

領域略称名：水圏機能材料

領域番号：6104

令和6年度科学研究費助成事業  
「新学術領域研究（研究領域提案型）」  
に係る研究成果報告書（研究領域）兼  
事後評価報告書

「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」

領域設定期間

令和元年度～令和5年度

令和6年6月

領域代表者 東京大学・大学院工学系研究科・教授・加藤 隆史

# 目 次

## **研究組織**

1 総括班・総括班以外の計画研究	2
2 公募研究	3

## **研究領域全体に係る事項**

3 交付決定額	10
4 研究領域の目的及び概要	11
5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況	13
6 研究目的の達成度及び主な成果	15
7 研究発表の状況	20
8 研究組織の連携体制	25
9 研究費の使用状況	26
10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況	28
11 若手研究者の育成に関する取組実績	29
12 総括班評価者による評価	30

**研究組織**

(令和6年3月末現在。ただし完了した研究課題は完了時現在、補助事業廃止の研究課題は廃止時現在。)

**1 総括班・総括班以外の計画研究**

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
X00 総	19H05714 水圏機能材料の創成に関する総括研究	令和元年度 ～ 令和5年度	加藤 隆史	東京大学・大学院工学系研究科・教授	7
A01 計	19H05715 水圏機能材料の基盤となる分子設計・分子集合体の構築	令和元年度 ～ 令和5年度	加藤 隆史	東京大学・大学院工学系研究科・教授	2
A01 計	19H05716 水圏機能材料創製のための機能分子の精密合成	令和元年度 ～ 令和5年度	辻 勇人	神奈川大学・理学部・教授	3
A02 計	19H05717 水圏機能材料の先端構造・状態解析	令和元年度 ～ 令和5年度	原田 慈久	東京大学・物性研究所・教授	4
A02 計	19H05718 計算科学による水圏機能材料の設計	令和元年度 ～ 令和5年度	鷺津 仁志	兵庫県立大学・大学院情報科学研究科・教授	3
A03 計	19H05719 水圏機能材料の電子・イオン機能開拓	令和元年度 ～ 令和5年度	田中 求	京都大学・高等研究院・特任教授 ハイデルベルク大学・物理化学研究所・教授	2
A03 計	19H05720 水圏機能材料のバイオ・環境機能開拓	令和元年度 ～ 令和5年度	田中 賢	九州大学・先導物質化学研究所・教授	2
A03 計	19H05721 水圏機能材料のメカノ機能開拓	令和元年度 ～ 令和5年度	高島 義徳	大阪大学・大学院理学研究科・教授	2
<b>総括班・総括班以外の計画研究 計 8 件（廃止を含む）</b>					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

## 2 公募研究

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
A01 公	20H05197 水圏環境における発光性希土類分子会合体の形成と光機能	令和2年度 ～ 令和3年度	長谷川 靖哉	北海道大学・大学院工学研究院・教授	1
A01 公	20H05199 水圏機能材料のプラットフォームとしての多細胞型膜組織の構築	令和2年度 ～ 令和3年度	今井 正幸	東北大学・大学院理学研究科・教授	1
A01 公	20H05202 水素結合による分子認識を水圏で実現する機能性超分子ユニットの開発	令和2年度 ～ 令和3年度	中村 貴志	筑波大学・数理物質系化学域・助教	1
A01 公	20H05205 フラーレン分子超薄膜の二次元水圏電子・イオン材料としての応用	令和2年度 ～ 令和3年度	原野 幸治	東京大学・総括プロジェクト機構・特任准教授	1
A01 公	20H05206 極性分子の水表面での配向分極を利用した次世代型 OFET 用中間層の開発	令和2年度 ～ 令和3年度	藤野 智子	東京大学・物性研究所・助教	1
A01 公	20H05207 水ゲート有機トランジスタによるオキソアニオン類の認識とインバータ回路制御への応用	令和2年度 ～ 令和3年度	南 豪	東京大学・生産技術研究所・准教授	1
A01 公	20H05208 セルロース系分子集合体の水和構造解析と水圏バイオ機能材料への展開	令和2年度 ～ 令和3年度	芹澤 武	東京工業大学・物質理工学院・教授	1
A01 公	20H05216 大環状化合物の特異的ナノ空間を利用する物質輸送と分離膜構築に関する研究	令和2年度 ～ 令和3年度	河野 慎一郎	名古屋大学・大学院理学研究科・講師	1
A01 公	20H05217 潮解により創成される水圏ナノ周期構造の光配向制御法の開発	令和2年度 ～ 令和3年度	原 光生	名古屋大学・大学院工学研究科・助教	1
A01 公	20H05218 水酸基の3次元精密配列に基づく高次集積構造の構築	令和2年度 ～ 令和3年度	橋川 祥史	京都大学・化学研究所・助教	1
A01 公	20H05219 セルフソーティング高分子ミセルによる水圏機能材料の創出	令和2年度 ～ 令和3年度	寺島 崇矢	京都大学・大学院工学研究科・准教授	1

## 2 公募研究(つづき)

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
A01 公	20H05223 過酷な環境に調和する N-ビニルアミドを用いた高強度保水材の開発	令和2年度 ～ 令和3年度	網代 広治	奈良先端科学技術大学院大学・先端科学技術研究科・教授	1
A01 公	20H05224 水中の分子・イオンと選択的に相互作用する機能性炭素材料の開発	令和2年度 ～ 令和3年度	仁科 勇太	岡山大学・異分野融合先端研究コア・研究教授	1
A01 公	20H05229 環境応答型の分子分布を持つ水圏機能ペプチド材料の創製	令和2年度 ～ 令和3年度	若林 里衣	九州大学・大学院工学研究院・助教	1
A01 公	20H05230 水溶性ブロック高分子による水圏分子集合体の創製と機能材料への展開	令和2年度 ～ 令和3年度	三浦 佳子	九州大学・大学院工学研究院・教授	1
A01 公	20H05231 有機無機超分子複合体を用いた水圏光機能材料の創出	令和2年度 ～ 令和3年度	堀内 新之介	長崎大学・大学院工学研究科・助教	1
A02 公	20H05201 ブロック共重合体等を用いた高分子孤立鎖の高湿度下での運動制御	令和2年度 ～ 令和3年度	熊木 治郎	山形大学・大学院有機材料システム研究科・教授	1
A02 公	20H05210 原子レベルで制御されたモデル有機材料の化学構造-水和構造-界面現象の包括的研究	令和2年度 ～ 令和3年度	林 智広	東京工業大学・物質理工学院・准教授	1
A02 公	20H05211 ペプチド分子集合体からなる水圏機能材料の固体 NMR による構造解析	令和2年度 ～ 令和3年度	川村 出	横浜国立大学・大学院工学研究院・准教授	1
A02 公	20H05212 高速広域3次元走査型力顕微鏡による固液界面構造・現象の原子・分子スケール計測	令和2年度 ～ 令和3年度	宮田 一輝	金沢大学・ナノ生命科学研究所・助教	1
A02 公	20H05214 超空間デザイン無機結晶の固液界面でのイオン交換挙動の理解と応用	令和2年度 ～ 令和3年度	手嶋 勝弥	信州大学・学術研究院工学系・教授	1
A02 公	20H05215 電子密度変化の統計的解析に基づく水素結合系の静電分極モデルの生成法開発と応用	令和2年度 ～ 令和3年度	鳥居 肇	静岡大学・工学部・教授	1

## 2 公募研究(つづき)

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
A02 公	20H05221 凍らない水において多数の水分子が協奏して引き起こされる水素結合ダイナミクス	令和2年度 ～ 令和3年度	金 鋼	大阪大学・大学院基礎工学研究科・准教授	1
A02 公	20H05235 流れと接したバイオマテリアルの水和構造分析	令和2年度 ～ 令和3年度	森田 成昭	大阪電気通信大学・工学部・教授	1
A03 公	20H05198 レシオ型の蛍光変化を示す超分子メカノフォアの創製と水圏機能材料への応用	令和2年度 ～ 令和3年度	相良 剛光	東京工業大学・物質理工学院・准教授	1
A03 公	20H05203 氷表面の化学的機能を利用した氷マイクロフルイディクスの分離計測化学への展開	令和2年度 ～ 令和3年度	稲川 有徳	宇都宮大学・工学部・助教	1
A03 公	20H05213 一軸配向多糖膜を用いた水蒸気駆動型エネルギー変換素子の設計	令和2年度 ～ 令和3年度	桶葎 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	1
A03 公	20H05220 タンパク質による水分子の配位状態制御	令和2年度 ～ 令和3年度	竹田 一旗	京都大学・大学院理学研究科・准教授	1
A03 公	20H05222 側鎖のカルボキシ基の高密度化による高分子表面の着氷特性および不凍効果への影響	令和2年度 ～ 令和3年度	松本 拓也	神戸大学・大学院工学研究科・助教	1
A03 公	20H05225 チタン/生体組織相互作用における水和相の役割理解と応用	令和2年度 ～ 令和3年度	松本 卓也	岡山大学・大学院医歯薬学総合研究科・教授	1
A03 公	20H05227 サブナノ多孔膜における気相～液相系水分子の透過性評価と高機能化	令和2年度 ～ 令和3年度	都留 稔了	広島大学・先進理工系科学研究科・教授	1
A03 公	20H05232 血中滞留性・温度応答性を示すデンドリマーの水和挙動と機能との相関	令和2年度 ～ 令和3年度	児島 千恵	大阪府立大学・大学院工学研究科・准教授	1
A03 公	20H05233 生体分子・細胞との相互作用を制御する革新的水圏機能材料の創製	令和2年度 ～ 令和3年度	長瀬 健一	慶應義塾大学・薬学部・准教授	1

研究 項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
A03 公	20H05234 水圏材料の励起状態制御	令和2年度 ～ 令和3年度	羽會部 卓	慶應義塾大学・理工学部・ 教授	1
A03 公	20H05236 エントロピー抑制による動的分子結合能を有するスマート水圏機能材料の設計	令和2年度 ～ 令和3年度	宮田 隆志	関西大学・化学生命工学 部・教授	1
A03 公	20H05237 98%以上が水からなるフォトニック高分子ゲルの開発と機能開拓	令和2年度 ～ 令和3年度	楽 優鳳	国立研究開発法人産業技術総合研究所・エレクトロニクス・製造領域・主任研究員	1
A03 公	20H05238 水圏環境下でイオン・分子認識機能を発現するグラフェン機能材料の開発	令和2年度 ～ 令和3年度	上野 祐子	中央大学・理工学部・教授	1
A01 公	22H04516 水圏環境で生体分子と会合体を形成する発光性希土類錯体の開発	令和4年度 ～ 令和5年度	長谷川 靖哉	北海道大学・工学研究院・ 教授	1
A01 公	22H04519 水素結合と配位結合を駆使した超分子のアプローチに基づく水圏機能材料の創出	令和4年度 ～ 令和5年度	中村 貴志	筑波大学・数理物質系・助教	1
A01 公	22H04521 (廃止) 水圏分子集積に基づくインターカーレション型二次元材料のポトムアップ合成	令和4年度 ～ 令和5年度	原野 幸治	国立研究開発法人物質・材料研究機構・マテリアル基盤研究センター・主幹研究員	1
A01 公	22H04522 非対称水和ネットワーク構造を有する多孔性水圏材料の機能化	令和4年度 ～ 令和5年度	田代 省平	東京大学・大学院理学系研究科(理学部)・准教授	1
A01 公	22H04523 ニッケル錯体塩の水圏での自己組織化を利用したアンバイポーラー電荷輸送性薄膜の開発	令和4年度 ～ 令和5年度	藤野 智子	東京大学・物性研究所・助教	1
A01 公	22H04524 (廃止) 生体液中のホルモン検出を可能とする水ゲート有機トランジスタの開発	令和4年度 ～ 令和5年度	南 豪	東京大学・生産技術研究所・准教授	1
A01 公	22H04526 三次元水ナノシートを用いたプロトン伝導パスの構築と伝導メカニズムの解明	令和4年度 ～ 令和5年度	一川 尚広	東京農工大学・工学(系)研究科(研究院)・准教授	1
A01 公	22H04528 セルロース系分子集合体の集合・水和構造の制御と水圏バイオ機能材料の構築	令和4年度 ～ 令和5年度	芹澤 武	東京工業大学・物質理工学院・教授	1

A01 公	22H04529 水圏環境で自己集合化する金属イオン配位駆動型超分子ペプチドの開発と機能発現	令和4年度 ～ 令和5年度	堤 浩	東京工業大学・生命理工学院・准教授	1
A01 公	22H04530 タンパク質分子からの分子構造情報抽出による水圏機能性材料の構築	令和4年度 ～ 令和5年度	林 智広	東京工業大学・物質理工学院・准教授	1
A01 公	22H04535 大環状化合物の特異的ナノ空間を利用する水・イオン輸送のための水圏機能材料の開発	令和4年度 ～ 令和5年度	河野 慎一郎	名古屋大学・理学研究科・講師	1
A01 公	22H04536 自己集合性ナノ水圏の理解とモルフォロジー制御	令和4年度 ～ 令和5年度	原 光生	名古屋大学・工学研究科・助教	1
A01 公	22H04538 球面 $\pi$ 共役系を用いた実験系水和モデルの創出	令和4年度 ～ 令和5年度	橋川 祥史	京都大学・化学研究所・助教	1
A01 公	22H04539 環境に応答して自己組織化する水圏機能ポリマーミセル材料の創成	令和4年度 ～ 令和5年度	寺島 崇矢	京都大学・工学研究科・准教授	1
A01 公	22H04540 水圏環境での励起状態プロトン移動を鍵とする環境応答型蛍光分子材料の開発	令和4年度 ～ 令和5年度	櫻井 庸明	京都工芸繊維大学・分子化学系・講師	1
A01 公	22H04541 イオン性ラダーポリマーに基づく水圏機能材料構築学の創成	令和4年度 ～ 令和5年度	石割 文崇	大阪大学・大学院工学研究科・講師	1
A01 公	22H04547 N-ビニルアミドに特徴的な水和挙動解析と化学結合型表面修飾による新規ゲル材料創出	令和4年度 ～ 令和5年度	網代 広治	奈良先端科学技術大学院大学・先端科学技術研究科・教授	1
A01 公	22H04548 水中の分子・イオンと選択的に相互作用する機能性炭素材料の開発	令和4年度 ～ 令和5年度	仁科 勇太	岡山大学・異分野融合先端研究コア・研究教授	1
A01 公	22H04552 分子分布を制御した水圏ペプチド超分子の水和構造と細胞機能	令和4年度 ～ 令和5年度	若林 里衣	九州大学・工学研究院・准教授	1
A01 公	22H04553 親水性ブロック共重合体による新規水圏分子集合体の創製と機能	令和4年度 ～ 令和5年度	三浦 佳子	九州大学・工学研究院・教授	1
A01 公	22H04554 水圏で形成される有機無機複合体結晶の創出と機能開拓	令和4年度 ～ 令和5年度	堀内 新之介	東京大学・大学院総合文化研究科・講師	1

A01 公	22H04562 親水性金属ナノクラスターの化学組成制御に基づく高機能水圏バイオ機能材料の創製	令和4年度 ～ 令和5年度	根岸 雄一	東京理科大学・理学部第一部応用化学科・教授	1
A02 公	22H04517 摩擦 in-situ 赤外分光法による水潤滑ソフト材料の分子機構解明	令和4年度 ～ 令和5年度	粕谷 素洋	公立小松大学・生産システム科学部・准教授	1
A02 公	22H04520 ラマン分光による水中のRNAの分子間振動の理解:創薬への応用に向けて	令和4年度 ～ 令和5年度	城田 秀明	千葉大学・大学院理学研究院・准教授	1
A02 公	22H04533 水圏機能材料のイオン交換特性を支配する超空間原子配列の深耕	令和4年度 ～ 令和5年度	手嶋 勝弥	信州大学・先鋭材料研究所／工学部物質化学科・所長／教授	1
A02 公	22H04534 材料分子と水の界面において生ずるスペクトルの特徴的变化に関わる電子構造論的解析	令和4年度 ～ 令和5年度	鳥居 肇	静岡大学・工学部・教授	1
A02 公	22H04537 帯電界面における水素結合ダイナミクスの直接観察	令和4年度 ～ 令和5年度	池田 勝佳	名古屋工業大学・物理工学科・教授	1
A02 公	22H04542 水圏における水分子の動的様態を評価するシミュレーション技術の開発とその応用	令和4年度 ～ 令和5年度	金 鋼	大阪大学・基礎工学研究科・准教授	1
A02 公	22H04550 水圏材料の軟X線分光理論計算による不均一構造の解明	令和4年度 ～ 令和5年度	高橋 修	広島大学・大学院先進理工系科学研究科・准教授	1
A02 公	22H04563 中赤外分光と近赤外分光を組み合わせたバイオマテリアルの水和構造分析	令和4年度 ～ 令和5年度	森田 成昭	大阪電気通信大学・工学部・教授	1
A02 公	22H04566 水和による水の不均一性から生物機能を理解する	令和4年度 ～ 令和5年度	今清水 正彦	産業技術総合研究所・細胞分子工学研究部門・主任研究員	1
A03 公	22H04525 水分子とイオンによるメカノクロミックバイオセンサの感度制御	令和4年度 ～ 令和5年度	杉原 加織	東京大学・生産技術研究所・准教授	1
A03 公	22H04531 (廃止) 水圏機能材料の内部で発生する力を可視化する超分子メカノフォアの開発	令和4年度 ～ 令和5年度	相良 剛光	東京工業大学・物質理工学院・准教授	1
A03 公	22H04532 生体高分子の形態不安定性に基づいた水圏機能材料の開拓	令和4年度 ～ 令和5年度	桶葎 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	1

A03 公	22H04543 水溶液プロセスによる水酸アパタイト結晶の形態制御と水圏機能設計	令和4年度 ～ 令和5年度	後藤 知代	大阪大学・高等共創研究院 ／産業科学研究所・准教授	1
A03 公	22H04545 中間水を有する分岐ポリグリセリンの血液適合性材料表面の最適化	令和4年度 ～ 令和5年度	大谷 亨	神戸大学・大学院医学研究科・教授	1
A03 公	22H04546 カルボン酸側鎖を有するポリ置換メチレンの分子設計による疎水性制御	令和4年度 ～ 令和5年度	松本 拓也	神戸大学・大学院工学研究科・講師	1
A03 公	22H04551 サブナノ多孔膜における気相～液相系水分子の透過性評価と高機能化	令和4年度 ～ 令和5年度	都留 稔了	広島大学・大学院先進理工系科学研究科・教授	1
A03 公	22H04555 選択的水和による水圏メゾスコピック秩序構造	令和4年度 ～ 令和5年度	檜垣 勇次	大分大学・理工学部・准教授	1
A03 公	22H04556 様々な末端構造をもつデンドリマーの水和挙動とDDS機能との相関	令和4年度 ～ 令和5年度	児島 千恵	大阪公立大学・大学院工学研究科・准教授	1
A03 公	22H04558 (廃止) 水圏機能材料の励起ダイナミクス制御	令和4年度 ～ 令和5年度	羽會部 卓	慶應義塾大学・理工学部・教授	1
A03 公	22H04559 キノン含有共役高分子材料の水圏および非水圏での機能制御とエネルギー関連応用	令和4年度 ～ 令和5年度	緒明 佑哉	慶應義塾大学・理工学部・教授	1
A03 公	22H04560 生体分子との相互作用制御を実現する革新的な温度応答型水圏機能材料の創製	令和4年度 ～ 令和5年度	長瀬 健一	慶應義塾大学・薬学部・准教授	1
A03 公	22H04561 生体分子の構造や相互作用を変化させる場の水和状態の解析	令和4年度 ～ 令和5年度	藤田 恭子	東京薬科大学・薬学部・講師	1
A03 公	22H04564 エントロピー抑制に基づくスマート水圏機能材料の設計と動的分子結合能制御	令和4年度 ～ 令和5年度	宮田 隆志	関西大学・化学生命工学部・教授	1
A03 公	22H04565 水圏で接着能が可逆的に変化するサステイナブル接着剤の開発	令和4年度 ～ 令和5年度	曾川 洋光	関西大学・化学生命工学部・准教授	1
<b>公募研究 計 83 件 (廃止を含む)</b>					

[1] 総：総括班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

## 研究領域全体に係る事項

### 3 交付決定額

年度	合計	直接経費	間接経費
令和元年度	308,360,000 円	237,200,000 円	71,160,000 円
令和2年度	305,370,000 円	234,900,000 円	70,470,000 円
令和3年度	305,370,000 円	234,900,000 円	70,470,000 円
令和4年度	310,700,000 円	239,000,000 円	71,700,000 円
令和5年度	310,960,000 円	239,200,000 円	71,760,000 円
合計	1,540,760,000 円	1,185,200,000 円	355,560,000 円

## 4 研究領域の目的及び概要

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時の領域計画書を基に、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、どのような点が「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」であるか、研究の学術的背景や領域設定期間終了後に期待される成果等を明確にすること。

### 本研究領域の研究目的

「水」は、人類の安全・安心のために必須であり、重要な課題である。そのため「水」は、様々な角度から研究対象となっている。国連の持続可能な開発目標（SDGs）の一つにも「すべての人に対する、持続可能な水源と水と衛生の確保」が掲げられている。さらに、今後の人類の持続的発展のためには、生物・文明に必須である水と調和しながら最大限機能を発揮する材料の構築は喫緊の課題である。しかし、「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る。

本研究領域では、「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あてた（図1）。「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した。

### 本研究領域の全体構想

材料の環境調和・人類の持続的発展は非常に重要な課題である（図1）。そのためには、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、「水圏」で自在に高機能を発揮する材料の新しい設計原理が求められる。このような根源的な材料設計原理を創出するためには、水と物質の構造・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。すなわち、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至る水の構造・相互作用・運動をとらえ、それらを深く理解することが、水圏（水環境）において高度に機能を発現する材料の構築を可能にする。従来の水の科学では、水単独での水素結合や結晶・液体構造の研究が主流であった。また最近では、生体分子やバイオマテリアルとの相互作用などの研究が行われている。本領域では、水圏において材料に高度な「機能」を発揮させるために、下記の具体的な課題を通して水の材料科学の展開を試みた。

- (1) 水圏電子・イオン機能（界面接続）
- (2) 水圏バイオ・環境機能（融合機能発現）
- (3) 水圏メカノ機能（水環境合成）

上記の機能材料構築学と水の学理との融合が本研究領域の全体構想である（図2）。

### どのような点が「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」であるか

既存の水科学は、親水的な環境下の積極的な水素結合形成と、疎水的な環境下で起こる疎水性水和のような典型的な事象を個別に取り扱ってきた。それに対して本提案では、水圏における機能発現のプロセスを、「つなぐ」、「はたらく」、「つくる」という観点からとらえる新たな視座を取り入れた。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の創製を試みた（図3）。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できる材料科学を創成し、物質・材料に関する学術研究に革新的な発展・展開を見出すことができた。



図1. 本研究領域で提案する「水圏機能材料構築学」の創成

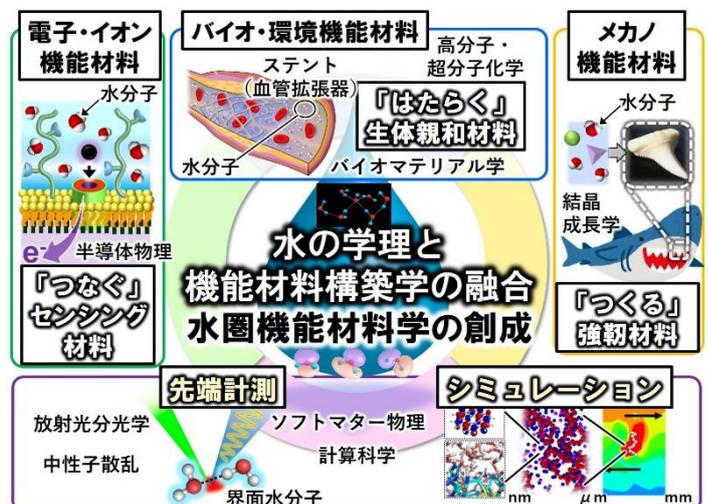


図2. 本領域の基本理念と関連する学問分野

本領域「水圏機能材料」は、有機と無機の融合を主眼とした従来の領域「融合マテリアル」では未だ成し遂げられていない「水と共生する機能材料構築学」という新しい研究領域を我が国に確立し、材料構築学の学理と技術開拓に格段の発展と飛躍的展開を図るものである。

従来の材料学は、主に乾燥状態・真空状態で計測した物性を基に議論され、学理が構築されてきたが、**水環境で機能する材料の設計のためには、含水状態のバルクおよび表面の材料物性を理解し、制御する必要がある。**事実、生体分子も合成分子も、乾燥時と含水時の材料物性は全く異なることが知られているが、そのメカニズムは解明されていなかった。

この課題の解決と発展を実現するために、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求し、水圏機能材料の創製を試みた。**

### 研究の学術的背景や領域設定期間終了後に期待される成果

本研究領域「水圏機能材料」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現する革新的機能材料の創製と、物質・環境・生命を統合的にとらえ、新しい学術体系「水圏機能材料構築学」の創成を行う。水圏機能材料における水の役割を**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)**という学術的観点から明確化させる。水圏における水の構造を分子レベルからとらえ、水分子の水素結合構造とエネルギー状態と材料の相互作用・関係を分子レベルで明確にすることにより、下記のポイントの成果が達成され、今後、水圏機能材料構築学のさらなる発展と広がりが期待される。

- ・水圏で機能する機能材料の理論構築・開発を行う新しい基礎学問分野を創成：(a)「つなぐ」イオン選択透過性・温度応答性機能を有する機能分子材料の放射光解析、(b)「はたらく」生体親和性を持つ高分子の放射光・中性子・テラヘルツ解析、(c)「つくる」可動性架橋高分子の接着機能と強靱化機能に果たす水の役割が解明された。今後、高耐久性・環境低負荷水圏材料への展開が期待される。
- ・高選択的なイオン分離能を示す水処理膜：水分子の水素結合性を先端計測・シミュレーションにより理解・制御することにより、精密分離機能を発揮する膜が創製された。今後、従来性能を凌駕する高性能処理膜への展開が期待される。
- ・生体親和性に優れたポリメトキシエチルアクリレートと水との相関説明：世界最高の生体親和性と金属への高接着性を併せ持ち、血球細胞に認識されず、金属ステントと生体親和性高分子の高接着を達成できる材料の創製(生体環境機能ステント)が達成できた。今後、水圏電子材料との複合化により、生体分子の認識情報を発信する従来にはない機能性ステントの構築が期待される。
- ・分子接着における強度・靱性と水との相関：材料力学の特徴である強度と延伸性はトレードオフの関係にあるが、これを超える高強度・軽量強靱材料への創製に向け、含水量と接着力・材料強度の関係が解明された。今後、上記の知見に基づいた強度と延伸性を両立する耐久性材料の創製が期待される。
- ・水圏にて機能する高感度なイオン捕捉材料：鉱山や工場からの排水に含まれる有害な重金属イオンを河川や地下水から取り除く方法として、植林によるファイトレメディエーションが開発途上国で広く用いられている。開発したイオン捕捉材料を界面に超高集積化させることで、水圏環境から有害な重金属イオンを除去する水圏環境浄化システムを構築できた。今後、世界最高レベルの超高性能重金属分離システムへの応用展開が期待される。
- ・水圏にて機能する電子・イオンセンサー：本来水となじまない電子材料を水圏で活用するために、水・材料界面における分子の配列や自己組織化を精密に制御した電子・イオンセンサーが達成できた。今後、水圏でも機能する高性能デバイスとして応用展開が期待される。
- ・水圏機能材料のシミュレーション：動径分布関数を用いる解析を高分子溶融体の分子動力学に適用し、マテリアルズインフォマティクスへ展開した。新規力学材料創製の設計指針へのフィードバックが期待される。

上記の環境・エネルギー・医療分野における機能分子材料設計の指針・学術の創出と新たな材料創製に結び付けることができた。現在、水圏機能材料構築学に基づいた評価・解析方法や高機能材料が複数社の企業との共同研究にて推進されており、今後、社会実装への開発展開が期待される。



図3. 本研究領域に期待される飛躍的な発展戦略

## 5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況

研究領域全体を通じ、審査結果の所見及び中間評価結果の所見において指摘を受けた事項があった場合には、当該指摘及びその対応状況等について、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

### 【審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況】

**【審査結果の所見】**「水の学理」構築を実現するために、水そのものに主眼を置いた研究者も含めた、幅広い研究者の参画による、研究内容の強化が望まれる。そのためには、化学合成、物理計測、応用物性のグループ間で、綿密な計画と密接な連携の実行が必要である。「水の学理」構築を実現するために、公募研究として、第1期にA01分子・材料構築班16件、A02先端計測・シミュレーション班8件、A03機能開拓班13件の合計37件を採択し、全期間を通して、合計83件を採択した。水圏機能材料の設計・合成・集合体設計から精密計測・シミュレーション、さらに機能化まで、水そのものに主眼を置いた研究者(鳥居・金)も含めた、幅広い分野の研究者の参画による研究内容の強化の結果、中間評価までに共同研究198件(内、計画研究と公募研究の連携:91件)、共著論文29報、事後評価書提出までに共同研究292件(内、計画研究と公募研究の連携:120件)、共著論文112報という成果をあげた。

代表例としてA01加藤の合成したナノ構造自己組織化水処理膜の機能を、先端計測の原田Gが水素結合の観点から解析・解釈することに成功し(*Angew. Chem.*, 2020, *J. Phys. Chem. Lett.*, 2023)、A02鷺津がその水分子のエネルギー状態のシミュレーションに成功した(*Sci. Adv.*, 2021, *Adv. Sci.*, 2024)。さらに、A01加藤とA02瀬戸により中性子散乱でナノロッドの凝集体形成が解明された(*Nanoscale*, 2020)。

さらに、機能発現に水が果たす役割を理解するため、計画研究のみならず、公募研究において、材料系の構築技術と幅広い空間・時間スケールを網羅した計測・理論解析技術を結集した。また、化学合成、物理計測(鳥居・森田・宮田・熊木(すべて公募))、応用物性(藤野・松本(すべて公募))のグループ間で密接な連携ができる体制を構築した。事後の現在も多くの論文を印刷・投稿中あるいは準備中である。

**【留意事項1】**水圏とは通常、地球を覆う球状層としての水環境、すなわち海洋、河川、湖沼などをイメージするが、本申請においては単なる水環境について述べているため、「水圏」の意味や定義を明確にする必要がある。材料の分野から見た「水圏」は、地球上の海洋や河川、湖沼から人類の生活環境、生体内まで包括している。本プロジェクトにおいて「水圏」とは、材料が水と協調することにより機能を発現している状態・場を定義するための言葉である。すなわち、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」機能材料と定義する。「水圏」機能材料における「水」は、単なる「背景」や「環境」ではなく、材料の一部として機能を発現させるために必須の要素である。

**【留意事項2】**「水」は本研究領域の横糸とも言える極めて重要なキーワードであるが、「水の科学」「水の学理」を理解するための計画が弱いため、水そのものの研究を強化し、物質中での「水」の役割を明らかにするための研究計画の再構成が望まれる。計画研究および公募研究において、材料科学と水の基礎科学にかかわる幅広い分野の研究者が参画している。例えば、中性子散乱測定により、リン脂質膜の親水基近傍に水和した水の運動状態が明らかになっている(*Appl. Phys. Lett.*, 2020)。物質と水が共存する環境下における水和した物質および物質に水和した水の構造に関して、シミュレーション研究で明らかにした(*Sci. Adv.*, 2021)。さらに、合成高分子の生体親和性発現に強く影響する水和水に関する知見を得た(*Macromolecules*, 2020)。この水和水の状態解析が、放射光分光(*Angew. Chem. Int. Ed.*, 2021)やテラヘルツ分光(*Nat. Commun.*, 2023)により結実した。電子密度変化の統計的解析に基づく水素結合系の静電分極モデルの生成法も開拓し、タンパク質の周囲の水分子集団の運動を励起し、水和水状態を変化させる現象の観測に成功した。

**【留意事項3】**幅広い関連分野の研究者の参画などによる、研究内容の強化が望まれる。そのためには、化学合成、物理計測、応用物性のグループ間で、綿密な計画と密接な連携の実行が必要である。

【審査結果の所見】と同等と思われるため、割愛いたします。

**【留意事項4】**提案されている材料の多くは着実に開発され、多くの論文や特許などの成果が生まれると期待しているが、総花的な印象があり、特定の材料のシミュレーションや新規応用材料の開発に終わってしまうことが危惧される。異分野の融合による新しい学問分野を形成し、新学術領域としての発展性や、どのような学術的・社会的波及効果があるのかを明確に示すことが望まれる。

ナノ自己組織化液晶機能性膜の水の観点からの分離機能の解明は、汎用性を有しており、今後、水圏における分離・除去の科学として、学術的に大きな波及効果があり、新しい学問分野として、発展している。

水圏機能材料の社会的波及効果を発揮させることを目的として、領域内に「産業アドバイザーボード」を設置し、産業界からフィードバックを得る仕組みを構築した。領域内で得られる成果を産業界に積極的に発信し、知財担当と協力して産学連携研究を促し、研究の社会還元を推進した。2021年2月には第1回産学連携フォーラムを開催し、産業界を中心に約400名の参加を得た。例えば手嶋(A02公募)の「フラックス育成結晶」などに関して、携帯水浄化システムとして社会実装されている。このことは、本研究領域の研究および企画に対する産業界への貢献の大きな可能性を示している。さらに産学連携の成果として特許が出願され、共著論文が出版された(*ACS Biomater. Sci. Eng.*, 2020)。医療機器メーカ

一・材料化学メーカーなどの企業から水圏機能材料学が注目され、個々の研究者との共同研究だけでなく、領域全体として連携し、水圏機能材料の社会実装に様々展開している。

**【留意事項5】** 3グループ間でモデル的な分子・材料を共有するなどの研究連携を工夫し、水自体の特性に踏み込む研究と、水系で機能する材料の創生を融合させる必要がある。また、ヘテロジニアスな物質中の水の役割を理解するために、物理計測グループの観測手法や研究計画について再検討が望まれる。

界面で起こる水と材料の相互作用および水・材料それぞれに起こる変化が、材料の様々な機能に果たす役割を系統的に理解するために、水の役割を側面から見て「つなぐ・はたらく・つくる」という分類でスタートした。A03 から明確な機能を示す材料を、A01 からその構成要素分子を「モデル系」として提供し、A02 が水和挙動を調べるという連携体制を構築した。水分子間の水素結合や、特定の官能基への水和挙動とマクロな機能発現の関係を予測するアプローチにより、高機能化へのフィードバックが実現した (*Sci. Adv.*, 2021)。また、特定の水和状態を形成する生体親和性高分子の新規合成に成功した (*Biomacromolecules*, 2021)。

**【留意事項6】** 若手研究者が主体的に活躍し、より深く新しい分野の形成に貢献できるような枠組みや仕掛けについて、工夫が必要である。

計画研究分担者が中心となって(総勢 10 名)、若手のみの「先進水圏若手フォーラム」を立ち上げ、30 回以上の会議を行った。計画研究での「つなぐ・はたらく・つくる」をキーワードとした材料創製と水の学理構築の達成目標に加えて、若手フォーラムでは「つかむ・はなつ」を新しいキーワードとして、材料を介した水の吸脱着の学理解明と機能発現、およびその制御を目指した研究を推進した。幅広い分野の若手研究者の共同研究により、吸脱着過程における材料と水の相関を解明する基盤となる知見(*Commun. Chem.*, 2020, *Langmuir*, 2021)を得た。

### (中間評価結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

本研究領域では、水が関与する材料機能発現を、「つなぐ」「はたらく」「つくる」という新しい視座により「水圏機能材料創製」を目指し、機能材料開発と先端計測、シミュレーションの三課題を協働的・相乗的に推進し、日標どおりの優れた成果を得ている。(中省略)開発と評価、先端計測とシミュレーションを駆使した研究により、イオン液晶膜細孔中の水の水素結合構造の同定や、透過過程解析に代表される優れた成果を多数得つつある。

女性や若手も多く参画している公募研究も含め、「水圏機能材料」の学理構築の共通認識化を目指し、総括班を中心に積極的な領域内共同研究の促進に努め、効率的に推進されている。また「水圏若手フォーラム」の起ち上げにより、新しい「つかむ・はなす」課題設定や、アカデミアインターンシップ等の若手育成、産学連携フォーラムも評価される。重水化試料の総括班での購入による標準サンプル化への取り組み等、領域運営についても工夫されている。

今後、各研究者間、そして総括班との密接な連携による「分子設計」「機能解明」「機能開拓」に関する共同研究を推進するのみならず、「水の基礎物性科学」に基づく学理構築に資する先端計測施設の利用促進や理論解析/シミュレーション研究などを提案しており、その成果が大いに期待される。

特に今後、先端計測とシミュレーションを駆使した研究により、フィードバックすることによる材料設計法の提案などへの展開が期待される。また電子材料分野への展開も望まれる。

■ 先端計測を駆使した研究 多くの水圏機能材料は自己組織化(液晶化、ホスト-ゲスト錯体形成など)した秩序構造に基づいて、材料分子側は水分子の強い極性に誘起され、凝縮相特有の部分電荷の再配置(分極)が生じる。この部分電荷を量子化学的に決定して、顕著な成果を上げた。〔ナノ構造自己組織化水処理膜〕イオン液晶膜の構造予測および材料中の水の状態についての解析に成功した (*Sci. Adv.*, 2021, *J. Phys. Chem. B.*, 2022)。

■ シミュレーションを駆使した研究 〔大規模粗視化シミュレーション〕バルクの分子集合構造に対しては、実験結果と直接の比較を可能とするソフトマター材料のシミュレーション技術を発展させた (*Phys. Rev. E*, 2021)。高分子の構造安定性とそのメカニズム (*Macromolecules*, 2022) や水の吸着・吸水プロセス (*Polymer*, 2024) を解明した。超分子メカノフォアにおいて、包接と解離の自由エネルギー差を計算科学的に見積もる手法で、力学的に異なる新規材料創製の指針を研究者にフィードバックした (*J. Mater. Chem. C*, 2023)。〔新規構造解析法の高分子熔融体の分子動力学への適用〕高分子材料としてはじめて分子構造の違いによる誘電特性の違いを明らかにする手法を用い (*Sci. Rep.*, 2021)、複雑な高分子系にフィードバックした (*NPG Asia Mater.*, 2022, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2023)。

■ 電子材料分野への展開 〔水圏電子-イオンセンサー〕国際共同研究で液晶超分子膜のイオン選択的輸送機能を窒化ガリウムデバイスを用いて精密計測し、その選択性を電子信号解析から明らかにした (*J. Phys. Chem. B* 2024)。〔水圏で安定な、アンバイポーラ型半導体の実現〕良好なアンバイポーラ型電荷輸送特性材料を作製し、耐候性の高い半導体としての機能を実現した (*J. Am. Chem. Soc.*, 2023)。

〔水圏炭素複合材料による分子センサー〕高分子材料とカーボンブラックを複合化した導電性材料は選択的にアンモニア系化合物を電子シグナルとして検出した (*ACS Appl. Mater. Interfaces* 2023)。

## 6 研究目的の達成度及び主な成果

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、(2) 本研究領域により得られた成果について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。(1)は研究項目ごと、(2)は研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で記載すること。なお、本研究領域内の共同研究等による成果の場合はその旨を明確にすること。

### (1) 領域設定期間内に水の構造と機能との相関を明らかにしようとし、どの程度達成できたか

#### A01 分子・材料構築

水と物質の構造・機能相関の基礎学理に依拠した「水圏機能材料構築学」の確立に向け、液晶・超分子・高分子・錯体などを水圏で機能させるために、それらの分子・分子集合体と水との相互作用における機能発現の相関を明らかにしようとした。特筆すべき成果として、以下について達成することができた。

水圏で配列し、選択的なイオン・分子輸送機能を発揮する自己組織化ナノ液晶膜を構築し、その特異な機能を先端計測 (A02 と共同) やシミュレーション (A02 と共同)・電気化学計測 (A03 と共同)・水構造理論 (A02 と共同) により、水との相互作用の観点から解明できた。この内容を基盤として、ナノ空間における水の構造と材料の相互作用がもたらす機能に関する新しい学理を構築できた。すなわち、

水の構造からの新たな視座による新しい機能性有機高分子膜の設計指針の創成を達成した。これは今後、従来達成できなかったような様々な精密分離の科学の確立にも展開できる成果である。

すなわち、これを代表例とした水圏における様々な機能材料について、A02, A03 との連携により水との相互作用の観点から材料を理解・設計する学理を構築できた (図4)。

機能膜開発・シミュレーション・先端計測の共創により、自己組織化ナノ液晶膜中の水分子に関する学理を構築

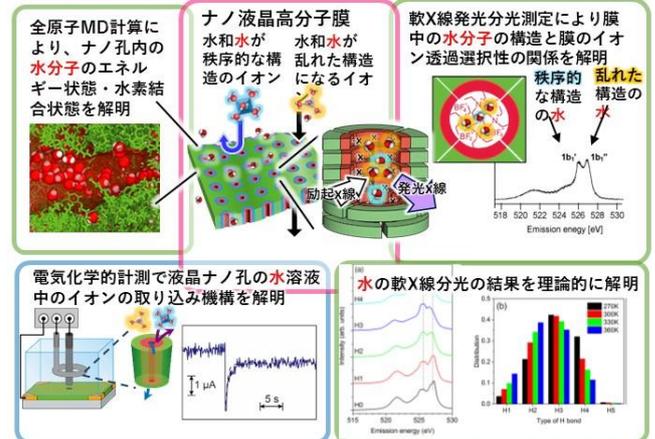


図4. 水圏機能材料学の学理構築の一例

#### A02 先端計測・シミュレーション

材料における界面水の構造・運動を放射光・中性子・テラヘルツ分光で計測し、水圏シミュレーションおよび理論計算と連携して材料の機能発現機構を明らかにしようとした。以下について、A01, A03 との密接な連携により達成できた。

自己組織化ナノ液晶膜について、A01 との共同研究により、ナノ空間水・イオン水和水・界面水の構造・運動を分析し、膜材料機能に果たす水の役割を解明することができた。水圏シミュレーション手法を創出・融合し、分子機構解析により水圏機能材料の創製のための分子設計指針を提示することができた。さらに得られた実験的知見を機能制御と材料合成にフィードバックする水圏機能材料構築学を創成できた (図5)。

すなわち、水分子の水素結合構造とエネルギー状態と材料の相互作用・関係を分子レベルで解明し、水圏で機能する機能材料の計測・計算理論構築・開発を行う新しい基礎学問分野を創成できた。

#### A03 機能開拓

水・材料界面の状態を精密解析・制御する技術を確立し、界面水構造・運動制御の基礎学理を構築し、さらなる水に基づく機能構築に繋げる創製法を明らかにしようとした。以下について達成できた。

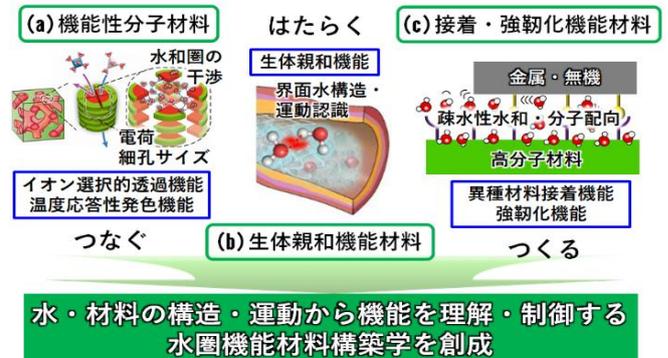
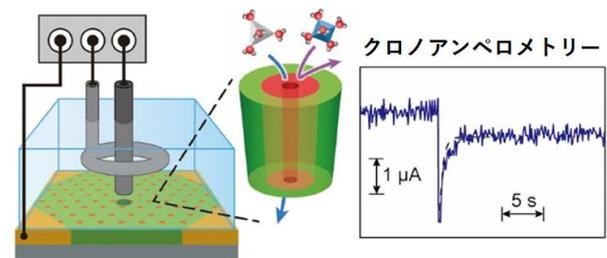


図5. 先端分光計測解析の最適化による水圏機能材料の機能解明



選択的イオン認識を電子材料と融合  
材料の機能を電子信号として検出

図6. 生物着想型イオン捕捉材料の設計

生体着想型分子認識材料の水和構造を解析し、新規な水浄化システムを確立した。水界面での超高集積化（界面高集積化技術）によって、水圏有機半導体デバイスを構築できた。精密合成により高分子の化学構造を変化させ、界面水の水分子の構造・運動を制御することで、特定の生体分子や細胞の選択的認識や検知を行う水圏バイオ・環境機能材料を構築し、その機能を解明できた。水・材料界面の状態を精密解析する技術を確認し、**界面水構造・運動制御の基礎学理を構築**した（A02 と共同）。生体親和性および金属ステント表面への高接着性を示す材料の設計指針の創出に至った（A01 と共同）（**図 6**）。ナノレベルで動的に応答する分子認識挙動を制御し、**水圏分子接着材料や力学特性と水の相関説明、水圏高分子材料の強靱化、水圏分子センシング**、さらに**力学刺激に応答する水圏機能材料**を開拓した。

すなわち、生体親和機能材料・メカノ機能材料の界面水構造・運動制御・力学特性制御に関する新しい学理を構築し、水圏機能材料を創製することができた。

**(2) 本研究領域により得られた成果**  
**計画研究**

**A01-1 水圏機能材料の基盤となる分子設計・分子集合体の構築**

**(a) 選択的なイオン輸送・分離機能を発現する機能性液晶の合成** 加藤、坂本らは、扇状や棒状のイオン性液晶分子を合成・配列・重合し、ナノチャンネル構造によって優れたウイルス除去

能力や選択的イオン透過能を示す水処理膜を開発した（**図 7**）[*Adv. Sci.*, 2024, *J. Mater. Chem.*, A 2023, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2021, *Small*, 2020]。また、ナノチャンネル構造内の水分子とイオンの運動性の違いを A03 田中求と電気化学的手法により明らかにした[J. Phys. Chem. B, 2024]。

**(b) 水分子の集合構造とイオン透過機能の相関説明** 加藤らが開発した均一かつ 1 ナノメートル以下でサイズの揃った孔を持つ液晶高分子の自己組織化膜について、A02 原田と SPring-8 を用いて液晶高分子膜中の水を調べた結果、イオンを取り巻く水の水素結合の構造がイオンの選択的な透過機能におよぼす影響を明らかにした [J. Phys. Chem. Lett. 2023, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020]。

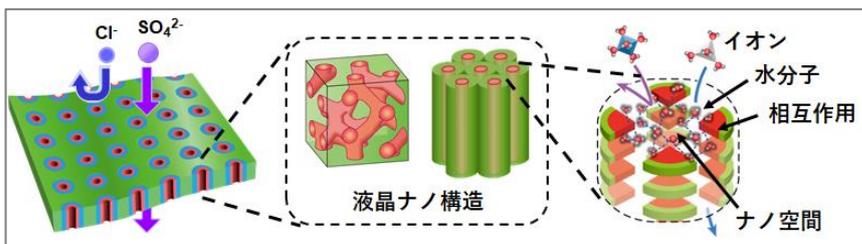
**(c) 無機コロイド液晶の水圏合成** 加藤の水圏合成で得られる生分解性無機コロイド液晶がフォトニック機能を示すことを見出した[*Adv. Mater.* 2024]。軽量強靱材料の基盤となる無機コロイド液晶のせん断下での挙動を A02 瀬戸と中性子散乱法により明らかにした[*Nanoscale*, 2020]。研究成果は論文として 52 報を発表した。

**A01-2 水圏機能材料創製のための機能分子の精密合成**

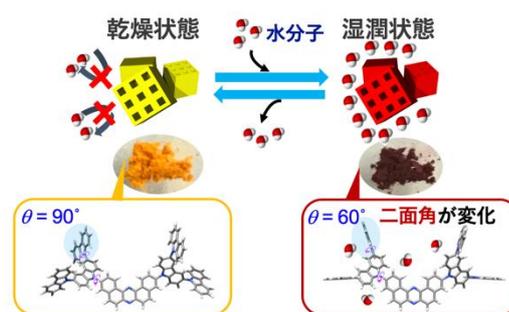
水圏-非水圏をつなぐ分子創製技術を系統的に検証し、次に示すアプローチの有効性を実証した（**図 8**）。**(a) 生体着想分子との複合化**：有機半導体-生体着想分子の融合により、水中で安定な有機薄膜の形成に成功した（辻、A03 田中求）。**(b) 両親媒性分子の活用**：疎水性分子の水-THF 混合溶媒中への分散挙動と構造-機能相関を中性子小角散乱等により解明した（辻、A02 菱田、瀬戸、A03 中畑）[*J. Phys. Chem. Lett.*, 2023]。**(c) 構造可変分子の構築**：構造可変型分子を合成し、水分子の可逆的吸脱着で色が変わる多孔質有機結晶を創製した（武田、A02 池本）[*Commun. Chem.*, 2020]。ここに親水性置換基を導入し応答性を高めた（武田、A02 池本、渡辺、A03 松葉、A01 公募 石割、A03 公募 相良）[*Chem. Commun.*, 2024]。

**(d) 環境調和性高分子の活用**：水との相互作用制御で生体親和性と分解性が向上した高分子を開発した（福島、A01 加藤、A03 田中賢）[*ACS Biomater. Sci. Eng.*, 2021]。研究成果は論文として 44 報を発表した。

**A01 公募研究からの成果** 独自性の高い材料や技術をもとに共同研究などにより新規水圏機能材料に関する成果を得た。（加藤・熊木(A01 公募)）[*ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2021]、（牧浦・藤野(A01)）[*J. Am. Chem. Soc.* 2023]、（辻・長谷川(A01)）[*RSC Adv.*, 2021, 2023]、（武田・石割(A01)・相良(A03)）[*Chem. Commun.* 2024]。（寺島・A02 菱田）[*Macromolecules* 2023]、（原・A03 藤井）[*Macromolecules* 2022]。



**図 7. 選択的なイオン輸送・分離機能を有する水圏機能材料**



**図 8. 水圏-非水圏界面を「つなぐ」水圏機能分子創製の基盤技術の代表例：湿度に応答した光機能の変調**

### A02-1 水圏機能材料の先端構造・状態解析

(a) 水の運動の特徴付け 中性子準弾性散乱測定により生体親和性高分子の水和水の速い局所運動、遅い局所運動(瀬戸・A03 田中賢) [*J. Phys. Chem. B*, 2022]、広範囲の拡散運動(図9A)を明らかにした。230K付近で起こる低温結晶化の分子論的要因を解明した

(瀬戸) [*J. Chem. Phys.*, 2024]。タンパク質の付着安定性と第二水和圏の水の相関をテラヘルツ分光で見出した(菱田、A03 田中賢) [*J. Phys. Chem. B*, 2022]。またリン脂質の水の運動の遅速が第二水和圏の水素結合確率で制御されることを見出した(菱田・A02 樋口) [*Langmuir*, 2021]。

(b) 水の構造の特徴付け 原子間力顕微鏡(AFM)、水晶振動子マイクロバランス(QCM)、軟X線発光分光により、生体親和性高分子上の水が相分離を引き起こし、低密度領域でC=O基上の水と四面体配位の水が中間水生成の足場となり、血液適合性に寄与することを明らかにした(原田・池本・A03 田中賢) [*Langmuir*, 2022]。一方、機能性イオン液晶膜細孔中の水を軟X線発光分光で解析し、イオン近傍の水分子の水素結合がイオンの選択的透過性に影響することを見出した(原田・A01 加藤) [*J. Phys. Chem. Lett.* 2023, *Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020] (図9B)。研究成果は論文として63報を発表した。

### A02-2 計算科学による水圏機能材料の設計

(a) 「つなぐ」: A01 加藤の自己組織化イオン機能液晶の水の構造・水の透過プロセスを明らかにした(鷲津) (図10) [*Sci. Adv.*, 2021]。またA01 加藤の単分子膜において、タンパク質吸着した際の膜構造変化、および界面近傍の水分子の動態を解明した(渡辺) [*Langmuir*, 2020]。

(b) 「はたらく」: A03 田中賢とA01 福島の生体親和性高分子の構造安定性の評価と分子設計指針を提案した(渡辺, 樋口) [*Macromolecules*, 2022]。A03 高島の提案する超分子ヒドロゲルの錯体形成に関する分子描像を提示した(渡辺) [*Supramol. Mater.*, 2022]。

(c) 「つくる」: A03 高島の提案する高分子接着系について、イオン濃度と接着強度に関する知見を得た(樋口) [*Biomacromol.*, 2020]。水溶液系の流動-分子マルチフィジックスシミュレータを完成させた(鷲津) [*J. Mol. Liq.*, 2024]。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(鷲津) [*Sci. Rep.*, 2021]や、水の学理構築に向けた研究(樋口) [*Langmuir*, 2021]に関しても成果を得た。研究成果は論文として58報を発表した。

**A02 公募研究からの成果** 鳥居(A02 公募)は水のOH伸縮振動がH上の電場で制御され、高分子界面の水分子配置とよく相関することを見出した(池本・A03 田中賢・原田・A02 鷲津ら) [*J. Phys. Chem. B*, 2022]。サブテラヘルツ光照射によるタンパク質の構造安定化の促進現象を見出した(今清水(A02 公募)・菱田) [*Nat. Commun.*, 2023]。新奇ならせん構造を示すカラムナー液晶のGI-XRDで得られる配向構造、形成メカニズムを分子動力学により解明した(渡辺・原(A01 公募)) [*Chem. Commun.*, 2020]。ロタキサン型超分子メカノフォアにおいて軸末端ストッパーサイズと包接-解離状態間の自由エネルギー差の関係を全原子シミュレーションで解明した(渡辺・相良(A03 公募)) [*J. Mater. Chem. C* 2023]。水圏ペプチド分子の自己組織化プロセスを解明した(樋口・若林(A01 公募)) [*Chem. Commun.*, 2022]。

### A03-1 水圏機能材料の電子・イオン機能開拓

(a) 生物着想型重金属イオン捕捉材料の機能開拓 中畑は、植物中で重金属を選択認識・捕捉するファイトケラチンに着想を得た生物着想高分子のイオン捕捉機能の最適化や赤外分光(A02 池本)を駆使した水和構造の変化を解析し、明らかにした。また辻(A01)・菱田・瀬戸(A02)らと水-THF系の液液相分離構造が疎水性発光色素の光物性に与える影響を明らかにした [*J. Phys. Chem. Lett.* 2023]。ゲッティンゲン大学(独)と連携してイオン捕捉による水和構造変化でモデル細胞の接着が変調する様子明らかにした [*Soft Matter* 2023]。A03 田中求・中畑・A01 中村(公募)・A02 池本らは、植物に着想を得た重金属イオン捕捉材料を水圏-非水圏界面に超高集積化することにより、有害な重金属イオンを高効率で除去する水圏環境浄化システムを構築した [*Nat. Commun.* 2024]。

(b) 水圏電子材料の機能開拓 加藤(A01)と共に、超分子液晶水処理膜で窒化ガリウムデバイス表面を

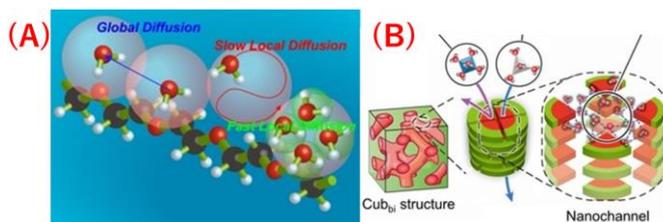


図9. 先端計測で明らかにした材料と相互作用する水の構造・運動状態と材料機能の関係

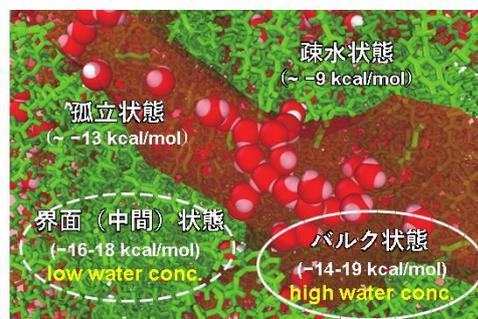


図10. 自己組織化イオンチャンネル液晶膜のナノ空間における水の状態計算

機能化し、1 価の塩素イオンより大きな 2 価の硫酸イオンがより速く選択的に輸送されるメカニズムを解明した [J. Phys. Chem. B 2024]。

(c) **水圏細胞制御材料の機能開拓** 田中求・中畑・高島 (A03) らは選択的分子認識による水和構造変化を利用した新しい細胞制御材料を開拓した [Adv. Healthcare Mater. 2023, ACS Appl. Polym. Mater. 2022]。カールスルーエ工大 (独) との国際共同研究では、超微細 3D 構造と融合させ、1 細胞を自在に操作する技術を提案し、細胞機能と材料機能の相関を解明した [Sci. Adv. 2020]。研究成果は論文として 43 報を発表した。

### A03-2 水圏機能材料のバイオ・環境機能開拓

(a) **官能基の構造、位置、量、配列を精密に制御** 生体親和性高分子 PMEA および主鎖の剛直性が異なるオレフィン高分子を合成し、側鎖導入間隔および含水環境における主鎖セグメント運動に応じて中間水の発現量変化を解明した (図 11)。

(b) **水の状態と生体親和性との相関を解明** 放射光 (A02 原田・池本)・中性子 (A02 瀬戸)・計算 (A02 鷺津・渡辺・樋口・菱田) との連携により、材料界面の中間水の水素結合状態や運動性に応じた、自由水と不凍水の状態と生体親和性との相関を解明した。また、水・高分子界面と力学物性の基礎データから中間水を形成する高分子と生体分子の共通の物理化学物性を明らかにした。研究成果は論文として 77 報を発表した。

### A03-3 水圏機能材料のメカノ機能開拓

(a) **水圏にて機能する自己修復膜** 非共有結合性相互作用と共有結合形成を組み合わせ、スクラッチ傷が修復する膜を作製し、メカノ機能を開拓した。[ACS Appl. Polym. Mater. 2020, Adv. Mater. 2020]

(b) **水圏にて機能する異種材料接着** 熱力学的に機能するホスト-ゲスト錯体と速度論的に機能するアミド結合形成を利用して異種接着するメカノ材料を開拓した [ACS Appl. Polym. Mater., 2021] (図 12)。

(c) **水圏融合材料** 超分子材料とセルロースとカルシウムを融合させ、水圏融合材料の創製と機能相関解明を試みた。破壊靱性が適切な金属塩濃度で向上するメカノ機能材料を開拓した [Biomacromolecules, 2020]。高分子と導電性カーボンフィラーを複合化し、強靱性と導電性を両立するひずみセンシング材料を作製した [ACS Appl. Mater. Interfaces 2023, ACS Polymers Au 2023]。

(d) **可動性架橋ネットワークの編み込みを駆使した強靱化材料** 水圏可動性架橋材料を創製し、架橋点が主鎖上を滑ることで強靱化を実現した。さらに異種ポリマーを主鎖に持つ別の可動性架橋ネットワークを編み込み、メカノ機能材料の創製に成功した [Macromolecules 2024, NPG Asia Mater., 2022]。

研究成果は論文として 65 報を発表した。

**A03 公募研究からの成果** 周波数変調原子間力顕微鏡 (AFM) 技術を用いてイオン捕捉に伴う高分子の構造変化を精密解明した (田中求・宮田 (A02 公募)) [Nanoscale Adv. 2021]。高速 AFM にて dendrimer 超薄膜の血液防汚性の物理学的メカニズムを解明した (田中求・林 (A01)) [RSC Adv. 2020]。水表面で合成した C60 二分子膜を用いて、電子デバイスで検出したプロトン伝導機能メカニズムを解明した (田中求・原野 (A01 公募)) [Adv. Mater. 2022]。水中で自己組織化したナノセルロースの抗菌機能をイオン選択的な界面水和構造の破綻として解明した (田中求・芹澤 (A01 公募)) [ACS Biomater. Sci. 2024]。Eu イオン錯体の水中での会合状態を解明した (田中求・長谷川 (A01 公募)) [Sci. Rep. 2024]。

セルロース系分子集合体の水和状態を系統的に解析し、タンパク質非吸着/吸着特性との相関を分子レベルで解明した (田中賢・芹澤 (A01 公募)) [Colloids Sur. B, 2022]。水和高分子の構造評価を中性子散乱実験から解明し (田中賢・原 (A01 公募)、長瀬 (A03 公募)) [Macromolecules, 2022]、PEG 改質 dendrimer の水和状態と薬物担体機能を解明した (田中賢・児島 (A03 公募)) [Mater. Sci. Eng. C, 2021, Polym. J., 2023]。

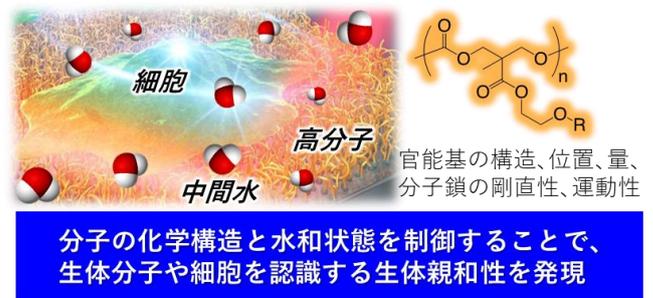
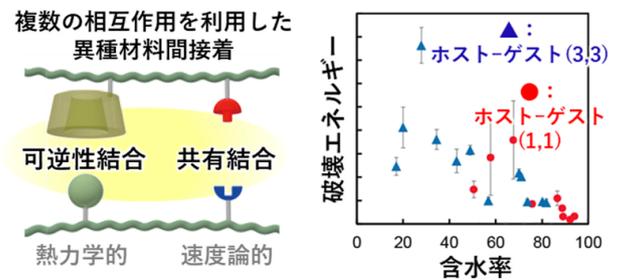


図 11. 水圏バイオ・環境機能材料の創製



水圏で分子接着と共創する水圏メカノ機能開拓

図 12. 水圏メカノ材料の機能開拓

ド結合形成を利用して異種接着するメカノ材料を開拓した

## 公募研究 代表的な成果の紹介

**A01** 水圏において配列・配向を制御した超分子およびナノ相分離構造や機能発現する分子集合体に関する研究成果が生まれた。

**藤野 (東京大学)**：水存在下の大気中でも安定な、アンバイポーラ型半導体を実現した。この材料は水・酸素と反応しにくく、大気に暴露しても機能を維持した[J. Am. Chem. Soc. 2023. 他論文9報] (図13)。

**橋川 (京都大学)**： $H_2O@C_{60}$  単分子トランジスタの電子輸送特性から、1分以内で起こる水のオルソ-パラ間遷移があることを示した[Nano Lett., 2021. 他論文39報]。

**原野 (物質・材料研究機構)**：A03 田中求と共同で、フラーレン分子超薄膜内部に形成された水の水素結合ネットワークを介して高いプロトン導電性を示すことを見いだした[Adv. Mater., 2022. 他論文2報]。

**南 (東京大学)**：A03 高島と葉の気孔に着想を得た分子認識に基づく超分子ガスセンサーを開発した[ACS Appl. Mater. Interfaces, 2023. 他論文22報]。

**長谷川 (北海道大学)**：A03 田中求と共同で、赤色発光分子を用いるヒト脳腫瘍の悪性度解析技術を開発した[Sci. Rep., 2024. 他論文31報]。

**寺島 (京都大学)**：両親媒性ホモポリマーの自己組織化を通じた単分散ミセル形成に関する研究や両親媒性ランダム共重合体のマイクロ相分離に関する「高分子ミセル水圏機能材料の創出」を進めた[Polym. Chem., 2021, Macromolecules 2023. 他論文19報]。

**芹澤 (東京工業大学)**：高結晶性、制御した陽イオン配列、多孔性および特徴的な粒子形状をもつ層状複水酸化物を合成し、水との機能相関を解明した[Colloids Surf. B: Biointerfaces, 2022. 他論文19報]。

**A02** 材料との相互作用に応じた界面水の分類と構造・運動を調べる研究、分光結果との相関や水和した材料の評価などにより、水と材料の素過程に関する多角的成果が生まれた。

**手嶋 (信州大学)**：層状複水酸化物のナノ空間に閉じ込められた水和イオンに働く力を実験的に観測する事に成功した[Nat. Commun., 2022. 他論文5報]。

**高橋 (広島大学)**：A02 原田と共同で、水の軟X線発光スペクトルを理論的に計算し、その温度依存性および同位体依存性を正しく説明することに成功した[Phys. Rev. Lett., 2022. 他論文3報]。

**今清水 (産業技術総合研究所)**：A02 菱田と共同で、サブテラヘルツ領域の電磁波の照射により、タンパク質周囲にある水分子集団の運動を励起し、水和状態を変化させる現象を観測した[Nat. Commun., 2023.] (図14)。

**池田 (名古屋工業大学)**：電極界面における水の水素結合ネットワークの集団的振動を観測した[Chem. Sci., 2023. 他論文2報]。

**A03** 水圏で「つくる」「はたらく」材料により機能を創製した。

**都留 (広島大学)**：独自の水蒸気回収膜を用いる水と熱の同時回収システムを開発した[Nat. Commun., 2023. 他論文14報]。

**相良 (東京工業大学)**：A01 原野、A02 渡辺、A02 池本と共同で、機械的刺激により水溶性を獲得するメカノクロミック蛍光超分子ファイバーを開発した[Small, 2024. 他論文8報]。

**緒明 (慶應義塾大学)**：A02 菱田と共同で、水電解水素発生反応に優れた活性を示す非晶質共役高分子ネットワークを開発し、水和状態の重要性を示した[J. Mater. Chem. A, 2024. 他論文3報]。

**宮田 (関西大学)**：水分子の存在下(膨潤状態)にあって高韌性を持つヒドロゲルの設計原理を提案し、水圏での力学機能発現に繋げた[NPG Asia Mater., 2021. 他論文18報]。

**長瀬 (慶應義塾大学)**：温度応答材料による相互作用制御に成功した[Stem Cell Res. Ther. 2023. 他論文20報]。

水を含む大気中で安定なアンバイポーラ型半導体デバイスを実現

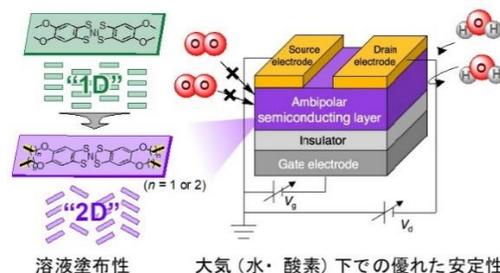


図13. A01 公募研究者 藤野(東京大学)の代表的な研究成果

サブテラヘルツ波が水とタンパク質のミクロな混合を加速

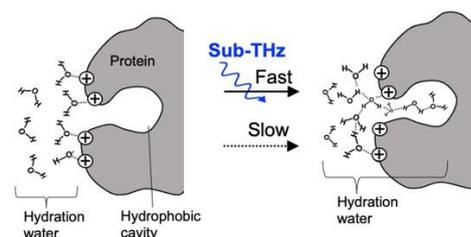


図14. A02 公募研究者 今清水(産業技術総合研究所)の代表的な研究成果

## 7 研究発表の状況

研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で、本研究領域により得られた研究成果の発表の状況（主な雑誌論文、学会発表、書籍、産業財産権、ホームページ、主催シンポジウム、一般向けアウトリーチ活動等の状況。令和6年6月末までに掲載等が確定しているものに限る。）について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。なお、雑誌論文の記述に当たっては、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究代表者（発表当時、以下同様。）には二重下線、研究分担者には一重下線、corresponding author には左に\*印を付すこと。

雑誌論文（すべて査読有 全体 計 657 件）（計画研究 総数 402 件、公募研究 総数 504 件）

研究項目A01 分子・材料構築

【計画研究（計96件、以下代表例を記載）】

A01-1 代表 加藤 隆史（東京大学）・分担 牧浦 理恵（大阪公立大学）（計 52 件）

- (1) Riki Kato, Takahiro Mikami, \*Takashi Kato, “2D Photonic Colloidal Liquid Crystals Composed of Self-Assembled Rod-Shaped Particles”, *Adv. Mater.*, (2024) (DOI: <https://doi.org/10.1002/adma.202404396>)
- (2) Nobuyoshi Miyamoto, Momoka Miyoshi, Riki Kato, Yuji Nakashima, Hiroyuki Iwano, \*Takashi Kato “Monodisperse Nanosheet Mesophases” *Sci. Adv.*, **10**, eadk6452 (2024).
- (3) \*Yoshihisa Harada, 他 3 名, “Hydrogen-Bonded Structures of Water Molecules in Hydroxy-Functionalized Nanochannels of Columnar Liquid Crystalline Nanostructured Membranes Studied by Soft X-ray Emission Spectroscopy”, *J. Phys. Chem. Lett.*, **15**, 454-460 (2024). **A01A02 共同研究**.
- (4) \*Takashi Kato, \*Junya Uchida, \*Yoshiki Ishii, and \*Go Watanabe, “Aquatic Functional Liquid Crystals: Design, Functionalization, and Molecular Simulation”, *Adv. Sci.*, **11**, 2306529-1/13 (2024). **A01A02 共同研究**.
- (5) Rie Makiura, \*Takashi Kato, 他 4 名, “Self-Assembly of Peptide-Conjugated Forklike Mesogens at Aqueous/Liquid Crystalline Interfaces: Molecular Design for Ordering Transition Induced by Specific Binding of Biomolecules”, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **15**, 36657-36666 (2023). **A01 内共同研究, 国際共同研究**.
- (6) Yuya Watanabe, Riki Kato, \*Kazuki Fukushima, \*Takashi Kato, “Degradable and Nanosegregated Elastomers with Multiblock Sequences of Biobased Aromatic Mesogens and Biofunctional Aliphatic Oligocarbonates”, *Macromolecules*, **55**, 10285-10293 (2022). **A01 内共同研究, Supplementary Cover**.
- (7) \*Rie Makiura, 他 6 名, “Uniaxially Oriented Electrically Conductive Metal–Organic Framework Nanosheets Assembled at Air/Liquid Interfaces”, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **13**, 54570-54578 (2021).
- (8) \*Yoshiki Ishii, Go Watanabe, \*Takashi Kato, \*Hitoshi Washizu, 他 1 名, “Molecular Insights on Confined Waters in the Nanochannel of Self-Assembled Ionic Liquid Crystal”, *Sci. Adv.*, **7**, eabf0669 (2021). **A01A02 共同研究**.
- (9) Jiro Kumaki, \*Takashi Kato, 他 6 名, “Gemini Thermotropic Smectic Liquid Crystals for Two-Dimensional Nanostructured Water-Treatment Membranes”, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **13**, 20598-20605 (2021). **A01A02 共同研究**.
- (10) Ryusuke Watanabe, Takeshi Sakamoto, Kosuke Yamazoe, Jun Miyawaki, \*Takashi Kato, \*Yoshihisa Harada, “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). **A01A02 共同研究, Very Important Paper, プレスリリース, 日本経済新聞, Nature Reviews Chemistry 誌に Research Highlight**.
- (11) Satoshi Kajiyama, Hiroki Iwase, Masanari Nakayama, Rino Ichikawa, Daisuke Yamaguchi, Hideki Seto, and \*Takashi Kato, “Shear-Induced Liquid-Crystalline Phase Transition Behaviour of Colloidal Solutions of Hydroxyapatite Nanorod Composites”, *Nanoscale*, **12**, 11468-11479 (2020). **A01A02 共同研究, Back Cover**.
- (12) Daisuke Yamaguchi, Yuka Ikemoto, and \*Takashi Kato, “Thermally Tunable Selective Formation of Self-assembled Fibers into Two Orthogonal Directions in Oriented Liquid-crystalline Smectic Templates”, *Chem. Commun.*, **56**, 9954-9957 (2020). **A01A02 共同研究, Inside Back Cover**.

A01-2 代表 辻 勇人（神奈川大学）・分担 武田 洋平（大阪大学）・分担 福島 和樹（東京大学）（計 44 件）

- (13) Yasuchika Hasegawa, \*Hayato Tsuji, 他 6 名, “Circularly Polarized Luminescence and High Photoluminescence Quantum Yields from Rigid 5,10-Dihydroindeno[2,1-*a*]indene and 2,2'-Dialkoxy-1,1'-binaphthyl Conjugates and Copolymers”, *RSC Adv.*, **14**, 7251-7257 (2024). **A01内共同研究**.
- (14) Fumitaka Ishiwari, Yuka Ikemoto, Go Matsuba, Go Watanabe, \*Yoshimitsu Sagara, \*Youhei Takeda, 他8名, “Water-dispersible donor–acceptor–donor  $\pi$ -conjugated bolaamphiphiles enabling a humidity-responsive luminescence color change”, *Chem. Commun.*, **145**, 3653-3656 (2024). **A01A02A03共同研究**.
- (15) \*Hayato Tsuji, Masaki Nakahata, Mafumi Hishida, Hideki Seto, 他3名, “Water Fraction Dependence of the Aggregation Behavior of Hydrophobic Fluorescent Solutes in Water–Tetrahydrofuran”, *J. Phys. Chem. Lett.*, **14**, 11235-11241 (2023). **A01A02A03共同研究, プレスリリース**.
- (16) \*Kazuki Fukushima, Yuji Higuchi, Go Watanabe, Takashi Kato, \*Masaru Tanaka, 他8名, “Anisotropic, Degradable Polymer Assemblies Driven by a Rigid Hydrogen-Bonding Motif That Induce Shape-Specific Cell Responses”, *Macromolecules*, **55**, 15-25 (2022). **A01A02A03共同研究**.
- (17) Yasuchika Hasegawa, \*Hayato Tsuji, 他8名, “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). **A01内共同研究**.

- (18) Takashi Kato, Masaru Tanaka, \*Kazuki Fukushima, 他7名, “Methoxy-Functionalized Glycerol-Based Aliphatic Polycarbonate: Organocatalytic Synthesis, Blood Compatibility, and Hydrolytic Property”, *ACS Biomater. Sci. Eng.*, **7**, 472-481 (2021). **A01A03**共同研究, 国際共同研究, [Supplementary Cover](#).
- (19) \*Youhei Takeda, \*Ken Albrecht, Yuka Ikemoto, 他15名, “Sigmoidally Hydrochromic Molecular Porous Crystal with Rotatable Dendrons” *Commun. Chem.*, **3**, 118-1/8 (2020). **A01A02** 共同研究, 国際共同研究, オープンアクセス, [プレスリリース](#), [Optornics](#) 等海外メディアで多数報道.
- (20) \*Kazuki Fukushima, Takashi Kato, 他4名, “Formation of Bis-benzimidazole and Bis-benzoxazole through Organocatalytic Depolymerization of Poly(ethylene terephthalate) and Its Mechanism”, *Polym. Chem.*, **11**, 4904-4913 (2020). **A01**内共同研究, 国際共同研究, [Back Cover](#), Special Issue.

【公募研究 (計282件, 以下代表例を記載)】

**長谷川 靖哉 (北海道大学) (計32件)**

- (21) Go Matsuba, Akihisa Yamamoto, Motomu Tanaka, \*Yasuchika Hasegawa, 他10名, “Structure-changeable luminescent Eu(III) complex as a human cancer grade probing system for brain tumor diagnosis”, *Sci. Rep.*, **14**:778 (2024). **A01A03** 共同研究, 国際共同研究.

**藤野 智子 (東京大学) (計8件)**

- (22) \*Tomoko Fujino, Rie Makiura, 他7名, “Ambipolar Nickel Dithiolene Complex Semiconductors: from One- to Two-Dimensional Electronic Structures Based upon Alkoxy Chain Lengths”, *J. Am. Chem. Soc.*, **145**, 2127-2134 (2023). **A01** 内共同研究, 国際共同研究, [Supplementary Cover](#), [プレスリリース](#).

**南 豪 (東京大学) (計20件)**

- (23) Haonan Fan, Yui Sasaki, Qi Zhou, Wei Tang, \*Yuta Nishina, and \*Tsuyoshi Minami, “Non-enzymatic detection of glucose levels in human blood plasma by a graphene oxide-modified organic transistor sensor”, *Chem. Commun.*, **59**, 2425-2428 (2023). **A01** 内共同研究.

**芹澤 武 (東京工業大学) (計19件)**

- (24) \*Takeshi Serizawa, Akihisa Yamamoto, Motomu Tanaka, 他6名, “Antibacterial Synthetic Nanocelluloses Synergizing with a Metal-Chelating Agent”, *ACS Appl. Bio Mater.*, **7**, 246-255 (2024). **A01A03** 共同研究, 国際共同研究, [Front Cover](#).

**河野 慎一郎 (名古屋大学) (計6件)**

- (25) Shin-ichiro Kawano, Yuka Ikemoto, 他3名, “Mesogenic Discrete Metallofoldamer for Columnar Liquid Crystal”, *Chem. Commun.*, **58**, 3274-3277 (2022). **A01A02** 共同研究, [Inside Front Cover](#).

**原 光生 (名古屋大学) (計13件)**

- (26) \*Mitsuo Hara, Yoshihisa Fujii, 他4名, “Humidity-Induced Self-Assembled Nanostructure via Ion Aggregation in Ionic Linear Polysiloxanes”, *Macromolecules*, **55**, 4313-4319 (2022). **A01A03** 共同研究, [日本液晶学会論文賞受賞論文](#), [Supplementary Cover](#).

**橋川 祥史 (京都大学) (計40件)**

- (27) Yoshifumi Hashikawa, 他6名, “Inelastic Electron Transport and Ortho-Para Fluctuation of Water Molecule in H<sub>2</sub>O@C<sub>60</sub> Single Molecule Transistors”, *Nano Lett.*, **21**, 10346-10353 (2021).

**寺島 崇矢 (京都大学) (計19件)**

- (28) \*Mafumi Hishida, Rikuto Kanno, and \*Takaya Terashima, “Hydration State on Poly(ethylene glycol)-Bearing Homopolymers and Random Copolymer Micelles: In Relation to the Thermoresponsive Property and Micellar Structure”, *Macromolecules*, **56**, 7587-7596 (2023). **A01A02** 共同研究.

**網代 広治 (奈良先端大学院大学) (計15件)**

- (29) Go Matsuba, \*Hiroharu Ajiro, 他1名, “Chemically Bound Hydrophobic Modification on Hydrogel Surface with Poly(*N*-vinylamide)s”, *Polymer*, **294**, 126695-1/7 (2024). **A01A03** 共同研究.

**研究項目A02 先端計測・シミュレーション**

【計画研究 (121件, 以下代表例を記載)】

**A02-1 代表 原田 慈久 (東京大学) ・分担 瀬戸 秀紀 (高エネルギー加速器研究機構) ・分担 池本 夕佳 (高輝度光科学研究センター) ・分担 菱田 真史 (東京理科大学) (計63件)**

- (30) Go Matsuba, Mitsuo Hara, Yuka Ikemoto, \*Kosuke Okeyoshi, 他4名, “Reconstruction of Chitosan Network Orders Using the Meniscus Splitting Method for Designing pH-Responsive Materials”, *Langmuir*, in press (2024). **A01A02A03**共同研究.
- (31) \*Takuya Matsumoto, Mitsuo Hara, Hideki Seto, 他4名, “Selective Acetylation of Amorphous Region of Poly(vinyl alcohol) in Supercritical Carbon Dioxide”, *Polym. J.*, **55**, 1287-1293 (2023). **A01A02A03**共同研究.
- (32) \*Yoshifumi Hashikawa, Yuka Ikemoto, 他2名, “Open-[60]Fullerenols with Water Adsorbed Both Inside and Outside”, *Chem. Commun.*, **60**, 1261-1264 (2024). **A01A02** 共同研究, [Outside Back Cover](#).
- (33) Yuka Ikemoto, \*Masaru Tanaka, \*Yoshihisa Harada, 他6名, “Hydration Mechanism in Blood-Compatible Polymers Undergoing Phase Separation”, *Langmuir*, **38**, 1090-1098 (2022). **A02A03**共同研究.

- (34) \*[Yuji Higuchi](#), Yuta Asano, Takuya Kuwahara, and \*[Mafumi Hishida](#), “Rotational Dynamics of Water at the Phospholipid Bilayer Depending on the Head Groups Studied by Molecular Dynamics Simulations”, *Langmuir*, **37**, 5329-5338 (2021). **A02内共同研究**, **国際共同研究**.
- (35) \*[Motomu Tanaka](#) and \*[Hideki Seto](#), “Interfacial Water: A Physical Chemistry Perspective”, *Front. Chem.*, **8**, 760-1/2 (2020). **A02A03共同研究**, オープンアクセス.
- (36) [Yuka Ikemoto](#), \*[Yoshinori Takashima](#), 他4名, “Preparation of Hydrophilic Polymeric Materials with Movable Cross-Linkers and their Mechanical Property Polymer”, *Polymer*, **196**, 122465-1/8 (2020). **A02A03共同研究**.
- A02-2 代表 [鷺津 仁志](#) (兵庫県立大学) ・分担 [渡辺 豪](#) (北里大学) ・分担 [樋口 祐次](#) (九州大学) (計58件)**
- (37) [Qiming Liu](#), [Tianyue Zhang](#), [Yuka Ikemoto](#), [Yudai Shinozaki](#), [Go Watanabe](#), [Yuta Hori](#), [Yasuteru Shigeta](#), [Takemi Midorikawa](#), [Koji Harano](#), and \*[Yoshimitsu Sagara](#), “Grinding-Induced Water Solubility Exhibited by Mechanochromic Luminescent Supramolecular Fibers”, *Small*, in press (2024). **A01A02A03共同研究**.
- (38) \*[Go Watanabe](#), [Hitoshi Washizu](#), \*[Goran Ungar](#), \*[Takashi Kato](#), 他8名, “Reentrant 2D Nanostructured Liquid Crystals by Competition between Molecular Packing and Conformation: Potential Design for Multistep Switching of Ionic Conductivity”, *ChemPhysChem*, **24**, e202200927-1/10 (2023). **A01A02共同研究**.
- (39) [Md. Khalidur Rahman](#), [Takeshi Yamada](#), [Norifumi L. Yamada](#), [Mafumi Hishida](#), \*[Yuji Higuchi](#), and \*[Hideki Seto](#), “Quasi-elastic Neutron Scattering Reveals the Relationship between the Dynamical Behavior of Phospholipid Headgroups and Hydration Water”, *Struct. Dyn.*, **10**, 044701-1/12 (2023). **A02内共同研究**.
- (40) \*[Rie Wakabayashi](#), [Yuji Higuchi](#), 他5名, “Hydrophobic Immiscibility Controls Self-Sorting or Co-Assembly of Peptide Amphiphiles”, *Chem. Commun.*, **58**, 585-588 (2022). **A01A02共同研究**.
- (41) [Go Watanabe](#), \*[Yoshinori Takashima](#), 他8名, “Design and Mechanical Properties of Supramolecular Polymeric Materials Based on Host-guest Interactions: the Relation between Relaxation Time and Fracture Energy”, *Polym. Chem.*, **11**, 6811-6820 (2020). **A02A03共同研究**.
- (42) \*[Go Watanabe](#), [Hiroki Eimura](#), [Nicholas L. Abbott](#), and \*[Takashi Kato](#), “Biomolecular Binding at Aqueous Interfaces of Langmuir Monolayers of Bioconjugated Amphiphilic Mesogenic Molecules: A Molecular Dynamics Study”, *Langmuir*, **36**, 12281-12287 (2020). **A01A02共同研究**, **国際共同研究**, **Front Cover**.
- (43) \*[Go Watanabe](#), \*[Mitsuo Hara](#), \*[Jun Yoshida](#), 他8名, “Visualizing Helical Stacking of Octahedral Metallomesogens with A Chiral Core”, *Chem. Commun.*, **56**, 12134-12137 (2020). **A01A02共同研究**, **ChemComm Emerging Investigator 2020受賞論文**, **Inside Back Cover**.
- (44) \*[Toshihiro Okamoto](#), [Go Watanabe](#), [Takashi Kato](#), 他13名, “Alkyl-Substituted Selenium-Bridged V-Shaped Organic Semiconductors Exhibiting High Hole Mobility and Unusual Aggregation Behavior”, *J. Am. Chem. Soc.*, **142**, 14974-14984 (2020). **A01A02共同研究**, **プレスリリース**, **日経新聞**, **Supplementary Cover**.

**【公募研究 (計 69 件, 以下代表例を記載)】**

**熊木 治郎 (山形大学) (計 13 件)**

- (45) [Takashi Kato](#), [Kazuki Fukushima](#), \*[Jiro Kumaki](#), 他5名, “Crystallization of Star-Shaped Poly(l-lactide)s with Arm Chains Aligned in the Same Direction in Two-Dimensional Crystals in a Langmuir Monolayer”, *Langmuir*, **39**, 5486-5494 (2023). **A01A02共同研究**.

**手嶋 勝弥 (信州大学) (計 8 件)**

- (46) \*[Katsuya Teshima](#), 他7名, “Critical Role of Water Structure Around Interlayer Ions for Ion Storage in Layered Double Hydroxides”, *Nat. Commun.*, **13**, 6448-1/9 (2022).

**鳥居 肇 (静岡大学) (計 7 件)**

- (47) \*[Yuka Ikemoto](#), [Yoshihisa Harada](#), [Masaru Tanaka](#), [Hitoshi Washizu](#), \*[Hajime Torii](#), 他6名, “Infrared Spectra and Hydrogen-Bond Configurations of Water Molecules at the Interface of Water-Insoluble Polymers under Humidified Conditions”, *J. Phys. Chem. B*, **126**, 4143-4145 (2022). **A02A03共同研究**.

**金 鋼 (大阪大学) (計 9 件)**

- (48) [Hitoshi Washizu](#), \*[Kang Kim](#), 他3名, “Simulating the Nematic-Isotropic Phase Transition of Liquid Crystal Model via Generalized Replica-Exchange Method”, *J. Chem. Phys.*, **156**, 014901-1/8 (2022). **A02内共同研究**.

**今清水 正彦 (産総研) (計 1 件)**

- (49) [Jun-ichi Sugiyama](#), [Yuji Tokunaga](#), [Mafumi Hishida](#), [Masahito Tanaka](#), [Koh Takeuchi](#), [Daisuke Satoh](#), and \*[Masahiko Imashimizu](#), “Nonthermal Acceleration of Protein Hydration by Sub-Terahertz Irradiation”, *Nat. Commun.*, **14**, 2825-1/13 (2023). **A02内共同研究**, **Editors' Highlights**, **プレスリリース**.

**研究項目A03 機能開拓**

**【計画研究 (計 185 件, 以下代表例を記載)】**

**A03-1 代表 [田中 求](#) (京都大学・Heidelberg Univ.) ・分担 [中畑 雅樹](#) (大阪大学) (計43件)**

- (50) [Masaki Nakahata](#), [Yoshinori Takashima](#), \*[Motomu Tanaka](#), 他12名, “Reversible Host-Guest Crosslinks in Supramolecular Hydrogels for On-Demand Mechanical Stimulation of Human Mesenchymal Stem Cells”, *Adv. Healthcare Mater.*, **13**, 2302607-1/17 (2024). **A03内共同研究**, **国際共同研究**.
- (51) [Felix Weissenfeld](#), [Lucia Wesenberg](#), [Masaki Nakahata](#), \*[Marcus Müller](#), and \*[Motomu Tanaka](#), “Modulation of Wetting of Stimulus Responsive Polymer Brushes by Lipid Vesicles: Experiments and Simulations”, *Soft Matter*, **19**, 2491-2504 (2023). **A03内共同研究**, **国際共同研究**, **Front Cover**.

- (52) Masaki Nakahata, \*Kazuki Miyata, \*Motomu Tanaka, 他4名, “Ion-Specific Nanoscale Compaction of Cysteine-Modified Poly(Acrylic Acid) Brushes Revealed by 3D Scanning Force Microscopy with Frequency Modulation Detection”, *Nanoscale Adv.*, **4**, 5027-5036 (2022). **A02A03共同研究**, [Back Cover](#).
- (53) \*Motomu Tanaka, \*Koji Harano, 他8名, “De Novo Synthesis of Free-Standing Flexible 2D Intercalated Nanofilm Uniform over Tens of cm<sup>2</sup>”, *Adv. Mater.*, **34**, 2106465-1/10 (2022). **A01A03共同研究**.
- (54) Tomohiro Hayashi, \*Motomu Tanaka, 他8名, “Dendronized Oligoethylene Glycols with Posphionate Tweezers for Cell-Repellent Coating of Oxide Surfaces: Coarse-Scale and Nanoscopic Interfacial Forces”, *RSC Adv.*, **11**, 17727-17733 (2021). **A02A03共同研究**, **国際共同研究**.
- (55) Masaki Nakahata, Yoshinori Takashima, \*Motomu Tanaka, 他10名, “Mechanical Stimulation of Single Cells by Reversible Host-Guest Interactions in 3D Microscaffolds”, *Sci. Adv.*, **6**, eabc2648 (2020). **A03内共同研究**, **国際共同研究**, [プレスリリース](#).

**A03-2 代表 田中 賢 (九州大学) ・分担 藤井 義久 (三重大学) (計77件)**

- (56) Takeshi Serizawa, \*Masaru Tanaka, 他10名, “Suspension Culture System for Isolating Cancer Spheroids using Enzymatically Synthesized Cellulose Oligomers”, *ACS Appl. Bio Mater.*, **7**, 306-314 (2024). **A01A03共同研究**.
- (57) Takayuki Ota, Valentina Montagna, Yuji Higuchi, Takashi Kato, Masaru Tanaka, Haritz Sardon, and \*Kazuki Fukushima, “Organocatalyzed Ring-Opening Reactions of  $\gamma$ -Carbonyl-Substituted  $\epsilon$ -Caprolactones”, *RSC Adv.*, **13**, 27764-27771 (2023). **A01A02A03共同研究**, **国際共同研究**, [Invited Paper](#).
- (58) \*Takeshi Serizawa, Izuru Kawamura, Go Watanabe, Masaru Tanaka, 他6名, “Alkyl Chain Length-Dependent Protein Nonadsorption and Adsorption Properties of Crystalline Alkyl  $\beta$ -Celluloside Assemblies”, *Colloids Surf. B*, **220**, 112898-1/9 (2022). **A01A02A03共同研究**.
- (59) \*Taiki Tominaga, Mafumi Hishida, Daiki Murakami, Yoshihisa Fujii, Masaru Tanaka, and \*Hideki Seto, “Experimental Evidence of Slow Mode Water in the Vicinity of Poly(ethylene oxide) at Physiological Temperature”, *J. Phys. Chem. B*, **126**, 1758-1767 (2022). **A02A03共同研究**.
- (60) \*Yoshinori Takashima, \*Masaru Tanaka, 他7名, “Simultaneous Control of the Mechanical Properties and Adhesion of Human Umbilical Vein Endothelial Cells to Suppress Platelet Adhesion on a Supramolecular Substrate”, *RSC Adv.*, **12**, 27912-27917 (2022). **A03内共同研究**.
- (61) Yoshihisa Fujii, Taiki Tominaga, Daiki Murakami, Masaru Tanaka, and \*Hideki Seto, “Local Dynamics of the Hydration Water and Poly(methyl methacrylate) Chains in PMMA Networks”, *Front. Chem.*, **9**, 728738-1/8 (2021). **A02A03共同研究**.

**A03-3 代表 高島 義徳 (大阪大学) ・分担 松葉 豪 (山形大学) (計65件)**

- (62) Yuka Ikemoto, \*Yuta Nishina, \*Go Matsuba, \*Yoshinori Takashima, 他14名, “Highly Stretchable Stress-Strain Sensor from Elastomer Nanocomposites with Movable Cross-links and Ketjenblack”, *ACS Polymers Au*, **3**, 394-405 (2023). **A01A03共同研究**, [Front Cover](#).
- (63) \*Go Matsuba, \*Hitoshi Washizu, \*Tsuyoshi Minami, \*Yoshinori Takashima, 他9名, “Leaf-Inspired Host-Guest Complexation-Dictating Supramolecular Gas Sensors”, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **15**, 39777-39785 (2023). **A01A02A03共同研究**.
- (64) \*Masaru Tanaka, \*Go Watanabe, \*Yoshinori Takashima, 他7名, “Behavior of Supramolecular Cross-Links Formed by Host-Guest Interactions in Hydrogels Responding to Water Contents”, *Supramol. Mater.*, **1**, 100001-1/9 (2022). **A02A03共同研究**.
- (65) \*Masaru Tanaka, \*Yoshinori Takashima, 他7名, “Mechanical Properties with Respect to Water Content of Host-Guest Hydrogels”, *Macromolecules*, **54**, 8067 (2021). **A03内共同研究**.
- (66) \*Go Matsuba, \*Yoshinori Takashima, 他5名, “Extremely Rapid Self-healable and Recyclable Supramolecular Materials through Planetary Ball Milling and Host-guest Interactions”, *Adv. Mater.*, **32**, 2002008-1/9 (2020). **A03内共同研究**, [プレスリリース](#), [AlphaGalileo](#), [日経新聞等で新聞報道](#), [テレビ東京・NHKで報道](#).
- (67) Yuka Ikemoto, Yuji Higuchi, \*Yoshinori Takashima, 他7名, “Supramolecular Biocomposite Hydrogels Formed by Cellulose and Host-Guest Polymers Assisted by Calcium Ion Complexes”, *Biomacromolecules*, **21**, 3936-3944 (2020). **A02A03共同研究**.
- (68) Junsu Park, Shunsuke Murayama, Motofumi Osaki, Hiroyasu Yamaguchi, \*Akira Harada, \*Go Matsuba, and \*Yoshinori Takashima, “Reinforced Polystyrene through Host-guest Interactions Using Cyclodextrin as An Additive”, *Eur. Polym. J.*, **134**, 109807-1/8 (2020). **A03内共同研究**, [プレスリリース](#), [「高分子学会広報委員会パブリシティ賞」受賞](#).

**【公募研究 (計 153 件, 以下代表例を記載)】**

**相良 剛光 (東京工業大学) (計 11 件)**

- (69) Keiko Hiratsuka, Tatsuya Muramatsu, Takuya Seki, Christoph Weder, \*Go Watanabe, and \*Yoshimitsu Sagara, “Tuning the Mechanoresponsive Luminescence of Rotaxane Mechanophores by Varying the Stopper Size”, *J. Mater. Chem. C*, **11**, 3949-3955 (2023). **A02A03共同研究**, [Cover Picture](#).

**桶葎 興資 (北陸先端科学技術大学院大学) (計 11 件)**

- (70) Isamu Saito, Leijie Wu, Mitsuo Hara, Yuka Ikemoto, Tatsuo Kaneko, and \*Kosuke Okeyoshi, “Anisotropic Responses with Cation Selectivity in Hierarchically Ordered Polysaccharide Networks”, *ACS Appl. Polym. Mater.*, **4**, 7054-7060 (2022). **A01A02A03共同研究**.

## 松本 拓也 (神戸大学) (計4件)

(71) \*Takuya Matsumoto, Hideki Seto, 他5名, “Hydrophobicity of the Pentafluorosulfanyl Group in Side Chains of Polymethacrylates by Evaluation with Surface Free Energy and Neutron Reflectivity”, *Langmuir*, **38**, 6472-6480 (2022). **A02A03共同研究**, **Supplementary Cover**.

## 檜垣 勇次 (大分大学) (計4件)

(72) \*Yuji Higaki, Honoka Toyama, Takumi Masuda, Shingo Kobayashi, and Masaru Tanaka, “Microphase Separation of Double-Hydrophilic Poly(carboxybetaine acrylate)-Poly(2-methoxyethyl acrylate) Block Copolymers in Water”, *Polym. J.*, **55**, 1357-1365 (2023). **A03内共同研究**.

## 児島 千恵 (大阪公立大学) (計7件)

(73) Shigeaki Morita, Masaru Tanaka, \*Chie Kojima, 他7名, “Different Hydration States and Passive Tumor Targeting Ability of Polyethylene Glycol-Modified Dendrimers with High and Low PEG Density”, *Mater. Sci. Eng. C*, **126**, 112159-1/7 (2021). **A02A03共同研究**.

## 緒明 祐哉 (慶應義塾大学) (計6件)

(74) Wakana Hamada, Mafumi Hishida, Ryuto Sugiura, Haruka Tobita, Hiroaki Imai, Yasuhiko Igarashi, and \*Yuya Oaki, “Efficient Design and Synthesis of an Amorphous Conjugated Polymer Network for a Metal-Free Electrocatalyst of Hydrogen Evolution Reaction”, *J. Mater. Chem. A*, **12**, 3294-3303 (2024). **A02A03共同研究**.

## 長瀬 健一 (慶應義塾大学) (計22件)

(75) \*Kenichi Nagase, Yuka Ikemoto, 他2名, “Hydration and Dehydration Behaviors of Poly(*N*-isopropylacrylamide)-Grafted Silica Beads”, *Surf. Interfaces*, **40**, 103058-1/12 (2023). **A02A03共同研究**.

## 学会発表 (全体 計4276件)

### 【計画研究 (計1723件, 以下代表例を記載)】

- (1) 藤井義久, “接合界面における水の振る舞いと接着強度の関係”, 第34回高分子加工技術討論会, オンライン開催, 2022年10月28日, 日本レオロジー学会, 招待講演.
- (2) 瀬戸秀紀, “中性子散乱のソフトマター研究への応用と発展”, 第21回日本中性子科学学会年会, オンライン開催, 2021年12月1日, 日本中性子科学学会, 学会賞受賞講演.
- (3) Takashi Kato, “Self-Organized Functional Polymers for Water, Energy, Healthcare, and Environment: Approaches to Use of Liquid-Crystalline Ordered Nanostructures”, The 48th World Polymer Congress IUPAC-MACRO2020+, International Convention Center Jeju, Jeju Island, Korea and Online (Hybrid), May 18, 2021, 基調講演.

### 【公募研究 (計2553件, 以下代表例を記載)】

- (4) Hajime Torii, “Roles of Electrostatics and Intermolecular Electronic Motions in the Structural and Spectroscopic Features of Hydrogen- and Halogen-Bonded Systems”, 38th International Conference on Solution Chemistry (38ICSC), Hotel Metropol, Belgrade, Serbia, July 12, 2023, 招待講演.
- (5) Tsuyoshi Minami, “Water-gated organic transistors for chemical sensing application”, The 2021 International Chemical Congress of Pacific Basin Societies (Pacifichem 2021), USA and Online (Hybrid), December 21, 2021, 招待講演.

## 書籍 (全体 計84件) (計画研究30件, 公募研究54件, 以下代表例を記載)

- (1) 宮田隆志, “Target Molecule-responsive Hydrogels”, *Chemoresponsive Materials: Smart Materials for Chemical and Biological Stimulation: Edition 2*, Ed. Hans-Jörg Schneider, RSC, 2022年7月.

## 産業財産権 (全体 計205件) (計画研究175件, 公募研究30件, 以下代表例を記載)

- (1) 加藤隆史, 他, “ナノ構造複合半透膜”, 特許7368857号, 2023年.
- (2) Masaru Tanaka, 他, “Medical analysis device and cell analysis method”, 特許US-11660596-B2, 2023年.
- (3) 大谷 亨, 他, “血管新生促進材”, 特許7186417号, 2022年.

## ホームページ、主催シンポジウム、一般向けのアウトリーチ活動等

### 【ホームページ・ニュースレター・雑誌連載】

令和元年8月より領域ホームページ (<https://www.aquatic-functional-materials.org/>, 図15) を立ち上げ、ニュースレター (18号まで出版済) や論文、イベント案内、受賞などの情報を積極的に国内外に紹介した。一日平均200件近くのアクセスが、欧米諸国・アジア等を含め世界各国からあった。また、東京化学同人「現代化学」の2021年5月号-12月号 (全8回) にわたって領域研究の紹介を各2ページ連載した。

### 【主催シンポジウム (計17件)】

第10回 (2020年) ~14回 (2024年) のCSJ化学フェスタにて、「水圏機能材料」特別企画を主催し、成果を発信した。産学連携フォーラム (公開) を3回開催した。国際シンポジウムとして、国際若手フォーラム (2019年12月、シンガポール)、Japanese-German Workshop “Aquatic Materials Made to Order” (2020年3月、ハイデルベルク; COVID-19のため紙上開催) を開催した。

### 【アウトリーチ (計270件)】

領域発足時から令和6年6月までに、計270件のアウトリーチ活動が行われた。例としてA03計画・松葉 (山形大学) は、一般向け講演会や国内・海外での小中高生向け授業・実験など、令和6年6月までに計31件のアウトリーチ活動を行い、累計3,000名以上の参加者に水圏機能材料の魅力を発信した。



図15. 領域ホームページ

## 8 研究組織の連携体制

研究領域全体を通じ、本研究領域内の研究項目間、計画研究及び公募研究間の連携体制について、図表などを用いて具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

水圏で新たな機能を生み出す材料を効果的に創製するために、機能発現の単位となる分子およびその集合体を構築する研究項目 A01、出口の複合機能を開拓する研究項目 A03 に対して、水と材料の相互作用を原子・分子レベルから階層的に解析・理解する研究項目 A02 が緊密に連携する体制を構築した (図 16)。研究項目 A02 は全体を繋ぐ役割を担い、水と材料の相互作用の解明と、その知見に根差した材料開発という、本領域の目的に沿ったプロジェクト研究推進に効果的に機能した。

個別の研究の寄せ集めとしない工夫として、機能イオン液晶膜や $\pi$ 共役系発光材料、生物着想材料、生体親和材料、架橋ゲル接着材料などの共通の対象に対して放射光・中性子・テラヘルツ・AFM など複数の先端計測手法、さらには分子シミュレーションを基盤とする計算科学によって材料機能に対する水の役割解明という目的と照らし合わせながら総合的に研究を進めた。水圏の材料・機能や科学における共通の問題に対して、総括班が主導し、関連する研究項目間で打開策を見出す、機動性に富んだ水圏機能材料戦略会議を実施した。またテーマを決めた勉強会や若手同士の「先進水圏若手フォーラム」も活発に行い、より強固な連携体制を構築することができた。

### 計画研究及び公募研究間の連携体制

材料と接する水における形態を、「つなぐ」「はたらく」「つくる」という概念で分類する点が特徴であり、計画研究が目指す目標もこれらに分類することができた (図 17)。公募研究も全てこの分類に当てはまる。すなわち、連携体制が構築された計画研究の中に公募研究が入り込める形にした。公募研究者も含めた緊密な議論により、共同研究を促進する取り組みも積極的に行った。その結果、計画研究/公募研究間で 120 件を含む総数 302 件の共同研究テーマが生まれ、さらに共著論文 112 報 (全論文数 657 報) の発表に至った。

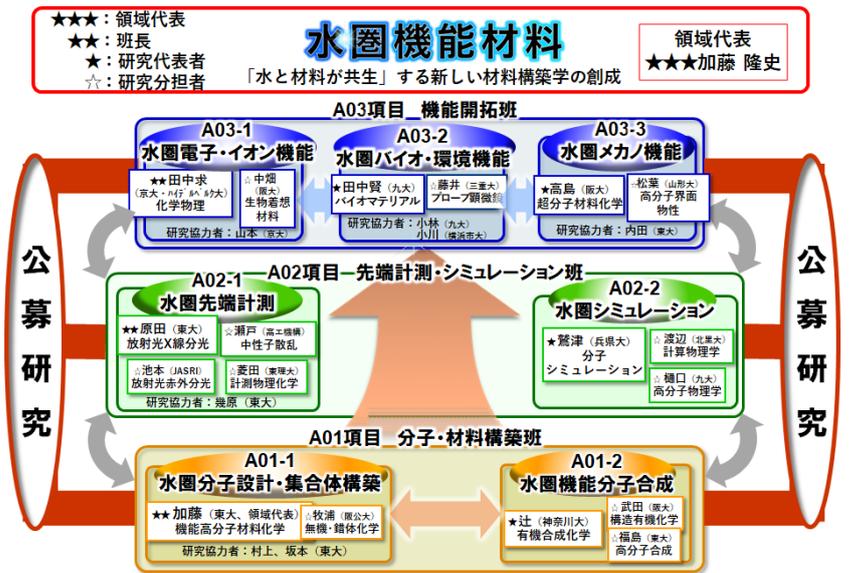


図 16. 研究項目間の連携体制

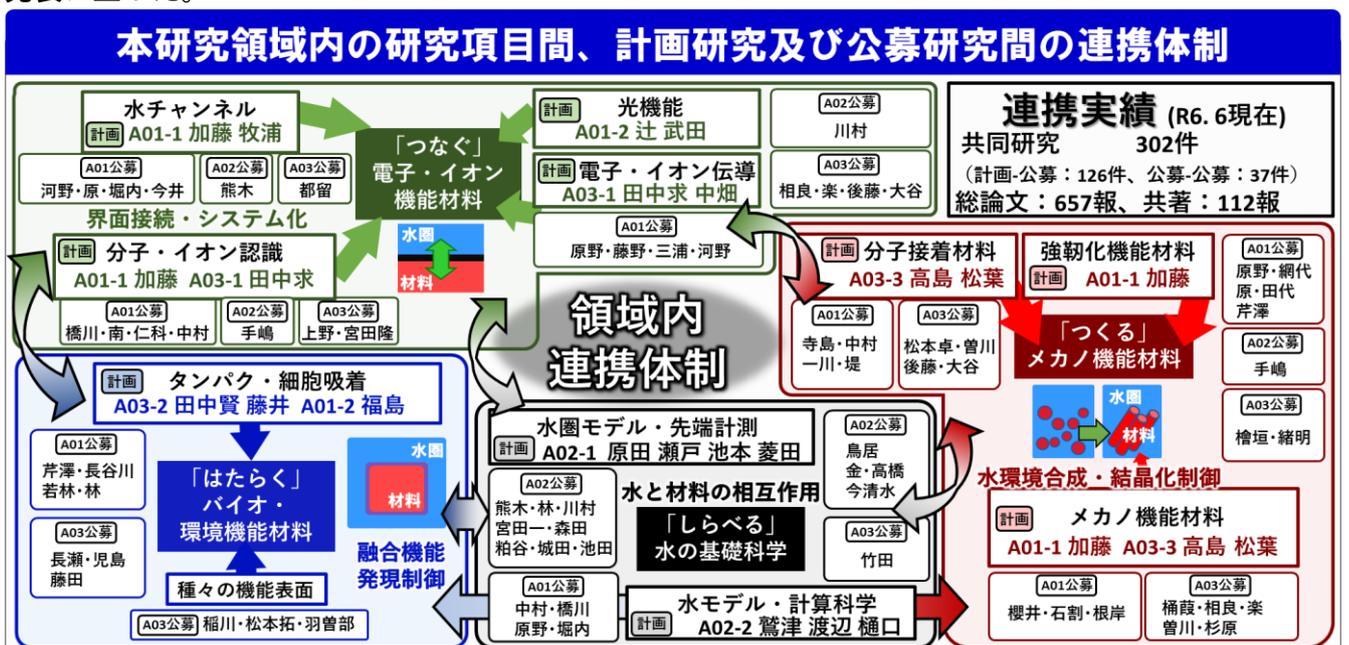


図 17. 材料と接する水の役割に応じた分類とそれに伴った領域内連携体制

## 9 研究費の使用状況

研究領域全体を通じ、研究費の使用状況や効果的使用の工夫、設備等（本研究領域内で共用する設備・装置の購入・開発・運用、実験資料・資材の提供など）の活用状況について、総括班研究課題の活動状況と併せて具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。また、領域設定期間最終年度の繰越しが承認された計画研究（総括班・国際活動支援班を含む。）がある場合は、その内容を記述すること。

**研究領域全体の使用状況** 総額の50%を超える使途の変更など大幅な変更は生じなかった。新型コロナウイルス感染症拡大の状況においても、効率よく研究の推進と研究成果の発展に繋がるように、オンライン研究会の開催と公開シンポジウムを開催した。感染症法上の位置付けが5類感染症に移行されてからは、対面形式での領域会議と公開シンポジウムを行った。異分野融合型の研究展開に繋げることを念頭において研究費を執行し、研究の推進に貢献した。

**研究費の使用状況** 「水」と「材料」の関係を見つめた機能創製という本領域の目標達成のために必要な分析機器を各計画研究課題の予算で初年度に購入した。本領域の研究活動を広く認知してもらうために、一般科学雑誌への連載を通じた広報活動や、公開シンポジウムの開催を行った。人件費について、効率的な研究課題推進にあたり、共同研究を推進し、研究成果を確実に論文成果として発表するために必要な特任研究員を各計画研究で雇用した。旅費については、令和2年度までは新型コロナウイルスの影響で使用が大幅に制限されたが、その後は、計画通りに執行した。

### 研究費の効果的使用の工夫

**領域内分子シミュレーション研究の活性化とデータ解析の促進** 領域内共同研究に分子シミュレーションを積極的に取り入れ、水圏マテリアルズインフォマティクス環境構築のために、共用機器としてファイルサーバーやデータ解析用の計算機環境を強化した（図18）。

**水の基礎物性解明のための重水素化物の提供** 「水」の構造・物性解析を加速させるため、共通で取り扱うポリマーの重水素化物を購入・提供し、中性子散乱や赤外分光などにおける検出・解析効率の向上を図った。これにより中性子散乱などの異なる複数の実験データの整合性を向上させた。

### 統一的水と材料評価：示差走査熱量測定（DSC測定）

「水」の状態の理解は材料機能の発現の解明において重要な情報の一つである。領域内においては、多数の「水」に関係した材料があり、これらの解明を進めることで、領域全体における統一した理解を創出することができる。そこで領域内にて、提供可能なサンプルを集め、状態解明の一つとして界面「水」の相転移挙動をDSC測定にて解析し、データベースを構築した。

**設備等の活用状況** 各計画研究で購入・設置した機器は総括班の設備共用担当が共用化し、運用した（図19）。

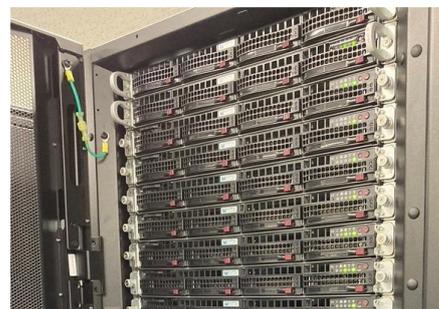


図18. 総括班にて導入したファイルサーバ（兵庫県立大学に設置）

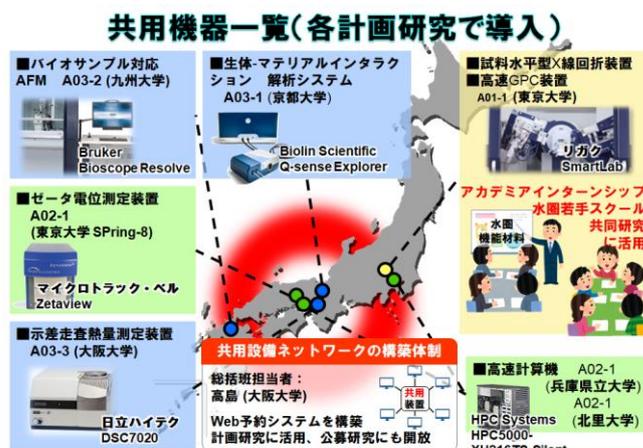


図19. 領域で導入した共用機器

設置先	共用設備機器 (設置先機関)	設置先	共用設備機器 (設置先機関)
A01-1	試料水平型 X 線回折装置 (東京大学大学院工学系研究科)	A03-1	生体-マテリアルインタラクション解析システム (京都大学)
A02-1	ゼータ電位測定装置 (東京大学物性研究所)	A03-2	バイオサンプル対応統合 AFM システム (九州大学先導化学研究所)
A02-1	分子シミュレーション用ファイルサーバ (兵庫県立大学情報科学研究所)	A03-3	示差走査型熱量測定装置 (標準型) (大阪大学大学院理学研究科)
X00	分子シミュレーション用ファイルサーバ (兵庫県立大学情報科学研究所)	X00	動的粘弾性測定装置 (東京大学大学院工学系研究科) 示差走査型熱量測定装置 (高感度型) (大阪大学大学院理学研究科)

**装置開発**：水の基礎物性解明のために、X線分光装置・赤外分光装置（A02-1）とX線散乱測定装置（A03-3）において、精密な調湿の下、引張試験と散乱測定の同時計測などに対応した装置開発を行い、共用機器体制を整えた。菱田は材料機能と含水率の関係を調べるためのテラヘルツ分光装置を開発しており、基本的なセットアップを整え領域研究に活用した。

**総括班研究課題の活動状況** 総括班は、加藤（研究代表者）のリーダーシップの下で、本研究領域の全体的な領域運営の方針ならびに研究方針の策定を行った。企画調整では、事務局（田中賢）と共同研究推進担当（原田）の補佐の下、各担当と協働で運営した。定期的（月1回以上）に総括班会議を開催し、領域全体の研究方針の策定と研究の進捗状況の確認、領域内共同研究や共用機器利用の促進、成果発表などの状況把握を行い、領域内の活動全般が円滑に進展するように機能させた。

**オンライン環境整備** 領域発足に合わせて、ホームページを開設した。オンライン会議システムであるZoomのアカウントを購入し、新型コロナウイルス感染症拡大の環境下において、領域会議や若手スクール、フォーラム、公開シンポジウム等のオンライン会議開催に活用した。

**総括班会議** 定期的に総括班会議を招集し、研究成果取りまとめに当たり領域全体の情報収集の策定と収集状況を確認した。**総括班会議は55回**を数え、全体会議で成果取りまとめの方向性を確認した。

**領域会議** 非公開の領域会議を6回行い、領域内の計画研究者と公募研究者の円滑な研究交流・相互理解も進み、共同研究も多数（400件以上）行われた。

**領域研究の広報活動** 本領域に参画している研究者の研究内容を社会に公開する企画を立てた。

**東京化学同人の月刊誌「現代化学」での研究紹介記事連載**：社会への認知を広げるために、2021年5月号から本領域の研究活動と各研究項目の紹介をはじめ、2023年にかけて12回連載した。

**日本化学会秋季事業CSJ化学フェスタでの公開企画**：講演枠に支出し、一般向けに無料公開の講演会として2020年～2024年の間、毎年公開シンポジウムを開催した。計画研究者だけでなく、公募研究者も講演した。領域内の研究成果を周知するには効果的であり、参加者も多数（対面時：毎回100名程度、オンライン時：300名程度）に上った。

**産学連携フォーラム**：領域研究シーズ集（印刷体）を作成し、参加企業に無料で配布することで、産学共同研究の促進につなげた。2020年から2022年の間に3回開催した。

**領域研究の若手育成活動** 本領域に参画している若手研究者を育成するために下記を企画した。

**水圏若手スクール**：次世代の研究者の育成の場、および若手研究者の相互交流の活性化の場として、企画した。3回の若手スクールを開催し、のべ135名が参加し、博士課程進学希望者を生み出した。

**水圏アカデミアインターンシップ**：スーパーコンピュータを用いた分子シミュレーションに関する研究会や先端計測に関する研究会を2回開催し、大学院生と若手研究者に異分野の研究内容・技術を習得・経験する機会を提供することで、共同研究の効率的促進と若手育成に貢献した。

**水圏インダストリーインターンシップ**：化学と物理の分野融合と領域内共同研究の加速、および水圏共通溶媒の有効活用へ繋げる目的で、大強度陽子加速器施設（J-PARC）にて3回開催した。インターンシップをきっかけとした博士後期課程進学や、実験で再訪した学生も多数生み出した。

**領域内分子シミュレーション研究のデータ管理** 領域内での水圏機能材料に関するシミュレーション研究を強化し、情報の蓄積・一元管理によるマテリアルズインフォマティクスへ展開した。2020年に総括班経費でファイルサーバを購入し、共通機器としての運用を開始した。2021年に導入された兵庫県立大学の新しいスーパーコンピュータおよび富岳等と本サーバを連携させ、大規模分子集合体のシミュレーションを多くの領域メンバーが利用可能になり、アカデミアインターンシップで活用した（**図17**）。

**国際シンポジウム&国際若手フォーラム** 国際アドバイザーボードメンバーのYanli Zhao教授（シンガポール・南洋理工大学）との国際合同シンポジウムを開催した。また、ドイツ・エクセレンスクラスタ『3D Matter Made to Order』と国際シンポジウムを開催した（コロナのため紙上開催）。

**国際アドバイザーとの連携** 2021年6月（オンライン）と2024年1月には国際アドバイザーであるYanli Zhao教授（シンガポール・南洋理工大学）らを迎えた国際アドバイザーボード会議を開催した。国際アドバイザーと連携し、本領域の継続的な発展と取りまとめにあたってのアドバイスを頂いた。

**総括班運営・共通機器・共同研究マネジメント** 効率的な総括班運営のために、事務補佐員・研究員を雇用し、領域運営の円滑化と共用化された機器の活用を行った。

**繰り越しについて** 2019年度に繰り越しを行った。新型コロナウイルス感染症拡大により、2020年3月に予定されていたハイデルベルク（ドイツ）での学会のオンサイトでの開催を断念することとなり、関連旅費の執行を取りやめた点が理由である。2020年度にも繰り越しを行った。国際会議や海外研究者の招へいの中止、日本からの若手研究者の海外派遣の停止措置が執られた点が理由である。繰り越し金は、新型コロナウイルス感染症拡大が終息した後に、領域運営のために適切に執行した。

## 10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の成果が当該学問分野や関連学問分野に与えたインパクトや波及効果などについて、「革新的・創造的な学術研究の発展」の観点から、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、応募時に「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」、「②当該領域の各分野発展・飛躍的な展開を目指すもの」のどちらを選択したか、また、どの程度達成できたかを明確にすること。

### ■ 本研究領域の成果が当該学問分野や関連学問分野に与えたインパクト

本研究領域は「水を分子としてとらえる」という独自の視座に基づき、未開拓であった「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」を融合し、水圏機能材料構築学の創成を通じて「革新的・創造的な学術研究の発展」に貢献した。応募時の「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」という目標に対して、当初の目的以上の内容を達成できた。

■ 「水圏機能材料」の研究に関する世界的な波及効果 加藤の超分子・液晶材料の構築技術をもとに、ナノチャンネル構造を有する自己組織化膜を形成させた。本概念を示した総説論文[*Adv. Mater.* 2022]は広く世界に認められ、2年間で133回以上(6月24日現在)の被引用に至り、Clarivate社 Web of Science および Wiley 社から Highly cited paper に選ばれた。これらは優れたウイルス除去能や選択的イオン透過能と99.9999%以上のウイルス除去率を有する水処理膜として機能した[*Adv. Sci.* 2024, *J. Mater. Chem. A* 2023, *Small*, 2020]。また加藤らが開発した極めて均一かつ1ナノメートル以下でサイズの揃った孔を持つ液晶高分子の自己組織化膜を用い、原田(A02)と大型放射光施設 SPring-8 を用いる軟X線蛍光分光により液晶高分子膜中の水分子を調べた結果、孔内のイオンを取り巻く水分子の水素結合構造の安定性が、イオンの選択的な透過機能に影響を及ぼすことを見出した[*Angew. Chem. Int. Ed.*, 2020]。さらに、鷺津(A02)と協同で自己組織化膜ナノチャンネル内の水の水素結合および自由エネルギー状態を量子・分子連成法という新しいシミュレーション手法により解明した[*Sci. Adv.*, 2021]。

今清水(A02)、菱田(A02)らは、サブテラヘルツ領域の電磁波の照射により、タンパク質の周囲にある水分子集団の運動を励起し、水和状態を変化させる現象の観測に成功した。通常は長い時間を要するタンパク質の水和変化が照射により大幅に加速されることも発見した[*Nat. Commun.*, 2023]。

■ 国際的なネットワークの構築等の取組 加藤(A01)や田中求(A03)らに代表される、領域メンバーが持つ幅広い国際ネットワークは本領域の大きな特徴の一つであり、国際共同研究の成果を国際共著論文として発表し、広く世界へ発信した(延べ154報)。代表的な研究成果として、加藤(A01)、牧浦(A01)らがコーネル大(米)・Abbottらと連携して、液晶分子の配列の乱れから生体分子認識を精密に検出した研究(*ACS Appl. Mater. Interfaces*, 2023)や、田中求、中畑、高島(A03)らがカールスルーエ工大(独)・Wegenerらと連携して、超精密3Dプリントした構造体の中に埋め込んだ超分子ゲルの水和構造を自在に変化させ、3D構造体に接着した細胞を力学制御した研究(*Sci. Adv.* 2020)を論文として発表した。

■ 「研究成果の社会還元」の観点での波及効果 領域内で得られた成果の社会還元の場合として「産学連携フォーラム」を毎年開催した。いずれのフォーラムにおいても、企業における材料・製品開発の課題解決に材料表面と水の関わりに着眼した解析が役に立つ例が多く、本フォーラムの必要性が明確になった。これを契機に企業と共同研究の議論や公益社団法人新化学技術推進協会から講演依頼を受けた。

■ 「異分野融合」の観点での波及効果 計画研究者と公募研究者との共同研究では、総括班が積極的に基幹化合物・材料の共有化を図ることができた。水と機能の相関解明のための共同利用施設における精密先端計測については、共同研究推進担当が中心となり、積極的に公募研究者をサポートする形で推し進め、共同研究成果に結びつけることができた。

■ 「次世代若手研究者育成」の観点での波及効果 計画研究・公募研究の若手研究者・学生に異分野の研究を肌で感じてもらうために、「アカデミアインターンシップ」を総括班の支援のもと行った。これまでに実施した研究機関への短期派遣(34件)に加えて、先方の研究室に中長期滞在することで、水圏機能材料の新たな発展に資する人材を育成した。

### ■ 「大型共同利用施設」の利用促進、ならびに世界トップレベル先端計測・計算施設での実施

分子シミュレーションを専門とする研究者が材料近傍の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状態解析を支援した。総括班にて導入したファイルサーバや計算機を用いた大規模分子シミュレーションのスクールを開催した。分子シミュレーションの実施件数を増し、マテリアルズインフォマティクスのためのデータベースを構築した。

SPring-8やJ-PARCなどの大型施設で高い経験値を持った研究者が領域内で活躍し、総括班が主導して水の基礎物性解明のための大型施設利用の促進に努めた。特に異分野の研究を実際に経験することにより、広い視点で独創的な研究を推進する研究者育成も含めて、産業応用が盛んな中性子散乱に対する「インダストリーインターンシップ」を企画した。施設見学や実験データを用いたデータ解析演習を行った。この結果、参加学生の博士後期課程進学やアカデミアとしての就職、共同研究の展開に繋がった。

## 11 若手研究者の育成に関する取組実績

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究遂行に携わった若手研究者（令和6年3月末現在で39歳以下。研究協力者やポスドク、途中で追加・削除した者を含む。）の育成に係る取組の実績について、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

**1) 若手スクール** 本領域では、化学、物理、材料、計測、計算科学など様々な研究分野を専門とする研究者が参画している。若手の育成および若手を主体とした領域の活性化の一環として、学会では顔を合わせる機会が少ない若手研究者や学生が一堂に会して情報交換を行い、異分野の知識の習得や新たなネットワーク構築ができる場として若手スクールを開催した。第1回は2019年11月に合宿形式で開催し、若手研究者15名、学生30名の計45名によるポスター発表・意見交換会を行った。第2回は2020年11月にコロナ禍の影響でオンラインにて開催し計71名が参加した。若手研究者による講義および学生ポスター発表44件が行われ、博士後期課程学生が司会進行するなど、若手が主体となって進められた。第3回は2022年12月に対面で開催し、計17名が参加した。SPRING-8施設見学においては、参加学生からは、「世界最高峰の装置であるSPRING-8を肌で感じ、中でどんな測定が行われているかを知ることができた。」「水圏機能材料という枠組みの中で自分の研究の立ち位置がわかった。」などの感想が寄せられ、対面の議論を通して、異分野の研究者・学生間の交流が深まる有意義なスクールとなった。

**(2) 国際若手フォーラム** 海外研究者との情報交換・交流を通じて新しい学問分野を国際的に牽引できる若手研究者を育成し、国際共同研究を加速することを目的として、若手研究者および大学院生を対象に第1回国際若手フォーラムを2019年12月にシンガポール南洋理工大学にて開催した。日本側からは7名、シンガポール側から32名が参加し、双方から若手を中心とした研究者14名が水圏機能材料に関連する研究発表を行い、ディスカッションベースの交流も活発に行われた。互いの国の研究生活の違い、将来展望について知る貴重な機会となった。

**(3) 水圏アカデミアインターンシップ、水圏インダストリーインターンシップ** 異分野の研究を実際に経験することにより、広い視点で独創的かつ斬新な研究を立案・推進する次世代の若手を育成することを目的とし、アカデミアインターンシップを計2回、インダストリーインターンシップを3回実施した。アカデミアインターンシップにおいては、合宿形式により分子動力学解析の実習を行い、オンラインにて成果発表を行った。インダストリーインターンシップにおいては、大強度陽子加速器施設（J-PARC）にて中性子の原理・応用の解説と産業界での活用実例を学び、分野の垣根を越えた学術的な交流も深めることができた。さらに、領域内における大学院生を含む若手研究者の短期派遣を頻繁に実施した。自身の専門とは異なる研究内容・技術を習得する機会となり、成長の手応えを得たとの感想が多数寄せられた。



第3回アカデミアインターンシップの集合写真

**(4) 若手主体の特筆すべき活動「先進水圏若手フォーラム」** 新しい水圏機能材料創製に向け、若手研究者が主体的に活躍し、新しい分野の形成に貢献できる枠組みや仕掛けを構築することを目的に、総括班の支援のもと、計画研究分担者（若手のみ総勢10名）が先進水圏若手フォーラムを立ち上げた。「つかむ・はなつ」を新しいキーワードとして、材料を介した水の吸脱着の学理解明とその制御を目指した研究を推進し、若手研究者の共同研究により、新たな知見（*Commun. Chem.*, 2020, *Langmuir*, 2021, *Macromolecules*, 2022, *Surf. Interfaces*, 2023, *Polymer*, 2024）が得られた。

**(5) 若手研究者・学生を受賞** 全国規模の学会での優秀発表賞など、若手研究者・学生を受賞が89件あった。計画研究A02 菱田の北米熱測定会議における若手賞（Stig Sunner Memorial Award）、計画研究A01 武田・A02 渡辺、公募研究A01 南・A01 中村・A03 桶蔭・A03 杉原の文部科学大臣表彰若手科学者賞、公募研究A01 中村の日本化学会進歩賞、学生の国際学会優秀発表賞（The 16th Pacific Polymer Conferenceなど）が挙げられる。

**(6) 若手研究者のキャリアパス・学生の博士後期課程への進学** 計画研究A02 渡辺が助教から講師、准教授を経て教授へ、公募研究A03 相良が助教から准教授へ昇任した。また研究協力者のポスドクが助教・講師に着任するなど、多くの若手研究者が大学・公的機関・企業の研究職に就いた。さらに研究協力者として携わる学生のうち、本領域が主催した若手スクールに参加したことをきっかけに博士後期課程へ進学し、博士号取得後に領域内の別の研究室に特任助教として着任するなど、本領域の活動は若手研究者の育成に大きく貢献している。

**(7) アウトリーチ活動** 中高生向けの公開授業・体験教室や若手研究者向けに分子動力学法に関する講習会を実施するなど、本領域の研究代表者・分担者が合計68件のアウトリーチ活動を実施した。

## 12 総括班評価者による評価

研究領域全体を通じ、総括班評価者による評価体制（総括班評価者の氏名や所属等）や本研究領域に対する評価コメントについて、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

**伊藤 耕三（東京大学大学院新領域創成科学研究科・教授）** 本新学術領域は研究者どうしがお互いを刺激する先駆的なプロジェクトに発展している。論文数や共同研究論文も数多くて素晴らしい。加藤先生のリーダーシップが素晴らしい。高い評価を得られると思う。次の新学術領域研究に繋がると期待される。今後、**水圏機能材料に関する研究が国際共同研究のスタートアッププロジェクトに繋がる**のではないかと思う。本領域に参画された研究者は、**卓越した基礎研究を中心にして、日本の大学でしかできないことを今後も実施してもらいたい。**

**川合 真紀（自然科学研究機構・機構長）** 本新学術領域は研究者同士がまとまった研究の部分と多様性を感じる部分が共存しており、これからが発展の大きな原動力となった。加藤領域代表の当初の計画通り、いくつかのまとまった**材料プロジェクトと系統的に基礎的な部分を研究する部分が同じフレームワークの中に入った魅力的なパッケージ**であった。領域会議ではまとまりが良く、意外な印象ではあったが、公募研究のバラエティも豊かで、**大きな発展を遂げた。**

**國武 豊喜（九州大学高等研究院・特別主幹教授）** 1. **水圏材料が一つのジャンルとして発展**しつつあるとの明確な印象を受けました。水圏材料における中間水の意味も種々のスペクトル手段により確立したと思います。水圏材料の中でも特にソフトマター（バイオ系や合成系を問わず）については、中間水などの新しい概念をベースとする革新的な新材料開拓が可能になるのではないのでしょうか。テラヘルツ分光は有力な武器になりそうです。2. **共同研究が極めて活発であり、その成果が具体的に見えてきているのは印象的でした。つくる、みる、はたらく、に表現されるグループ間の積極的な協力が大きな可能性を生み出しました。**リーダーシップの重要性は明らかです。3. **研究成果が多く国際誌に発表されているのは、成果のレベルが極めて高いことを示しています。**

**黒田 一幸（早稲田大学理工学術院 名誉教授、日本学術振興会ストックホルム研究連絡センター センター長）** 専門分野を跨ぐ**真の意味での共同研究が、予想をはるかに超える実績を質と量の両面で示している。**キックオフミーティング後のコロナ禍をオンライン会議等で乗り越え、後半は移動の制約で抑えられていた蓄積した共同研究への意欲やエネルギーが一挙に顕在化し、数々の成果創出は特筆に値する。**論文数、共同研究数、受賞数などの全ての指標は非常に高いアクティビティーの証左**である。もしこの領域が6年目、7年目と続くことが可能ならば、**指数関数的な成長**を示すことになったであろう。賞賛すべきことに取り上げられた個々の研究テーマが非常に多彩で、既存学会の集会等では生まれ得なかった多様な知の集積があった。**施設共同利用も有意義に行われた。**典型例としては、**共同利用設備として領域に導入された DSC 装置が多く研究者に共有され大活躍した。**極めて有効な装置利用と同一測定条件下でのデータ蓄積が相乗効果を成した。**コロナ禍を含む、たかだか5年間の研究でさえ、これだけの新しい描像を提示したことは本当に賞賛に値する。**既に新しい学術の姿を見せている。学術の今後の発展方向、本質的な転換につながる大きな可能性があることを当学術領域研究は実証した。

**山本 尚（中部大学分子性触媒研究センター・教授 センター長）** 加藤領域代表が始めた「水圏機能材料」というプロジェクトは、「**水素結合**」がキーワードになっている。**人類にとっての大きくチャレンジングなテーマ**で、やればやるほど難しいテーマであるが、面白い材料に挑戦された。領域の半分は純正研究（利益追求でなく、「わかる」ための研究）、残りは課題追及研究（明確な目的のある研究）が多い。**純正研究と課題追及研究が同じ新学術の中に共存しているのはたいへん良い。**これからも新しいものが次々と生まれることが期待される。

**吉川 研一（同志社大学生命医科学部・客員教授、京都大学・名誉教授）** 公募研究により、**本領域の研究のすそ野が着実に広がり、意外性のある研究成果が得られた。**計画班の研究も当初の期待を越える発展があり、公募研究者との共同研究も飛躍的に進んだ。「水圏」のキーワードのもと、**新しい機能材料が次々と生まれ、文字通り、新学術を世界に向けて発信した。**

従来の有機化学や応用化学の常識を打ち破るような新規性の高い研究を、中堅・若手研究者が公募研究として進められた。加藤領域代表からの直接的な働きかけもあり、**領域内での共同研究が順調に進められ、大いに発展した。**国際的な共同研究も本領域研究がリードする形で発展した。

**伊藤 恵利 (株式会社メニコン)** ソフトコンタクトレンズ関係の産業は水中で機能を発揮する材料をつくり、その機能を最大化するために詳細構造をみることを専門とします。産業界全体として、単に「つくる」ことだけが突出して求められた物作りから、昨今の先端研究の進化の結果、もの作りの現場においても、量子ビーム分析による構造機能相関の解明が開発速度に直結し、DX・AIの活用による製品の高性能化が必須とされる時代です。**研究が世の中の科学だけでなく産業の現場に与えた新しい価値であり、本新学術領域の神髄**でした。今までないものをつくる、見えなかったものを見る、その結果、**はたらく**機能が生み出されたり予測されたりする、という「つくる・みる・はたらく」を連関される新学術領域『水圏機能材料』による取り組みは、**安易な目先の出口に寄せない、50年後100年後の世界に光明**を与えます。

**岸本 浩通 (株式会社住友ゴム)** 本領域では水と材料に関わる学理の追求に向かって、**研究者同士のネットワーク (共同研究) が広がった点が非常に素晴らしい。成果が出ていない段階の研究を短く纏めることは一般的に難しいが、ここまでわかりやすく研究報告できるのは、成果が凝縮された結果**であり、研究者同士が同じ目標に向かってネットワークが広がった成果です。領域統括をされた加藤教授のマネジメントの賜物だと強く感じた。**企業の立場からしても興味深い**。当初と違った成果でも、本領域で実施された研究テーマの相性を再度カテゴライズして企画講演や企業マッチングなど実施していただけるとさらに良い。現在の日本は少し元気がない状況です。基礎研究は日本を元気にする源だと改めて感じた。

**中田 克 (東レリサーチセンター)** 中間水のキャラクタリゼーションはさまざまな手法でのアプローチがされて、**新たな知見が得られてきたこと感銘を受けました**。本新学術領域にて得られた個別の研究結果を現状成果の範囲で中間水のキャラクターを整理することにより、**次の世代に繋がると感じました**。

**西浦 聖人 (第一工業製薬株式会社)** 多様な産業分野より約400名の参加を得た本領域主催の**産学連携フォーラム**では、「水」というキーワードで多彩かつハイレベルな研究成果を確認できた。領域内の**コラボレーションが非常に多く、スピード感が感じられる研究体制が構築されている印象を強く受けた**。

既存の枠組みを超えた大きな広がり、「水圏」という広範な概念が相まって、将来の大きな可能性が確認できた。また、次世代研究者を養成するプラットフォームの役割を果たしていることも理解できた。環境やライフサイエンスは今後の成長分野として位置づけられ、**産業界においても水圏で機能を発揮する材料への注目度は非常に高い**。製品化に必要な実使用環境下で機能する材料の精密解析技術・シミュレーション技術は企業にも大変有益である。水の基礎科学から発展した応用研究は、有益である。

**Professor Zhao Yanli (Nanyang Technological University)** The main purpose of the project is to develop novel materials and molecules for harmonizing and interacting with environment and bio-systems in aqueous conditions. Developing functional materials and creating the related knowledge with the strong association of water are important both scientifically and practically. Thus, this project was funded timely to advance the research field. **This project is well integrated** with three main topics of (1) development of molecules and materials, (2) advanced measurements and simulation and (3) function development.

With the support of this funded project, there are 1 project leader, 7 planned research principal investigators, 11 planned research co-investigators, and 46 publicly offered research teams. **The funding has been reasonably distributed and utilized** to support interdisciplinary research under the umbrella of “Aquatic Functional Materials”. **Team members have been closely collaborating** to achieve the research targets and deliverables: successful set-up of infrastructures and facilities, high-quality scientific publications and patenting, young faculty development, student research and education, and knowledge translation.

**Professor Stefan Hecht (Humboldt-Universität zu Berlin)** The project has been devoted to **investigating aqueous solutions and their interfaces using a strong interdisciplinary approach**. Based on the gained detailed understanding of the structure and dynamics at aqueous interfaces, the project has been developing new materials for a wide variety of applications ranging from membranes for water purification to biomedicine.

**The research achievements are documented in a multitude of publications, many of them in highly ranked scientific journals and many of them involving multiple PIs**. In addition to scientific publications, work of the consortium and its PIs has led to several patent applications to protect intellectual property. Most importantly, the project has intensified collaboration within the Japanese scientific community and facilitated the academic careers.