

領域略称名：水圏機能材料
領域番号：6104

令和3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）」
に係る中間評価報告書

「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3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	研究領域の目的及び概要	7
4	審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況	9
5	研究の進展状況及び主な成果	11
6	研究発表の状況	16
7	研究組織の連携体制	21
8	若手研究者の育成に関する取組状況	22
9	研究費の使用状況・計画	23
10	今後の研究領域の推進方策	24
11	総括班評価者による評価	26

研究組織

(令和3年6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 ハイデルベルグ大学・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・高等共創研究院・大学院理学研究科・教授	2
総括班・総括班以外の計画研究 計 8 件 (廃止を含む)					

[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。）

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・数理工学系化学域・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・大学院工学研究院・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拓	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
公募研究 計 37 件 (廃止を含む)					

[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 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る（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する。

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ている。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。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、それらの深い理解から、水圏（水環境）において高度に機能発現する材料を構築する。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始めている。本領域では、水環境（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に対して、水の材料科学の展開を進める。

- (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3）。



図1. 本研究領域で提案する「水圏機能材料構築学」の創成

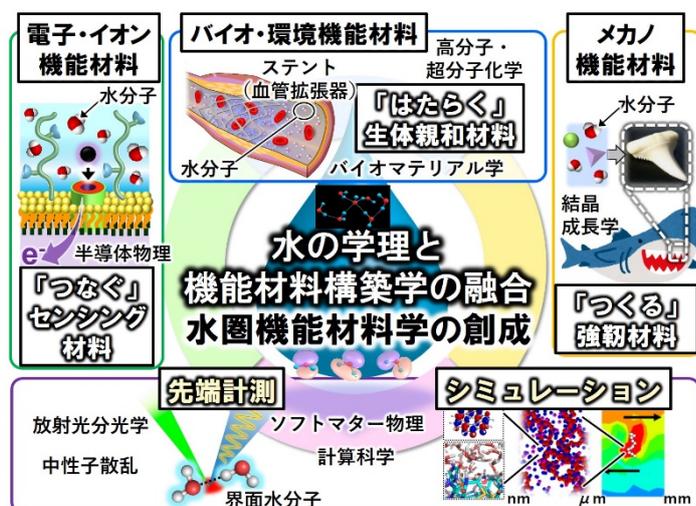


図2. 本領域の基本理念と関連する学問分野

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(図4)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・展開をもたらす。

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い。

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にした研究を行う。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。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**

本研究領域の「水圏機能材料」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」を創成する。

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る、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明確にして、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**を創成する。このような成果は**高粘性・選択的分離・好感度センシング・生体親和性**などの水圏高機能を示す環境・エネルギー・医療分野における機能分子材料設計の指針・学術を創出し、高機能材料およびその社会実装への研究を格段に進歩させる。たとえば、**図5**のように、水分子の水素結合性を先端計測・趣味レーションにより理解・制御して、従来無い精密分離機能を発揮する膜を構築する。

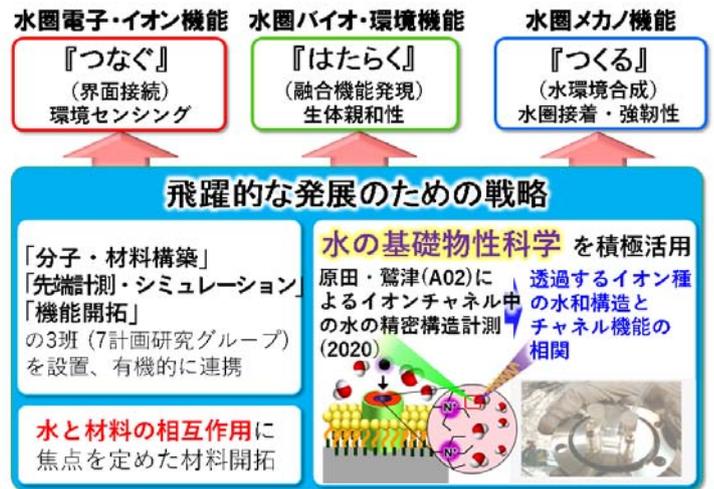


図3. 本研究領域に期待される飛躍的な発展戦略

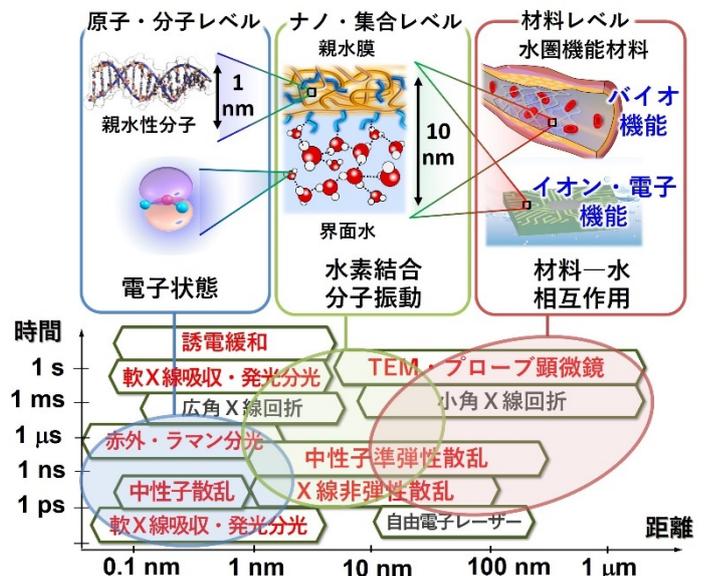


図4. 水圏機能材料の構造・相互作用・運動の先端計測

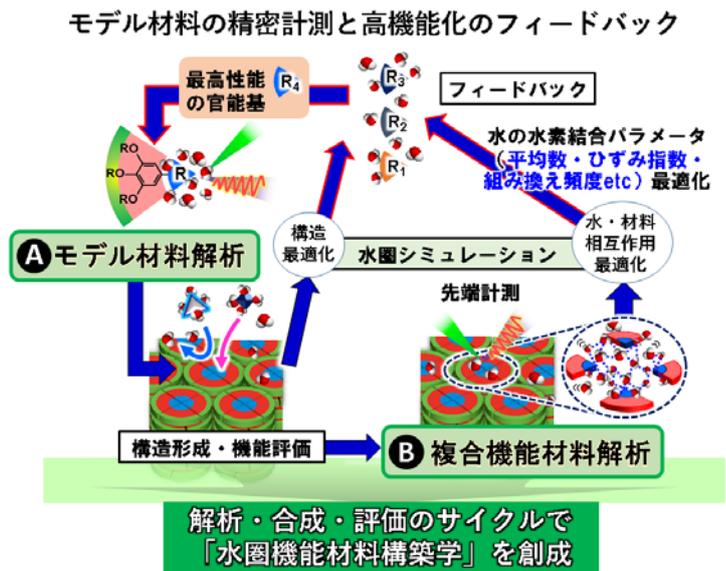


図5. 本研究領域の期間終了後に期待される成果の一例：水圏機能材料の分子設計、材料構築、先端計測 (Angew. Chem., 2020)、シミュレーション (Sci. Adv., 2021) の統合による新材料創製とその学理創成

4 審査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】「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、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、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 報といった成果になり、現在も多くの論文を投稿中、あるいは準備中である。

すでに、数十回における綿密な共同研究打ち合わせを計画研究において行い、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を、先端計測の原田 G が水素結合の観点から機能の解析・解釈に成功し (*Angew. Chem.*, 2020)、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)。さらに、A01 加藤と A02 瀬戸により中性子小角散乱でナノロッドの凝集体形成・破壊過程が解明された (*Nanoscale*, 2020)。このように綿密な計画と密接な連携により結実している。

今後さらに、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する。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）・岡本（研究協力））のグループ間で相互に得られる情報の相違や共通点を認識できる密接な連携体制を構築している。この結果、イオン機能材料や生体親和性材料、接着材料などで水の役割に関する新しい知見を得ている。

【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」とは、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」とは、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に関して、シミュレーション研究で成果が出ている (*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が得られている (*Macromolecules*, 2020)。この水和水の状態解析が、放射光分光やテラヘルツ分光により進行中である。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の開拓も進行している。

【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。 本領域の特徴の一つは、水圏材料合成化学の立場だけでなく、世界最高レベルの先端計測（放射光などによる X 線・中性子計測、理論解析・シミュレーション）を融合させることにより、水圏材料における水と物質の構造・機能の関係を明らかにして、総合的に水圏機能材料構築学を確立することにある。これにより、水と材料に関する学問を世界的にリードできるとともに、我が国発の画期的な製品開発に必要な産業の種を提供する。例えば、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、分子認識・イオン伝導等を検出する機能材料や生体環境を感知応答する環境機能材料などが進行している。

このような水圏機能材料のシーズとニーズのマッチングを行うために、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ている。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ている。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。フォーラム直後の情報交換の中で、企業における材料・製品開発の課題解決においても材料表面と水の制御が重要であるとの相談を受けた。例えば手嶋 (A02 公募・信州大学) の「フラックス育成結晶によるSDGsソリューション ～信大クリスタル×水をキレイにする化学～」などに関して、**新化学技術推進協会 (JACI) からあらためて招待講演の依頼を受け、その後の産学連携への議論に発展している**。このことは、本研究領域の環境低負荷・材料調和社会へ向けた**研究および企画に対する産業界の期待の大きさ**を示している。また、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ている (*ACS Biomater. Sci. Eng.*, 2020)。

【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。それぞれの分類で、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。計画研究では顕微鏡要素よりも水素結合構造・運動により高感度な手法に焦点を当て、測りやすい均一なモデル系を中心に分析を進め、理論グループのマルチスケール解析の力を借りて、**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結実した** (*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)。今後は公募研究との連携をさらに深め、ヘテロジニアス系に高性能原子間力顕微鏡や精密X線回折などによる可視化と分光を積極的に取り入れ、高分子に特有の「水和による不均化」現象が機能に及ぼす影響も対象とする。

【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)、令和元年度に**若手のみの「先進水圏若手フォーラム」**を立ち上げ、既に30回以上の会議を行っている。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ている。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。

【参考意見1】計画研究にダイバーシティが不足しているため、公募研究では若手研究者・女性研究者の登用を優先していただきたいとの意見があった。計画研究では女性研究者が2名であったが、公募研究代表者6名の参画後は女性の研究者が合計8名となり、幅広い年代の女性研究者が領域研究を推進している。また、若手ということでは、助教の割合が計画研究では16%であるが、公募研究では24%となった。領域内では常に、ジェンダー・世代・所属にとらわれない闊達な議論が行われており、ダイバーシティに富んだ組織になっている。

【参考意見2】非常に多くの公募研究を計画しており、研究領域内でどのように連携していくかの工夫が必要であるとの意見があった。公募においては数倍以上の高い倍率の中で採択された質の高い公募研究が参画し、領域会議・フォーラムを通して、公募研究者を孤立させない仕組みを設け、計画班と公募班、公募班間、班間、班内連携が進められる体制を構築している。分野横断的な研究を促進するために、「分子設計」「機能解明」「機能開拓」の3つのフォーラム、研究項目をまたいで実験の課題や問題点を討議する「水圏機能材料戦略会議」を設けており、研究計画班間・公募研究班間の連携進捗を確認している。事実、これまでに**総括班会議に計画研究と公募研究の連携について検討し、このマネジメント体制の中で材料と先端計測の連携、計測と理論・計算などの組み合わせた計画研究と公募研究の共同研究が91件**行われている。総括班はこれらの共同研究の種をサポートし、効果的に連携力を高めている。

【参考意見3】シミュレーションの取組がやや月並みな印象があり、新規応用材料の開発で終わらせないための工夫が必要であるとの意見が複数あった。イオン機能液晶のシミュレーションで開発した量子・分子連成法は凝縮系における新しい材料解析のスキームとして有用であることが証明できた (*Sci. Adv.*, 2021)。同時に細孔中の水の自由エネルギー状態の解明、生体認識機能を有する**水面上単分子膜の界面近傍における水分子の挙動と生体分子吸着性の相関解明** (*Langmuir*, 2020)、そして**薄膜両親媒性分子周囲の水の水素結合と回転緩和の関係の解明** (*Langmuir*, 2021)と、水の学理構築にも貢献した。さらに公募班の参画により、材料近傍における水分子の振動状態や、水素結合ネットワークの詳細解析が進んでいる。さらに、高分子の高次構造の表現において**パーシステントホモロジーが有効であることを世界で初めて示し** (*Sci. Rep.*, 2021)、MIにつなげている。また、流体・バルク固体を含むマクロスケールの計算手法を拡張しており、高分子材料の物性予測 (*Phys. Rev. E*, 2021)などに成功している。

5 研究の進展状況及び主な成果

(1) 領域設定期間内及び中間評価実施時までには何をどこまで明らかにしようとし、中間評価実施時までにはどこまで研究が進展しているのか、(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) 領域設定期間内及び中間評価実施時までには何をどこまで明らかにしようとし、中間評価実施時までにはどこまで研究が進展しているのか

A01 水圏機能材料の基盤となる分子設計・分子集合体の構築

領域設定期間内 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、加藤（研究代表者）の液晶・超分子技術と、牧浦（研究分担者）の水圏での錯体・構造体構築（水環境合成）技術を融合し、水圏で機能する分子・分子集合体を創製する。(1) 水圏で配列し、イオンの検出・選択的な輸送および電子機能を発現する液晶分子の創製、(2) 水環境や気水界面を利用し有機無機融合ナノ結晶・無機コロイド液晶の高度な配列・配向制御を通じた生分解性・軽量強靱材料の創製、(3) 分子集合体構築および結晶化過程における水・材料の構造・動態の解明および制御に取り組む。

中間評価実施時まで 上記に関して、(a) イオン輸送・分離機能を発現する機能性液晶の合成、(b) 無機コロイド液晶の水圏合成、(c) 水分子の集合構造とイオン透過機能の相関解明、を目標とし、研究の進展としては、「(2) 得られた成果」において紹介するように当初の想定を上回る成果が上がっており、公募班や国際共同研究先との連携を含めてさらなる飛躍が期待できる。

A01 水圏機能材料創製のための機能分子の精密合成

領域設定期間内 疎水的な電子・光機能性 π 電子系分子と親水的な生体・環境調和分子の融合により、水圏電子・イオン機能材料分子および環境を検知・発信する水圏光機能分子を合成し、バイオ・環境機能材料へと応用する。また、水圏-非水圏界面を「つなぐ」ための基礎学理を構築する。

中間評価実施時まで 研究は概ね順調に進展している。水圏-非水圏を「つなぐ」分子創製技術と環境調和性光機能分子創製技術の基盤を構築するに至っている。また、領域の共通目標の一つである『水と材料との分子レベルでの相互作用の理解と制御』の端緒となる知見も得ており、当初の想定を上回る成果が上がっている。

A02 水圏機能材料の先端構造・状態解析

領域設定期間内 界面水・材料双方の構造・運動を放射光・中性子・テラヘルツ分光で観測し、水圏シミュレーションと連携して機能発現機構の解明を目指す。得られた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する（図6）。

中間評価実施時まで 界面水の構造・運動を分析し、材料機能に果たす水の役割を解明することを目標とし、以下の材料の分析を行い、一部は(2)に示す機能解明に至っており、当初の想定を上回る成果が上がっている。

- (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の放射光・中性子解析

A02 計算科学による水圏機能材料の設計

領域設定期間内 材料の量子・原子、粗視化分子、流動中の粒子の各階層における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、分子設計指針を提示する。実験的知

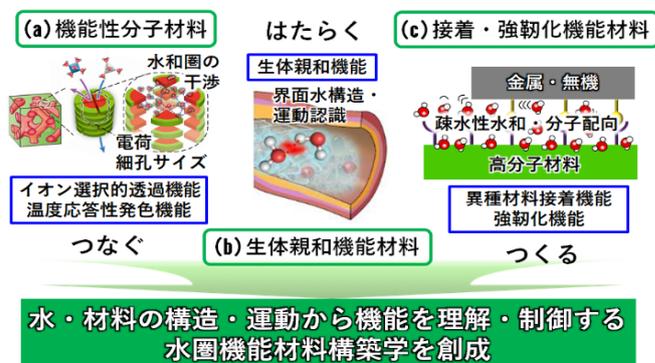


図 6. 先端分光解析の最適化による水圏機能材料の機能解明

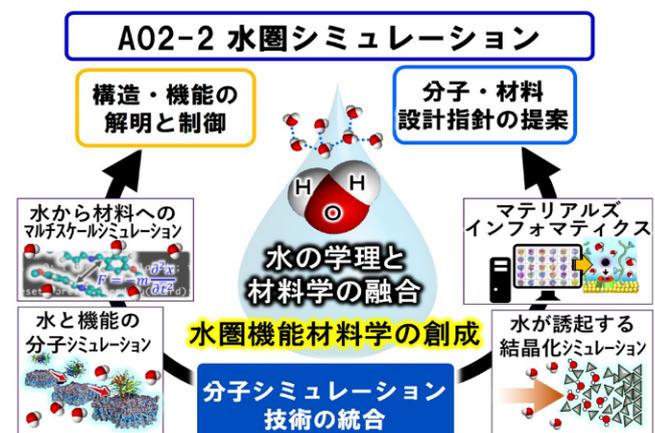


図 7. 計算科学による水圏機能材料の設計指針の確立

見と相補的な現象理解に基づく**水圏機能融合材料の構造・機能の解明**に寄与する（図7）。

中間評価実施時まで (a)「つなぐ」 分子集合体中の水の透過機構の解明と電子・イオン機能材料の制御・設計指針の確立、(b)「つくる」 高分子の接着プロセスの解明とメカノ機能材料の制御・設計指針の確立という2つの目標に対して、水の運動や材料物性の知見を得ることで、材料の制御・設計指針を示した。その結果、当初の想定を上回る成果が上がっている。

A03 水圏機能材料の電子・イオン機能開拓

領域設定期間内 生物着想材料と半導体電子材料を融合させ、水圏環境の微小変化の超高感度検出（**水圏電子機能**）と、イオン認識材料の高集積化による、水中有害イオンの超高効率捕捉・除去（**水圏イオン機能**）という二つの水圏機能を有する材料の創出を目指す（図8）。

中間評価実施時まで 上記目標を達成するため、生体着想型分子認識材料の合成と水和構造解析（**分子設計技術**）と、界面制御による機能と分子設計の最適化（**機能最適化技術**）という二つの技術基盤を確立した。当初の想定を上回る成果が上がっており、公募班や国際共同研究先との連携を含めてさらなる飛躍が期待できる。

A03 水圏機能材料のバイオ・環境機能開拓

領域設定期間内 精密合成により高分子の化学構造を変化させ、界面水の構造・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、その機能評価を行う。水中プローブ顕微鏡による合成高分子の界面状態の解明・制御を行う。A02との連携により水・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**する。A01と連携し、生体親和性および金属スチント表面への高接着性を示す材料の設計指針を創出する。

中間評価実施時まで 種々の生体親和性高分子からなる水圏機能材料表面および界面水の構造・動態を放射光分光、中性子散乱、テラヘルツ分光を駆使して観測し、タンパク質・細胞の選択吸着機能を支配する要因（水の役割など）を解明した。より選択性を高めた生体親和性材料の構築にフィードバックしている。さらに、生体親和機能材料を構成する分子のプロトタイプとしてポリエチレングリコール(PEG)を用いて、計画班および公募班と協働しながら放射光軟X線・赤外分光、中性子散乱、テラヘルツ分光、熱分析を行い、A02の水圏シミュレーションと組み合わせて水・材料の構造・動態の解析手法を確立する。

A03 水圏機能材料のメカノ機能開拓

領域設定期間内 機能性材料と水圏の環境調和性に基づくものづくりを融合し、**動的（界面）機能を発現する水圏機能材料**を創製することを目指す。ナノレベルで動的に応答する有機分子を用いて**マクロレベルでも応答する水圏機能材料の開拓**を目指す（図9）。

中間評価実施時まで **水圏メカノ機能材料の研究基盤の構築**にあたり、材料合成系と材料構造評価系、さらに研究項目内外の共同研究の枠組みを構築することを目指し、順調に基盤データの蓄積を行った。その結果、**論文13報**を発表するに至った。材料合成だけではなく、研究項目間との共同研究を通して、材料評価および機能開発に重点を置く研究を開始した。共同研究も順調に進められており、概ね順調に研究は進捗している。

(2) 本研究領域により得られた成果

A01 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や選択的イオン透過能を示す水処理膜を開発した[*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分子動力学計算から明らかにした[*Environ. Sci.: Water Res. Technol.*, 2020]。

(b) **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・軽量強靱材

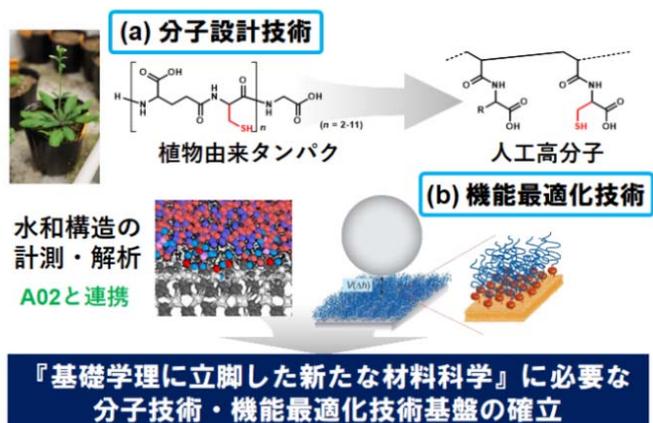


図8. 生物に着想を得た分子認識材料の設計・合成

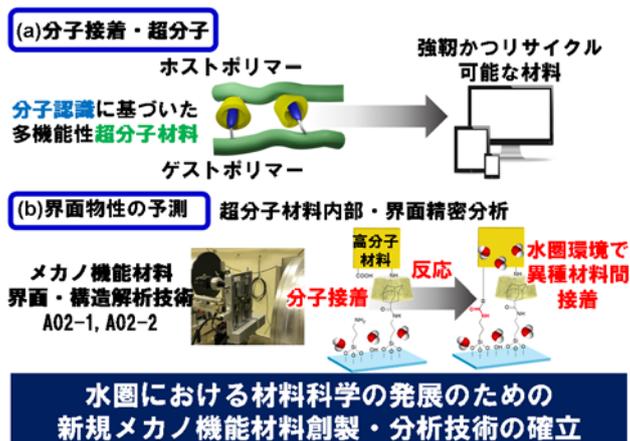
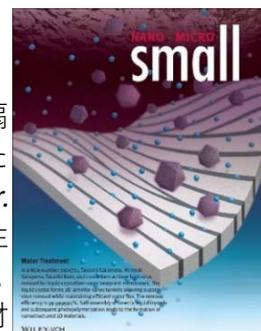


図9. 水圏におけるメカノ機能材料作製



料の基盤となる無機コロイド液晶のせん断下での挙動について、A02 瀬戸と共同で中性子散乱法により明らかにした[Nanoscale, 2020]。

(c) 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、極めて均一かつ1ナノメートル以下でサイズの揃った穴を持つ液晶高分子の自己組織化膜について、A02 原田と協力し、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構造が穴の中で安定に存在するかどうか、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(図10)[Angew. Chem. Int. Ed., 2020]。

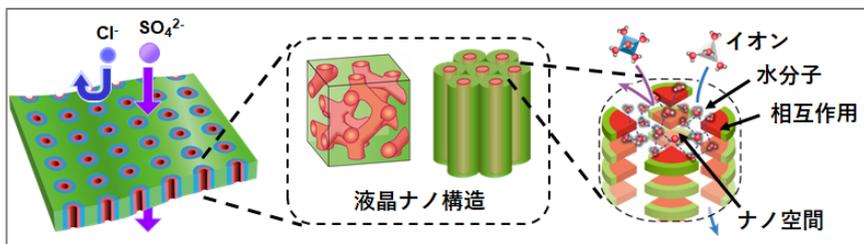


図 10. 選択的なイオン輸送・分離機能を有する水圏機能材料

A01 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として、半導体-生体着想分子を融合した新分子を合成し、集合体形成を確認している(辻、A03 田中求ら)。現在、構造解析・機能性評価の段階に移行している(図11)。

環境調和性光機能分子創製として、水分子の可逆的吸脱着で色が変わる多孔質有機結晶の創製(武田、A02 池本)[Commun. Chem., 2020]、水との相互作用制御で生体親和性等を向上させた高分子の開発(福島、A01 加藤、A03 田中賢)[ACS Biomater. Sci. Eng., 2021]に成功した。また疎水性光機能性分子-環境調和性高分子を融合した新規高分子の合成も達成し、機能評価を開始している。研究成果は論文として15報を発表した。

公募研究との連携 独自性の高い材料や技術を持つ公募研究との連携を開始している(7件)。辻・長谷川(A01 公募)との共同研究は論文発表した[RSC Adv., 2021]。

A02 水圏機能材料の先端構造・状態解析

機能性イオン液晶膜(A01 加藤)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(原田)[Angew. Chem. Int. Ed., 2020](図12A)。外部刺激応答分子(A01 武田)を赤外分光で分析し、水吸着誘起の分子変形で発光色の変調を明らかにした(池本)[Commun. Chem., 2020]。原田・池本・瀬戸は、生体親和性高分子ポリ(2-メトキシエチルアクリレート)(PMEA)(A03 田中賢)とその関連物質に対し中性子・赤外・軟X線分光で界面水の構造・運動解析を行っている。バルク水と同等の速い水と交換する遅い水の分布が高分子の凝集挙動や中間水の形成挙動に影響を与えることを明らかにした[2報投稿中]。テラヘルツ分光では、タンパク質の付着安定性が第二水和圏の水の有無に依存することを見出した。またリン脂質表面を水圏シミュレーション(A02 樋口)と合わせて解析し、親水基まわりの水の運動性の起源を解明した(菱田)[Langmuir, 2021]。

シクロデキストリンとアクリルアミドからなる親水性高分子材料(A03 高島)の破壊エネルギーが含水で高くなる原因を赤外分光で調べ、水の添加により可動性架橋点が形成された(池本)[Polymer, 2020]。ヒドロキシアパタイト結晶ナノロッド(A01 加藤)がずり流動場で配向する要因を中性子小角散乱で調べ、ずり流動場が粒子配向とナノロッドの凝集体形成・破壊に寄与していた(瀬戸)[Nanoscale, 2020]。

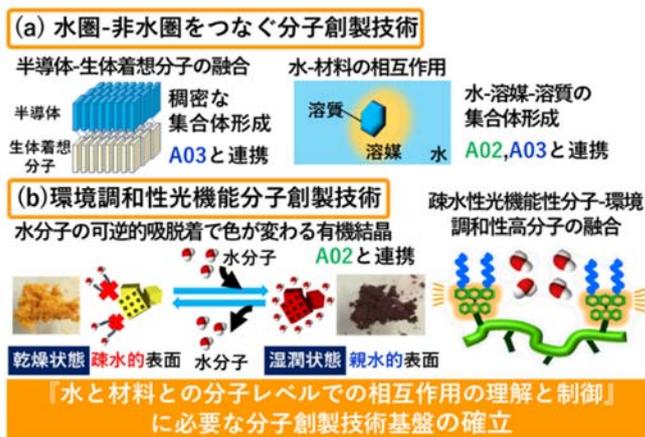


図 11. 水圏-非水圏界面を「つなぐ」水圏機能分子創製の基盤技術

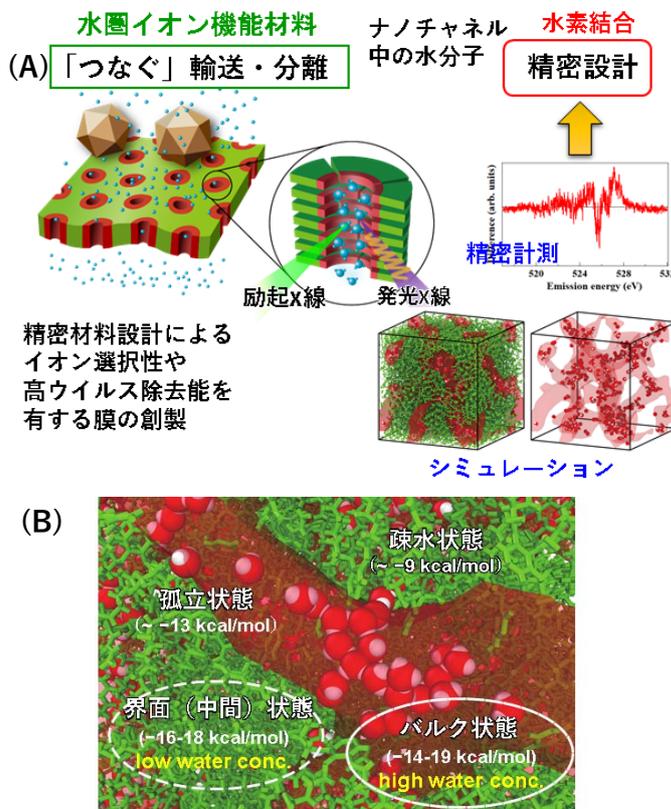


図 12. 自己組織化イオンチャンネル液晶膜のナノ空間における水の状態計算

公募研究との共同研究 原田は、凝集により不均化が起こる実用高分子の代わりに A02 林の自己組織化膜を用い、表面力計測と合わせて界面水の状態解析を行っている（論文投稿中）。

A02 計算科学による水圏機能材料の設計

「つなぐ」: A01 加藤の自己組織化したイオン機能液晶の**水の構造・水の透過**プロセスを明らかにした(鷲津) (図 12B) [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明らかにした(渡辺) [Langmuir, 2020]。「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) [Polym. Chem., 2020, Biomacromol., 2020]。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ている。

公募研究との共同研究 原 (A01 公募) の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、らせん構造形成のメカニズムを分子動力学により解明した(渡辺) [Chem. Commun., 2020]。

A03 水圏機能材料の電子・イオン機能開拓

中畑は、植物中で重金属を超高感度で選択認識・捕捉するファイトケラチンに着想を得た**生物着想高分子を合成**し、水和半径や重金属イオン (カドミウム: Cd) に対する解離定数 K_D など**水圏での物性を精密計測**した。赤外分光 (A02 池本) や高エネルギー X 線鏡面反射率 (ハイデルベルク大 (独)) を駆使して Cd の捕捉による**界面水と構造変化の精密解析**に成功した。

田中求は得意とする人工細胞膜の界面における自己組織化を活用し、**生物着想高分子を超高密度で集積化**することに成功した。QCM-D (共通機器) を用いて K_D 周辺での**水和構造変化を界面粘弾性から検出**したほか、プローブ粒子の水和界面近傍での**揺らぎ解析からイオン認識機能を精密定量**に成功した。

公募研究との共同研究 原野 (A01 公募) との共同研究では、プロトン伝導性を持ったフラーレン膜二次元の水素結合による自己組織化構造を精密に解析した。領域内連携の成果としては、田中・中畑が A03 高島と取り組んだ**超分子メカノ材料を用いた細胞の動的制御**に関する国際共同研究が論文文化されるなど [Sci. Adv., 2020]、当初の予想を上回るペースで成果が上がっている。

A03 水圏機能材料のバイオ・環境機能開拓

官能基の構造、位置、量、配列を精密に制御した生体親和性高分子 PMEA を合成し、側鎖導入間隔に応じて中間水の発現量が単調に変化することを明らかにし、**9 報の原著論文を出版**した (図 13)。また含水する際のイオンの有無によって観測される中間水量が大きく変化することも分かった。**放射光** (A02 原田・池本)・**中性子** (A02 瀬戸) との連携により、水・材料界面の構造・運動の解明のためのサンプル調製と実験条件検討を行った。さらに、菱田 (A02) と連携して水溶性の高い生体親和性高分子に関して、水・高分子界面の形態と力学物性の基礎データを取得した。



図 13. 水圏で機能する新規生体親和性合成高分子の創製

公募研究との共同研究 児島 (A03 公募) との共同研究により PEG 改質 dendrimer の異なる水和状態と薬物担体としての体内分子との関係を明らかにした [Mater. Sci. Eng. C, 2021]。原 (A01 公募)、長瀬 (A03 公募) らと水和高分子の構造評価を行うために J-PARC に共同で申請し**中性子実験**を行っている。

A03 水圏機能材料のメカノ機能開拓

非共有結合性相互作用と共有結合形成を組み合わせ、水圏にて機能する自己修復膜を作製した (図 14)。さらに材料間の高強度・高靱性を実現可能な異種材料接着を実現した。熱力学的に機能するホスト-ゲスト相互作用と速度論的に機能するアミド結合形成を利用して、異種接着を実現した [ACS Appl. Polym. Mater., 2021]。また、水圏高分子材料の高強度化を目的に、セルロースと金属塩としてカルシウムを用いて、水圏融合材料を作製した。破壊靱性は適切な金属塩濃度で向上した [Biomacromol., 2020]。水圏メカノ材料表面の赤外分光分析から、表面の構造により水の吸着が異なっていた。これらの結果 13 報の論文を出版した。

公募研究との共同研究 網代 (A01 公募) と湿度で強度が変化するゲルの精密構造・力学解析を実施している。また、樂 (A03 公募) と非常に含水率の高いゲル材料の構造解析、三浦 (A01 公募)、寺嶋 (A01 公募)、羽曾部 (A03 公募) とミセルの解析について共同研究を進めている。

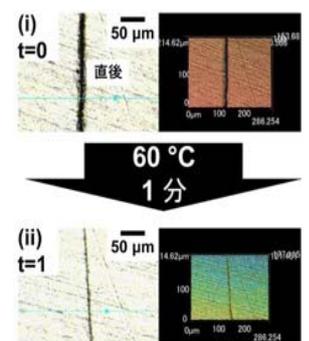


図 14. 水圏環境で機能するコーティング膜の自己修復挙動

公募研究 A01 (代表的な成果の紹介) 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(図15)。

長谷川 (北海道大学) は新しい π 共役高分子を基盤とした光機能材料を作製しており、近赤外発光分析や円偏光発光分析により、新たな近赤外発光性材料の創製に成功した[RSC Adv., 11, 6604 (2021). 他論文6報]。

南 (東京大学) は水圏で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に成功した[Commun. Mater., 2, 8 (2021). 他論文8報]。

寺島 (京都大学) は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., 12, 501 (2021). 他論文6報]。

三浦 (九州大学) はPEG-糖鎖高分子のブロック共重合を行い、この両親水性高分子が水溶液中で自己組織化してミセルのような集合体形成と両親水性高分子のUCST挙動を解明した(論文5報)。

公募研究 A02 (代表的な成果の紹介) 材料との相互作用に応じて界面水をモデルで分類し、その構造・運動を調べる研究、分光との相関や水和した材料の運動を顕微鏡的観察により、水と材料の素過程に多角的成果が生まれた(図16)。

鳥居 (静岡大) は水の水素結合環境を水素にかかる実効電場に置き換えることによって、水のOH伸縮スペクトルの波長を予測するアルゴリズムを構築し、電子状態分布解析に成功した。[J. Phys. Chem. B, 125, 1468 (2021)].

森田 (大阪電通大) と**林 (東工大)** はA03田中賢と共同で、タンパク質吸着・細胞接着を支配する中間水の挙動を赤外分光法、表面力測定により調べ、抗吸着・接着性に重要な役割を果たすメカニズムを明らかにした[Coll. Surf. B, 198, 111449 (2021)].

公募研究 A03 (代表的な成果の紹介) 水圏で材料「つくる」ことや材料が水圏環境下で「はたらく」ことで多彩な機能が生まれた。

相良 (東工大) は π 共役系拡張分子を用いて、伸展などの力学的ストレスによって蛍光波長を可逆的に変化させる、シクロファン型の超分子型メカノフォアの創製に成功した[J. Am. Chem. Soc., 43, 5519 (2021). 他論文1報] (図17)。

桶葎 (北陸先端大) は水界面に凝集したロッド型と板状の多糖類が、水の蒸発に伴って毛管長をはるかに超えた一軸配向性膜を形成することを見出した[Small, 16, 2001993 (2020). 他論文4報] (文部科学大臣若手科学者賞)。

松本 (岡山大) は無機インプラント材料と真皮などの組織の接着機能に水分が果たす役割に着目し、骨類似構造のオクタリン酸カルシウムを用い水圏バイオ接着機能を創製した[Adv. Mater. Interfaces, 8, 2002032 (2021). 他論文2報]。

宮田 (関西大) は水分子の存在下(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[NPG Asia Mater. 13, 34 (2021).]、水圏で多様な機能を発揮するヒドロゲルを創製した(高分子学会賞)。

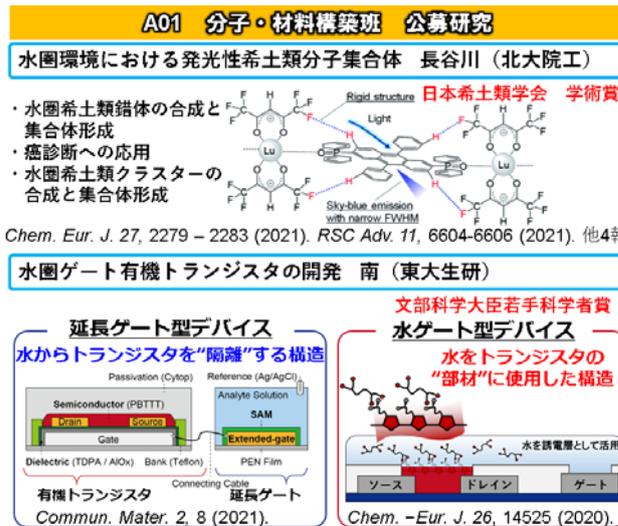


図15. A01 公募研究からの代表的な成果

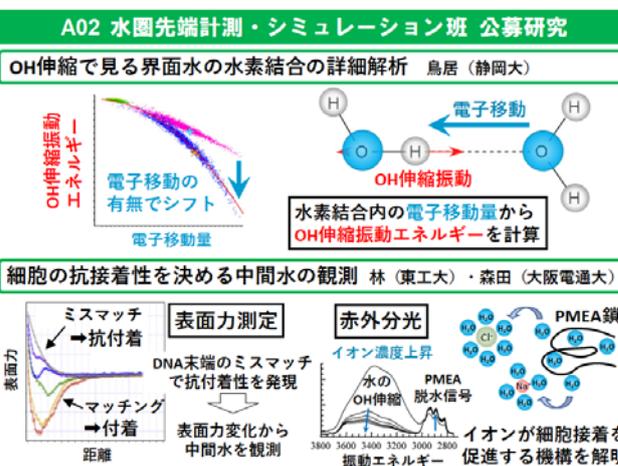


図16. A02 公募研究からの代表的な成果

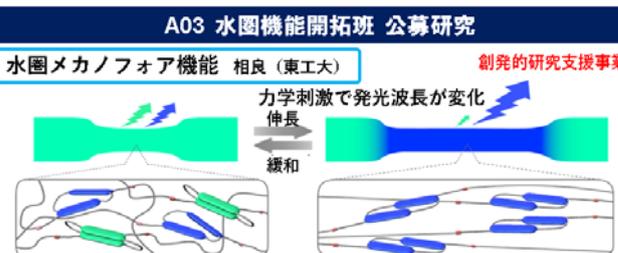


図17. A03 公募研究からの代表的な成果

6 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、一般向けのアウトリーチ活動等の状況。令和3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（計 223 件 全て査読有 以下代表例を記載）

【研究項目A01 分子・材料構築】（A01：計105件 計画研究40件 公募研究67件）

計画 A01-1 代表 加藤 隆史（東京大学・教授）・分担 牧浦 理恵（大阪府立大学・准教授）（計 21 件）

- (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. **A01A02 共同研究.**
- (2) Kazuma Hamaguchi, Rino Ichikawa, Satoshi Kajiyama, Shotaro Torii, Yusuke Hayashi, Jiro Kumaki, Hiroyuki Katayama, and *Takashi Kato, “Gemini Thermotropic Smectic Liquid Crystals for Two-Dimensional Nanostructured Water-Treatment Membranes”, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **13**, 20598-20605 (2021). **A01A02 計画・公募共同研究, Journal Cover.**
- (3) *Junya Uchida, Masafumi Yoshio, and *Takashi Kato, “Self-Healing and Shape Memory Functions Exhibited by Supramolecular Liquid-Crystalline Networks Formed by Combination of Hydrogen Bonding Interactions and Coordination Bonding”, *Chem. Sci.*, **12**, 6091-6098 (2021).
- (4) *Rie Makiura, Anna Niwa, Hiroki Eimura, *Junya Uchida, and *Takashi Kato, “Air/Water Interfacial Monolayer Assembly of Peptide-Conjugated Liquid-Crystalline Molecules”, *Bull. Chem. Soc. Jpn.* in press. DOI:10.1246/bcsj.20210166, **A01 内共同研究.**
- (5) *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). **A01 内計画・公募共同研究, 招待論文, Journal Cover.**
- (6) Ryusuke Watanabe, Takeshi Sakamoto, Kosuke Yamazoe, Jun Miyawaki, *Takashi Kato, and *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, プレスリリース, 日本経済新聞, Very Important Paper, Nature Reviews Chemistry 誌に Research Highlight.**
- (7) 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, 招待論文, 記念特集号, Back Cover.**
- (8) *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.**
- (9) Atsushi Kuwabara, Mayu Enomoto, *Eiji Hosono, Kazuma Hamaguchi, Taira Onuma, Satoshi Kajiyama, and *Takashi Kato, “Nanostructured Liquid-Crystalline Li-Ion Conductors with High Oxidation Resistance: Molecular Design Strategy towards Safe and High-Voltage-Operation Li-Ion Batteries”, *Chem. Sci.*, **11**, 10631-10637 (2020). **Themed collection: Celebrating 10 years of Chemical Science, Inside Front Cover.**
- (10) 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, オープンアクセス, Inside Back Cover.**
- (11) Masanari Nakayama, Satoshi Kajiyama, Akihito Kumamoto, Yuichi Ikuhara, and *Takashi Kato, “Bioinspired Selective Synthesis of Liquid-Crystalline Nanocomposites: Formation of Calcium Carbonate-Based Composite Nanodisks and Nanorods”, *Nanoscale Adv.*, **2**, 2326-2332 (2020). **オープンアクセス.**
- (12) Daniel Kuo, Miaomiao Liu, K. R. Sunil Kumar, Kazuma Hamaguchi, Kian Ping Gan, *Takeshi Sakamoto, Takafumi Ogawa, Riki Kato, Nobuyoshi Miyamoto, Hiroki Nada, Masahiro Kimura, Masahiro Henmi, *Hiroyuki Katayama, and *Takashi Kato, “High Virus Removal by Self-Organized Nanostructured 2D Liquid-Crystalline Smectic Membranes for Water Treatment”, *Small*, **16**, 202001721-1/5 (2020). **Frontispiece.**

計画 A01-2 代表 辻 勇人（神奈川大学・教授）・分担 武田 洋平（大阪大学・准教授）・分担 福島 和樹（東京大学・准教授）（計 22 件）

- (13) Takeru Inoue, Makoto Tsurui, Hiroshi Yamagishi, Yuma Nakazawa, Naoto Hamaguchi, Shoya Watanabe, Yuichi Kitagawa, Yasuchika Hasegawa, Yohei Yamamoto, and *Hayato Tsuji, “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内計画・公募共同研究.**
- (14) Heather F. Higginbotham, Masato Okazaki, *Piotr de Silva, Satoshi Minakata, *Youhei Takeda, and *Przemyslaw Data, “Heavy-Atom-Free Room-Temperature Phosphorescent Organic Light-Emitting Diodes Enabled by Excited States Engineering”, *ACS Appl. Mater. Interfaces*, **13**, 2899-2907 (2021). **国際共同研究,**

プレスリリース, **Optronics** 等海外メディアで多数報道。

- (15) Valentina Montagna, Junko Takahashi, Meng-Yu Tsai, Takayuki Ota, Nicolas Zivic, Seigou Kawaguchi, Takashi Kato, Masaru Tanaka, Haritz Sardon, and *Kazuki Fukushima, “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**.
- (16) *Youhei Takeda, *Ken Albrecht, Yuka Ikemoto, and *Yohei Yamamoto, 他 14 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, **Optronics** 等海外メディアで多数報道。
- (17) Kohei Iwai, *Hiroshi Yamagishi, Colin Herzberger, Yuji Sato, Hayato Tsuji, Ken Albrecht, Kimihisa Yamamoto, Fumio Sasaki, Hiroyasu Sato, Aswin Asaithambi, Axel Lorke, and *Yohei Yamamoto, “Single-Crystalline Optical Microcavities from Luminescent Dendrimers”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **59**, 12674-12679 (2020). 国際共同研究, プレスリリース, **日本の研究.com**.
- (18) *Piotr de Silva, *Przemyslaw Data, *Youhei Takeda, and *Satoshi Minakata, 他 5 名, “Thermally Activated Delayed Fluorescent Donor-Acceptor-Donor-Acceptor π -Conjugated Macrocyclic for Organic Light-Emitting Diodes”, *J. Am. Chem. Soc.*, **142**, 1482-1491 (2020). 国際共同研究, オープンアクセス, プレスリリース, **Optronics** 等海外メディアで多数報道, **Osaka University Research Profile 2019**.
- (19) *Kazuki Fukushima, *Gavin O. Jones, Hans W. Horn, Julia E. Rice, Takashi Kato, and *James L. Hedrick, “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, 招待論文**.
- (20) Victor Bonal, Hayato Tsuji, Eiichi Nakamura, and *María A. Díaz-García, “Blue and Deep-Blue Emitting Organic Lasers with Top-Layer Distributed Feedback Resonators”, *Adv. Opt. Mater.*, **8**, 2001153-1/11 (2020). 国際共同研究.

公募 長谷川 靖哉 (北海道大学・教授) (計7件)

- (21) Yuichi Kitagawa, Satoshi Wada, M. D. Jahidul Islam, Kenichiro Saita, Masayuki Gon, Koji Fushimi, Kazuo Tanaka, Satoshi Maeda and *Yasuchika Hasegawa, “Chiral Lanthanide Lumino-Glass for a Circularly Polarized Light Security Device”, *Commun. Chem.*, **3**, 119-1/5 (2020).

公募 中村 貴志 (筑波大学・助教) (計3件)

- (22) Takashi Nakamura, Sota Yonemura, Shunya Akatsuka, and *Tatsuya Nabeshima, “Synthesis of Single Isomeric Complexes with Dissymmetric Structures Using Macrocyclic Homooligomers”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **60**, 3080-3086 (2021).

公募 藤野 智子 (東京大学・助教) (計3件)

- (23) So Yokomori, *Shun Dekura, Tomoko Fujino, Mitsuaki Kawamura, Taisuke Ozaki, and *Hatsumi Mori, “Vapochromism Induced by Intermolecular Electron Transfer Coupled with Hydrogen-Bond Formation in Zinc Dithiolene Complex”, *J. Mater. Chem. C*, **8**, 14939-14947 (2020).

公募 南 豪 (東京大学・准教授) (計9件)

- (24) Yui Sasaki, Koichiro Asano, Tsukuru Minamiki, Zhoujie Zhang, Shin-ya Takizawa, Riku Kubota, and *Tsuyoshi Minami, “A Water-Gated Organic Thin-Film Transistor for Glyphosate Detection: A Comparative Study with Fluorescence Sensing”, *Chem. Eur. J.*, **26**, 14525-14529 (2020). **Very Important Paper, Front Cover, Cover Profile**にて特集記事掲載。

公募 芹澤 武 (東京工業大学・教授) (計8件)

- (25) Misaki Hanamura, Toshiki Sawada, and *Takeshi Serizawa, “In-Paper Self-Assembly of Cellulose Oligomers for the Preparation of All-Cellulose Functional Paper”, *ACS Sustainable Chem. Eng.*, **9**, 5684-5692 (2021). **Supplementary Cover**.

公募 寺島 崇矢 (京都大学・准教授) (計7件)

- (26) Motoki Shibata, *Takaya Terashima, and Tsuyoshi Koga, “Thermoresponsive Gelation of Amphiphilic Random Copolymer Micelles in Water”, *Macromolecules*, **54**, 5241-5248 (2021). **Front Cover**.

公募 網代 広治 (奈良先端大学院大学・教授) (計5件)

- (27) Jaeyeong Choi, Toshikazu Takata, and *Hiroharu Ajiro, “Pseudo-Polyrotaxane Stereocomplex with α -Cyclodextrin and Block Copolymers Using Poly(ethylene glycol) and Polylactide”, *Macromolecules*, **54**, 5087-5093 (2021).

公募 三浦 佳子 (九州大学・教授) (計5件)

- (28) Takahiro Oh, Yu Hoshino, *Yoshiko Miura, “Aggregation of a Double Hydrophilic Block Glycopolymers: the Effect of Block Polymer Ration”, *J. Mater. Chem. B*, **8**, 10101-10107 (2020).

公募 堀内 新之介 (長崎大学・助教) (計4件)

- (29) *Shinnosuke Horiuchi, Sangjoon Moon, Akitaka Ito, Jacopo Tessarolo, Eri Sakuda, Yasuhiro Arikawa, Guido H. Clever, and *Keisuke Umakoshi, “Multinuclear Ag Clusters Sandwiched by Pt Complex Units: Fluxional Behavior and Chiral-at-Cluster Photoluminescence”, *Angew. Chem. Int. Ed.*, **60**, 10654-10660 (2021). 国際共同研究, プレスリリース, **Inside Back Cover, Hot paper**.

【研究項目A02 先端計測・シミュレーション】 (A02: 計66件 計画研究45件 公募研究21件)

計画 A02-1 代表 原田 慈久 (東京大学・教授)・分担 瀬戸 秀紀 (高エネルギー加速器研究機構・教授)・分担 池本 夕佳 (高輝度光科学研究センター・主幹研究員)・分担 菱田 真史 (筑波大学・助教) (計25件)

- (1) Ryusuke Watanabe, Takeshi Sakamoto, Kosuke Yamazoe, Jun Miyawaki, *Takashi Kato, and *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**, プレスリリース, 日本経済新聞, **Very Important Paper**, *Nature Reviews Chemistry* 誌に **Research Highlight**.

- (2) *Youhei Takeda, *Ken Albrecht, Yuka Ikemoto, and *Yohei Yamamoto, 他 14 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.
- (3) *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.
- (4) *Mafumi Hishida, Naofumi Shimokawa, Yuki Okubo, Shun Taguchi, Yasuhisa Yamamura, and Kazuya Saito, “Phase Transition from the Interdigitated to Bilayer Membrane of a Cationic Surfactant Induced by Addition of Hydrophobic Molecules”, *Langmuir*, **36**, 14699-14709 (2020).
- (5) Ryohei Ikura, Yuka Ikemoto, Motofumi Osaki, Hiroyasu Yamaguchi, Akira Harada, and *Yoshinori Takashima, “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**.
- (6) *Yuka Ikemoto and Heishun Zen, “HgCdTe Detector Saturation Using Infrared Free Electron Laser and Infrared Synchrotron Radiation”, *Infrared Phys. Technol.*, **106**, 103268-1/4 (2020).
- (7) 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**, **J-PARC Web, Inside Back Cover**.
- (8) Hatsuho Usuda, Mafumi Hishida, Elizabeth G. Kelley, Yasuhisa Yamamura, Michihiro Nagao, and *Kazuya Saito, “Interleaflet Coupling of *n*-Alkane Incorporated Bilayers”, *Phys. Chem. Chem. Phys.*, **22**, 5418-5426 (2020). **2020 HOT PCCP Articles, Cover Picture**.

計画 A02-2 代表 鷺津 仁志 (兵庫県立大学・教授)・分担 渡辺 豪 (北里大学・講師)・分担 樋口 祐次 (東京大学・助教) (計22件)

- (9) *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. **A01A02 共同研究**.
- (10) Yohei Shimizu, Takanori Kurokawa, Hirokazu Arai, and *Hitoshi Washizu, “Higher-Order Structure of Polymer Melt Described by Persistent Homology”, *Sci. Rep.*, **11**, 2274-1/11 (2021). オープンアクセス, プレスリリース.
- (11) *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**.
- (12) *Go Watanabe, Hideyo Watanabe, Kota Suzuki, Hidetaka Yuge, Shintaro Yoshida, Takuyoshi Mandai, Shigetaka Yoneda, Hisako Sato, *Mitsuo Hara, and *Jun Yoshida, “Visualizing Helical Stacking of Octahedral Metallomesogens with a Chiral Core”, *Chem. Commun.*, **56**, 12134-12137 (2020). **A01A02 計画・公募共同研究**, **ChemComm Emerging Investigator 2020 受賞論文**, **Inside Back Cover**.
- (13) *Toshihiro Okamoto, Go Watanabe, and 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**.
- (14) Hinako Tsuchiya, Garry Sinawang, Taka-Aki Asoh, Motofumi Osaki, Yuka Ikemoto, Yuji Higuchi, Hiroyasu Yamaguchi, *Akira Harada, *Hiroshi Uyama, and *Yoshinori Takashima, “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**.
- (15) *Yuji Higuchi, Yuta Asano, Takuya Kuwahara, and *Mafumi Hishida, “Rotational Dynamics of Water at Phospholipid Bilayer Depending on the Head Groups Studied by Molecular Dynamics Simulations”, *Langmuir*, **37**, 5329-5338 (2021). **A02 内共同研究**.
- (16) *Toshihiro Okamoto, Shohei Kumagai, Eiji Fukuzaki, Hiroyuki Ishii, Go Watanabe, Naoyuki Niitsu, Tatsuro Annaka, Masakazu Yamagishi, Yukio Tani, Hiroki Sugiura, Tetsuya Watanabe, Shun Watanabe, and Jun Takeya, “Robust, High-Performance *n*-Type Organic Semiconductors”, *Sci. Adv.*, **6**, eaaz0632-1/14 (2020). **プレスリリース**.

公募 熊木 治郎 (山形大学・教授) (計7件)

- (17) Yasuhiro Watanabe, Hayato Ichinohe, and *Jiro Kumaki, “In situ AFM Observation of the Movements of Isolated Isotactic Poly(methyl methacrylate) Chains in a Precursor Film of an Oligo(methyl methacrylate) Droplet Spreading on Mica”, *Langmuir*, **36**, 12327-12335 (2020).

公募 林 智広 (東京工業大学・准教授) (計6件)

- (18) Rudolf Jason Kwaria, Evan Angelo Quimada Mondarte, Hiroyuki Tahara, Ryongsok Chang, and *Tomohiro Hayashi, “Data-Driven Prediction of Protein Adsorption on Self-Assembled Monolayers toward Material Screening and Design”, *ACS Biomater. Sci. Eng.*, **6**, 4949-4956 (2020). **プレスリリース**, 化学工業日報.

公募 川村 出 (横浜国立大学・准教授) (計2件)

- (19) Yugo Tasei, Batsaikhan Mijiddorj, Teruaki Fujito, Izuru Kawamura, Kazuyoshi Ueda, and *Akira Naito, “Thermal

and Non-Thermal Effects of Ethanol and Hexane Mixed Solution as Revealed by In situ Microwave Irradiation Nuclear Magnetic Resonance Spectroscopy and MD Simulation”, *J. Phys. Chem. B*, **124**, 9615-9624 (2020).

公募 鳥居 肇 (静岡大学・教授) (計1件)

(20) *Hajime Torii and Ryota Ukawa, “Role of Intermolecular Charge Fluxes in the Hydrogen-Bond-Induced Frequency Shifts of the OH Stretching Mode of Water”, *J. Phys. Chem. B*, **125**, 1468-1475 (2021).

公募 金 鋼 (大阪大学・准教授) (計4件)

(21) Yusuke Mori, Kei-ichi Okazaki, Toshifumi Mori, *Kang Kim, and Nobuyuki Matubayasi, “Learning Reaction Coordinates via Cross-Entropy Minimization: Application to Alanine Dipeptide”, *J. Chem. Phys.*, **153**, 054115-1/8 (2020).

【研究項目A03 機能開拓】 (A03: 計72件 計画研究50件 公募研究23件)

計画 A03-1 代表 田中 求 (京都大学・Heidelberg Univ.・教授)・分担 中畑 雅樹 (大阪大学・助教) (計11件)

(1) Julian Czajor, Wasim Abuillan, Dinh Vu Nguyen, Christopher Heidebrecht, Evan A. Mondarte, Oleg V. Konovalov, Tomohiro Hayashi, Delphine Felder-Flesch, Stefan Kaufmann, and *Motomu Tanaka, “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計画・公募共同研究, 国際共同研究, オープンアクセス, 招待論文.**

(2) *Marc Hippler, Kai Weißenbruch, Kai Richler, Enrico Lemma, Masaki Nakahata, Benjamin Richter, Christopher Barner-Kowollik, Yoshinori Takashima, Akira Harada, Eva Blasco, *Martin Wegener, *Motomu Tanaka, and *Martin Bastmeyer, “Mechanical Stimulation of Single Cells by Reversible Host-Guest Interactions in 3D Microscaffolds”, *Sci. Adv.*, **6**, eabc2648-1/13 (2020). **A03内共同研究, 国際共同研究.**

(3) *Motomu Tanaka, *Masaki Nakahata, Philipp Linke, and Stefan Kaufmann, “Stimuli-Responsive Hydrogels as a Model of the Dynamic Cellular Microenvironment”, *Polym. J.*, **52**, 861-870 (2020). **A03内共同研究, 国際共同研究, 招待論文.**

計画 A03-2 代表 田中 賢 (九州大学・教授)・分担 藤井 義久 (三重大学・准教授) (計23件)

(4) *Masaru Tanaka, Shigeaki Morita, and Tomohiro Hayashi, “Role of Interfacial Water in Determining the Interactions of Proteins and Cells with Hydrated Materials”, *Colloids Surf. B*, **198**, 111449-1/9 (2021). **A02A03計画・公募共同研究, 招待論文.**

(5) Toshiki Sonoda, *Shingo Kobayashi, Keisuke Herai, and *Masaru Tanaka, “Side Chain Spacing Control of Derivatives of Poly (2-methoxyethyl acrylate): Impact on Hydration States and Antithrombogenicity”, *Macromolecules*, **53**, 8570-8580 (2020).

(6) *Shin-nosuke Nishimura, Tomoya Ueda, Shingo Kobayashi, and *Masaru Tanaka, “Silsequioxane/Poly (2-methoxyethyl acrylate) Hybrid with Both Antithrombotic and Endothelial Cell Adhesive Properties”, *ACS Appl. Polym. Mater.*, **2**, 4790-4801 (2020). **Front Cover.**

(7) Yoshihide Toyokawa, Shingo Kobayashi, Haruka Tsuchiya, Tomokazu Shibuya, Makiko Aoki, Jun Sumiya, Shun Ooyama, Tetsuya Ishizawa, Naohiko Makino, Yoshiyuki Ueno, and *Masaru Tanaka, “A Fully Covered Self-Expandable Metallic Stent Coated with Poly (2-methoxyethyl acrylate) and Its Derivative: In vitro Evaluation of Early-Stage Biliary Sludge Formation Inhibition”, *Mater. Sci. Eng. C*, **120**, 111386-1/10 (2021).

(8) Ryohei Koguchi, Katja Jankova, Yuki Hayasaka, Daisuke Kobayashi, Yosuke Amino, Tatsuya Miyajima, Shingo Kobayashi, Daiki Murakami, Kyoko Yamamoto, and *Masaru Tanaka “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). **Journal Cover.**

(9) Meng-Yu Tsai, Fumihito Aratsu, Shogo Sekida, Shingo Kobayashi, and *Masaru Tanaka, “Blood-Compatible Poly (2-methoxyethyl acrylate) Induces Blebbing-like Phenomenon and Promotes Viability of Tumor Cells in Serum-Free Medium”, *ACS Appl. Bio Mater.*, **3**, 1858-1864 (2020).

計画 A03-3 代表 高島 義徳 (大阪大学・教授)・分担 松葉 豪 (山形大学・教授) (計20件)

(10) Yuta Chonan, *Go Matsuba, Koji Nishida, and Wenbing Hu, “Crystal Morphology of Polyurea on Rapid Quenching”, *Polymer*, **213**, 123201-1/8 (2021). **国際共同研究.**

(11) Junsu Park, *Akira Harada, *Go Matsuba, and *Yoshinori Takashima, “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, テレビ東京, NHK.**

(12) Hinako Tsuchiya, Garry Sinawang, Yuka Ikemoto, Yuji Higuchi, *Akira Harada, *Hiroshi Uyama, and *Yoshinori Takashima, “Supramolecular Biocomposite Hydrogels Formed by Cellulose and Host-Guest Polymers Assisted by Calcium Ion Complexes”, *Biomacromolecules*, **21**, 3936-3944 (2020). **A02A03内共同研究.**

(13) 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 相良 剛光 (東京工業大学・准教授) (計2件)

(14) *Yoshimitsu Sagara, Hanna Traeger, Jie Li, Yuji Okado, Stephen Schrettl, Nobuyuki Tamaoki, and *Christoph Weder, “Mechanically Responsive Luminescent Polymers based on Supramolecular Cyclophane Mechanophores”, *J. Am. Chem. Soc.*, **143**, 5519-5525 (2021).

公募 桶葺 興資 (北陸先端大学院大学・准教授) (計5件)

(15) Kulisara Budpud, *Kosuke Okeyoshi, Maiko K Okajima, and *Tatsuo Kaneko, "Vapor-Sensitive Materials from Polysaccharide Fibers with Self-Assembling Twisted Microstructures", *Small*, **16**, 2001993-1/7 (2020).

公募 松本 卓也 (岡山大学・助教) (計3件)

(16) Yuki Sugiura, Masahiro Okada, Ken Hirano, and *Takuya Matsumoto, "Bone Mineral Analogue Ceramic Block as an Instant Adhesive to Biological Soft Tissue", *Adv. Mater. Interfaces*, **8**, 2002032-1/5 (2021).

公募 宮田 隆志 (関西大学・教授) (計1件)

(17) Chisa Norioka, Yuino Inamoto, Chika Hajime, Akifumi Kawamura, and *Takashi Miyata, "A Universal Method to Easily Design Tough and Stretchable Hydrogels", *NPG Asia Mater.*, **13**, 34-1/10 (2021). **オープンアクセス, プレスリリース, 朝日新聞等, Top-page Graphics.**

公募 樂 優鳳 (産業技術総合研究所・研究員) (計2件)

(18) *Youfeng Yue, Yasuo Norikane, and Jian Ping Gong, "Ultrahigh-Water-Content Photonic Hydrogels with Large Electro-Optic Responses in Visible to Near-Infrared Region", *Adv. Opt. Mater.*, **9**, 2002198-1/9 (2021).

学会発表 (計1055件 計画研究650件 公募研究405件)

(1) 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.**

(2) Mafumi Hishida, "Systematic Understanding of the Effects of Peripheral Molecules on the Physical Properties of Phospholipid Bilayers: Effects of Hydrophobic Molecules and Hydration Water", OKINAWA COLLOIDS 2019, Bankoku Shinryokan, Okinawa, Japan, December 8, 2019. **平成31年度科学奨励賞受賞講演.**

(3) Yuji Higuchi, "Mechanical Properties of Semicrystalline Polymers at the Molecular Level by Coarse-Grained Molecular Dynamics Simulation", The Second International Conference of Polymeric and Organic Materials in Yamagata University, Yonezawa, Japan, December 20, 2019. **招待講演.**

(4) 藤井義久, "ロバスト炭素膜の作製と水処理への応用", 第93回高分子若手研究会[関西], 大阪工業大学 OIT ホール, 大阪府大阪市旭区, 2019年11月16日. **招待講演.**

(5) 原野幸治, "原子分解能電子顕微鏡で解き明かす分子集合の謎", 第15回"光"機到来! Q コロキウム, オンライン, 2021年4月28日. **招待講演.**

(6) 若林里衣, "環境応答型の水圏機能ペプチド材料の創製", 第10回CSJ化学フェスタ2020, オンライン, 2020年10月21日. **招待講演.**

(7) 松本拓也, "セルロースナノファイバーをマトリックスとした複合材料におけるX線回折による応力伝達解析と界面相互作用の関係", 繊維学会秋季研究発表会, オンライン, 2020年11月5日. **招待講演.**

書籍 (計20件)

(1) 牧浦理恵, "規則ナノ細孔を有する有機無機ポリマーナノシートの液相界面合成", 「ポストグラフェン材料の創製と用途開発最前線」, 監修: 柚原淳司, II編2章3節, pp167-182, エヌ・ティー・エス, 2020年4月.

産業財産権 (計43件)

(1) 加藤隆史, "スメクチック液晶構造を有する複合半透膜", 特願 2020-105484.

(2) 辻勇人, "化合物、並びにそれを用いた発光材料、光学材料及び光電変換材料", 特願 2020-119572.

(3) 細野英司, 朝倉大輔, 原田慈久, "光学及び放射光顕微分光装置", 特願 2020-036888.

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】

令和元年の領域発足時に立ち上げたホームページ (<https://www.aquatic-functional-materials.org/>) においては、イベント案内、ニュースレター(6号まで発行済)や、論文、受賞などの情報を日本語と英語の両方で積極的に国内外に紹介し、海外からも多くのアクセスがあった(アクセス数:約2万回)。また、東京化学同人「現代化学」にて2021年の8か月間にわたり領域の研究紹介を行っている(5-7月号は出版済)。

【主催シンポジウム】(計5件)

2019年9月14日(東京): 公開キックオフミーティング

2019年12月8日(シンガポール): 第1回国際若手フォーラム

2020年3月4日(ハイデルベルク; 紙上開催): 日独 Workshop "Aquatic Materials Made to Order"

2020年10月21-22日(オンライン): 水圏機能材料 日本化学会・化学フェスタと連携して開催

2020年10月22日(オンライン): 花王&水圏機能材料 日本化学会・化学フェスタと連携して開催

【アウトリーチ】(計108件)

広報誌・パンフレット11件、一般向け講演・セミナーが35件、小中高向け授業・実験・実習32件、サイエンスカフェ4件、イベント参加・出展10件、プレスリリース17件であった。一例として、A03 計画・松葉(山形大学)は、2019年にタイ王国のラヨンウィターヤコム校で、出張実験・授業「Polymer and Organic Materials」を開催した。大学生5名と現地教員とともに水と高分子を使った体験実験を行った。120名以上の中高生が参加し、水と高分子材料の関わりについて楽しく学んでいた(右写真)。



7 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。

研究項目間の連携体制

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、出口の複合機能を創製する研究項目 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分析・理解する研究項目 A02 が緊密に連携する体制を構築している (図 18)。研究項目 A02 は全体を繋ぐ役割を担っており、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運営がなされている。

個別の研究の寄せ集めとしない工夫

機能イオン液晶膜や π 共役系発光材料、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 など複数の手法で分析を行い、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網羅的に研究を進めている。問題が生じた場合は関連の研究項目間、あるいは総括班で水圏機能材料戦略会議を実施して打開策を模索し、相互に修正をかける機動性を持たせている。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」も活発に行っており、より強固な連携体制にしている。

計画研究及び公募研究間の連携体制

材料と接する水の形態を、「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る (図 19)。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なっている。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ている。その結果、本領域が発足してから現在までの2年足らずの間に、計画研究/公募研究間で91件を含む総数198件の共同研究テーマが生まれ、さらに**共著論文29報**の発表に至った。

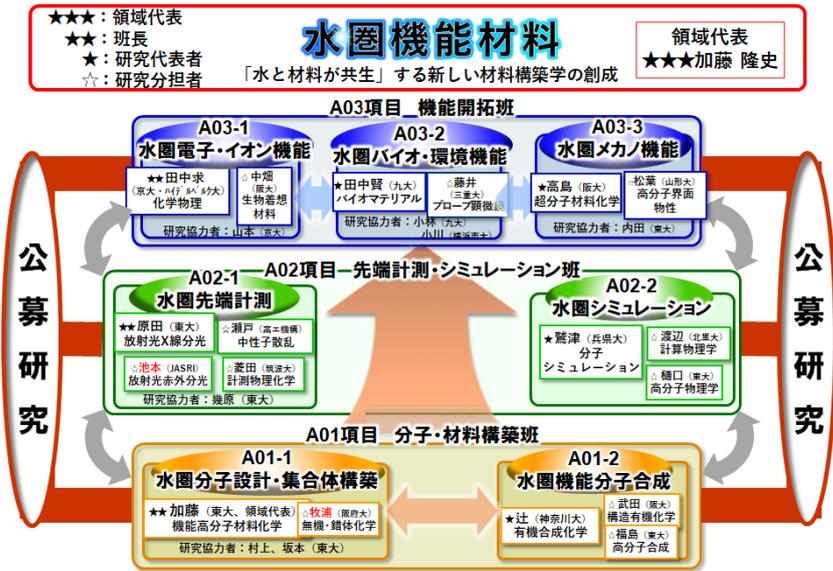


図 18. 研究項目間の連携体制

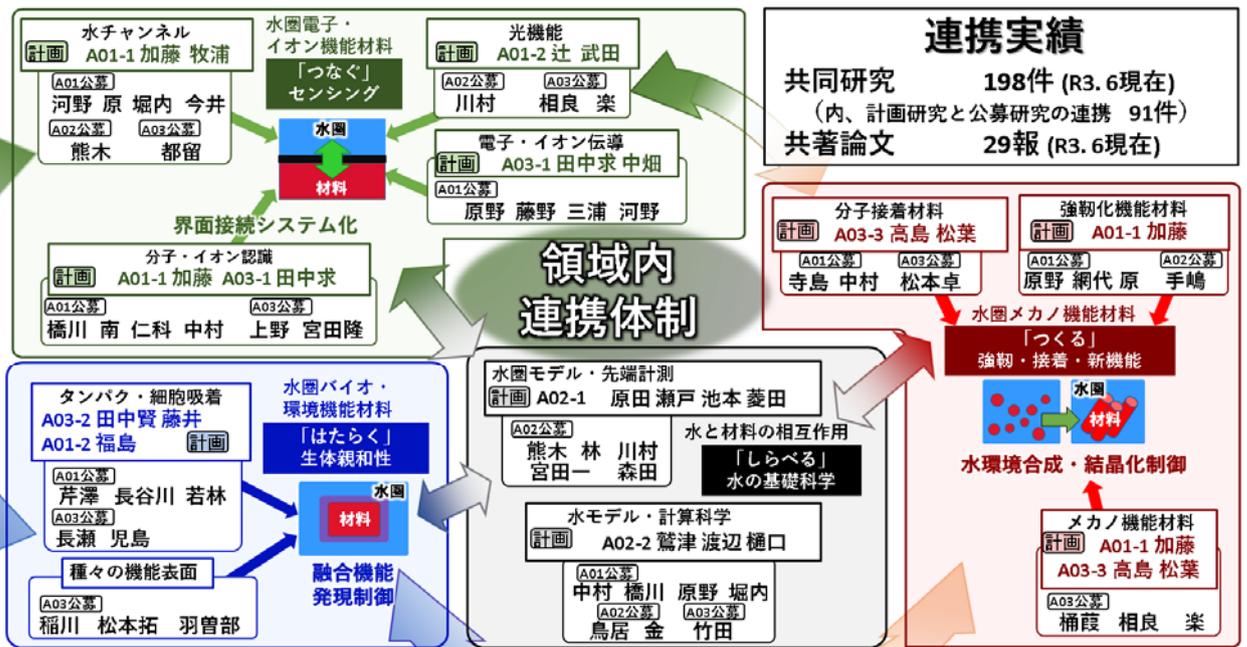


図 19. 計画研究および公募研究間の連携体制

8 若手研究者の育成に係る取組状況

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3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。）の育成に係る取組状況について、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同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(図20)で開催し**、本領域の研究項目のA02“先端計測・シミュレーション”に関する理解を深めるため、A02研究代表者による講義と分子シミュレーション立体可視化装置およびSPring-8ビームラインの見学を行った。**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月にオンラインにて開催し**、本領域の3つの研究項目それぞれに関する若手研究者による講義および学生ポスター発表(44件、博士後期課程学生の司会進行)を行い、**計71名が参加した**。学生の笑顔も多く見られ、満足度の高いイベントとなった。2021年度以降も開催予定である。

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1回若手スクール 開催

日時：2019年11月12日(火)～11月13日(水)

場所：兵庫県立大学神戸情報科学キャンパス(兵庫県神戸市)、SPring-8(兵庫県佐用郡)

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



図20. 第1回若手スクールの全体集合写真

(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、国内外の学術機関および企業に滞在するインターンシッププログラムを計画した。中長期滞在型は、新型コロナウイルス感染症の影響で実施には至っていない。一方、領域内における大学院生を含む若手研究者の短期派遣は34件を実施した(現在は新型コロナウイルス感染症の影響により中断)。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。

(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、基盤となる知見(Commun. Chem., 2020, Langmuir, 2021)を得ている**。

(5) 若手研究者・学生の受賞 全国規模の学会での優秀発表賞など、**若手研究者・学生の受賞が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・公募研究A01 南・公募研究A03 桶葎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、**若手研究者11名が大学・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、31名が博士後期課程に進学した。**うち5名が、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進学を決めており**、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と考えている。

(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**。

9 研究費の使用状況・計画

研究領域全体を通じ、研究費の使用状況や今後の使用計画、研究費の効果的使用の工夫、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1頁以内で記述すること。

中間評価実施時までの研究費の使用状況としては、概ね当初の予算計画通り順調に進んでおり、**交付額総額の50%を超える使途の変更など大幅な変更は生じていない**。現在の新型コロナウイルスの感染拡大の状況で、如何に効率よく研究の推進とさらなる研究成果の発展、そして異分野融合型の研究展開に繋がるかを念頭に工夫して研究費を執行し、研究の進捗に貢献している。

研究費の使用状況 初年度に「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ている。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。

今後の使用計画 各計画研究では必要な人材を継続・新規に雇用するとともに、感染症対策に努めつつ、共同研究を促進するため、共用施設への訪問や国内・外機関との共同研究推進のための旅費を効果的に執行する。重要な研究成果を学会等で研究紹介・発表を行うため、効果的に旅費を執行する。

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、ファイルサーバーやデータ解析用の計算機環境を逐次強化し、これらを共用機器として利用している（**図 21**）。

水の基礎物性解明のための重水素化物 「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る。

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、管理・運用している（**図 22**）。

A01-1：試料水平型 X 線回折装置

設置場所 東京大学大学院工学系研究科

A02-1：ゼータ電位測定装置、設置場所 東京大学物性研究所

A03-1：生体-マテリアルインタラクション解析システム

設置場所 京都大学

A03-2：バイオサンプル対応統合 AFM システム

設置場所 九州大学

A03-3：示差走査型熱量測定装置 設置場所 大阪大学

X00：分子シミュレーション用のファイルサーバー、

設置場所 兵庫県立大学

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）、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っており、共用機器体制は整っている。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、これまでに基本的なセットアップを整えた。今後は共用機器化とさらなるアップデートを進めていく。

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ている。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ている。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っており、領域内の活動全般が円滑に進展するように機能している。

総括班主催で非公開の**領域会議を3回**、**産学連携フォーラム**や**日本化学会秋季事業 CSJ 化学フェスタ**にて**公開シンポジウムを2回**実施している。領域内の共同研究が促進されるように研究内容紹介を充実した名簿冊子を作成して領域内に配布し、これを活用して第2回領域会議では Zoom のブレイクアウト機能を利用して、9つのテーマ別に少人数での緊密な議論を行った。このような活動を通じて共同研究を支援し、実際に研究者間の活発な連携へとつながっている。

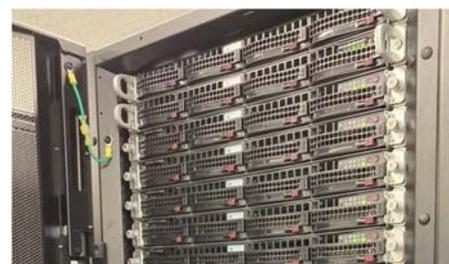


図 21. 総括班で導入したファイルサーバー(兵庫県立大学に設置)



図 22. 領域で導入した共用機器

10 今後の研究領域の推進方策

研究領域全体を通じ、今後の本研究領域の推進方策について、「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2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、今後公募する公募研究の役割を明確にすること。また、研究推進上の問題点がある場合や、国際的なネットワークの構築等の取組を行う場合は、その対応策や計画についても記述すること。

「革新的・創造的な学術研究の発展」の観点からの仕掛け 今後も引き続き「水」と「材料」の関係を見つめた機能創製と学理の構築という本領域の目標に向かって、材料開発・機能開拓の研究者と計測・シミュレーションの研究者間の連携を一層強化する。さらに共同研究を円滑に進められるように、令和4年1月に「第3回水圏機能材料戦略会議」を開催する。「水圏機能材料若手スクール」、「アカデミアインターシップ」を実施し、学生・若手研究者の異分野交流を促進し、共同研究を一層加速させる（図23）。

■ **異分野融合型の共同研究の促進** 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。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、共同研究成果の取り纏めの効率化を図る（図24）。

■ **若手研究者育成を目指したアカデミアインターシップ** 研究領域を担う計画研究・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シップ」を総括班の支援の下で、引き続き実施する。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、新型コロナウイルスの終息後には長期派遣も積極的に実施し、先方の研究室に中長期滞在することでより深く学び、水圏機能材料の新たな発展に資する人材を育成する。

■ **成果の社会還元** 領域内で得られた成果の社会還元のためとして「産学連携フォーラム」を引き続き毎年開催する予定である。既に実施した第一回産学連携フォーラムにおいて、企業における材料・製品開発の課題解決においても材料表面と水の関わりに着眼して解析が行われている事例が多く見られ、本フォーラムの必要性が改めて浮き彫りになり、これを契機とした企業と一部の研究者との共同研究に向けた議論や**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。今後、産学のさらなる相互理解を通じて、水の基礎学理の産業利用における重要性を高め、新しい現象の発見、材料設計コンセプトの提案、新製品開発へとつなげていく。

■ **分子シミュレーション・大型施設の利用促進** 分子シミュレーションを専門とする研究者が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解析を支援し、「分子設計」「機能解明」「機能開拓」の3つの研究項目の架け橋となるように領域内で活躍する。SPRING-8やJ-PARCなどの大型施設の利用において、各施設で高い経験値を持った研究者が領域内で活躍しており、総括班が主導して水の基礎物性解明のための大型施設の利用を促進する。

総括班にて導入したファイルサーバーや計算機を用いた分子シミュレーションの利用者数を増やすために、領域主催にて、**大型分子シミュレーションのためのスクールを開催**する。スーパーコンピュータや並列プログラミングについて初心者向けにその概要や手法、考え方の基礎、大規模な並列計算が可能な大型計算機やコンピュータシステムを扱えるように、A02と共同で進める。分子シミュレーションの実施件数を増やすことで水圏機能材料の**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の構築**を目指す。

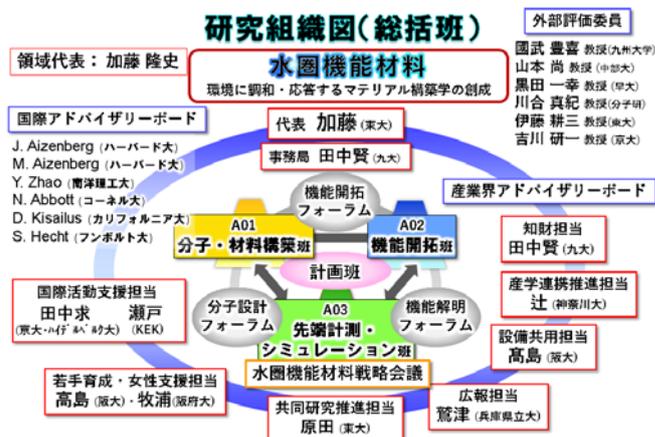


図23. 領域全体の推進体制

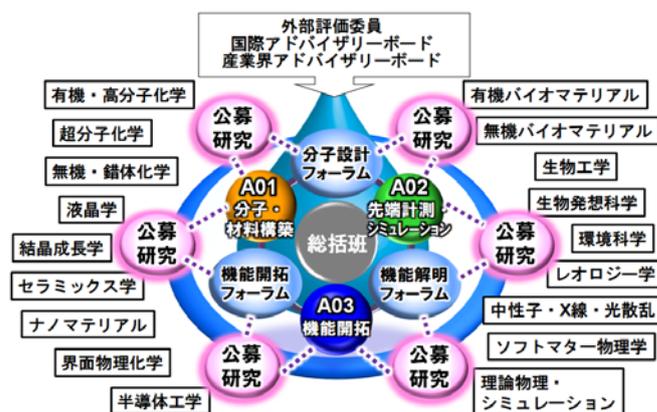


図24. 領域での公募研究の役割

■ **水の基礎物性解明のための共用性の高い基幹化合物の提供** 水圏機能材料研究のさらなる加速と領域内での共同研究を円滑に推進できるように、領域内で取り扱う重水素化合物を研究支援として提供する。これにより、「水」の構造・物性解析に共通認識を持たせるだけでなく、中性子散乱実験や赤外分光分析における効率の向上と複数の実験から得られるデータの整合性の向上をはかる。

■ **国際アドバイザーボードメンバーとのオンライン会議を通じた意見交換会の開催** 効果的に、また定期的に国際アドバイザーとの交流を図るために、各フォーラムに分けて、**オンライン会議を開催し**、本領域の水圏機能材料の研究内容を世界的にアピールする。国際アドバイザーからも講演をいただき、議論することで、水に対する理解を深める。意見交換会により、次につながる研究活動の情報発信と収集を行い、**水圏機能材料のための国際共同研究に繋げる**。

今後公募する公募研究の役割 単独で行われる研究課題ではなく、“**新しい学問分野を開拓する**”という**新学術領域研究の理念に立脚して、関連分野を開拓する意欲的な提案**を募る。公募研究も含め、異分野間の有機的な融合による共同研究を展開することで学問領域の拡大を図る。令和2年度－令和3年度の公募研究として、合計37件が採択された。機能発現に水が果たす役割の理解、水がどのような空間・時間スケールで材料に働くかを網羅した計測・理論解析技術、水そのものの実験および計算・シミュレーション研究の強化などを目指し、**令和4年度－令和5年度の公募研究は、さらに5－6件を増枠してより広く募集する**。公募研究の目標・位置づけを明確にし、お互いの強みを生かした共同研究を円滑に進められるよう総括班がサポートする。

研究推進上の問題点 個別の研究課題がうまくいかないときや目的とする十分な機能発現が得られない場合のために、「**水圏機能材料戦略会議**」で問題を抽出・再検討することにより効率的・効果的な研究推進を図る。

国際的なネットワークの構築等の取組 国際的なネットワーク構築のための取り組みとして、以下に示す事例を通じた人的交流・研究連携を実施した。

■ **国際若手フォーラム** 令和元年12月に**国際若手フォーラム**を加藤（領域代表、A01-1）とZhao教授（国際アドバイザーボード、南洋理工大学）がシンガポール・南洋理工大学で開催し（図25）、日本とシンガポールの水圏機能材料研究に携わる若手研究者が互いに研究を紹介し、研究者同士のネットワーク構築をサポートした。

■ **国際シンポジウム** 令和2年2月には**ドイツ・エクセレンスクラスター『3D Matter Made to Order』との合同シンポジウム**をハイデルベルク大学で企画し、日独間で拠点レベルの国際連携の可能性を検討した（コロナ禍のため、紙上開催）。

■ **海外機関との連携** 瀬戸（A02-1）のアレンジにより、オーストラリアの原子炉実験施設ANSTOでの高分子/水系の**中性子散乱実験（リモート実施）**、インドの実験施設BARCの研究者を招聘してのJ-**PARCでの実験**、国際研究集会（オンライン開催）など、**中性子散乱を共通テーマとした国際ネットワーク構築**に取り組んだ。

今後の計画としては、研究者の移動の制限が続く間は、オンラインフォーラムのような形式を最大限に活用して、本領域の存在と水圏機能材料研究の成果を世界に広く発信する、水圏機能材料研究の分野で著名な研究者に領域会議での講演や参加をオンラインでお願いします、また小規模な国際セミナーや研究会を数拠点つないで行うといった、コロナ禍で大きく進化したプラットフォームを駆使して『**ウィズコロナの時期だからこそできる国際ネットワーク構築**』を推進する（図26）。



図 25. 国際若手フォーラム(南洋理工大学)



図 26. 今後の国際活動・国際共同研究

11 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）

本領域には、化学以外にも物理、生物、有機、無機、シミュレーションなどを専門とする研究者が参加しており、多様性に富んでいる。特に優秀な若い研究者が活躍しており、日本の将来の発展性を感じている。広い分野にまたがった領域において、論文が多く出されており、素晴らしいと感じている。加藤領域代表のリーダーシップを感じさせる組織運営になっている。共同研究が多く進行しており、まさに新学術領域にふさわしい運営が行われている。引き続き共同研究の発展を期待したい。

本領域は、水に焦点を当てた研究が一つの柱としてあり、水があることによって材料の物性が変化するというもう一つの柱がある。新学術領域研究としての今後のさらなる発展を期待している。

川合 眞紀（自然科学研究機構分子科学研究所・所長）

領域会議を通して、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、これからの発展の可能性を感じた。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と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、公募研究のバラエティも豊かで、これからの展開が期待できる。領域会議ではまとまりが良く、意外な印象ではあったが、これからダイバーシティも含めた展開を期待したい。

國武 豊喜（九州大学高等研究院・特別主幹教授）

領域会議を通して、すべての発表を確認して、メタンハイドレートのことを思い出した。メタンハイドレートは水という極性分子に囲まれているのにも関わらず、トータルとしては疎水的な材料である。これを可能にしているのは、水分子が作り上げる強い水素結合ネットワークの効果である。多様な水の構造体がメタンハイドレートの形成を可能にしている。有機・無機から成る構造体が一体となり、その上で水分子が非常に多様な構造を取り得る。このような多様な水の集合体が、生き物の複雑な構造・機能を支える理由と考えられる。このような水の特性を活用すれば、非常にユニークな構造体・機能を生み出すことが期待できる。すなわち、水と材料を絡めた本新学術領域の方向性は非常に重要であると言える。さらに、このような複雑な構造体には、長い論争が繰り返されてきた。物理的な精密測定法が本領域には集中して揃っている。構造の解明、機能の解明、これらが一体となったグループは世界にも例がない。

また、産と学を結びつけるという仕組みが作られている。「結びつける」という意味では、個別の学と個別の産がそれぞれ最新の情報を出し合ってそれらが結びつくというのが主なメカニズムであるが、これを一歩進めて、地球規模ではまだまだ未解決問題にチャレンジすることも重要である。このような大きなテーマに対して、グループ全体で何ができるか、科学の力を結集してどのような切り口からどう取り組んでいけるかということに関して共同作業を提案すれば、大きなインパクトとなる。

黒田 一幸（早稲田大学理工学術院・名誉教授）

水の基礎科学と材料科学の融合という点で、本領域の進展に非常に興味を持っている。様々な水の学理の整理が重要だと感じている。例えば、層状ケイ酸塩の世界では層間水が研究対象とされており、自身も興味を持って取り組んできたが、本新学術領域研究で材料に及ぼす水の役割がより詳細に解明されることを期待している。水自体の研究と並ぶもう一つの重要な柱は材料科学である。単純に機能分子の研究を行えば一概に機能材料に持っていけるという訳ではなく、一筋縄ではいかない。機能向上を目指す場合、大事なものはベンチマークである。適切なベンチマークを設定して、それが達成できた場合、何が効いているのかをしっかりと解明することが重要である。機能発現と発現機構の解明の両輪で、今後の発展に期待したい。

本領域主催の産学連携フォーラムにおいては、様々な分野が集まっており、バラエティに富んでいることが理解できた。様々な分野が集まっていたが、他分野にも分かりやすい説明が工夫されていた。水の基礎科学についての理解がどれほど深まるか、計画班とインテグレートしてどのような新しい展開が見込めるかがこれから楽しみである。材料の機能についての発表では、機能自体もそうだが、材料の機能発現を通して「どれほど一般化した知見に繋がるか」の情報が必要である。機能のベンチマークを示して頂いて、それに対して現在どこの位置にあるのかを示す必要がある。また、オンライン上での国内留学を通じて学生同士がお互いを刺激し合えるような取り組みは、領域のさらなる活性化に繋がると感じた。今後、「材料科学と水の基礎科学の融合」という将来ビジョンを社会へ発信されることを期待している。

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るということで、大変期待している。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（京都大学・高等研究院客員教授；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つつある。計画班の研究も当初の期待を越える発展があり、今後、公募研究者との共同研究も、飛躍的に進んでいくものと期待される。機能材料の創製に関して、従来は有機溶媒を活用するものが主流であった（合成化学で水溶媒を用いるものは希少）。「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ようとしており、文字通り、新学術を世界に向けて発信する、そのような研究領域として発展してきている。

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てきていることが注目される。公募研究のなかでも、例えば、原野幸治（A01）のように非常に疎水的なフラーレンが水素結合を絶妙に使って非常に均一な二次元膜の形成に関するメカニズムや、一方では三浦佳子（A01）のような親水性高分子同士の共重合体がミセルのような凝集体を形成するといった水に関わる興味深い発見、更には、松本卓也（A03）のように、真皮と金属の接着という、一見しただけではドライな接着に見える現象に水が関わっていると発表のように、新しい概念を打ち出すといった研究もあり、新たな材料科学の展開に大いに期待が持てる。

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てきており、今後、大いに発展するものと思われる。これからは、国内のみならず、国際的なレベルの共同研究を、本領域研究がリードする形で推進していくことを期待したい。本領域での機能材料の基礎そして応用研究を展開する中で、生命科学や医科学領域にも、積極的に研究対象を広げて行っていただきたい。

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として、「水圏」という広範な概念が相まって、将来の大きな可能性を確認できた。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。また、製品化時に必要となる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。さらに、水の基礎科学から発展した応用研究は、今後ますます期待される。企業が求める製品というアウトプットにつなげるには、越えなければならないハードルはまだたくさんあるが、本新学術領域メンバーを中心とする産学連携活動により解決されることを希望している。

Professor Zhao Yanli (Nanyang Technological University)

Professor Takashi Kato directly introduced the research project at the International Young Forum in Singapore and an online meeting. I confirm that he is developing an exciting and dynamic research project. Researchers from chemical syntheses, molecular simulations and advanced measurements join in the research project. They have mutually performed a lot of collaborative works, which is very powerful to approach the core of “Aquatic Functional Materials”. This proves that he has precisely organized his research project. Some of these collaborations have successfully been published in *Angew. Chem.*, *Science Advances*, and other journals. I really appreciate the high performance of this research project. I realize remarkable practical applications using biocompatible polymeric materials based on the concept of “Aquatic Functional Materials”. It is impressive that researchers from chemical syntheses, molecular simulations and advanced measurements complementarily work together to get the core of the concept. Furthermore, I expect that the participation of publicly offered researchers will enforce the research project. In the near future, I look forward to holding a joint research symposium online. After the COVID-19 problem, I expect face-to-face interactions among students and young researchers.

Professor Nicholas L. Abbott (Cornell University)

The topic is a very interesting and important one – there is a lot that we still do not understand about the behavior of water at the interfaces of materials, including the interactions between molecules that lead to self-assembly in water (and functional properties of the resulting assemblies).