

2021年3月23日  
東レ株式会社

**2020 年度日本化学会 第 26 回技術進歩賞受賞  
「分子シミュレーションを用いたフッ素ポリマーの界面自由エネルギー予測技術の開発」  
－6年ぶり、6度目の「技術進歩賞」受賞－**

東レ株式会社(本社:東京都中央区、社長:日覺昭廣、以下「東レ」)は、このたび、『分子シミュレーションを用いたフッ素ポリマーの界面自由エネルギー予測技術の開発』について、公益社団法人日本化学会より「第 26 回(2020 年度)技術進歩賞」を受賞しました。日本化学会による「技術進歩賞」の授与は3年ぶり、当社の受賞は第 20 回(平成 26 年度)以来、6年ぶり6度目となりました。

このたびの受賞は、スーパーコンピュータを活用した大規模な分子シミュレーションにより、フッ素ポリマーの接触角と液体の界面自由エネルギーを定量的に予測することに世界で初めて成功し、分子レベルでの表面構造設計技術を開発したことで開発期間の短縮が期待される点が評価されたものです。

界面自由エネルギーは、吸着・接着・毛管現象など多様な現象を支配することで知られています。中でも吸着は分離膜の分離性能を決定する主要因であり、水処理膜におけるファウリング(汚れ成分の膜表面への吸着が引き起こす目詰まり)や気体分離膜における分離性能を左右するガス分子の膜への吸着など、分離の基礎科学を理解する上で重要な熱力学量です。

界面自由エネルギーの評価には一般的に接触角測定が用いられ、簡便な測定手法ながら表面の官能基や形状を高精度で測定できます。しかし、マクロな接触角とミクロな分子レベルでの表面構造との相関の明確化が容易ではないため、分離膜設計のコンセプト実証は試行錯誤的に進めざるを得ず、開発期間が長期化する一因となっていました。

東レは、国立研究開発法人新エネルギー・産業技術総合開発機構(理事長:石塚 博昭)による「超先端材料超高速開発基盤技術プロジェクト」において、先端素材高速開発技術研究組合(理事長:腰塚 國博)に参画し、名古屋大学の岡崎 進教授(現・東京大学)との共同研究を通じて、長年培ってきた独自の分子シミュレーション技術を深化させ、モデル材料として水処理膜製造に用いられるフッ素ポリマーを選択し、大規模分子シミュレーションによる界面自由エネルギーの定量的予測を実現しました。

本技術は、分離膜だけでなく界面接着強度の制御等にも応用可能であり、汎用的な高分子表面の設計技術となり得るため、将来にわたり高分子素材産業の発展に大きく貢献していくと期待される点が高く評価されたものです。今後、シミュレーションやインフォマティクスを活用したデジタル材料設計の発展を進めてまいります。

東レは今後も、「わたしたちは新しい価値の創造を通じて社会に貢献します」との企業理念のもと、コア技術である有機合成化学、高分子化学、ナノテクノロジーのさらなる深化、デジタル技術との融合を図り、革新的な先端材料の創出を進めてまいります。

以 上

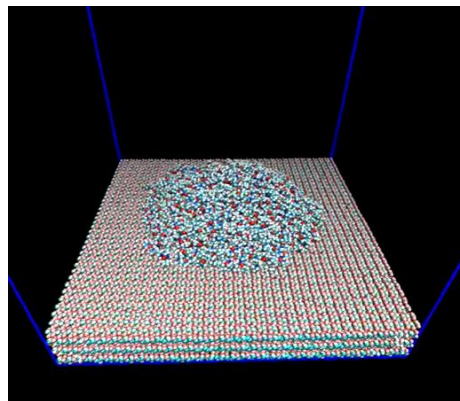


写真: 楯を持つ東レ(株)先端材料研究所 北畑研究員 (左)、受賞対象となった液滴シミュレーション(右)

日本化学会誌「化学と工業」(受賞記事) : <https://www.chemistry.or.jp/journal/ci21p192.pdf>

#### <ご参考>

#### 東レの「日本化学会・技術進捗賞」受賞履歴について

第 11 回(平成 17 年度)	「柱状構造を用いた超高感度 DNA チップの開発」
第 12 回(平成 18 年度)	「革新的な血液前処理デバイスおよびそれを用いた超高感度タンパク質解析技術の開発」
第 14 回(平成 20 年度)	「ベッドサイドでの迅速・高感度診断を可能にする革新タンパク質解析チップの開発」
第 16 回(平成 22 年度)	「膜利用発酵プロセスによる効率的な D-乳酸連続発酵技術の開発」
第 20 回(平成 26 年度)	「高分子分離膜と酵素技術を用いた非可食バイオマスから糖原料の新規製造プロセス技術の開発」
第 26 回(2020 年度)	「分子シミュレーションを用いたフッ素ポリマーの界面自由エネルギー予測技術の開発」

#### <本件に関するお問い合わせ先>

東レ株式会社 広報室 (東京)TEL:03-3245-5179 (大阪)TEL:06-7688-3085