

高分子化学講座出身者が 物理と化学の狭間で考えてきたこと ～コウモリ研究者の戯言～

佐々木 裕

21期（元 東亞合成株式会社）

May 11, 2024

① はじめに

- 自己紹介から
- オキセタンを転換点として
- 構造明確なネットワークの検討

② 考えてきたこと

- モデル化による現象の理解
- 化学と物理
- 抽象的と具体的

③ 私のおすすめ

- 感じてきたこと
- MIへの違和感
- 私のやり方

はじめに

私のお話

- 教養で落ちこぼれた劣等生が、
- 合成化学工学科で拾ってもらって、
- 就職にも苦労して結果的に東亞合成という会社に入社。
- そこから、なぜか研究が面白くなったという変なお話。

はじめに

私のお話

- 教養で落ちこぼれた劣等生が、
- 合成化学工学科で拾ってもらって、
- 就職にも苦労して結果的に東亞合成という会社に入社。
- そこから、なぜか研究が面白くなったという変なお話。

具体的には

- 会社の仕事の中でのさまざまな経験を通して、
- 材料をソフトマターとして捉え直す中で、
- 徒然と考えてきたことを紹介。

はじめに

私のお話

- 教養で落ちこぼれた劣等生が、
- 合成化学工学科で拾ってもらって、
- 就職にも苦労して結果的に東亞合成という会社に入社。
- そこから、なぜか研究が面白くなったという変なお話。

具体的には

- 会社の仕事の中でのさまざまな経験を通して、
- 材料をソフトマターとして捉え直す中で、
- 徒然と考えてきたことを紹介。

お二人のタイトなお話の後のおまけの与太話

自己紹介（大学時代）

大学時代

- 教養で2年留年しても夏移行できずに、あわや放校処分
- 高田先生に拾っていただいて、望まぬ道の化学系へ



自己紹介（大学時代）

大学時代

- 教養で2年留年しても夏移行できずに、あわや放校処分
- 高田先生に拾っていただいて、望まぬ道の化学系へ
- 高分子講座に行くも学部で就職できずに修士へ



自己紹介（大学時代）

大学時代

- 教養で2年留年しても夏移行できずに、あわや放校処分
- 高田先生に拾っていただいて、望まぬ道の化学系へ
- 高分子講座に行くも学部で就職できずに修士へ



自己紹介（大学時代）

大学時代

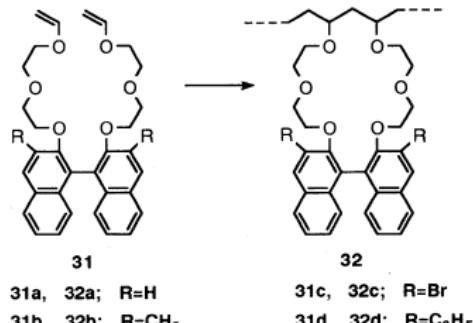
- 教養で2年留年しても夏移行できずに、あわや放校処分
- 高田先生に拾っていただいて、望まぬ道の化学系へ
- 高分子講座に行くも学部で就職できずに修士へ



自己紹介（大学時代）

大学時代

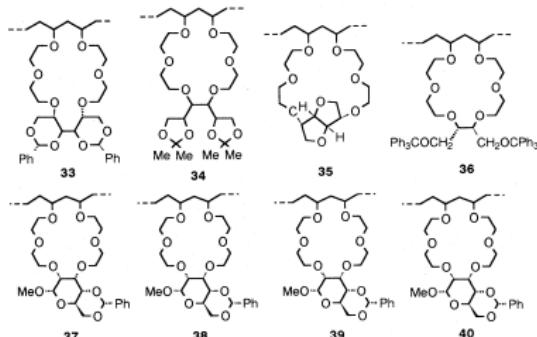
- 教養で2年留年しても夏移行できずに、あわや放校処分
- 高田先生に拾っていただいて、望まぬ道の化学系へ
- 高分子講座に行くも学部で就職できずに修士へ
- 院試の勉強と環化重合の実験で研究の面白さに気づく



自己紹介（大学時代）

大学時代

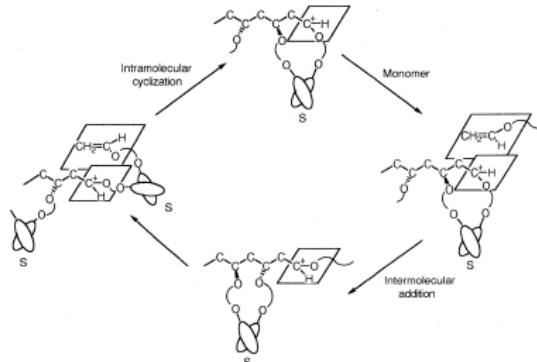
- 教養で2年留年しても夏移行できずに、あわや放校処分
- 高田先生に拾っていただいて、望まぬ道の化学系へ
- 高分子講座に行くも学部で就職できずに修士へ
- 院試の勉強と環化重合の実験で研究の面白さに気づく



自己紹介（大学時代）

大学時代

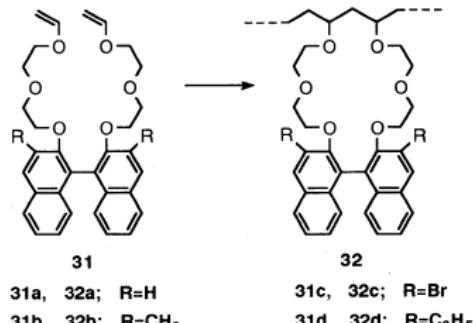
- 教養で2年留年しても夏移行できずに、あわや放校処分
- 高田先生に拾っていただいて、望まぬ道の化学系へ
- 高分子講座に行くも学部で就職できずに修士へ
- 院試の勉強と環化重合の実験で研究の面白さに気づく



自己紹介（大学時代）

大学時代

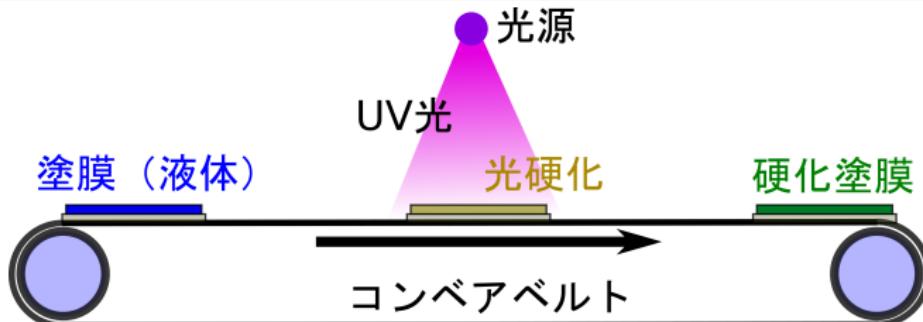
- 教養で2年留年しても夏移行できずに、あわや放校処分
- 高田先生に拾っていただいて、望まぬ道の化学系へ
- 高分子講座に行くも学部で就職できずに修士へ
- 院試の勉強と環化重合の実験で研究の面白さに気づく
- Cram, Pedersen, Lehn の三人がノーベル賞 (1987)



自己紹介（東亞合成入社後）

東亞合成に入ってみると、

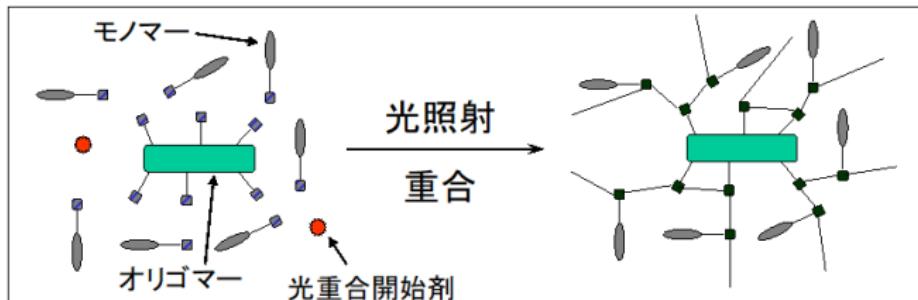
- 光硬化型材料の開発に配属
 - 卒業研究で光二量化によるネットワーク形成の研究
 - 入社前の奨学生採用の面接ではその話に注目された



自己紹介（東亞合成入社後）

東亞合成に入ってみると、

- 光硬化型材料の開発に配属
 - 卒業研究で光二量化によるネットワーク形成の研究
 - 入社前の奨学生採用の面接ではその話に注目された
- 合成化学をベースとし、材料設計
 - ChemDraw の絵を、物性に無理に意味づけがち
 - 過去の経験をベースに思い込みで設計



自己紹介（東亞合成入社後）

アメリカ留学の機会

- 1991年にアメリカに留学の機会（当時は流行）
- 注目を集めていた光力チオン重合の研究を選択
- Rensselaer Polytechnic Institute の Crivello 先生



Rensselaer

自己紹介（東亞合成入社後）

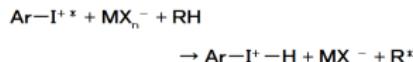
アメリカ留学の機会

- 1991年にアメリカに留学の機会（当時は流行）
- 注目を集めていた光カチオン重合の研究を選択
- Rensselaer Polytechnic Institute の Crivello 先生

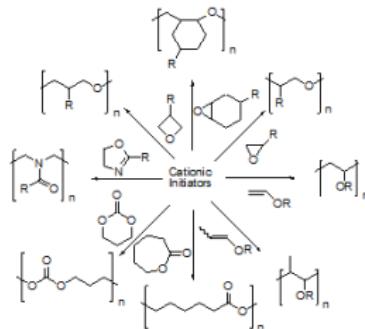
(1)励起



(2)水素引抜



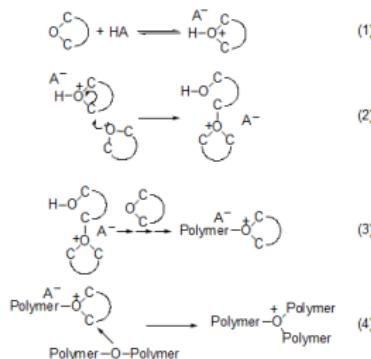
(3)カチオン(酸)発生



自己紹介（東亞合成入社後）

アメリカ留学の機会

- 1991年にアメリカに留学の機会（当時は流行）
- 注目を集めていた光カチオン重合の研究を選択
- Rensselaer Polytechnic Institute の Crivello 先生
- オキセタンの開環重合に再注目（1960 年代から既知）



Ring strain (kJ/mol)			
114	107	23	5
pKa	2.0	2.1	3.6
			3.7

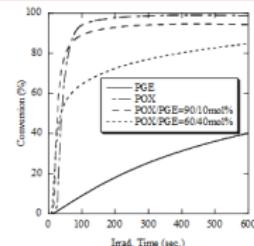
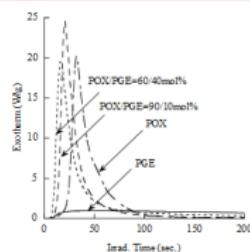
自己紹介（東亞合成入社後）

アメリカ留学の機会

- 1991年にアメリカに留学の機会（当時は流行）
- 注目を集めていた光カチオン重合の研究を選択
- Rensselaer Polytechnic Institute の Crivello 先生
- オキセタンの開環重合に再注目（1960年代から既知）

オキセタンの特徴的な開環重合性

- 重合開始は緩慢だが、高重合度に
- エポキシとの配合で、高速重合



オキセタンの工業化において

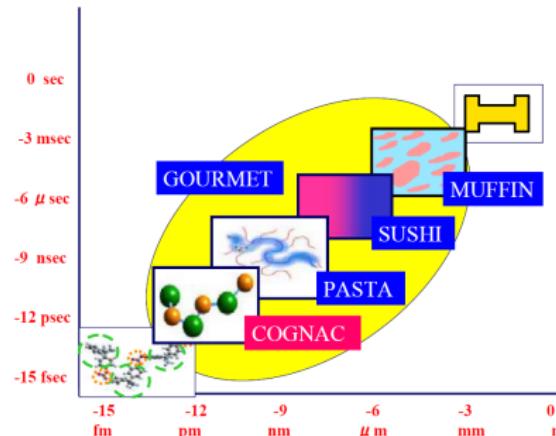
オキセタンの面白さのあぶり出し

- 帰国後に社内にオキセタンの有用性を説く必要。
 - 迅速な重合だけでは共感は得られなかった。
 - 訴求性のある何かが必要と痛感。
- 材料としての面白さを探索
 - この時点では、化学屋としてのやり方として、ひたすら誘導体のバリエーションを求めた。
 - 同時に、特異な反応性の原因を明確に議論するために、**MOシミュレーション**にも着手。
 - 少し会社をごまかしながら、覚知先生のもとでの博士課程も。
- それらの過程で、ネットワークの韌性の由来に興味を持つ。

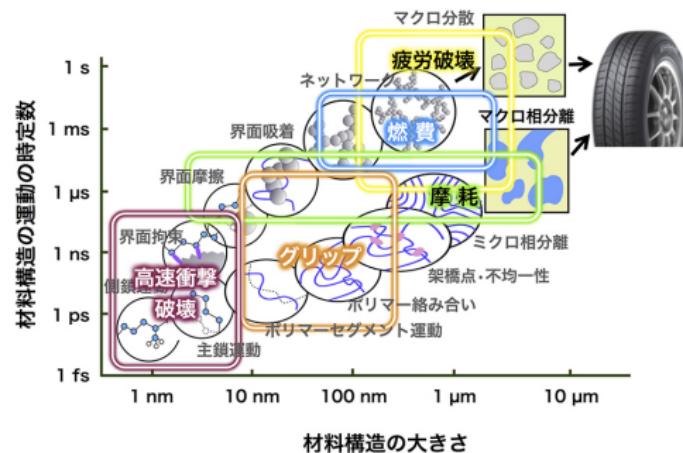
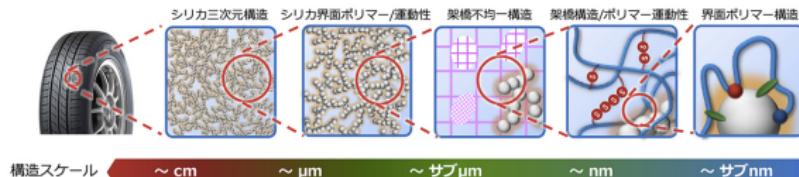
OCTAとの出会い

OCTAとは

- ソフトマテリアルに対する統合的なシミュレータ
- マルチスケールでのシミュレーション
- 階層の異なるフィジックスを統合



マルチスケールと物性



J-PARC の広報サイトから引用。

統合的な理解を目指して

マルチスケールな取り扱いで階層的な構造をイメージ

- マクロな実感とミクロな構造をつなげることが大事
- そのとき、メゾスケールが重要となる。
 - ローカルには、自由エネルギーを最小化
 - ローカルの微視的状態の個数倍 \neq グローバル
- 実事象では、平衡状態を達成できるとは限らない
 - 時間遷移の過程で準安定状態でトラップ
- 開放系での議論も重要
 - 生物学での、ホメオスタシス（恒常性）
 - 自己組織化の理解

統合的な理解を目指して

マルチスケールな取り扱いで階層的な構造をイメージ

- マクロな実感とミクロな構造をつなげることが大事
- そのとき、メゾスケールが重要となる。
 - ローカルには、自由エネルギーを最小化
 - ローカルの微視的状態の個数倍 \neq グローバル
- 実事象では、平衡状態を達成できるとは限らない
 - 時間遷移の過程で準安定状態でトラップ
- 開放系での議論も重要
 - 生物学での、ホメオスタシス（恒常性）
 - 自己組織化の理解

実事象の統合的な理解は一筋縄では行かない！

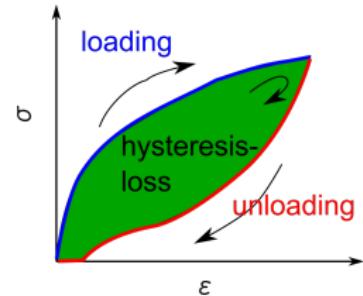
力学的ヒステリシスと破壊エネルギー

● 力学的ヒステリシスロス

- **Unloading** 時の応力が低下
- ヒステリシスロス ⇒ エネルギー散逸
- 破壊エネルギーと正の相関^a

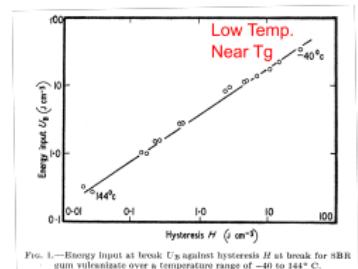
● ヒステリシスロスの由来は？^b

- 粘弾性効果
- 伸張結晶化
- フィラー添加の効果



^aK.A.Grosch, J.A.C.Harwood, A.R.Payne,
Rub. Chem. Tech., 41, 1157(1968)

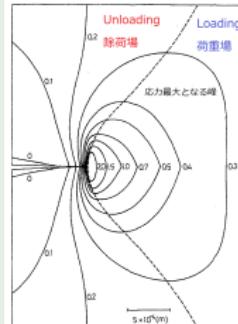
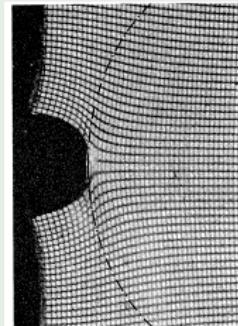
^bA.R.Payne, J.Poly.Sci.:Sympo., 48, 169(1974)



Andrews 理論

Andrews 理論

- クラック近傍の応力場^a
 - Loading 場と Unloading 場
 - クラック進展時に遷移
- ヒステリシスロスを有する材料では
 - この差が、全体の変形に要したエネルギーの多くを散逸
 - 鎖の破断へのエネルギーが低減
⇒ 強靭さの起源。
- 実験的に、 Φ を求めている。

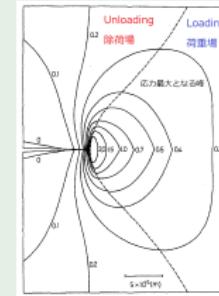


^aAndrews, E. H. and Fukahori, Y.,
J. of Mat. Sci., 12, 1307 (1977)

ゴムの強靭性

Andrews 理論

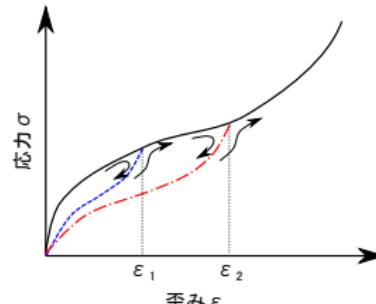
- クラック先端の応力場の考察より、
 - Loading 場と、Unloading 場の差が重要。
 - この差はヒステリシスに由来
- 応力集中を低減 ⇒ 強靭さの起源。



Andrews, E. H. and Fukahori, Y., J. of Mat. Sci., 12, 1307 (1977)

Mullins 効果

- 歪み起因のヒステリシス
- 内部構造の変化
- 可逆 or 不可逆



構造の明確なネットワーク

構造の明確なネットワーク

- 設計方針が明確となり、フィードバックが容易。
- 基盤技術の見極めに適する。

二つの具体的アプローチ

Tetra-PEG gel

- 末端官能性四本鎖
- 均質なネットワーク構造を有するゲルを形成

超分子ネットワーク

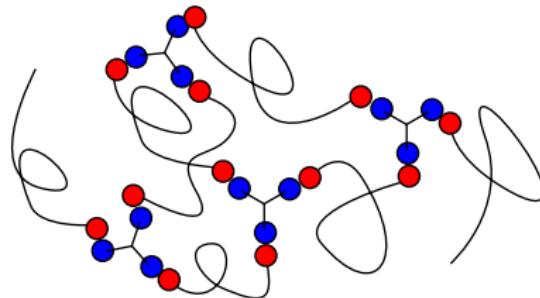
- 「繋ぎ替え可能な非共有結合（水素結合、疎水性相互作用…）」を介して自己組織化
- 無溶剤での構造の明確なネットワークの形成

超分子ネットワークの固定化

ESA-CF 法 (Electrostatic Self-assembly and Covalent Fixation)

Y. Tezuka, E.J. Goethals, European Polymer Journal, 991, 1982

- 両末端に開環反応性アンモニウム塩を有するテレケリックアイオノマー
 - 両末端トリフラー型ポリ THF (カチオン開環重合)
 - 環状三級アミンと反応 (ドーマント種に変換)
- 多価カルボン酸との塩交換により超分子ネットワークを形成

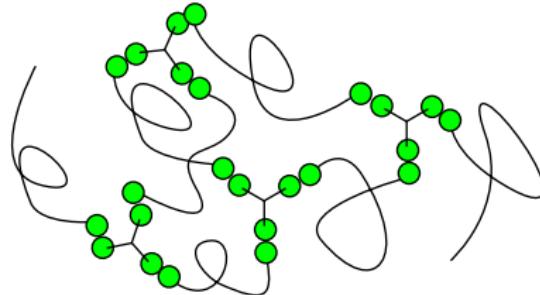


超分子ネットワークの固定化

ESA-CF 法 (Electrostatic Self-assembly and Covalent Fixation)

Y. Tezuka, E.J. Goethals, European Polymer Journal, 991, 1982

- 両末端に開環反応性アンモニウム塩を有するテレケリックアイオノマー
 - 両末端トリフラー型ポリ THF (カチオン開環重合)
 - 環状三級アミンと反応 (ドーマント種に変換)
- 多価カルボン酸との塩交換により超分子ネットワークを形成
- 加熱により以下の反応で共有結合へと変換



可逆反応+共有結合への変化での固定化

組み換え可能な可逆反応の利用

- 応力によるつなぎ替えが可能な可逆反応
 - ネットワークトポロジーの最適化
 - 接着時に発生した応力も緩和可能
⇒ 迅速な増粘後にゆっくり緩和

+

共有結合への変化による固定化

- クリープ抑制のために
 - 適切な時間経過後に、共有結合に変化
 - 適正なトポロジーを維持

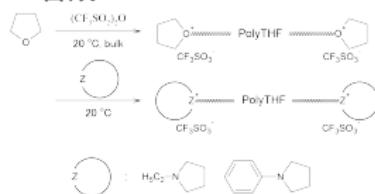
テレケリックアイオノマーの検討結果

ESA-CF 法 (Electrostatic Self-assembly and Covalent Fixation) による超分子ネットワーク

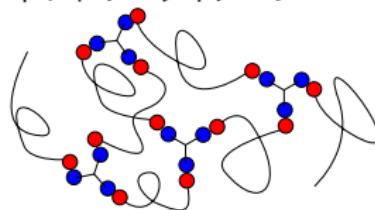
Y. Tezuka, E.J. Goethals, European Polymer Journal, 991, 1982

テレケリックアイオノマー

の合成



ネットワークイメージ

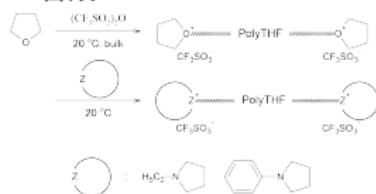


テレケリックアイオノマーの検討結果

ESA-CF 法 (Electrostatic Self-assembly and Covalent Fixation)
による超分子ネットワーク

Y. Tezuka, E.J. Goethals, European Polymer Journal, 991, 1982

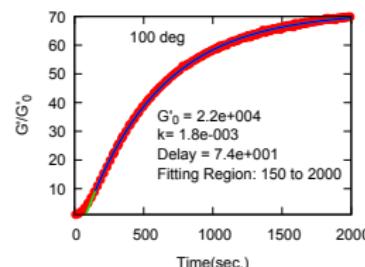
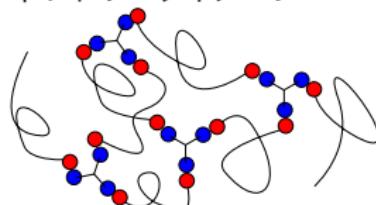
テレケリックアイオノマー
の合成



レオメータで、温度ジャン
プにより反応性を評価

- 疑一次反応で架橋反応を記述可能
- 付加反応は反応律速
- 塩構造の末端基がクラスタを形成？

ネットワークイメージ

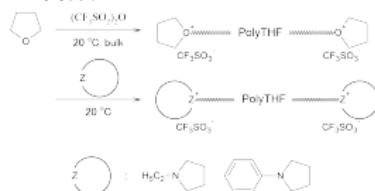


テレケリックアイオノマーの検討結果

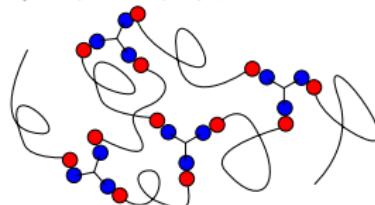
ESA-CF 法 (Electrostatic Self-assembly and Covalent Fixation)
による超分子ネットワーク

Y. Tezuka, E.J. Goethals, European Polymer Journal, 991, 1982

テレケリックアイオノマー
の合成

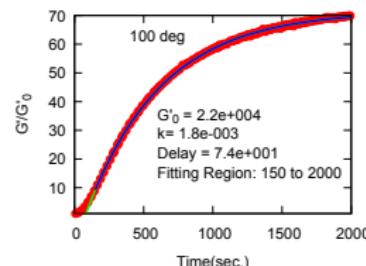


ネットワークイメージ



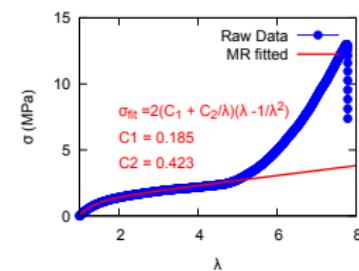
レオメータで、温度ジャンプにより反応性を評価

- 疑一次反応で架橋反応を記述可能
- 付加反応は反応律速
- 塩構造の末端基がクラスタを形成？



形成ネットワークの力学特性

- 古典ゴム理論で、伸長特性を記述可能
- C2 の寄与が比較的大きい
- 伸び切り効果が顕著



ここまでまとめ



- 院試をきっかけに、「広範な知識を関係づけることの重要性」を実感。
- Synchronicity（意味のある偶然の一致）は結構生じる。
- 目の前のチャンスを逃さない。
- 落穂拾いは役に立つ。
 - オキセタンの再発見 1960-
 - 超分子ネットワーク 1990-
 - ゴムの強靭性 1960-

1 はじめに

- 自己紹介から
- オキセタンを転換点として
- 構造明確なネットワークの検討

2 考えてきたこと

- モデル化による現象の理解
- 化学と物理
- 抽象的と具体的

3 私のおすすめ

- 感じてきたこと
- MIへの違和感
- 私のやり方

モデル化による現象の理解

化学系企業でありがちな状態

- 教科書的なものの背後にある物理的、数学的な思想を理解することからの逃避
- 数式や物理モデルの盲目的な受認によるデータの処理
- 統計的な妥当性の確認の放棄
- 客観的な視点に基づく独立事象と従属事象の切り分けの放棄

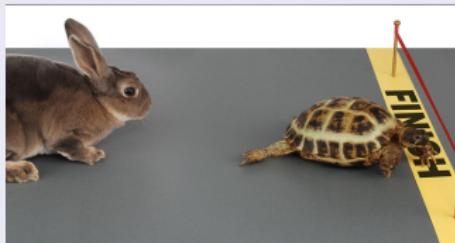
化学系の人間としての過去の自身に欠けていたもの

- 物理系では当たり前の考え方
 - 自然現象の背後にあるユニバーサリティーの理解
 - 適正なレベルでのモデル化

最近の風潮

直ぐに結果を求めたがる

- 実事象はあまりに複雑で因果関係がわかりにくいのに、すぐに結果を求める。
 - 具体的な対策、方法論を望む
 - 考え方の提示では満足しない
- シミュレーションに対しても考え方の指針ではなく、答えを求める。
 - 概念的なものをあまり重視しない。
 - そのようなアプローチは、汎用性を生み出さない。



化学と物理を比べると

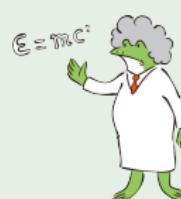
化学のやり方

- 基本的に天下りを受容
 - 実感できない分子、原子を対象
 - 見えないものを受け容
- 多様性を容認
- 熱力学が理解できていない人が、けっこう多い



物理的な考え方

- 事象に内在する一般性
- その本質に迫るためにモデル化
- 興味深い考え方：
　　運動散逸定理、線形応答理論、臨界現象、スケーリング則、無次元化



抽象的に考える

- 抽象的ということを非現実的と捉え、「えそらごと」と読んでしまう人のなんと多いことか。

抽象とは

「抽象」という語については、「事物や表象からある性質・共通性・本質を抽（ひ）き出して把握する」つまり「象を引き出す」という意味を持つ語

- 個々の事物の本質・共通の属性を抜き出して、**一般的な概念をとらえる**さま。
- 単に概念的に思考されるだけで、実際の形態・内容を持たないさま。

後者の意味の反意語は、**具体的**

抽象化は、モデル化に必須。

単純化して概念へと昇華する方法論

抽象と捨象

- 捨象は捨てる行為に、フォーカスする。
- 単純化する際に、抽出出す行為と捨てる行為
- どちらも不要ななのに埋もれた中から、
本質につながる単純化
- 粗視化はどちらであるべきか？

単純化して概念へと昇華する方法論

抽象と捨象

- 捨象は捨てる行為に、フォーカスする。
- 単純化する際に、抽出する行為と捨てる行為
- どちらも不要なものに埋もれた中から、
本質につながる単純化
- 粗視化はどちらであるべきか？
- 高校時代の美術の熊井先生の**走り回り画法**
 - 目を細めて対象物を眺め、ディテールを無視して、
目に留まる主要な色を用いて下書き
 - 全体に共通なトーンや色合いの部分を、
全体に筆を走り回らせながら書き込む。
 - 段階的に、微細なディテールへと

① はじめに

- 自己紹介から
- オキセタンを転換点として
- 構造明確なネットワークの検討

② 考えてきたこと

- モデル化による現象の理解
- 化学と物理
- 抽象的と具体的

③ 私のおすすめ

- 感じてきたこと
- MI への違和感
- 私のやり方

感じてきたこと

これまでの経験を通して感じてきたこと

- 「化学をベースに、尤もらしく」
 - 「新規なものを作り出す技術としての**化学の有用性**」
 - 経験則を重視して、個別の理由を考えがち。
 - 化学構造式で物質を設計しようとしがち
- 「物理、数学、統計の考え方を利用して」
 - 「**事象を客観視し、普遍性を大事にする考え方**」
 - 雜多な化学の中に**シンプルな論理性**を
- 「できるだけシンプルなモデルで。」
 - 数学や物理で用いられる**モデル化が非常に有用**
 - 適切なモデル化で、尤もらしいストーリーを構築

考え方のコツ

感じてきたことをまとめ直すと、

- 化学構造式と実際の物性の関係は非常に複雑。
 - ややこしいものを、全部理解しようとしても無理。
 - かと言って、単純化しすぎても役に立たない。
- 「なぜそうなっているんだろう？」と考えてみる。
 - 自分の言葉で理由を考えて、
 - 人に説明できるように話の流れを作る。
 - 流れの各ステップはできるだけ単純に。
- できるだけシンプルな実験を
 - 同時に仮定を複数設定しないこと。
 - 実験前によく考えて計画を建てる。
 - 一つずつ検証していく。

MIへの違和感

機械学習について

機械学習は特定の分野では非常に有効

- 回帰的手法をベースとした多変量解析
- 自動運転のようなフィードバック系

MIへの違和感

- (一部の方に見られる) 思考を放棄したような無手勝流
- 少なくとも、MIを打ち出の小槌と捉えてはいけない。
- シミュレーションを実験の代替とする方法論は有効。
- 考えるための道具として有効活用すべき。
- 因果推論も確からしくできるようになってきたらしい

基礎知識の汎用化について

データサイエンスの企業での使いこなし

- データサイエンティストの中途採用
 - マネジメントの難しさ ⇒ プロの持ち腐れ
 - 現役データサイエンティストの満足度は低い
 - 手本がない
 - 周りの理解がない
 - スキルアップの時間がない

「データサイエンスの民主化」

- 文系、数学苦手は関係ない
- データをもとに客観的に考えるという基本的な概念
- 関係者みんなに広く浅く（深いに越したことはない）

研究一般についても大事

るべき状態

化学系研究者の立ち位置

- 試行錯誤ベースで実際に物質を合成することは必須
- 物理側からの理論的な成果を盲目的に受容しては駄目

るべき状態

- 物理的な思考による事象の成り立ちの理解、および、モデル化への道すじを共有
- 目的を明確にし、適切な次元、スケール及び時間軸で、議論を行う
- 物質の多様性を前提とした化学的な方法論の整理と、適正なモデル化への挑戦
- 物理及び化学双方の方法論についての**相互理解の深化**

自分の中への落とし込み

「何のためにやりたいのか？」を明確に

- 目的がわからぬと、ゴールが見えてこない。
- 仕事であれば、上司とよく相談すること。
- 自己啓発であれば、自分の本心をよく見極める。

自分の中への落とし込み

「何のためにやりたいのか？」を明確に

- 目的がわからぬと、ゴールが見えてこない。
- 仕事であれば、上司とよく相談すること。
- 自己啓発であれば、自分の本心をよく見極める。

「何をやりたいのか？」を常に意識

- 因果関係をはっきりと。
 - 因 ⇌ 原因
 - 果 ⇌ 結果
- 図として書下せるように理解する。
 - 複雑な実事象をできるだけ単純化して、
 - 一目で理解できるようにすることが大事。

色々なモデル化

「さまざまな条件のもとで、幅広い検討対象に対してでも当てはめることのできるような汎用的なモデル」を考えることが役にたったと実感。

モデル化のすすめ

- 適度な深さで尤もらしく
 - 簡単すぎるものは例外が多い。
 - 複雑化しすぎても過適応
 - 個々の現象にだけ適応可能
 - モデル化する意味がない
- 欲しいもの
 - 汎用的に使えるモデル
 - 尤もらしく、実験事実を説明可能



はじめに
考えてきたこと
私のおすすめ

感じてきたこと
MI への違和感
私のやり方

おすすめのやり方

「急がば回れ」

おすすめのやり方

「急がば回れ」

ざっくり全体像をイメージ

- 慌てて結果を出そうとしない。
 - 心を落ち着けて、
 - やるべきことを、
 - 明確にイメージする。
- 全体像をザックリと捕まえる。
- 理解は一気に容易になり、
- ゴールへの道も見えてくる。



他人の意見について

その道のプロの言うこと

- それなりの確からしさ
- 前提条件の確認が必要
 - 常識が異なる
 - 暗黙の了解が多数
- 素人が下手に使う怖さ

他人の意見について

その道のプロの言うこと

- それなりの確からしさ
- 前提条件の確認が必要
 - 常識が異なる
 - 暗黙の了解が多数
- 素人が下手に使う怖さ

「**盲目的に
信じてはだめ**」

他人の意見について

その道のプロの言うこと

- それなりの確からしさ
- 前提条件の確認が必要
 - 常識が異なる
 - 暗黙の了解が多数
- 素人が下手に使う怖さ

「**盲目的に
信じてはだめ**」

腑に落とす（落ちる）

- 消化して使いこなす
- 頭でっかちにならない

自分の頭で考える

胃の腑に落とすということは？

無理やり胃に落としてもだめ！！

咀嚼するための基礎学力

STEAM

- Science
- Technology
- Engineering
- Art
- Mathematics



自分の頭で考える

胃の腑に落とすということは？

無理やり胃に落としてもだめ！！

咀嚼するための基礎学力

STEAM

- Science
- Technology
- Engineering
- Art
 - 成り立ちの美しさ
 - 哲学的な統一性
- Mathematics



自分の頭で考える

胃の腑に落とすということは？

無理やり胃に落としてもだめ！！

咀嚼するための基礎学力

STEAM

- Science
- Technology
- Engineering
- Art
 - 成り立ちの美しさ
 - 哲学的な統一性
- Mathematics

消化（使いこなす）ために？

- 特定分野に囚われない
広範な知見
- 締め切りを決めない
- ゆっくり考える
- 自由な議論
- 数値化にこだわらない
- 目に見えないものを
大事に

まとめに代えて

私のアプローチ

- 自由に議論できる場の創設
 - Slack を利用して、「東海ソフトマター」を設置
 - 大学、企業半々程度の参加者
 - それをベースに、Web 会議で「ザツダン会」を開催
- 基本的な知見の再整理
 - Moodle システムを利用して、LMS サイトを整備中
 - 自身の初心者としての疑問点にフォーカスして整理
 - 対象：レオロジー、高分子物理、統計等
- 定年後のセミナー会社
 - 上記の基礎的な事項に関するセミナー、オンデマンド
 - 学生は無料