

計算化学の援用による 有機材料合成

大学院理工学府 物質・環境部門
材料科学プログラム
助教

松原 希宝

[まつばら きほ]

大学院理工学府物質・環境部門の松原希宝助教は、次世代の有機材料開発を志している新進気鋭の研究者である。われわれの身の回りで広く使われる有機材料だが、高性能な材料を効率よく創出する設計・合成方法にはまだ課題が多い。松原助教は、材料の性質をAIに学習させることで、化学反応の一種である「放射線グラフト重合」の反応性予測と理解に成功した。

こうした研究成果が高く評価され、博士後期課程3年だった昨年、優秀な大学院博士課程学生を顕彰・支援する令和7年度の日本学術振興会の育志賞を受賞している。



「無限の可能性」に魅せられた

— 有機材料の研究に興味を持った背景は？

私たちの生活は、さまざまな有機材料に支えられています。有機材料とは、炭素を基本骨格とし、水素や酸素、窒素などが結びついた物質の総称です。具体的には、プラスチックや合成ゴム、繊維といった石油化学製品から、木材や紙などの天然物まで幅広く含まれます。私がこの分野に興味を持ったのは、これら有機材料が持つ「無限の可能性」に魅せられたからです。分子の組み合わせや構造を少し変えるだけで、硬さや熱への強さ、電気の通しやすさといった性質が劇的に変化します工夫次第でこれまでにない全く新しい機能を生み出せる点に、ものづくりの原点としての深い魅力を感じ、研究の道を志しました。

— AI＝機械学習を、材料をつくる反応の理解・予測に役立てようと思ったきっかけは何ですか。

学部・修士時代は、コンピューターを用いた「量子化学計算」によって、化学反応の仕組みを理論的に解き明かす研究を行っていました。当時は比較的小さいサイズの小さい分子（低分子）を対象にしていたのですが、研究を続けるうちに、このシミュレーションを有機材料のような「膨大な原子を含む複雑な物質」にも応用できないか、と考えるようになりました。しかし、扱う原子の数が増えるほど、計算にかかる時間や膨大なコンピューターのパワー（計算資源）が必要になるという課題に直面します。「もっと効率よく、狙い通りの材料を予測・設計する方法はないか」と模索していたときに出会ったのが、機械学習（AI）でした。これまで地道に蓄積されてきた計

算データや実験データをAIに学習させれば、膨大な計算資源に頼ることなく、実験前に結果を予測する強力な武器になると確信し、この新たなアプローチへの挑戦を決めました。

研究に必要な機械学習はほぼ独学

— 「放射線グラフト重合」の研究の推移は？

「放射線グラフト重合」とは、ベースとなる高分子材料に放射線をあて、そこに別の分子をまるで植物の「接木(グラフト)」のように結合させて、新しい機能を付与する技術です。この研究を始めるにあたり、指導教員である覚知亮平先生からは、計算化学をただのツールとして使うのではなく、実験現象の核心に迫るための理論的基盤として捉えるよう、重要なアドバイスをいただきました。さらに、共同研究者である量子科学技術研究開発機構(QST)の瀬古典明先生からは、長年の実験データや知見をご共有いただき、理論と実験が融合した深い共同研究へと発展させることができました。

一方で、研究に必要な機械学習の知識は、ほぼ独学で習得しました。データサイエンスの専門書やオンライン教材を活用してコードの書き方を学び、学

内外の情報系の先生方にも助言をいただきながら、化学の課題を解決するための実践的な手法を模索し、今回の研究へとつなげました。

— そして、「放射線グラフト重合」の反応性の予測と理解に成功したのです。

はい、AIと計算化学を組み合わせることで、これまで複雑で予測が困難だった放射線グラフト重合の反応性を、高い精度で予測・理解することに成功しました。この研究の一番の意義は、これまで研究者の「経験や勘」、あるいは膨大な回数の実験という試行錯誤に頼ってきた材料開発の現場に、データに基づく客観性と効率性をもたらした点にあります。実験を行う前にデジタル空間上で最適な反応条件を導き出せるため、開発にかかる時間やコストを大幅に削減できます。本研究で示したAI技術の活用は、次世代の革新的な有機材料をピンポイントかつ迅速に創り出す基盤となり、これからの材料開発を大きく加速させると期待しています。

— 令和7年度の日本学術振興会「育志賞」(注)を受賞しました。今年度、研究者としてのスタートラインに立ちました。

このような誉れ高い賞をいただき身の引き締まる思いです。支えてくれた家族や先生方への恩返しになっていれば嬉しく思います。今後は博士課程で培った研究手法をさらに発展させ、有機材料にとどまらず無機や金属など幅広い材料系へと展開していきたいと考えています。分野の枠を越えた手法の融合により、新たな視点から材料設計や反応理解に貢献し、世界を驚かせるような革新的な研究へと挑戦を続けていきます。

【注・・・日本学術振興会「育志賞」】

上皇陛下の天皇御即位20年に当たり、社会的に厳しい経済環境の中で、勉学や研究に励んでいる若手研究者を支援・奨励するための事業の資として、上皇陛下から御下賜金を賜り創設されました。将来、我が国の学術研究の発展に寄与することが期待される優秀な大学院博士課程学生を顕彰することで、その勉学及び研究意欲を高め、若手研究者の養成を図ることを目的としています。



図 有機材料合成の課題とAIを活用した放射線グラフト重合の反応性予測研究の概要