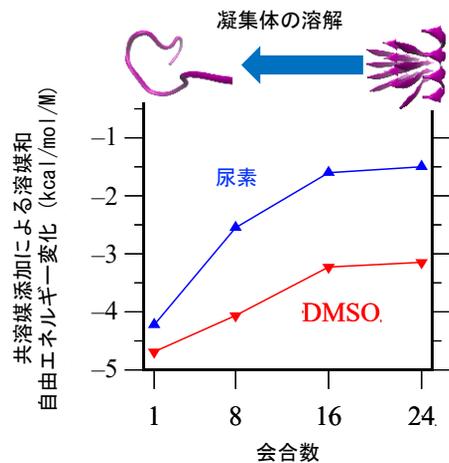
● ポリマー材料の吸収と吸着の機能

ポリマー材料は、分離・吸水・撥水・防汚・ガスバリアなど様々な機能を持ちます。ポリマーの機能はその分子構造だけではなく集合様態にも依存し、現実の設計では共重合化・含水・ブレンド化などを取り入れると無数の可能性があるためスクリーニングが欠かせません。原子レベルの相互作用の知見に立脚し、溶液理論と分子シミュレーションを十全に活用するスクリーニング法の開発を行っています。



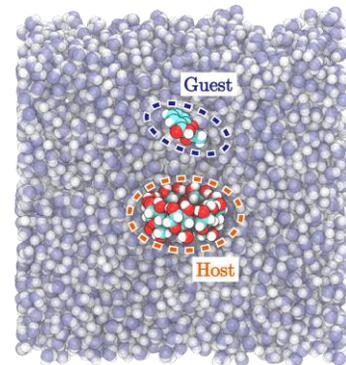
● 溶媒効果を用いた機能性分子の構造制御

タンパク質のような機能性分子の構造は、溶媒と（自由）エネルギーの交換をしながら大きくゆらいでいます。そこで、溶媒とエネルギーの変調が共溶媒を加えるなどの比較的安価な操作で可能であることに着目し、溶媒効果によって機能性分子の構造および集合様態の制御を行うための指針を溶液理論と大規模分子シミュレーションを用いて探索し、多成分からなる溶媒効果を用いた生体関連分子の機能制御を目指しています。



● 分子会合ダイナミクスの系統的解析

シクロデキストリンの小分子取り込み(包接)やタンパク質と基質の結合など分子会合は多くの分子集合系における基礎的な化学過程です。分子会合の理解と制御を実現する上で会合過程の時間スケールを規定する物理化学的要素を同定することが重要です。2分子反応理論と分子シミュレーションの連携により会合過程のダイナミクスに対する系統的解析を実現する独自の方法論の開発と応用を行なっています。



研究室Q&A

Q 研究室のアピールポイントは？

A 多種多様な分子集合系を横断的に研究し、機能発現の統一的原理の解明を目指しています。そのため新しい理論計算手法を独自に開発するとともに、多くの共同研究を行っています。

Q 研究活動の目標は？

A 常に原理に立ち戻りつつ、現実系を丹念に解析しています。このような研究活動を通して、全体を見渡しつつも細部をしっかりと仕上げる人材、地に足をつけて最先端課題に取り組むことのできる人材の育成に寄与したいと考えています。

Q 研究内容と社会との関わりは？

A 本グループで開発した理論計算手法は、いくつもの企業で使われています。いわゆる「役に立つこと」と「すぐには役に立たないこと」の両方に寄与できるものこそが真の基礎であると考えており、その意味での基礎を社会に発信しています。

輸送現象の制御による新パラダイムの構築



講師

伴貴彦

ban.takahiko.es@osaka-u.ac.jp

<http://www.cheng.es.osaka-u.ac.jp/okanolab/home.html>

我々は、熱力学と輸送現象が融合した環境およびエネルギーに関する研究に携わっています。さらに現代のエネルギー技術に関わる基礎研究として、平衡から遠く離れた状態で、複数の非可逆過程が複合化した輸送現象で成立する原理の探求を行っています。非平衡開放系に一般的に成立する原理は現在のところ確立されておりませんが、『**エントロピー生成速度最大原理**』がその有力な候補として挙げられ、新しいパラダイムの確立を目指し、実験および理論的に研究を続けています。また新しいエネルギー変換技術として**アクティブマター**を用いた環境発電、環境浄化作用、有価物質の回収、運動認識型化学センサーや標的指向型薬物送達または、地中からの石油の増進回収など様々な応用技術の研究を行っています。

- 熱力学力によって流動を制する

水やCO₂を地中に圧入し、貯留層内に残り残された石油を回収する技術は、化石燃料の有効活用だけでなく、CCUS技術としても注目を集めていますが、多孔質媒体の混合領域では粘度差駆動型のSaffman-Taylor不安定性が発生し、石油回収率の低下が問題となっています。

我々は、熱力学力を制御し自己駆動するアクティブ流体によって、Saffman-Taylor不安定性を解消し、回収率を20~30%向上することに世界で初めて成功しました。経済効果を簡単に試算すると、**回収率をたった1%向上させるだけで**、年間約3.7億バレル以上の生産高となり、大体1バレル80ドル程度で取引されているため、現在のレートによると日本円にして**4.5兆円以上の経済効果**となります。これまでの成果は、アメリカ科学振興協会が提供する世界最大規模のオンラインニュースサービス【**EurekAlert**】にいくつか掲載されました。

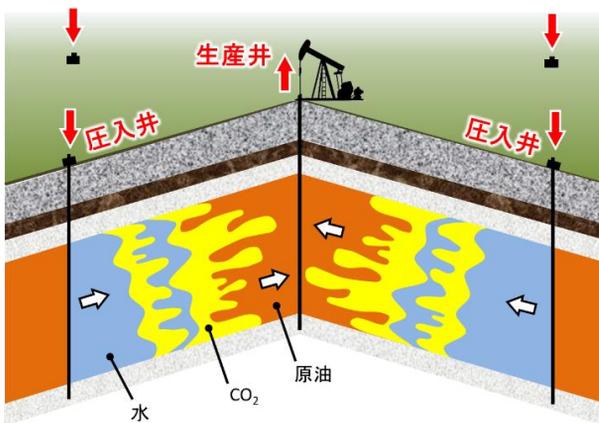


図1. CO₂の貯留を利用した石油増進回収技術

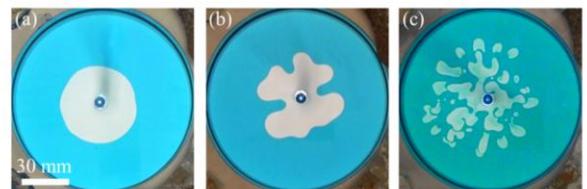
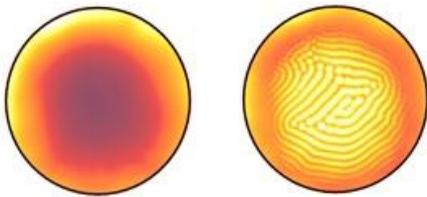


図2. 液液間の混和性を熱力学的に制御し、水（白色）の流動性を増し、液液間の揺らぎを抑制し、石油（青色）の回収率を増加させます。相分離現象を伴うSaffman-Taylor不安定に関する新規な界面流動不安定現象の研究によって、難関で狭き門の**日本流体力学論文賞**を受賞。**日経新聞の電子版（2022年06月02日）** & **（2023年5月16日）**に“効率的なCO₂地中貯留を目指して流れを化学の力で制御する”と題した記事が掲載。

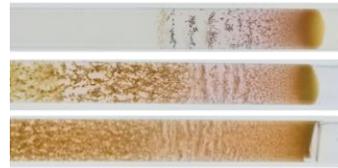
● エントロピーによって運動量・エネルギー・物質輸送を制する

平衡状態は、温度を関数とした化学ポテンシャルによって、相として規定することができ、エントロピーが最大となるように系の状態は自発変化しますが、非平衡状態では、示強変数が時空間的に変化するため、状態を規定することができず、状態遷移を行う選択律を現時点では確立できていません。そのような背景の下、我々は非平衡状態を規定し、相転移の選択律として **エントロピー生成速度最大原理**が、最も有効であることを、様々な実験および数値計算を駆使して実証してきました。熱駆動と運動量駆動の二つの非可逆過程が複合化した輸送現象である Rayleigh-Bénard対流、拡散駆動と運動量駆動が複合化した輸送現象であるMarangoni対流や Saffman-Taylor不安定性、熱力学不安定性と結晶成長が複合化したLiesegang現象など様々な **輸送現象はすべてエントロピーで制御**できます。エントロピー生成速度が最大となるように輸送過程が変質し、状態が遷移することが分かってきました。熱力学流束と推進力の関係を用いれば非平衡状態が平衡状態の相のように規定することを世界で初めて明らかにし、選択律としてエントロピー生成速度が、最も重要であることを発見しました。

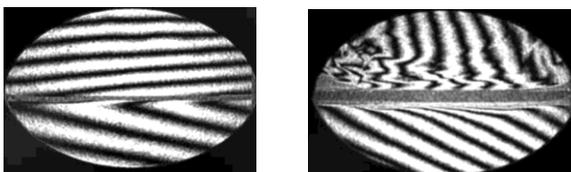
➤ 熱伝導からRayleigh-Bénard対流



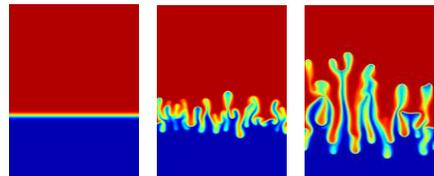
➤ Liesegang帯から樹状構造



➤ 分子拡散からMarangoni対流



➤ 拡散界面からSaffman-Taylor不安定性



研究室Q&A

Q 研究室のアピールポイントは何か？

A この世に運動量・エネルギー・物質輸送が関わっていない現象や工業プロセスは存在しません。そのため、当研究室の研究内容は上記以外に、環状磁場に閉じ込められたプラズマの構造相転移やアクティブマターを用いた群衆退避行動の検証からワインに適した美味しいグラスの開発に太陽活動と気象現象の関係や哺乳類の概日リズムに関する研究など、多岐に亘ります。

Q いい企業に就職するためにこの研究室は有利なのか？

A 企業が求める人材は、“化学工学者”としての専門的知識と応用能力を備えた人物です。当研究室の研究および教育を通じて、“ものづくり”に関連する業務を自己の判断で責任を持って遂行する能力が、学生に身につけています。研究テーマに直結する業種に就職した卒業生もいれば、全く異なる業種に就職した卒業生がいるという実績が、それを保証しています。

Bio-Inspired化学工学の創成に向けた挑戦



教授 馬越 大 umakoshi.hiroshi.es@osaka-u.ac.jp

准教授 岡本 行広 okamoto.yukihiro.es@osaka-u.ac.jp

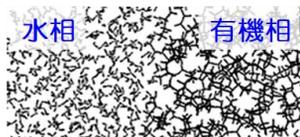
助教 渡邊 望美 no.watanabe.es@osaka-u.ac.jp

「生体系」を発想の原点とし、「リポソーム膜(自己組織系)」を分子の認識・変換の「場」として活用するBio-Inspired化学工学の創成に向けて挑戦しています。自己組織系をキーワードとして、両親媒性分子(界面活性剤)から成る自己組織膜を「Bio-Inspired膜」と位置づけ、自己組織化膜を「場」とした「分子の振舞い」について解明し、将来の科学技術の発展に貢献したいと考えています。

● 自己組織化膜のナノ・マイクロ物性評価

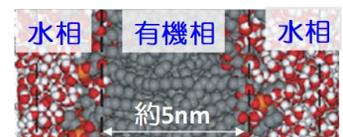
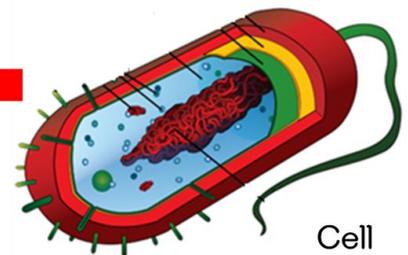
リポソーム膜(またはベシクル膜)の「ナノ・マイクロ物性」を解析するための方法論について開発を行っています。様々な膜組成(リン脂質、脂肪酸、界面活性剤など)や環境条件(温度など)における2次元膜の相図に基づいて、分子認識・変換に適切な「場」としての自己組織化膜のデザイン手法について研究しています。

Chemical Process

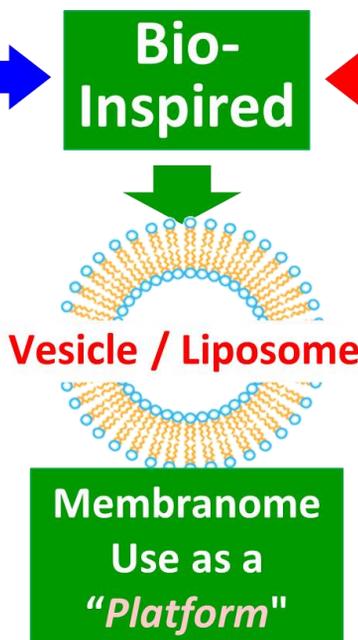


「Interface」
(Multi-Phase System)

Micro Bioprocess



「Membrane」
(Self-Organizing System)



● 自己組織化膜による分子認識・物質変換

自己組織化膜は、ゲスト分子を表層提示する事で新しい秩序構造を形成する点に特徴があります。デザインしたりポソーム膜は、各種バイオ分子(アミノ酸、アミロイド性ペプチド、一本鎖RNA分子など)を選択的に認識し、それらの高次構造・機能を制御できます。近年では、アミノ酸(Trp, His)の不斉認識(分離度(L/D)>104)の誘導に成功しています。また、膜界面の不斉疎水場を活用する分子変換反応の制御にも挑戦しており、リポソーム膜界面や界面活性剤ベシクルの膜表層では選択的な物質変換反応が達成される事を明らかにしています。

医療・ヘルスケアへの生物材料設計の貢献



教授 境 慎司 sakai.shinji.es@osaka-u.ac.jp

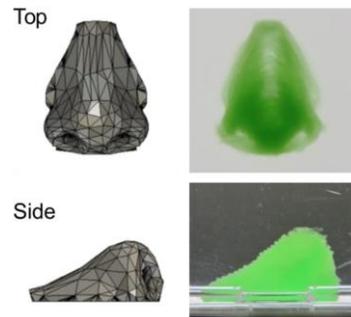
准教授 小嶋 勝 kojima.masaru.es@osaka-u.ac.jp

人類の快適な生活や産業活動の維持のためには、医療・ヘルスケアに寄与する技術やプロセスの開発・設計・操作を目的とした研究は不可欠です。本研究グループでは、「生物の持っている機能を材料として利用する方法を設計・開発」し、また「生物の持っている機能を制御する材料や方法を設計・開発」することで、医療・ヘルスケア分野に貢献することを目指します。

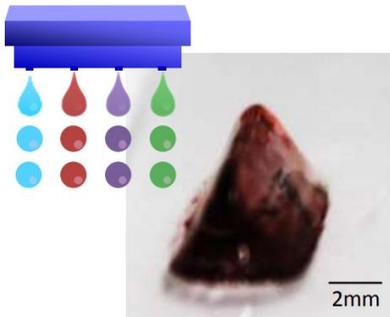


● 3Dバイオプリンティングに関する技術の開発

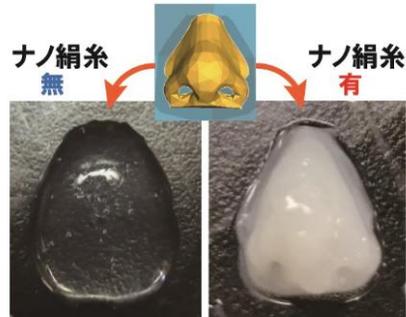
病気やケガ、先天的な要因などにより機能が低下したり、機能しなくなった組織や臓器の代替品を、細胞と人工物などを上手く組み合わせて作り出すことを目指すのが組織工学であり、それを使った医療が再生医療です。私達の研究室では、組織工学における重要な技術である、プリンタを使って組織や臓器を3次印刷する3Dバイオプリンティングに関する技術の開発を行っています。その中では、有機合成に関する知識を活かした、細胞の機能を高めるための新たなインク材料の合成や、プリント過程でのインクの流動状態の理解にもつづいた新たなプリンタの設計、製作などを行っています。さらに、開発した技術を発展し、3Dフードバイオプリンティングへの応用にも取り組んでおり、健康に資する新しい食品の実現にも挑戦しています。



プリント補助剤を用いた柔らかい構造体の造形



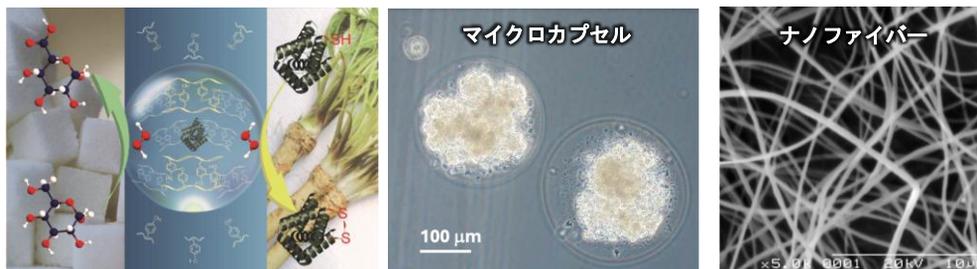
インクジェットによる多色造形



ナノ絹糸添加による造形性の向上

● 酵素を使った組織工学技術の開発

酵素は動物細胞が生存できる条件下でもさまざまな反応を触媒します。この機能を利用して、動物細胞をゼリーのようなヒドロゲル（独自に合成した材料を使用）のなかに閉じ込めたり、そこで増やした後に取り出したりすることにより組織や臓器の代替物を作り出すための技術の開発を行っています。



● 薬剤送達に資する新規材料・手法の開発

生体内で薬剤をはじめとする機能性分子を狙って作用させるために、必要な部位に・必要な量を・必要なタイミングで届けることが求められています。特に、標的部位で機能性分子を徐放し、その機能をコントロールするためには、系全体を俯瞰的に捉える化学工学的な視点が不可欠です。我々は、独自の材料設計およびその材料を使った新規の手法の開発により、遺伝子や薬効分子を、ターゲットとする生体の局所組織・細胞（例えば、ガン細胞や環境因により障害を受けた細胞）に効率的・効果的に送達することに関して研究を行っています。

● 新規バイオマテリアルの設計

生体系では、生体高分子が分子同士の複雑な認識を介して細胞、器官と階層的に組織化し、生体を形作っています。このような生体分子認識を人工系に取り入れ、生体と人工の対話を通じた新しいハイブリッド材料の開発に取り組んでいます。それにより、生命現象のより深い理解（理学）と、生体構成要素-人工材料間のミスマッチを解消した新たな技術開発（工学）の両方を達成し、新しい基礎工学を切り拓くことを目標としています。

● ロボット技術を応用した細胞の計測・操作

細胞や生体の組織は様々な入力情報（刺激）に適切に応答することで複雑な構造を形成し、また、高度な機能を実現しています。この仕組みは未解明の点が多く、その理解のためには精密な応答計測を実現することが重要です。我々は、1ミクロンほどの微小な対象物をつまむ、回転させるなど器用な操作を行うことが可能なロボットシステムを開発し、細胞の局所への機械刺激や化学刺激を実現しました。この技術の発展は、細胞や生体組織の様々な特徴の解明に役立ち、組織構築方法の確立に貢献します。また、ロボット技術に基づいた自動化されたシステムは、手動では困難な実験を可能するため、これまでにない新たな知見の発見も期待されます。

研究室Q&A

Q 研究室のアピールポイントは？

A 多彩なバックグラウンドをもつアクティブな人たちが集うグループ（留学生も多数在籍）

Q 生物について勉強してこなかったけど大丈夫？

A 大丈夫です。だからこそ、新しい発想につながると考えています。

Q 端的に言うとなんかことをやっているの？

A 有機合成、シミュレーション、プログラミング、遺伝子組み換え、動物実験などいろいろです。

Q 求める学生像は？

A 想像力を磨き創造力を養う

・1を知って10のことに思いをはせ夢を膨らませよう（想像力）

・それらのことを咀嚼し消化しよう（理解力）

・その上で、自分の世界を創りあげよう（創造力）

Q 研究室の生活は？

A 研究の合間に、四季折々のイベント有り

光で駆動する新材料と包接化合物の研究

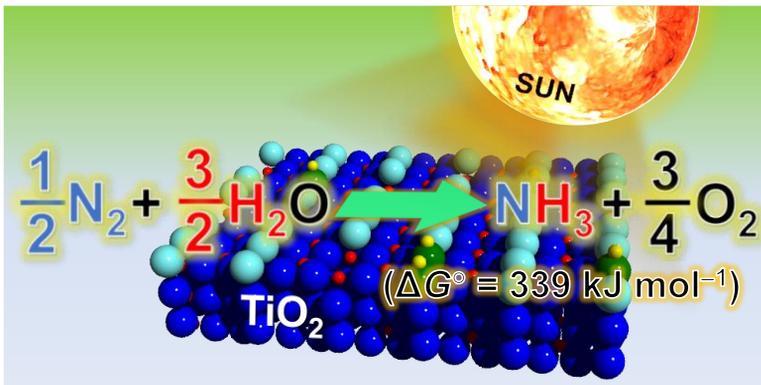


教授	平井 隆之	hirai.takayuki.es@osaka-u.ac.jp
准教授	白石 康浩	shiraishi.yasuhiro.es@osaka-u.ac.jp
助教	菅原 武	sugahara.takeshi.es@osaka-u.ac.jp

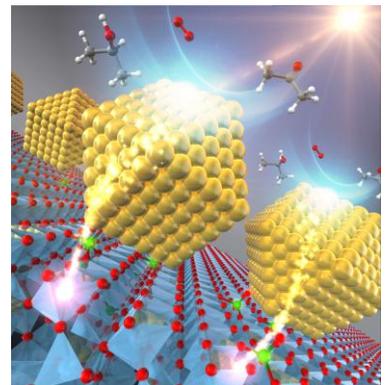
太陽エネルギー化学研究センターは、有機光化学研究センターの改組により2001年4月に発足し、その名の通り太陽エネルギー・光エネルギーを化学反応に利用する機能材料や技術の開発を目的とした研究を展開してきました。2021年4月より大学院基礎工学研究科附属センターとして整備されました。エネルギー光化学工学グループ（旧環境光化学工学グループ）は、引き続き基礎工学研究科物質創成専攻化学工学領域ならびに基礎工学部化学応用科学科化学工学コースの協力講座として研究と教育の一端を担い、幅広い視野をもつ研究者・技術者の育成を目指しています。光触媒を用いる人工光合成技術の開発や、発光・発色型分子センサーの設計・合成と利用などの研究に取り組んでいます。また、メタンハイドレートに代表されるガスハイドレートや有機クラスレート化合物の機能を測定し、分離・エネルギー貯蔵・反応の場として利用する研究に菅原助教が取り組んでいます。

● 光触媒による人工光合成

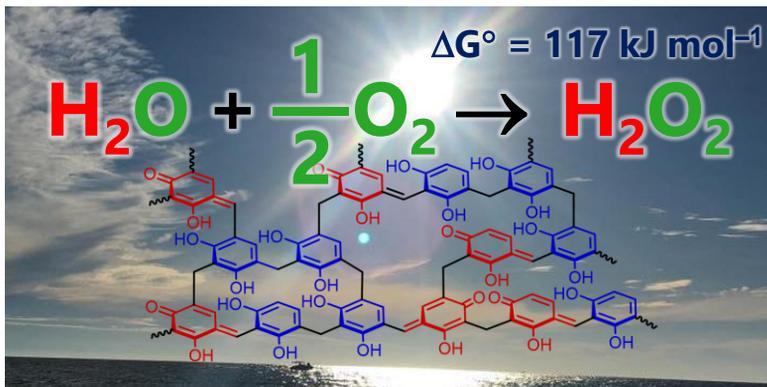
無尽蔵に降り注ぐ太陽光エネルギーを化学エネルギーに変換する、すなわち有用な有機物質を合成する研究を進めています。工業的に不可欠な有機化合物をはじめ、医薬品の原料となる付加価値の高い化合物の合成にも取り組んでいます。



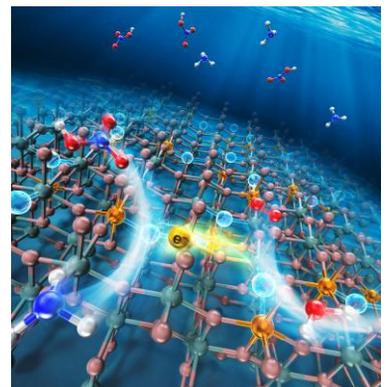
太陽光を使って、水と窒素からアンモニアを合成する人工光合成型光触媒反応



金属ナノ粒子により可視全域の光を吸収して光触媒反応を進める



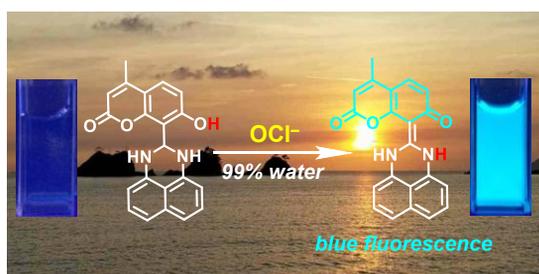
太陽光を使って水と酸素から次世代のエネルギーキャリアとして有望視されている過酸化水素を合成する人工光合成型光触媒反応



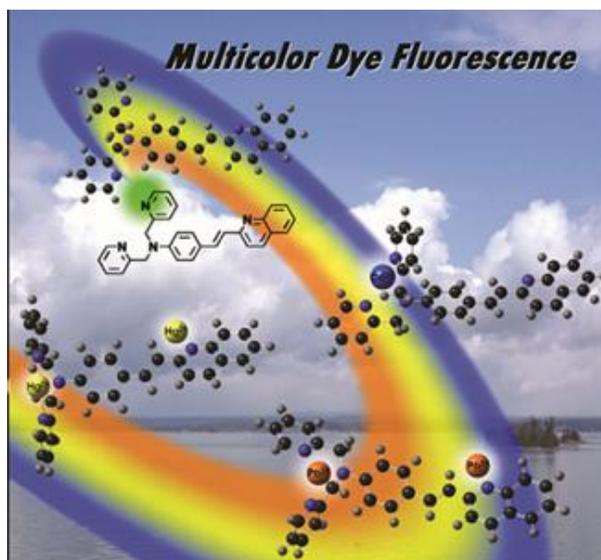
水を還元剤として排水に含まれる硝酸をアンモニアに変換する

● 光センサー分子および光機能性分子の開発

環境中や生体中に存在する微量物質を正確に定量することは困難です。我々は、ターゲットする分子に選択的に応答して色を変えたり、光ったりする分子の開発を行っています。また、環境に応じて様々な色や発光を示すインテリジェント分子の開発も進めています。



有害物質と反応して蛍光色を変える蛍光センサー



金属イオンに対して異なる蛍光色を示すマルチ発光分子

● 包接化合物の機能測定と応用利用

メタンハイドレートに代表されるガスハイドレートや水素結合性有機クラスレート化合物の性質を調べ、その機能を活かした分離材料、貯蔵材料、蓄熱材料、反応場としての利用を目指しています。



燃えるメタンハイドレート(左)と分光測定用高压容器内のガスハイドレート単結晶(右)



潜熱蓄熱材料として注目されているセミクラスレートハイドレート

研究室Q&A

Q 研究室のアピールポイントは？

A 光触媒・光分子センサー・包接化合物に関するいずれの研究に対しても、ずば抜けた機能をもつ材料やシステムをたくさん開発してきました。“世の中をあとと言わせる”成果を出すことを目的として研究を進める点が、当研究室の特長と言えます。

Q 研究内容と社会との関わりは？

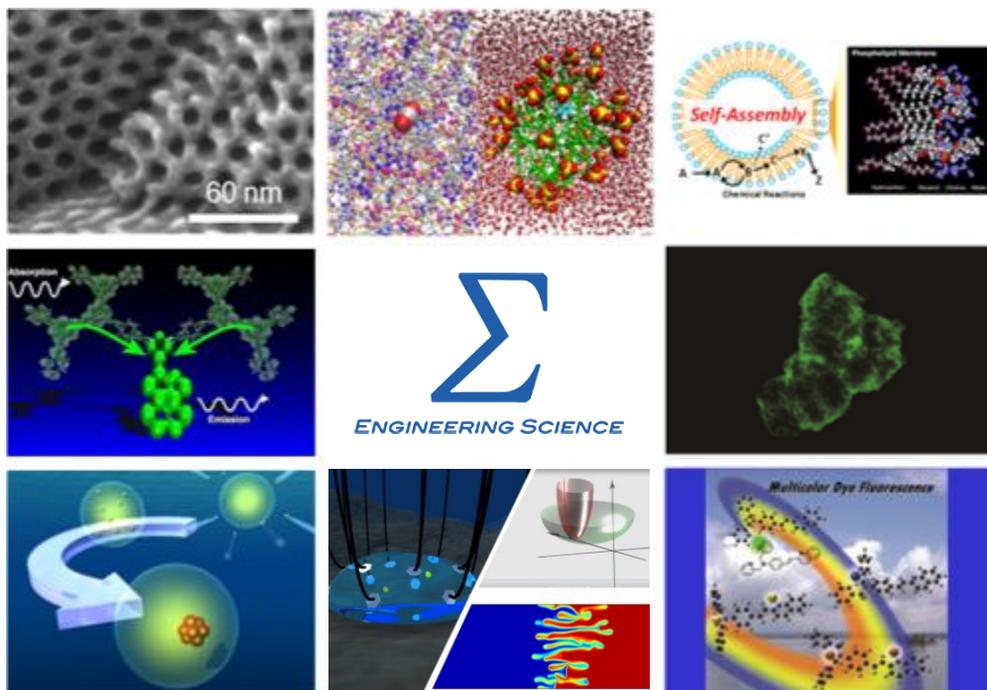
A 光触媒や光分子センサーに関する研究はまだ始まったばかりであり、その可能性を導き出すことが我々の研究の目的です。特に太陽光の有効利用は人類全体に突き付けられている大きな課題であり、社会的要求の強い重要な課題と

言えます。加えて、分離、 CO_2 貯留、蓄熱、晶析などに包接化合物を利用することは、エネルギーの有効利用や環境保全に大きく貢献できるものと考えています。

Q 研究活動の目標は？

A すばらしい研究成果を出すことはもちろんですが、自ら発案し、積極的に課題に取り組むことのできる自立した人材の育成が我々の目標です。我々の研究では、化学工学、光化学、有機化学、物理化学、触媒化学、表面化学などの様々な知識が必要です。様々な分野で活躍できる研究者を育成できるところも当研究室の特長と言えます。

化学工学
ChEmical
n
g
i
n
e
e
r
i
n
g



—「もの」にこだわる「ものづくり」—

大阪大学 大学院基礎工学研究科 物質創成専攻 化学工学領域
大阪大学 基礎工学部 化学応用科学科 化学工学コース



〒560-8531 大阪府豊中市待兼山町1-3
Tel : 06-6850-6295 (化学事務室)
Fax : 06-6850-6296 (化学事務室)
URL: <http://www.cheng.es.osaka-u.ac.jp/>