

二国間交流事業 共同研究報告書

令和5年4月26日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[日本側代表者所属機関・部局]
国立研究開発法人物質・材料研究機構
機能性材料研究拠点
[職・氏名]
グループリーダー・荏原充宏
[課題番号]
JPJSBP 120204814

1. 事業名 相手国: ロシア (振興会対応機関: RFBR) との共同研究

2. 研究課題名

(和文) 計算科学による医療用形状記憶ポリマーの解析と設計

(英文) Desing of Shape-memory Polymers for Medical Applications: Computational and Experimental Approaches

3. 共同研究実施期間 2020年4月1日 ~ 2023年3月31日 (3年0ヶ月)【延長前】 2020年4月1日 ~ 2022年3月31日 (2年0ヶ月)

4. 相手国側代表者(所属機関名・職名・氏名【全て英文】)

Ural Federal University・Senior Researcher・Yevgeny Moskovitz

5. 委託費総額(返還額を除く)

本事業により執行した委託費総額		4,750,000 円
内訳	1年度目執行経費	2,375,000 円
	2年度目執行経費	2,375,000 円
	3年度目執行経費	- 円

6. 共同研究実施期間を通じた参加者数(代表者を含む)

日本側参加者等	2名
相手国側参加者等	1名

* 参加者リスト(様式 B1(1))に表示される合計数を転記してください(途中で不参加となった方も含め、全ての期間で参加した通算の参加者数となります)。

7. 派遣・受入実績

	派遣		受入
	相手国	第三国	
1年度目	0	0	0(0)
2年度目	0	0	0(0)
3年度目	0	0	0(0)

* 派遣・受入実績(様式 B1(3))に表示される合計数を転記してください。

派遣:委託費を使用した日本側参加者等の相手国及び相手国以外への渡航実績(延べ人数)。
受入:相手国側参加者等の来日実績(延べ人数)。カッコ内は委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流の概要・成果等

(1)研究交流概要(全期間を通じた研究交流の目的・実施状況)

本研究交流プロジェクトでは、安全かつ高性能な医療用形状記憶ポリマーの開発を目指し、ポリマー構造の最適化をコンピューターモデル(原子および粗視化モデル)によってナノからメソスケールまで解析することを目的とし、計算科学・コンピュータサイエンスの分野で世界を牽引する Yevgeny A. Moskovitz 博士(Ural Federal University)との研究交流を通じて、シミュレーションによって得られた形状記憶ポリマーを実際に設計し比較検討を行った。具体的には、optimized potentials for liquid simulations (OPLS) force field や class II polymer consistent force field (PCFF)を用いることで NIMS で得られた実測値との比較を行った結果、非常に高い相関性を得ることができた。形状記憶ポリマーの最適値の理論的な分子設計法はいまだに確立されておらず、今回得られた結果は非常に意義の高いものであると考えられる。実際の交流に関しては、ロシアの政治情勢や COVID-19 の影響により、派遣や受け入れはできなかったものの、オンラインでの交流を通して予定通りの研究成果を得ることができた。

(2)学術的価値(本研究交流により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

これまで世界的に形状記憶ポリマーの開発は行われてきたが、そのほとんどが網羅的な実験の集積やシンプルな予測であり、本研究室でもその範疇を超えたシミュレーションを行うに至っていなかった。そんな中、計算科学・コンピュータサイエンスの分野で世界を牽引するロシアの研究者 Yevgeny A. Moskovitz 博士(Ural Federal University)とともにナノからメソスケールまでポリマー構造の計算解析を行うことで、形状記憶プロセスのメカニズムに直結するパラメータ①結晶性、②架橋密度、③融点のそれぞれの役割が明らかとなった。これまで医療用で使えるアクチュエータはほとんどなく、今回得られた形状記憶プロセスと機能の最適化法の学術的意義は大きい。

(3)相手国との交流(両国の研究者が協力して学術交流することによって得られた成果)

日本はモノづくりで世界を牽引する一方で、ロシアは数学・計算科学・コンピュータサイエンスの分野で世界的にも優れた研究者が多い。またロシアの科学者は概して粘り強く、我慢強いと言われており、膨大な基礎研究に裏打ちされたユニークな発想をモノづくりにまで展開させるのを得意としている。こうした背景から、これまでほとんど共同開発がなされてこなかった医療用デバイスの開発に関してロシアと研究交流する社会的意義は非常に大きく、実際に今回の交流を通してこれまでに報告されていなかった形状記憶ポリマーの最適値の理論的な分子設計法を確立し、論文報告を行った。Full-Atomistic Optimized Potentials for Liquid Simulations and Polymer Consistent Force Field Models for Biocompatible Shape-Memory Poly(ϵ -caprolactone), Journal of Physical Chemistry B, 126, 3961-3972 (2022).

(4)社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

Society5.0 スマート社会を迎え IoT デバイスなどの開発が激化しているが、センサ部分の開発はかなり進んでいるものの、アクチュエータ部分の開発は遅れをとっている。特に医療用で使えるアクチュエータはほとんどなく、形状記憶プロセスと機能の最適化法を見つける社会的インパクトは大きい。日本はモノづくりで世界を牽引する

一方で、ロシアは数学・計算科学・コンピュータサイエンスの分野で世界的にも優れた研究者が多い。今回の国際交流を通して得られた形状記憶ポリマーの設計論は、これまでほとんど共同開発がなされてこなかった医療用形状記憶アクチュエータの開発を加速することが期待でき、その社会的インパクトは大きい。

(5)若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取組、成果)

今回は、ロシアの政治情勢や COVID-19 の影響により、若手研究者の派遣や受け入れはできなかったものの、オンラインでの交流を通して若手研究者の養成を行った。具体的には、筑波大学大学院および東京理科大学大学院との連携大学院制度と本プログラムを利用することで、若手研究者や大学院生を主体とした研究グループを組織し、本プログラムの国際交流によって研究を遂行していく過程で、国際的な視野を持った研究を展開・推進できる人材の育成・教育を行った。また卒業後は、海外学振制度への応募を積極的に進め、その際も本プログラムでの交流先(Moskovitz 博士)あるいはそこから発生したつながりの就職先を紹介するなどの取り組みを行った。

(6)将来発展可能性(本事業を実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか)

本共同研究が終了したあとは、別プログラム(科研費)にて行っている医療機関(大学病院)との共同研究を通じて、本開発品の性能を動物実験に調査していく予定である。また、本プログラムで開発した形状記憶ポリマーに関心を持っている企業もあり、企業連携なども現在検討中である。

(7)その他(上記(2)～(6)以外に得られた成果があれば記載してください)

例:大学間協定の締結、他事業への展開、受賞など

Full-Atomistic Optimized Potentials for Liquid Simulations and Polymer Consistent Force Field Models for Biocompatible Shape-Memory Poly(ϵ -caprolactone), Journal of Physical Chemistry B, 126, 3961-3972 (2022).

形状記憶ポリマー 血管締結で腫瘍治療 胎児の低侵襲手術に、2021.9.3 日刊工業新聞

「優秀ポスター賞」Ailifeire Polat(第71回高分子討論会)2022.9.7

「最優秀賞ポスター賞」Ailifeire Polat(第51回医用高分子シンポジウム)2022.7.26