

トップページ / 研究 / スポットライト / 機械工学科 准教授 荒井 規允

## スポットライト



近畿大学理工学部のトップランナーいま注目の最先端研究

### 「ソフトマター」×「分子シミュレーション」 ～ミクロな視点で工学研究を深化させる～

近畿大学理工学部 機械工学科 准教授  
荒井 規允



#### 研究

- ▶ 研究ニュース
- ▶ スポットライト
- ▶ アワード
- ▶ 競争的研究資金獲得状況
- ▶ 研究所・センター
- ▶ 近畿大学学術情報リポジトリ

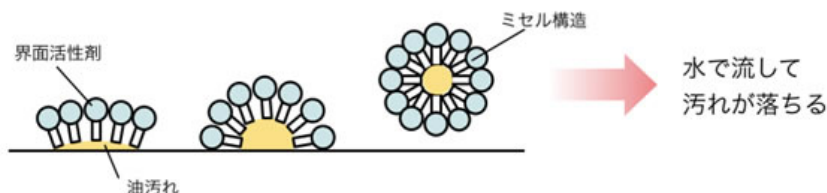
#### 「ソフトマターを知っていますか？」

「ソフトマター」という言葉には馴染みがないかも知れませんが、実は私達の身の回りの様々なものがソフトマター製品です。例えば、ゴムタイヤや洗剤、化粧品、日焼け止めクリーム、服の素材、アイスクリーム等々。かくもソフトマターは様々なものへ応用されていて、今日では私達人間が生きていくために必要不可欠なものとなっています。これらの製品に共通しているのは、「柔らかい」ということ。私達の皮膚や筋肉も柔らかいですよね？そう、実は私達自身もソフトマターの塊なのです。

したがって、ソフトマターの研究領域は幅広く、明日の私達の生活を激変させるような製品から生体機能の解明、果ては生命の起源にまで及びます。これほど広範囲の研究にソフトマターが関わっているのはソフトマター自身の持つ機能が非常に興味深いものだからです。

バラバラに置いてある積み木は、綺麗な構造（例えばお城や橋）に勝手に積み上がったりはしません。しかし、ソフトマター、厳密にはソフトマターを構成する分子は、勝手に綺麗な（秩序的な）構造に組み上がってくれます。つまり、人間が全く手を加えなくても、分子たちが自発的に綺麗な構造へ集まってくるので、製品や体内である機能を発現する場合、非常に少ないエネルギーで達成できるということなのです。

例えば、界面活性剤の洗剤機能を考えてみましょう。界面活性剤とは洗剤のもととなる分子で、水を好きな部分（親水基）と水が嫌いで逆に油が好きな部分（親油基）を併せ持っています。そのため、汚れた衣服と一緒に水の中に入ると、界面活性剤が勝手に汚れた（油汚れ）部分に集まってくれます。そこでたくさんの界面活性剤を入れれば、多くの分子が汚れに集まるため、汚れが衣服から浮き出し、最終的にはミセルという綺麗な構造が形成されます。これを「自己集合」と言います。このミセルごと水で流すことによって、衣服から汚れを取り除くのが界面活性剤の洗剤効果です。私達は界面活性剤分子が持つ自己集合という性質を上手く使って、洗剤という機能を得ているわけです。



界面活性剤の洗剤効果

それでは、もっと品質の良い（汚れが落ちる）洗剤は、どのように開発すればよいのでしょうか。先に述べたように、洗剤という機能は分子自体が持っている性質です。ですので、洗剤効果を高めるためには、分子レベルでの製品開発をしなければならないということになるわけです。

## 分子シミュレーションの必要性

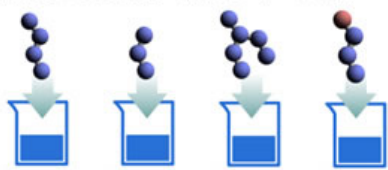
ソフトマター製品は、一度製品として出来上がってしまえば、私達にとって省エネルギー性に優れた嬉しい製品となるのですが、その製品開発は簡単なものではありません。それは、分子自身が持っている特徴を利用するために、分子の詳細を理解しなければならないからです。現在でも、多くの分子、特に自己集合した時の特徴については、まだ完全にはわかっていません。それでは、どうやって現在私達が使っている製品が生み出されているのでしょうか。

実はソフトマター製品は、多くの企業が試行錯誤しながら開発を行っています。例えば、少し形状を変えた分子を数十から数百パターン用意して、実際に実験を行います。その結果、得られた機能で最も良い分子を実際の製品で採用するというわけです。

こうやって書くと簡単に思えるかも知れませんが、そのような数百パターンの形状の分子をあらかじめ用意するのも大変ですし、実験はもちろん1回だけではありません。全ての製品で同じような機能を得られるように、何度も何度も再現性の実験を行います。こうして1つの製品が生まれるまでの時間、労力、そして費用は莫大なものとなります。

ここで見逃せないのは、このような実験では、何故その分子形状が一番良い結果を得られたのかがわかりにくいということです。例えば、さらにより良い製品を開発しようとなった時、先の実験で何故良い結果が得られたのか、知見を十分に活かすことができず、また同じような実験を繰り返さなければならず、結局莫大なコストがかかってしまうということです。

形状を少し変えた分子で数100パターン以上・・・



それぞれの試作品で実験・・・



結局一番優れていたのは・・・



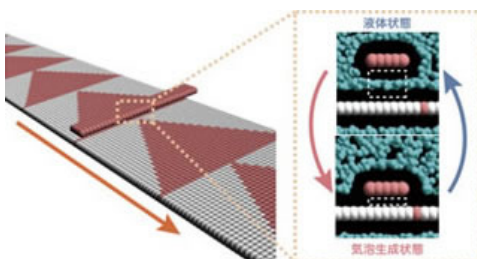
試行錯誤的な製品開発

そこで、コンピュータシミュレーションで分子自体が持つ特徴や性質を理解しようというのが私の研究です。私の研究では、シミュレーションの中でも特に分子シミュレーションという手法を用いており、これは分子の動きをコンピュータ上で再現することで、どのように分子が集合するのかを自分の目でダイレクトに見ることができます。ここから、何故その分子が一番良い結果を得られたのかを説明するわけです。

さらにもう一步この研究を進めてみるとどうなるでしょうか。

これまで、現在のわからないこと（何故その分子が一番良いか）に対するアプローチでした。さらに進んで分子シミュレーションは、分子自体が持っている性質をコンピュータ上で再現する手法ですので、まだ起こっていない未来のこと、例えば実験するのが困難な超高压下や超低温下での分子の挙動を予測することもできます。つまり、シミュレーションでこんな良い結果が出るのがわかったから、実際に実験を行って欲しい、というシミュレーション提案型、実験のモチベーションと成りうる研究だということです。

実際に私は分子シミュレーションによって、カーボンナノチューブ (\*1) 内に界面活性剤を挿入した時に、これまでない新しい自己集合構造が形成されることを発見し、それらに名前を付けました。さらに、気泡生成現象を利用することで、ナノスケール (100万分の1ミリメートル) のモーター (\*2) が作れることを示しました。これらは、現在の技術では実現が困難ですが、いつの日にか周辺技術が追いついて来て、実際の実験で再現された暁には、私の研究が大々的にピックアップされると確信しています。



## メッセージ

2000年代以降、日本の理科離れが叫ばれて久しいですが、その一方で日本人のノーベル賞受賞や宇宙開発関連のニュースは常に大きく取り上げられ、国内を盛り上げてくれています。これは潜在的に人々が理科への興味を失ってしまったわけではなく、学校で習っているうちに「難しい」と感じて躓いてしまう人が多いだけのように思います。理系学問に限ったことではありませんが、「間違えたら恥ずかしい」とか、そもそも「難しそうだから」と扉を閉ざしてしまわずに、「まだ間違っただけだから。だから今勉強しているし、難しいからこそ自分が取り組む価値がある」と考えて欲しいものです。

自分自身で生み出したり、発見したりしたものを通じて世界中と繋がる喜び、そして自分の名を歴史に刻みつけて、死んでも残るものを得る喜びを、ぜひとも次の世代にも実感して欲しい。私はそう思っています。



## 用語説明

\*1 カーボンナノチューブとは



\*2 モーターとは



機械工学科 准教授

荒井 規允

[researchmap](#)

[教員・研究紹介](#)

|     |  |                                 |
|-----|--|---------------------------------|
| 所属  | 学科 / <a href="#">機械工学科</a>   | 専攻 / <a href="#">メカニクス系工学専攻</a> |
| 研究室 | <a href="#">計算熱工学研究室</a>   |                                 |
| 略歴  | <p>2004年 慶應義塾大学 理工学部 機械工学科 卒業</p> <p>2006年 慶應義塾大学大学院 理工学研究科 開放環境科学専攻 修士課程修了</p> <p>2009年 慶應義塾大学大学院 理工学研究科 開放環境科学専攻 博士課程修了 (工学)</p> <p>2009年 電気通信大学 情報理工学部 知能機械工学科 助教</p> <p>2010年 電気通信大学大学院 情報理工学研究科 知能機械工学専攻 助教</p> <p>2012年 University of Nebraska Lincoln Visiting Assistant Professor</p> <p>2014年 近畿大学 理工学部 機械工学科 講師</p> <p>2018年 近畿大学 理工学部 機械工学科 准教授</p> |                                 |

## スポットライト一覧

- ▶ 光通信技術とレーザー技術の融合。光ファイバで日本の産業用レーザーの復権を目指す
- ▶ 究極は太陽の光だけで操業する「太陽光化学工場」。光触媒で世界一を目指す

|  |
|--|
| ▶ 「ソフトマター物理学」から「物質幾何学」へ。新たな学問分野を創造する                   |
| ▶ ゲノム解析で挑む、神経疾患の原因解明。                                  |
| ▶ 交通安全をテクノロジーで支援 情報通信技術を用いた個人適応型の安全運転講習                |
| ▶ 光合成を化学の眼で理解する・化学の力で造る                                |
| ▶ 化学のラビリンスを照らす“光”。鏡の国のアリスの世界に光で挑む                      |
| ▶ 「ソリトン」から「弦理論」へ可積分系のさまざまな顔と包容力の解明                     |
| ▶ 生命のしくみを解き明かせ～液体界面で起こる特異な現象の観測～                       |
| ▶ 軽量化の切り札“CFRP”のポテンシャルアップを目指して～金型と成形の複合化技術で、量産・再利用に挑む～ |
| ▶ ナノサイエンス・テクノロジーを駆使してエネルギー・環境問題に解決の道筋を！                |
| ▶ 明日の社会基盤を創造する～安全・安心、“人と環境にやさしい”をめざして～                 |
| ▶ 電磁界シミュレーションの可能性～ワイヤレス給電の飛躍的な普及を目指して～                 |
| ▶ 究極理論への夢～素粒子、宇宙、重力への統一のアプローチ～                         |
| ▶ 結び目の数学～身近な対象から未解明の科学的命題まで～                           |
| ▶ ソフトウェア開発の失敗を減らすために                                   |
| ▶ 「地図を描きかえる仕事」から「人の役に立つ仕事」へ。「土木」が担う、人と環境の未来            |
| ▶ 細胞移動のメカニズムを解明し癌転移、免疫応答のコントロールをめざす                    |
| ▶ 元素を自在に結合させて世の中を一変させる新しい高機能材料を創出する                    |
| ▶ 次世代再生可能エネルギー「バイオコークス」夢の燃料で争いのない世界を！                  |
| ▶ ブラックホールで拓く、新しい宇宙像                                    |

● 最先端研究 INDEX

| ● 学部・大学院について  | ● 学科・専攻   | ● 教育  | ● 研究  |
|---|---|---|---|
| <b>－ 学部紹介</b><br>▶ 学部長挨拶<br>▶ 教育理念・目標と育成する人材像<br>▶ アドミッションポリシー／カリキュラムポリシー／ディプロマポリシー<br>▶ 歴史 | <b>－ 学科</b><br>▶ 理学科 数学コース<br>▶ 理学科 物理学コース<br>▶ 理学科 化学コース<br>▶ 生命科学科<br>▶ 応用化学科<br>▶ 機械工学科<br>- 機械工学コース<br>- 知能機械システムコース<br>▶ 電気電子工学科 | <b>－ 学科</b><br>▶ 学部教育の特色<br>▶ 理工学部の4年間<br>▶ 学部カリキュラム<br>▶ 進級及び卒業の要件<br>▶ 授業評価・卒業アンケート<br><b>－ 専攻</b><br>▶ 大学院教育の特色<br>▶ 大学院カリキュラム及び修了要件 | ▶ 研究ニュース<br>▶ スポットライト<br>▶ アワード<br>▶ 競争的研究資金獲得状況<br>▶ 研究所・センター<br>▶ 近畿大学学術情報リポジトリ  |
| <b>－ 大学院紹介</b><br>▶ 研究科長挨拶  |   |   | <b>● 学生生活・進路</b><br>▶ 学年暦   |

|                                    |                                      |  |   |
|------------------------------------|--------------------------------------|--|---|
| ▶ 教育理念・目標と育成する人材像                  | - エレクトロニクス・情報通信コース<br>- エネルギー・環境コース  | - 国際交流・留学制度  | ▶ 時間割表  |
| ▶ アドミッションポリシー／カリキュラムポリシー／ディプロマポリシー | ▶ 情報学科<br>- 情報システムコース<br>- 情報メディアコース | ▶ 短期語学研修・留学制度  | ▶ キャンパスマップ  |
| ▶ 歴史                               | ▶ 社会環境工学科                            | ▶ シラバス検索  | ▶ インターンシップ  |
| <b>その他</b>                         | <b>- 専攻</b>                          | ▶ 教員・研究紹介  | ▶ 学費・奨学金  |
| ▶ 在学生・教職員の皆様へ                      | ▶ 理学専攻                               |  | ▶ 就職・進路   |
| ▶ 受験生の方へ                           | ▶ 物質系工学専攻                            |  | ▶ 理工学部通信  |
| ▶ 保護者の方へ                           | ▶ メカニクス系工学専攻                         |  | ▶ 理工会研究会  |
| ▶ 卒業生の方へ                           | ▶ エレクトロニクス系工学専攻                      |  | ▶ 各種証明証発行   |
| ▶ 企業・一般の方へ                         | ▶ 環境系工学専攻                            |  | ▶ 在学生の声（学部）   |
|                                    | ▶ 建築デザイン専攻                           |  | ▶ 在学生の声（大学院）  |
|                                    | ▶ 東大阪モノづくり専攻                         |  | ▶ 活躍する卒業生・修了生の声   |
|                                    |                                      |  | ▶ 司書課程           |
|                                    |                                      |  | <b>● 入試情報</b>   |
|                                    |                                      |  | <b>- 学科</b>   |
|                                    |                                      |  | ▶ エコ出願（入試情報・学費）  |
|                                    |                                      |  | ▶ Kindai graffiti 理工学部 パンフレット   |
|                                    |                                      |  | ▶ 行くぞ！近大         |
|                                    |                                      |  | <b>- 専攻</b>   |
|                                    |                                      |  | ▶ 共通事項  |
|                                    |                                      |  | ▶ 大学院研究科概要  |
|                                    |                                      |  | ▶ 博士前期・修士課程   |
|                                    |                                      |  | ▶ 博士後期課程  |
|                                    |                                      |  | ▶ 外国人留学生入学試験  |
|                                    |                                      |  | ▶ 入試結果  |

学科公式オリジナルサイト

  
Open

▶ サイトマップ    ▶ 個人情報の取り扱い    ▶ サイトポリシー

近畿大学理工学部・総合理工学研究科

〒577-8502 大阪府東大阪市小若江3-4-1 TEL (06) 4307-3047

©KINDAI UNIVERSITY All rights reserved. このウェブサイトの内容の無断転載・複製を禁じます。