



研究者氏名 うと たくや 宇都 卓也 受入研究者 ゆい としふみ 湯井 敏文	所属機関 宮崎大学工学部 環境応用化学科	関連キーワード(複数可) セルロース、結晶構造、分子シミュレーション、 分子鎖シート、セルロースナノチューブ
主な研究テーマ 分子シミュレーションによる多糖の結晶構造解析、 関連タンパク質との相互作用解析		主な採択課題 ・特別研究員奨励費 平成26～27年度 (配分総額:2,500千円) 課題名「セルロース結晶構造特性解析を基盤とした新規セルロース関連材料の分子設計研究」(日本学術振興会特別研究員DC2 / PD)

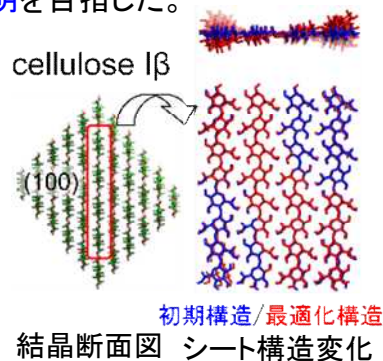
① 科研費による研究成果

植物細胞壁の主成分であるセルロースは、直鎖状に伸びた繊維が数本～数十本集合した、極めて高い結晶性を有する多糖材料である。

木材などから特殊な技術で繊維化したセルロースナノファイバーとしての利用が検討され、鋼鉄の約5倍の強度を持つだけでなく、軽量で環境負荷の少ない次世代材料として多くの注目を浴びている。実用的には、樹脂(プラスチック材)との複合化材料を生産し、自動車部品や住宅建材などの使用を想定されている。しかし、セルロースは結晶材料のため、ナノファイバー作成の過程でそれらを一旦ほどく(解繊)の技術が不可欠であり、セルロースは樹脂に溶けにくく、これらをいかに乗り越えるかが課題となっている。本研究では、実用研究の指針に必要なセルロース材料の基礎的知見を提供するために、セルロース結晶そのものが持つ変形特性の解明を目指した。

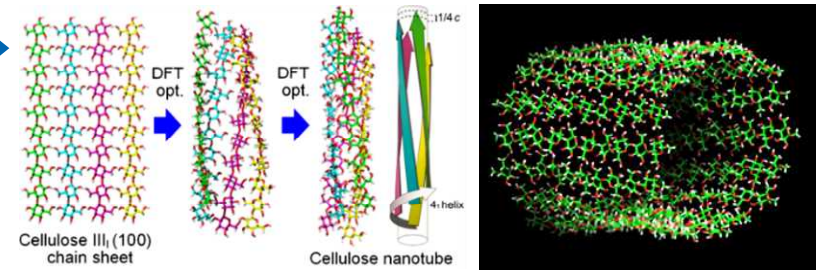
セルロース結晶材料は以前から、ねじれ変形することが知られており、分子構造に基づいた変形挙動の解析をコンピュータにより行った。セルロース結晶構造に特徴的な複数本で構成されるシートを取り出して、計算によりシート構造変化を評価した。結晶全体の変形と比較することで、結晶内部に存在する変形ストレスの詳細を明らかにすることに成功した。

T. Uto, et al., J. Phys. Chem. B 118, 2014.



② 当初予想していなかった意外な展開

セルロースは複数の結晶タイプを持つため、様々なシート構造の変形挙動を解析してきた。その際、あるタイプの結晶が持つシート構造が大きくねじれるだけでなく、より変形していき、自然とナノチューブ構造へと変化していくことを発見した。更に、得られた分子構造に基づいて、大きなサイズのセルロースナノチューブを設計し、分子シミュレーションにより、安定して非極性の有機溶媒中で構造を維持した。



③ 今後期待される波及効果、社会への還元など

予測したセルロースナノチューブは、セルロースの疎水性表面が露出し、樹脂と混ざりやすい性質を持つことが容易に想定され、これは、セルロースナノファイバーの持つ弱点の1つを解決するアイデアであり、実現すれば、セルロース材料の実用化に向けての貢献が期待出来る。