

「産業科学フォーラム 2023」開催報告

日時：2023年9月20日（水）13時30分～16時50分

場所：名古屋大学ベンチャービジネス棟3階ベンチャーホール及びオンライン開催

テーマ：工学のエッセンス

昨年と同様、講演会とオンライン参加のハイブリッド方式で開催した。「新規事業を成功させるための設備投資額の許容範囲」、「X線分子軌道解析法の開発と実験から波動関数の評価」、「細胞外電子伝達物質を用いた微生物の環境技術への応用」と経営論、量子化学の基礎的研究、微生物の応用まで、幅広い話題の企画であったが、フォーラム終了後も熱心な討論が行われた。

参加者：21名（内オンライン参加7名）

講師：藤澤寿郎 副研究部長

講演タイトル：「新規事業を導入したい時に考える事」

講演者は、企業で新ビジネスの立ち上げを行われてきた。その実務体験をもとに、新規事業として、バイオマス発電事業を例に設備投資を行う時の考え方、特にいくらの設備投資が必要でそれで採算がとれるのか、について紹介された。

色々な分野の企業の売上金額と総資産額を比較され、電力会社の「総資産回転率＝売上金額／総資産額」は0.4前後であることを示された。新規事業を立ち上げる時に、想定できる売上額の評価は重要で、新規事業の「設備投資回転率＝売上額／投資額」をどう評価するかが重要となってくる。色々な資料から総資産回転率と設備投資回転率を合わせるとよいようである。

ある自治体のバイオマス発電経計画についての評価が示されたが、売上額が増やせず設備投資回転率が低いため、採算が取れそうになく結果的に計画は中止と判断された。その他、企業や地域が取り組んだバイオマスの活用個別事例が紹介された。

最後に、畜産農家で発生する糞尿を利用した小規模バイオガス発電の事業化について紹介された。人件費や従来の諸経費が抑えられ設備の償却のみでよい場合には設備投資回転率を低めに考えることも可能なようである。

討論では、「電力会社の場合との考え方の違いや売上金額の以外の因子」ということに対し、「これは大雑把な評価であるが、設備投資回転率から新規事業を立ち上げていいかどうか容易に判定でき、案外あっている」との応答がなされた。



講師：田中清明 上席研究員（名古屋工業大学名誉教授）

講演タイトル：「X線分子軌道解析法（XMO法）によるX線回折法と量子力学の結合」

結晶にX線を照射すると回折斑点が生じるが、この斑点の位置と強度をもとに位相が求め

られると、フーリエ変換により結晶の電子密度が求まる。電子密度の極大な位置に原子を置くことにより、分子の立体構造を決めるのが X 線結晶構造解析である。そして電子密度は波動関数の絶対値の二乗であることから、X 線回折法で波動関数に至る方法として、XMO 法が開発された。

X 線分子軌道解析(XMO 法)により、(NHCHO)₂分子の MO を求めた過程が紹介された。XMO 法の理論とグループ法を用いた解析の方針が説明され、3 段階での精密化、(A) 通常の球状原子としての結晶学的パラメータ (CrP) の精密化、(B) GAUSSIAN09 で計算した MO (CrP は固定) の精密化、(C) 最後に XMO 法、すなわち HONDO-8 で計算した MO を CrP とともに精密化して行く。

(A) の通常の X 線解析で用いる分子軌道 (MO) を適用した球状原子モデルの精密化で精密化因子 (R 因子) は 0.0261(通常の精密化の 1/2 程度のレベルで、X 線の測定精度が高いことを示している)となっている。(B)、(C) の精密化後、R 因子は 0.0124 で有意に減少した。差電子密度図でもピークは無く、XMO 解析法が成功したことが示された。

最後に、原子軌道の一次結合として求めた MO が、複雑な測定電子密度を驚くほど細部まで再現していることを、「電子密度と MO の結合—位相ダイアグラム」などから示した。これは、XMO 解析法で得られた MO は化学結合論の観点から正しい結果を与えている、つまり、量子力学と X 線回折法が直接的に結びつけられたことを示していると言えよう。

特に質問がなかったので、司会者により「講演者が紹介されなかった実験と解析、特に X 線回折データの収集や構造の精密化の指標である R 因子が 0,01 程度まで下げられていることの意義とそれに至る難しさ」についてコメントがあった。

講師：片山新太 名古屋大学特任教授

講演タイトル：「細胞外電子伝達物質を用いた微生物の環境技術」

最初に、日本の地下水の汚濁の状況について紹介された。2000 年以降は硝酸性窒素・亜酸性窒素による汚染の伸びが顕著で、半導体洗浄剤による汚染は減少している。昔の農薬処理政策による土壌や地下水帯（いずれも嫌気環境）における有機ハロゲン化合物の問題などの後、土壌地下水汚染の浄化修復についての説明がなされた。そして、安価で CO₂ 排出量の少ない微生物浄化技術の現状が示された。

最初に、微生物による有機塩素系化合物の嫌気性脱塩素について紹介された。脱塩素呼吸を行う微生物の分離とその応用事例からは、ジオキササンやポリ塩化ビフェニルの脱塩素も可能である。しかし、まだ脱塩素できないペンタクロロフェノールなどの化合物も残っている。



次に嫌気性ペンタクロロフェノール脱塩素菌に関する研究から、細胞外電子伝達物質であるヒューミンの発見とその応用が紹介された。ヒューミンは土壌中の腐植物質の一つで、土細胞外電子伝達物質として機能し多様な微生物反応を促進できる。固体腐植ヒューミンを用いた生物電気化学浄化装置の構築と脱塩素の促進の成果も示された。種々のヒューミンの化学的特性と脱塩素速度の解析から、その機能を支える化学構造も提案された。これは、新規な細胞外電子伝達材料の探索につながり、蚕シルクの細胞外電子伝達能力の発見に至っている。

最後に、固体腐植ヒューミンを用いた脱窒微生物の電気化学的な反応の促進など、脱窒固定微生物群の活性を固体腐植ヒューミンが大きく高めることが紹介された。

討論では、「固体腐植ヒューミンの収率や活性の違い」などについて、「固体腐植ヒューミンは自然物で採取場所により活性に差は出てくる、手を加えて使いやすいものにすることや、同じ機能を持ったものを合成することを目指している」などの応答がなされた。

オンライン参加も含めたハイブリッド開催のため、システムの接続に手間取り講演の開始が4, 5分遅れたことを、参加いただいた皆様にお詫びいたします。会場の準備をいただいた藏藤常務理事、研究部事務の方々に感謝します。

(文責 山根 隆 上席研究員)