

巻頭言

- モデルベース研究の試みと協会の効率化 大下 浄治 . . . 1

ひとこと

- ケイ素化学の世界へ 小坂田 耕太郎 . . . 2
 真実と議論について思うこと 飛田 博実 . . . 4

トピックス—昨日今日そして明日のケイ素化学

- 元素ブロックとしてのカゴ型シルセスキオキサン 郡司 天博 . . . 6
 ダブルデッカー型シルセスキオキサンを用いた高耐熱・透明フィルムの創製
 吉田 一浩、山廣 幹夫 . . . 14
 ケイ素の特性を活用した新反応と新しい有機ケイ素分子の開発：
 シリルアルキン・シリルアルケンの化学，キラルケイ素分子の化学
 井川 和宣、河崎 悠也、友岡 克彦 . . . 21
 「重いアリアルアニオン」の化学 水畑 吉行 . . . 31
 ボリルシランをシリレンおよびシレン合成等価体として利用する触媒的分子変換
 大村 智通、杉野目 道紀 . . . 40

協会賞

- 有機ケイ素配位子をもつ後期遷移金属錯体の構造と反応の解明 小坂田 耕太郎 . . . 50

技術賞

- 新奇フルオロアルキルシルセスキオキサンをベースとする
 機能性コーティング材料の開発と工業化
 伊藤 賢哉、平木 聡一郎、及川 尚夫、山廣 幹夫 . . . 52

奨励賞

- σ 電子受容性シラン配位子を基軸とする新規錯体の創生と触媒反応の開発
 亀尾 肇 . . . 54

シリコン R&D

- ケイ素化合物のスケールアップ合成 アヅマ株式会社 村上 信仁 . . . 56

シリコンスクエア—会員の広場

- 自分史 猪股 航也 . . . 57
 無機高分子とケイ素化学 金子 芳郎 . . . 58

研究室紹介

- 学習院大学理学部化学科 狩野 研究室 . . . 59
 九州大学先端物質化学研究所 國信 研究室 . . . 60
 岡山大学異分野基礎科学研究所 西原 研究室 . . . 61

Special Article

- 光学材料としてのシリコーン 伊藤 真樹 . . . 62
 D4 松本 允 . . . 64

第24回ケイ素化学協会シンポジウムプログラム

. . . 66

事務局より

入会の手続きおよび会員情報等の変更について	・・・	69
ケイ素化学協会名誉会員、役員および顧問名簿	・・・	70
令和元年度会計決算報告書	・・・	71
決算監査意見書	・・・	72

編集後記

・・・	73
-----	----

モデルベース研究の試みと協会の効率化

広島大学大学院先進理工系科学研究科 大下浄治



4月にケイ素化学協会の会長を仰せつかって半年が過ぎました。この間、COVID-19の問題で大学も社会も対応に追われてきました。第2波が過ぎたとは言え、まだ見通しがつかないように思われます。見えない敵というものがこれほど厄介なものかと皆さん感じられているのではないのでしょうか。協会の方も対応に苦慮した結果、他の多くの学会同様に今年度のシンポジウムをオンライン開催とさせていただきます。COVID-19は大変な損失を社会にもたらし、大学でも多くの研究室が実験停止になったり人数制限を設けたりしたわけですが、我々にとっては、これまで実験に頼ってきた研究をどう効率的に進めるかを改めて考えさせられる機会でもありました。

5年ほど前から、企業との共同研究の中でモデルベースリサーチ (MBR) という手法を展開しようとしています。現象・機能をできるだけモデル化して、効率的な材料開発に導こうとするものです。最初のきっかけは、ポリシルセスキオキサンの分子量をモデル式によってモノマーの化学構造のパラメータから予測しようとしたもので、MIの一種と言えるかもしれませんが、私には、いい成果に思えたのですが、論文の投稿から採択まで2年以上かかってしまいました。モデルの根拠

が乏しかったことと、検証が不十分だったのが原因と思います。2年前には学内に化学、プロセス、制御、情報の研究者からなるMBR拠点という研究拠点を作ってもらいました。また、MBRによる自動車用材料の開発は、地方創生の国プロのテーマにも採択されています。

最初の論文がなかなか採択してもらえなかったこともあり、あまり積極的になれない時もありましたが、新しい社会秩序の中で試行錯誤を少なくして効率的に、通常の化学的思考では思いつかない材料を得る手法として取り組んでいきたいと考えています。

さて、協会の運営を見てみますと、まだまだデジタル化が遅れているように思います。今年度から名簿の印刷をしないことにしました。これは、個人情報保護の観点からの取り組みでもあります。質を落とさず簡略化できることには、今後も取り組んでいきたいと思っています。また、オンライン講演会の開催など、会員の皆様へのお金のかからないサービスも考えていきたいと思っています。

ただ、やはり、地酒パーティーを含む対面でのシンポジウムが開催できなかったことは、大変残念でした。来年度は、多くの方々とシンポジウム会場でお目にかかれることを願っています。