

機関番号：12601

領域設定期間：令和元年度～令和5年度

領域番号：6104

研究領域名（和文）水圏機能材料：環境に調和・応答するマテリアル構築学の創成

研究領域名（英文）Aquatic Functional Materials: Creation of New Materials Science for Environment-Friendly and Active Functions

領域代表者

加藤 隆史（KATO Takashi）

東京大学・大学院工学系研究科・教授

研究者番号：70214377

交付決定（予定）額（領域設定期間全体）：（直接経費）1,185,200,000円

研究の概要

「材料科学」と「水の基礎科学」の融合により「水」の存在下において、環境と調和・相互作用しながら機能を発現する材料を「水圏機能材料」と定義し、その創製に焦点を当てる。有機化学・高分子化学、物理学・精密計測および計算科学、工学を含めた広い視点を取り入れ、水と物質の構造・機能に関する基礎学理に依拠した新しい学術体系「水圏機能材料構築学」を創成する。「水」と「材料」の相互作用を分子レベル・ナノ集合レベルでとらえ、電子・イオン機能性、バイオ・環境機能性、メカノ機能性を発揮する水圏機能材料を構築する。これにより世界に先駆けた物質・材料学における新学術領域を築く。

研究分野：有機化学・高分子化学、物理学・精密計測、計算科学、バイオマテリアル学、工学

キーワード：水圏機能材料、電子・イオン機能、バイオ・環境機能、メカノ機能、先端計測・シミュレーション

1. 研究開始当初の背景

水なしでは機能しないシステムである我々生命体や地球環境にとって、水分子の存在する場、すなわち、地球上の環境や、生活・産業の場、および生体内と調和しながら、自在に機能を発揮する材料の新しい設計原理を見出すことが、人類の持続的発展のために重要な課題である。我々はこのような、水分子と他の分子・材料との相互作用が重要な役割を果たす場を「水圏」と定義する。「水圏」で高機能を発揮する材料開発のためには、水と材料の構造・機能の相関に立脚した統合的な材料構築学を確立する必要があると考えた。しかし、研究開始時点において、電子材料・高分子材料などの開発では、非水圏での使用を意識したものが主であり、水の基礎科学では、水単独での水素結合や結晶・液体構造の研究が中心であった。つまり「水環境（水圏）において働く材料の構築学」と「水の基礎物性科学」の融合分野は未開拓であった。生体分子とバイオマテリアルの相互作用などの研究を通じて、水の分子としての振る舞いが材料の機能に及ぼす影響についての議論が必要とされた。



図1. 水圏機能材料の目的とそのための学問融合

2. 研究の目的

本新学術領域研究では、「水」の存在下において環境と調和・相互作用しながら機能を発揮する材料を「水圏機能材料」と定義し、「水」と「材料」の相互作用を分子レベル・ナノ集合レベルでとらえ、水と物質の構造・機能相関の基礎学理に依拠しつつ、材料科学に展開する「水圏機能材料構築学」を創成することを目的とする（図1）。原子・分子レベルからナノ集合レベル、さらにマクロ材料レベルにいたる水の構造・相互作用・運動をとらえ、それらの深い理解から、

水圏において高度に機能発現する材料を構築する。すなわち、「材料科学」と「水の基礎科学」の融合とそれによる材料創製に焦点を当てる。

3. 研究の方法

本研究では、水圏における機能発現のプロセスを、界面接続「つなぐ」、融合機能発現「はたらく」、水環境合成「つくる」という観点からとらえる新たな視座を取り入れる。既存の材料科学を超えて、常温・常圧・水圏環境下で新たな機能・物性を発現する水圏機能材料を創製する(図2)。

さらに、ピコ秒から秒までの時間スケール、ナノメートルからミリメートルにわたる空間スケールにおいて材料と相互作用する水が材料の新たな機能に資するというコンセプトの下、化学、物理学、生物学、工学から研究者を配した分野横断型の融合的アプローチにより、水圏環境において精密機能制御を達成する。

水圏材料合成化学だけでなく、世界最高レベルの先端計測、すなわち、放射光・中性子計測、理論解析・分子シミュレーションの物理を融合させることにより、水圏機能材料における水と物質の構造・機能の関係を明らかにする。

水と材料の相互作用に焦点を定め、電子特性に着目した電子・イオン機能材料、生体親和性に着目したバイオ・環境機能材料、力学特性に着目したメカノ機能材料を中心とした研究を行う。材料の構築、水および含水状態における材料の構造・機能解析の研究者が一丸となり、材料と共生する水の学理を追究し、水圏機能材料を創製する。



図2. 水圏機能材料学創成に向けた取り組み

4. 研究の進展状況及び成果

本研究領域で取り組む、環境や他のデバイスと調和・相互作用しながら機能を発揮する材料として、単一の機能発現だけでなく、構造を極めて精緻に設計・構築することにより、分子認識・イオン伝導等を検出する電子・イオン機能材料や、生体環境を感知応答するバイオ・環境機能材料、軽量・超高強度のメカノ機能材料などの設計・合成が進行している。

機能性イオン液晶膜の細孔中の水を軟X線発光分光で解析し、水素結合構造がイオン透過性に影響することを見出した (T. Kato, Y. Harada, et al. *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020; 図3A)。また、計算科学・シミュレーションにより水の透過プロセスが解明された (T. Kato, H. Washizu, et al. *Sci. Adv.*, 2021; 図3B)。

水分子に応答して外部に位置する π 電子ユニットの構造が変化して、色が可逆的に変化する有機結晶の創製に成功した (Y. Takeda, Y. Ikemoto, et al. *Commun. Chem.*, 2020; 図4)。

材料近傍における水分子の振動状態や、材料と水の界面における水素結合ネットワークの詳細な状態が明らかになっている。マテリアルズインフォマティクスのための新規高分子構造表現法 (H. Washizu, *Sci. Rep.*, 2021) や、大規模計算による高分子材料の物性理解 (Y. Higuchi, et al. *Phys. Rev. E*, 2021) などの発展に成功している。

機能開拓班では、水圏での分子認識を利用した細胞の動的制御を達成した (M. Tanaka, et al. *Sci. Adv.*, 2020)。さらに水和状態制御により見出された新規生体親和性合成高分子 (M. Tanaka, et al. *ACS Biomater. Sci. Eng.*, 2020)、分子認識を用いた異種材料接着や高靱性自己修復材料 (G. Matsuba, Y. Takashima, et al. *Adv. Mater.*, 2020) などの開発が進行している。

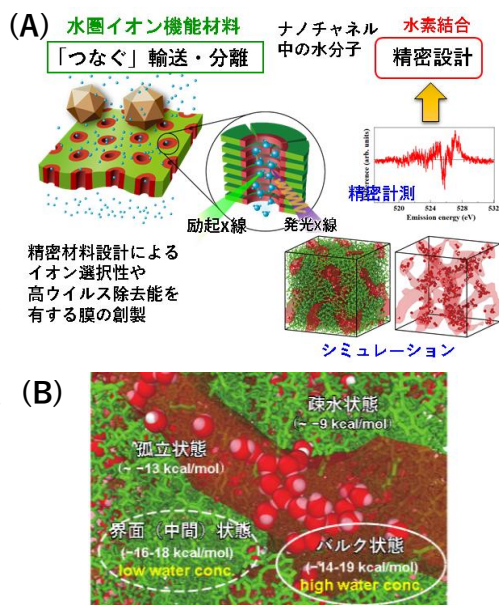


図3. 自己組織化イオンチャンネル液晶膜のナノ空間における水の状態計算

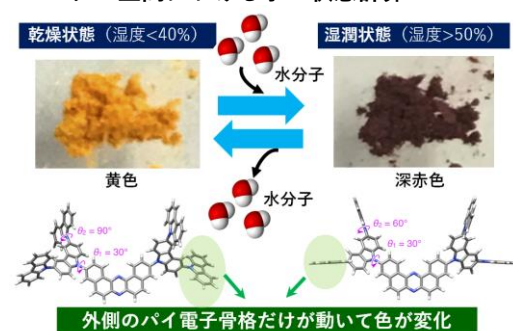


図4. 水分子の可逆的吸脱着で色が変わる多孔質有機結晶

5. 今後の研究計画

今後、本研究領域は「水」と「材料」の相互作用と材料創製の関係に、より焦点を絞って、領域全体で連携をさらに強化して研究を推進する。「分子設計」「機能解明」「機能開拓」のグループ間、ならびに計画研究と公募研究の連携、さらには国際共同研究の促進とネットワークの構築により、より一層の本領域の学理的な目標の達成ため研究を加速させる。これまでに開催した領域会議や各種フォーラムによって、本領域の学理構築の目標である「水の基礎物性科学」を、そのより深い理解と材料科学の融合により、さらに新しい領域として発展させる基盤ができたと考えている。今後、領域の各研究者または共同研究グループがこれまでに明らかにしてきた水に関する知見の「点」と「点」を結び、より深く掘り下げて体系化すべく研究を進める。それにより、水圏において高度に機能する新しい材料を創製し、今後の社会や人類の持続的な発展に寄与する材料科学とする。

6. 主な発表論文等（受賞等を含む）

主な発表論文（領域メンバーの発表論文総数：223件（内、計画研究の発表数：135件）、研究代表者には二重下線、研究分担者には一重下線、corresponding authorには左に*印を付した。）

- (1) *Yoshiki Ishii, Nobuyuki Matubayasi, Go Watanabe, *Takashi Kato, and *Hitoshi Washizu, “Molecular Insights on Confined Waters in the Nanochannel of Self-Assembled Ionic Liquid Crystal”, *Sci. Adv.* in press.
- (2) *Masaki Hada, *Yuta Nishina, and *Takashi Kato, “Exploring Structures and Dynamics of Molecular Assemblies: Ultrafast Time-Resolved Electron Diffraction Measurements”, *Acc. Chem. Res.*, **54**, 731-743 (2021).
- (3) *Takashi Kato, and *Yoshihisa Harada, et al. “Ion Selectivity of Water Molecules in Subnanoporous Liquid-Crystalline Water-Treatment Membranes: A Structural Study of Hydrogen Bonding”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **59**, 23461-23465 (2020).
- (4) *Takeshi Sakamoto, *Hiroyuki Katayama, and *Takashi Kato, et al. “High Virus Removal by Self-Organized Nanostructured 2D Liquid-Crystalline Smectic Membranes for Water Treatment”, *Small*, **16**, 20201721-1/5 (2020).
- (5) Takeru Inoue, Yasuchika Hasegawa, and *Hayato Tsuji, et al. “Long-Wavelength Visible to Near Infrared Photoluminescence from Carbon-Bridged Styrylstilbene and Thiadiazole Conjugates in Organic and Aqueous Media”, *RSC Adv.*, **11**, 6008-6013 (2021).
- (6) *Hideki Seto, and *Takashi Kato, et al. “Shear-Induced Liquid-Crystalline Phase Transition Behaviour of Colloidal Solutions of Hydroxyapatite Nanorod Composites”, *Nanoscale*, **12**, 11468-11479 (2020).
- (7) Yohei Shimizu, *Hitoshi Washizu, et al. “Higher-Order Structure of Polymer Melt Described by Persistent Homology”, *Sci. Rep.*, **11**, 2274-1/11 (2021).
- (8) *Marc Hippler, Masaki Nakahata, Yoshinori Takashima, *Martin Wegener, *Motomu Tanaka, and *Martin Bastmeyer, et al. “Mechanical Stimulation of Single Cells by Reversible Host-Guest Interactions in 3D Microscaffolds”, *Sci. Adv.*, **6**, eabc2648 (2020).
- (9) *Masaru Tanaka et al. “Understanding the Effect of Hydration on the Bio-Inert Properties of 2-Hydroxyethyl Methacrylate Copolymers with Small Amounts of Amino- or/and Fluorine-Containing Monomers”, *ACS Biomater. Sci. Eng.*, **6**, 2855-2866 (2020).
- (10) *Go Matsuba, *Yoshinori Takashima, et al. “Extremely Rapid Self-healable and Recyclable Supramolecular Materials through Planetary Ball Milling and Host-guest Interactions”, *Adv. Mater.*, **32**, 2002008-1/9 (2020).

主な受賞歴（領域メンバーの受賞総数：110件（内、学生の受賞件数：62件））

- (1) 加藤 隆史（東京大学）：紫綬褒章（2021年春の褒章、内閣府、2021年4月29日）
- (2) 加藤 隆史（東京大学）：2020年度 高分子科学功績賞（公益社団法人高分子学会、2021年2月19日）、「液晶性分子集合体・超分子ポリマーの構築・構造制御と機能化」
- (3) 桶葺 興資（北陸先端科学技術大学院大学）：令和3年度 科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞（文部科学省、2021年4月6日）「水と共生する生体模倣高分子材料に関する研究」
- (4) 辻 勇人（神奈川大学）：日本化学会学術賞（公益社団法人日本化学会、2021年3月20日）「低温現象を室温で顕在化する炭素架橋フェニレンビニレン化合物の創製」
- (5) 中村 貴志（筑波大学）：日本化学会進歩賞（公益社団法人日本化学会、2021年3月20日）「金属錯体ユニットの集積と構成要素の非対称化に基づく人工レセプターの開発」
- (6) 渡辺 豪（北里大学）：ChemComm Emerging Investigator 2020（英国王立化学会、2021年1月25日）
- (7) 南 豪（東京大学）：令和2年度 科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞（文部科学省、2020年4月7日）「超分子の分子認識能に基づく化学センサデバイスに関する研究」
- (8) 武田洋平（大阪大学）：令和2年度 科学技術分野の文部科学大臣表彰 若手科学者賞（文部科学省、2020年4月7日）「含窒素芳香環の新構築法を起点とする光機能分子の創製研究」

ホームページ等

領域ホームページ：<https://www.aquatic-functional-materials.org/>
「現代化学」誌 2021年5月～12月まで領域紹介記事を掲載。