

国立大学法人京都工芸繊維大学基金奨学生実績報告書

所属・年次	工芸科学研究科	物質・材料化学 専攻 3 年次
氏名	LI HAOLUN	
奨学金支給年月（支給金額）	2022 年 2 月支給（100万円）	

研究課題及び研究実績の概要

研究課題	活性種による高分子構造変化及び活性種の細胞膜輸送に関する分子動力学研究
<p>活性種は反応性の高い物質であり、高分子や生体分子に接触するとそれらに損傷を与え、材料や物質の本来の機能を損なう。高分子材料が損傷を受けると、架橋や鎖切断等が発生することはよく知られているが、その構造変化の全容はまだ完全には明らかになっていない。一方、活性種は正常な細胞には侵入せず、ガン細胞のみに侵入して DNA を攻撃し、ガン細胞を死滅させることが知られている。このような活性種の性質に着目したガン治療法が提出されたが、活性種の細胞膜輸送過程の全容はまだ明らかになっていない。上述の二つの過程の時間スケールと空間スケールは極めく小さいため、現時点では、実験で研究することは困難である。そこで、本研究では、分子動力学 (MD) 法を用い、上述の二つの課題、①活性種による損傷高分子の構造変化、及び②活性種の細胞膜輸送過程について調べた。</p> <p>課題①では、MD 法を用いて通常環境条件下で、代表的な高分子材料であるポリエチレンを研究対象とし、活性種により水素の引き抜かれたポリエチレンの構造変化を調べた。古典 MD シミュレーションを行った結果、全炭素数に対する取り除かれた水素数の比が 0.1 以上の場合、ポリエチレンの熱安定性及び構造安定性が低下することを明らかにした。また、反応 MD シミュレーションを用い、損傷ポリエチレンの分子内及び分子間化学反応（二重結合の生成、環状構造や共役構造の形成、高温での鎖切断など）の過程が再現でき、架橋反応が起こるために必要な条件についても明らかにした。今後、本研究と同じ手法を用いることにより、より複雑な高分子材料が損傷を受けた場合の構造変化を予測することが可能となる。</p> <p>課題②では、古典 MD シミュレーション及び操舵 MD シミュレーションを行い、OH ラジカルの脂質二重膜タンパク質 (AQP1) 複合体の透過過程を調べた。OH ラジカルが各経路を透過する過程における各位置での受ける力を計算した結果、脂質膜、AQP1 の水チャンネル、AQP1 真中の穴をそれぞれ透過する過程において、特定の部位で OH ラジカルが大きな斥力または引力を受けることが分かった。現段階では、OH ラジカルの細胞膜輸送経路の詳細を確認できていないが、今後自由エネルギー計算を行うことにより、細胞膜輸送経路を明らかにすることができると期待される。また、前述のように、活性種の種類や濃度の膜透過性への影響を調べ、データを収集することにより、最も効率的にガン細胞を死滅させる組成を明らかにすることが可能となる。これらの知見は、今後活性種を含む CAP (低温大気圧プラズマ) によるガン治療を展開する上で非常に役立つものと期待される。</p>	

## 研究成果

### ・ 学術論文

[1] **H. Li**, S. Fujiwara, H. Nakamura, T. Mizuguchi, A. Nakata, T. Miyazaki and S. Saito, Structural change of damaged polyethylene by beta-decay of substituted tritium using reactive force field, Jpn. J. Appl. Phys. 60, SAAB06 (2021).

### ・ 国際会議／シンポジウム

[1] **Haolun Li**, Susumu Fujiwara, Hiroaki Nakamura, Tomoko Mizuguchi, Shinji Saito, Wataru Sakai, "Reactive molecular dynamics simulations on structural stabilization of damaged polyethylene chains", The 31st International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC-31), Online, November 9, 2022 (P2-4F01) (ポスター、査読有)

[2] **Haolun Li**, Susumu Fujiwara, Hiroaki Nakamura, Tomoko Mizuguchi, Shinji Saito and Wataru Sakai, "Reactive molecular dynamics study on intermolecular structural changes of hydrogen-abstracted polyethylene chains", The 41st JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2022), Online, September 2, 2022 (口頭、査読有)

[3] **Haolun Li**, Susumu Fujiwara, Hiroaki Nakamura, Tomoko Mizuguchi, Ayako Nakata, Tsuyoshi Miyazaki, Shinji Saito, Wataru Sakai, "Reactive molecular dynamics simulations on intramolecular and intermolecular structural changes of damaged polyethylene chains", 14th International Symposium on Advanced Plasma Science and its Applications for Nitrides and Nanomaterials (ISPlasma2022)/15th International Conference on Plasma-Nano Technology & Science (IC-PLANTS2022), Online, March 9, 2022 (No. 1085) (口頭、査読有)

[4] **Haolun Li**, Susumu Fujiwara, Hiroaki Nakamura, Tomoko Mizuguchi, Ayako Nakata, Tsuyoshi Miyazaki, Wataru Sakai, Shinji Saito, "Reactive molecular dynamics simulations on structural stabilization of damaged polyethylene chains", The 30th International Toki Conference on Plasma and Fusion Research (ITC-30), Toki (JAPAN) / Online, November 18, 2021 (18Ea8) (口頭、査読有)

[5] **Haolun Li**, Susumu Fujiwara, Hiroaki Nakamura, Tomoko Mizuguchi, Ayako Nakata, Tsuyoshi Miyazaki, Shinji Saito, Wataru Sakai, "Reactive molecular dynamics study on damaged polyethylene after hydrogen abstraction by radiation", The 40th JSST Annual International Conference on Simulation Technology (JSST2021), Online, September 3, 2021 (口頭、査読有、発表受賞)

### ・ 国内の会議／シンポジウム

[1] **LI HAOLUN**, 藤原 進, 中村 浩章, 水口 朋子, 中田 彩子, 宮崎 剛, 齊藤 真司, 坂井 互, "放射線による損傷ポリエチレンの構造変化に関する反応分子動力学シミュレーション", 2021 年度核融合科学研究所一般共同研究(研究会)「置換トリチウムのベータ壊変による DNA 構造変化に関する研究会」, オンライン開催, 2022 年 1 月 24 日 (口頭、査読無)

[2] **LI HAOLUN**, 藤原 進, 中村 浩章, 水口 朋子, 中田 彩子, 宮崎 剛, 齊藤 真司, 坂井 互, "真空中における損傷炭化水素の構造変化に関する反応分子動力学シミュレーション", 第 70 回高分子討論会, オンライン開催, 2021 年 9 月 6 日 (1G18) (口頭、査読無)

[3] **LI HAOLUN**, 藤原 進, 中村 浩章, 水口 朋子, 中田 彩子, 宮崎 剛, 坂井 互, 齊藤 真司, "真空中における損傷炭化水素の構造安定化に関する反応分子動力学シミュレーション", 光・量子ビーム科学合同シンポジウム 2021 (OPTO2021), オンライン開催, 2021 年 6 月 22 日 (P129) (ポスター発表、査読無)

[4] **LI HAOLUN**, 藤原 進, 中村 浩章, 水口 朋子, 中田 彩子, 宮崎 剛, 齊藤 真司, 坂井 互, "真空中における損傷炭化水素の構造安定化に関する反応分子動力学シミュレーション", 第 70 回高分子年次大会, オンライン開催, 2021 年 5 月 28 日 (3D16) (口頭、査読無)

[5] **LI HAOLUN**, 藤原 進, 中村 浩章, 水口 朋子, 中田 彩子, 宮崎 剛, 齊藤 真司, "真空中における損傷ポリエチレン一本鎖の構造安定化に関する反応分子動力学シミュレーション", JSST Workshop&2020 年度核融合科学研究所一般共同研究(研究会)「置換トリチウムのヘリウム 3 への壊変による DNA 構造変化に関する研究会: Radiation Effects in Materials and Biological Molecules」, オンライン開催, 2021 年 1 月 15 日 (No. 7) (口頭、査読無、発表受賞)

[6] **LI HAOLUN**, 藤原 進, 中村 浩章, 水口 朋子, 中田 彩子, 宮崎 剛, 齊藤 真司, "反応力場を用いた置換トリチウムの崩壊による損傷ポリエチレンの構造変化に関する分子動力学研究", 第 29 回ポリマー材料フォーラム, オンライン開催, 2020 年 11 月 26 日 (1PD50) (ポスター発表、査読無)

[7] **LI HAOLUN**, 藤原 進, 中村 浩章, 水口 朋子, 中田 彩子, 宮崎 剛, 齊藤 真司, "置換トリチウムのベータ崩壊による損傷ポリエチレンの構造変化に関する反応力場分子動力学研究", 2020 年度高分子基礎物性研究会・高分子計算機科学研究会・高分子ナノテクノロジー研究会 合同討論会, 2020 年 11 月 5 日 (No. 29) (口頭、査読無)

[8] **Haolun Li**, Susumu Fujiwara, Hiroaki Nakamura, Tomoko Mizuguchi, Ayako Nakata, Tsuyoshi Miyazaki, Shinji Saito, "A Molecular Dynamics Study on Structural Change of Damaged Polyethylene by Beta-decay of Substituted Tritium using Reactive Force Field", 第 69 回高分子討論会, オンライン開催, 2020 年 9 月 16 日 (IESA08) (口頭、査読無)

## 受賞歴等

[1] **Haolun Li** 「JSST Workshop Outstanding Presentation Award」(2021.3)

[2] **Haolun Li** 「JSST 2021 Student Presentation Award」(2021.11)

国立大学法人京都工芸繊維大学基金奨学生実績報告書

所属・年次	工芸科学研究科	建築学専攻	3年次
氏名	和田 露		
奨学金支給年月（支給金額）	2021年 6月支給（100万円）		

研究課題及び研究実績の概要

研究課題	近代日本における小売市場の出現と都市への展開に関する歴史的研究
<p>わが国の都市の近代化過程に関する研究は多くの蓄積がなされ、その中で商業空間は都市住民による都市形成の実態を探ることを目的に研究対象にとりあげられてきた。商業空間を対象とする研究蓄積から、市井の人々の実態と市街地形成との関わりが明らかになりつつある一方で、行政による施策と都市住民との関係性、都市空間における第二次世界大戦前（以下、戦前）／第二次世界大戦後（以下、戦後）の継承や変容については不明な点が多く残されている状況にある。また、従来の都市史研究では主に都市の中心部である繁華街がその対象とされてきたが、近代以降、六大都市を中心に市域の拡張が行われていることから、近現代の都市形成過程の全容を把握する上では、都市の周辺部における市街地形成過程を明らかにしていくことが重要な課題となっている。</p> <p>そこで、本研究では、都市計画事業が極めて計画的に進められた京都市を事例に、1918年（大正7）以降、行政と民間事業者が主体となって開設が進められた商業施設である小売市場に着目した。京都市の小売市場は1918年以降に新しく市域に編入した地域に多く立地した事態がある。このことから、京都市の小売市場の実態に迫ることで近代都市形成過程における商業空間の成立要因や市域の周辺部における市街地形成過程を明らかにすることができると考え、研究を実施した。</p> <p>まず、大正期から昭和10年代における小売市場の実態に着目し、小売市場の導入時の設置施策と小売市場の成立過程を辿った。京都市の公設小売市場の設置は流通の合理化を明確な目的として設置が進められ、小売市場の普及とともに、指定市場制度や開設の許可制を実施することで、行政側は小売業態を指導・管理する体制を実現していった。また私設小売市場には小売業とは関係のない多様な事業者が参入し、新たな需要が開けていた京都市の新市域に都市計画事業と連動しながら小売市場の開設が進められていった様子を窺うことができた。</p> <p>次に、戦後における京都市の商業空間の成立過程を把握することを目的に、戦中期から昭和30年代における小売市場の経過を辿り、戦後に現れた新興商業集団と戦前から存在する商業集団が都市内部にどのように商業空間を構築していったのかについて検証した。そこでは終戦直後に不安定で流動的な露天営業を余儀なくされた小売商人たちが、特定の市場に定着し、安定的な商売を営むことができるようになっていく過程を見出すことができた。ここから、小売市場の形成・展開が、戦後復興期の商業拠点の形成を担ったものであると考察した。</p> <p>以上より、小売市場の設置が商業空間の揺籃期において市街化を誘導する役割を持っていたことを指摘することができる。本研究で得られた知見は小売市場が普及した他都市においても敷衍化できる可能性があり、近現代期における商業空間の形成過程を理解するうえで有用といえる。また、本研究では従来の日本近代都市史研究において等閑視されてきた小売市場を取り上げた。このことは、わが国の近代期における商業空間を総体化するうえでも大きな意義があると考えられる。</p>	

## 研究成果

### 【査読付学術論文】

[1] 和田 藍・大田省一・中川理、戦前期京都市の小売市場の設立基盤とその立地構造に関する研究 郊外地の市街地形成過程に関連して、日本建築学会計画系論文集・第 87 巻・第 802 号・pp. 2666-2677・2022 年 12 月 1 日

[2] 和田 藍・大田省一・中川理、第二次世界大戦後の京都市における商業集団の形成とその立地に関する研究、日本建築学会計画系論文集・第 88 巻・第 806 号・pp. 1505-1516・2023 年 4 月 1 日

### 【書籍】

[3] 和田 藍・中川理、小売市場の普及に見る生活文化の近代的変容、高木博志編『近代京都と文化―「伝統」の再構築』思文閣出版・pp. 623-651・2023 年 8 月 31 日

### 【国内学会発表】

[4] 和田 藍・中川理、戦前期の京都市における都市開発事業と日用品小売市場の動向に関する研究、日本建築学会大会学術講演会（東海）・日本建築学会・2021 年 9 月 7 日、口頭発表（コロナ禍のためオンラインでの実施）、梗概は『日本建築学会学術講演会（東海）学術講演梗概集』（日本建築学会、2021 年 9 月）pp. 489-490 に掲載

[5] 和田 藍・大田省一、戦後京都の小売市場の立地とその開設経緯に関する研究、日本建築学会大会学術講演会（北海道）・2022 年 9 月 8 日、口頭発表（コロナ禍のためオンラインでの実施）、梗概は『日本建築学会学術講演会（北海道）学術講演梗概集』（日本建築学会、2022 年 9 月）pp. 529-530 に掲載

[6] 和田 藍・大田省一、第二次世界大戦後の大阪市における公設市場の再開と商業基盤の整備過程、日本建築学会学術講演会（近畿）・日本建築学会・2023 年 9 月 14 日、口頭発表（京都大学）、梗概は『日本建築学会学術講演会（近畿）学術講演梗概集』（日本建築学会、2023 年 9 月）pp. 59-60 に掲載

### 【フェローシップ採用】

[7] 令和 3 年度 京都工芸繊維大学 京都産学共創 異分野融合フェローシッププログラムに採用（採用期間：2021 年 10 月 1 日～2024 年 3 月 31 日）

## 受賞歴等

[1] 2021 年（第 32 回）日本建築学会優秀卒業論文賞／優秀修士論文賞「京都市における日用品小売市場の出現と市街地拡大に関する研究」において優秀修士論文賞を受賞。（2021 年 9 月 7 日）

[2] 日本建築学会大会学術講演会（東海）において、2021 年度日本建築学会大会学術講演会建築歴史・意匠部門 若手優秀発表賞受賞。（2021 年 11 月 12 日）

[3] 日本建築学会大会学術講演会（北海道）において、2022 年度日本建築学会大会学術講演会建築歴史・意匠部門 若手優秀発表賞受賞。（2022 年 11 月 15 日）