

# Aquatic Functional Materials News



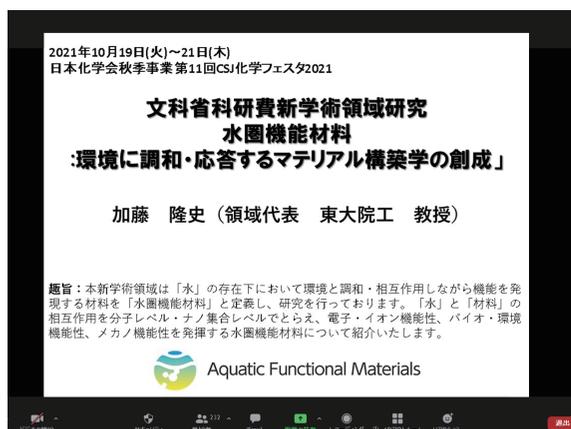
December 2021 ▶ No. 9

文部科学省科学研究費補助金 新学術領域研究 (研究領域提案型) (No. 6104) 令和元年-5年度

## 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

### 第11回CSJ化学フェスタ2021における公開企画の開催報告

第11回CSJ化学フェスタ2021(公益社団法人日本化学会主催)にて、本領域はオンラインにて公開シンポジウム企画を開催しました。「文科省科研費新学術領域研究「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」に関する特別企画として、10月20日(午前)には「材料に調和する水を使う・観る」、21日(午前)には「水との調和により創造される材料機能」と題した公開講演会を開催しました。本領域の理念である「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る、という理念に基づいて、1日目の企画では、水に関する計測と理論、分子シミュレーションに関する講演を、2日目の企画では、材料合成・機能に関する講演を行いました。いずれのセッションにおきましても、両日ともに250名近い聴講者にご来場頂き、質問の絶えない活発な議論がなされ、水と材料の科学の幅広さと重要性を再認識して、盛況に終わることができました。(阪大高等研・高島義徳)



1日目 10月20日(水) 9:30~11:55

開会挨拶

加藤 隆史(東京大学 大学院工学系研究科・教授)

A2-01

水圏機能材料としての生体適合性高分子~中性子で見えるもの~

瀬戸 秀紀(高エネルギー加速器研究機構 物質構造科学研究所・教授)

A2-02

水圏で「はたらく」低含水高分子材料の解析~少ない水の大きな効果~

藤井 義久(三重大学 大学院工学研究科・准教授)

A2-03

放射光赤外分光で観る水圏機能材料と水の状態

池本 夕佳(高輝度光科学研究センター 分光推進室・主幹研究員)

A2-04

分子シミュレーションで見る水圏機能材料

樋口 祐次(東京大学 物性研究所・助教)

A2-05

シミュレーションで水圏機能材料における分子の動きを"見る"

渡辺 豪(北里大学 理学部・講師)

A2-06

水圏機能材料分子近傍の水に関わる分光データの解析に向けた理論研究

鳥居 肇(静岡大学 工学部・教授)

2日目 10月21日(木) 9:30~12:00

A3-01

水圏機能材料の開発を目指した多糖類の構造解析

松葉 豪(山形大学 大学院有機材料システム研究科・教授)

A3-02

水圏界面における機能分子の配列制御と機能創出

牧浦 理恵(大阪府立大学 大学院工学研究科・准教授)

A3-03

水圏環境における発光性分子材料のセンシング機能

長谷川 靖哉(北海道大学 大学院工学研究院・教授)

A3-04

両親水性高分子の水圏での自己組織化能

三浦 佳子(九州大学 大学院工学研究院・教授)

A3-05

水-有機溶媒混合中における発光色素の挙動

辻 勇人(神奈川大学 理学部・教授)

A3-06

水圏電子・イオン機能材料創製のための生物着想材料の設計

中畑 雅樹(大阪大学 大学院基礎工学研究科・助教)

A3-07

多糖と水を用いた水圏エネルギー変換材料の設計

桶蔭 興資(北陸先端科学技術大学院大学 先端科学技術研究科・准教授)

閉会挨拶

田中 賢(九州大学 先端物質化学研究所・教授)

日時:2021年9月20日(月)-10月1日(金)

場所:WEB会議室

主催:新学術領域研究「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」総括班

## 企画主旨と事前準備

新学術領域研究「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」のアカデミアインターンシップを、2021年9月20日(月)から10月1日(金)にかけてオンラインで開催しました。このインターンシップは、本領域の計画研究に参画する研究グループに所属する実験系の学生と若手研究者を対象に、分子シミュレーションを用いた材料研究について体験することで、それぞれの扱っている分子系に対する理解を深めることを目的としました。

企画は、兵庫県立大学大学院情報科学研究科鷺津研究室が担当し、プログラムの設計と運営は石井特任講師が中心になり、ティーチングアシスタントは鷺津研の修士大学院生、事務は東京大学加藤研と鷺津研で行いました。兵庫県立大学は、データ計算科学連携センターという枠組みにより外部の研究者を受け入れる体制があり、事前に計算機のアカウントを作成しました。

## 導入

初日、9月20日は領域代表の加藤隆史教授(東京大学)の挨拶から始まりました。続いて、兵庫県立大学の鷺津および石井特任講師から、分子シミュレーションを用いた水圏機能材料の研究事例について紹介をしました。

その間に、参加者各自が自己紹介スライドを作成し、翌日、自己紹介を行いました。21日、22日はリモートアクセス方法のセッティングと、各自の研究室側および兵庫県大側の計算機環境の用意をしました。

講習そのものはZoomを用いて行い、ファイルの提示や回収、時間外の相談などにSlackを用いました。その他の固定資料は、鷺津研究室のウェブサーバに提示しました。個別の作業や質疑応答は、Zoomのブレイクアウトルームにおいて行いました。

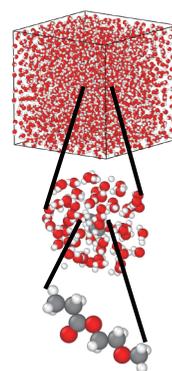


## 実習テーマ

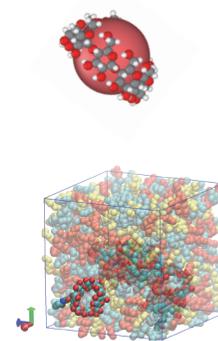
さて、実習のテーマは、大きく分けて2つ企画しました。

- ・テーマ1: 水溶液中の有機分子の水和シミュレーション
- ・テーマ2: 有機溶媒(モノマー)中のシクロデキストリンの包摂シミュレーション

いずれのテーマも、1.分子を描いて 2.量子計算してモデルを決めて 3.分子集団の中に入れて 4.物性解析する、というプロセスを経ます。テーマ1は、水圏機能材料の主テーマそのものですが、テーマ2は、A03-3大阪大学高島研究室で扱っているホスト-ゲストの包摂錯体をイメージしたものです。どちらのテーマについても、有機分子およびモノマーは任意の分子としました。これにより、参加している各研究室のテーマにあわせた分子を試してみることができます。



テーマ1: 水和



テーマ2: 包摂

## 計算開始

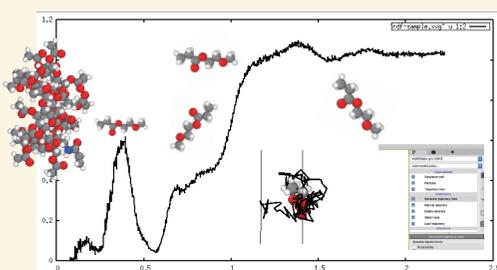
計算機シミュレーションは、Linuxを用いて遠隔アクセスをし、分子モデルのファイルやシミュレーション結果を転送することに最初のポテンシャルバリアがあります。これについては、普段から産学および学学連携研究を担当しているTAの修士大学院生が付ききりでサポートすることにより、研究開始することができました。そして第一週の終わりである9月24日には、それぞれの参加者は計算対象の分子を選定し、分子動力学計算を始めるところまで進みました。



## 成果報告会

実験系とはいえ、さすが若手研究者だけあって、参加者は分子設計ソフト、量子化学計算、分子動力学計算などにすぐに慣れて、思い思いの分子を描き、計算機上で溶液構造を計算しました。解析手法としては、基本的な手法である動径分布関数から、専門家でも若干難しい溶媒と自由エネルギー解析までを実施しました。

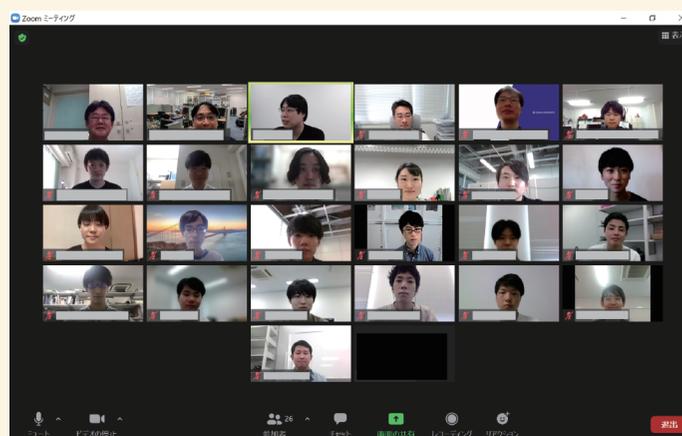
最終日には、指導教員も参加し、成果発表会を実施しました。5大学から集まった13名の学部生、院生、ポスドクがそれぞれ発表しました。どれも、そのまま学会発表や、修士・博士論文の一部に使いそうな解析でした。正直、多種多様な系の解析を実施し、短期間で上手にまとめた参加者のクオリティに驚きました。成果発表会の後には、指導教員の先生方および領域代表の加藤教授が感想を述べられました。



## まとめ

今回のアカデミアインターンシップでは、2週間という非常に短期間で、任意の有機分子の水和構造といった、本質的なデータを出せることを示したものであり、分子シミュレーションの普及にも大きな一歩となったと実感しています。若手の参加者も、分子シミュレーションを身近なツールとして感ることができ、本新学術領域の枠組みによって、ますます実験と理論の融合が進んだといえます。今後は、より広い対象者に拡大できればと思いました。領域代表の加藤先生はじめ、ご参加、ご協力いただきました全ての皆様に感謝申し上げます。

(兵庫県大院情報) 鷲津 仁志



## 第1回水圏インダストリーインターンシップ:中性子準弾性散乱 開催

日時:2021年11月12日(金)-14日(日)

場所:WEB会議室

主催:新学術領域研究「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」総括班

新学術領域研究「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」のインダストリーインターンシップを、2021年11月12日(金)から14日(日)にかけてオンラインで開催しました。このインダストリーインターンシップは、本領域の計画研究に参画する研究グループに所属する学生と若手研究者を対象に、中性子散乱を用いた企業研究に触れるとともに、先端的な実験手法による水圏機能材料の解析についてより深く学ぶことを目的に企画されたものです。

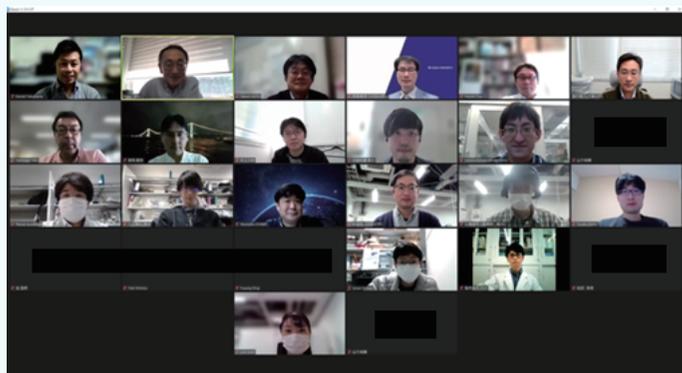
1日目のプログラムはオンライン講義で、最初に領域代表の加藤隆史教授(東京大学)から、領域全体の狙いとインダストリーインターンシップを開催する意義についての説明を兼ねた挨拶がありました。

続いて講義では、今回の世話を務めた KEK 物構研の瀬戸が、「中性子と中性子散乱」「中性子準弾性散乱」の2コマ分の講義を行って、中性子を用いて何が分かるのか、中性子準弾性散乱の特徴等について解説しました。そして1日目の最後は住友ゴム工業株式会社研究開発本部分析センターの岸本浩通センター長が、タイヤのゴムの高性能化の課題と、放射光、中性子、スーパーコンピューターを駆使して解析し、新製品開発に結びつけた経緯を紹介しました。

2日目は冒頭に瀬戸が Virtual Reality を用いて、J-PARC 物質・生命科学実験施設 MLF のオンラインツアーを行いました。続いて A02 班研究協力者の富永大輝博士(CROSS)が MLF の BL02 に設置されたダイナミクス解析装置 DNA の実験の詳細について紹介するとともに、データ解析の方法に

ついて説明しました。そして午後には実際に「水圏機能材料」のテーマの1つとして実験されたポリメチルメタクリレート (PMMA) に水和する水の QENS データを用いて、高分子鎖の拡散係数を求める実習を行い、論文の結果と比較しました。

今回は新型コロナウイルス禍の収束が見えないことから人数を絞ってのオンライン開催としたため、学生・若手研究者の参加者は8名でしたが、その分密度の濃い実習ができたようで、「インターンシップ後のアンケートでは多く



の参加者が得るところが大きかった」、と回答していました。世話人側としても見学や実習をオンラインで行うのは初めての経験で、至らないところも多かったのではないかと思います。多くの方々の協力により無事終わることができました。実習参加者と実習に協力して下さった先生方だけでなく、講演や Virtual Tour のみの参加だった方も含めた関係者の皆様に、この場を借りて感謝と御礼を申し上げます。

(KEK 物構研・瀬戸秀紀)



## Aquatic Functional Materials

文部科学省科学研究費補助金 新学術領域研究 (研究領域提案型)(No. 6104) 令和元年-5年度

「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」

ニュースレター第9号(2021年12月発行)

■編集・発行 「水圏機能材料」総括班

〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1

〒650-0047 神戸市中央区港島南町 7-1-28

<https://www.aquatic-functional-materials.org>

東京大学大学院工学系研究科 加藤研究室内

兵庫県立大学大学院情報科学研究科 鷺津研究室内