

**京都大学教育研究振興財団助成事業
成 果 報 告 書**

平成20年4月18日

財団法人京都大学教育研究振興財団
会 長 辻 井 昭 雄 様

所属部局・研究科 工学研究科分子工学専攻

職 名・学 年 博士後期課程3年

氏 名 鈴 木 慎 司

事業区分	平成19年度・国際研究集会派遣助成		
研究集会名	アメリカ化学会第235回2008年春季年次大会と展示会		
発表題目	-D-グルコースとセロビオースの ¹³ C化学シフトの量子化学計算		
開催場所	アメリカ合衆国・ルイジアナ州・ニューオリンズ・メモリアルコンベンションセンター		
渡航期間	平成20年4月4日 ~ 平成20年4月13日		
成果の概要	タイトルは「成果の概要/報告者名」として、A4版2000字程度・和文で作成し、添付して下さい。「成果の概要」以外に添付する資料 無 有()		
会計報告	交付を受けた助成金額	200,000 円	
	使用した助成金額	200,000 円	
	返納すべき助成金額	0 円	
	助成金の使途内訳 (使用旅費の内容)	航空運賃	119,000 円
		参加登録料	41,790 円
		宿泊費	78,000 円

成果の概要

工学研究科分子工学専攻

博士後期課程3年

鈴木慎司

1. アメリカ化学会第235回春季年次大会セルロースと再生材料部門のポスターセッションでの発表

4月6日 17:00~19:00 の2時間のポスターセッションで発表を行った。「Quantum chemistry calculations of ^{13}C chemical shifts for β -D-glucose and cellobiose」(β -D-グルコースとセロビオースの ^{13}C 化学シフトの量子化学計算)というタイトルでポスター発表を行った。

ポスターセッションのディスカッションの中で、これから研究を進めていく上でシミュレーションを行う際の条件設定や、計算方法、計算すべき事柄について貴重なアドバイスをもらうことができた。なかでもアメリカ合衆国農務省の Dr. French は次に会った時に関連する自身の文献のコピーを持ってきて、解説してくれた。たいへんありがたかったし勉強になった。

初めての英語でのプレゼンテーションであり、原稿を用意して練習を行い十分準備して行ったつもりであったが、なかなかうまく説明できなかった。参加者からの質問やアドバイスも十分に理解できなかったり、自分の言いたいことを英語でうまく表現できなかったり、英語の能力不足を実感した。これからは英語の能力向上に励みたい。

京大杉山教授、中坪教授、九大近藤教授、北岡準教授の研究室からドクターコースあるいはボスドクの学生がポスター発表を行っていた。自分より年齢は10歳くらい年下であるが同じような立場である彼らが、たいへんレベルが高く、研究に対する意欲の高さが伺われるプレゼンテーションを行っているのを見て、いい刺激を受け、今まで以上に熱意を持って研究に取り組まないといけないと感じた。

2. アメリカ化学会第235回春季年次大会のセルロース系ポリマー、集合体、ナノコンポジットの構造と特性とバイオエネルギーと炭化水素の構造：モデリングと実験の講演を聴講

大学院で指導いただいている京都大学堀井教授の ANSELME PAYEN AWARD 受賞を記念して開催された「セルロース系ポリマー、集合体、ナノコンポジットの構造と特性」のセッションと、私が研究しているセルロースの量子力学計算と近い研究を行っている Dr. French がオーガナイズした「バイオエネルギーと炭化水素の構造：モデリングと実験」のセッションの発表を中心に聞いた。

「セルロース系ポリマー、集合体、ナノコンポジットの構造と特性」のセッションでは日本のビッグネームである東京大学 磯貝教授、京都大学 矢野教授、杉山教授、西尾教授、中坪教授らの発表が注目を集めていた。ANSELME PAYEN AWARD はアメリカ化学会において、セルロースと再生材料部門で最も功績があったと認められた研究者に送られる賞で1962年から毎年1名に送られている。堀井教授が日本人3人目の受賞者であるが、来年も京都大学 中坪教授が受賞することとなり、セルロース研究の分野においては日本が中心的役割を果たしていると感じた。

海外の発表においては酢酸菌が産出するバクテリアセルロースに関する研究が意外に多く、実

際に人体に対して人工皮膚や脳の硬膜として適用した事例に関する発表もあり、実用化に向けた研究が進んでいることを実感した。私もバクテリアセルロースを使ってセルロース結晶の初期結晶化過程の研究という基礎研究を行っているが、実用化に繋げていくことも念頭において研究を進めていく必要を感じた。

セルロースの結晶、マイクロフィブリル、木材にいたるまでセルロースのねじれに着目した研究がいくつかあった。天然セルロースはセルロース I α と I β の二つの結晶の混合体であり、ホヤやコットンのように I β の割合が多いものから、バクテリアセルロースやバロニアのように I α の割合が高いものまであり、どちらか一方が 100% というものはない。ねじれが 2 つの結晶構造を生み出す要因になっていると考えられるので、今後の私の研究におけるコンピューターシミュレーションにおいてもこのようなモデルを取り入れていきたいと思った。

このセッションの最後に堀井教授が受賞記念講演を行った。堀井教授の発表の冒頭で堀井教授の以前の実験結果とともに、堀井教授に指導してもらいながら私が行った計算結果が紹介された。現在行っている研究の意義と位置づけを再確認することができ良かった。

セルロースのコンピューターシミュレーション研究を行っている研究者は日本では少ない。文献検索を行っても適当な文献をあまり見つけることができなかったが、Dr. French がオーガナイザーを務めてその分野の研究者を集めて「バイオエネルギーと炭化水素の構造：モデリングと実験」のセッションが行われた。世界の最先端の研究成果や研究手法の発表が行われ、たいへん勉強になった。セルロースのコンホメーションと自由エネルギー、水素結合の関係について注目している研究も多く、これから自らが研究を行い成果をまとめていく上で、これらの研究との違いを十分に考えて、自分のオリジナリティーを明確にできるよう努力して行く。

以上