

## 私立大学研究ブランディング事業

## 平成 28 年度の進捗状況

学校法人番号	131065	学校法人名			
大学名	東京理科大学				
事業名	材料表面・界面における水の学際研究拠点の形成				
申請タイプ	タイプ B	支援期間	5 年	収容定員	14,300 人
参画組織	理学部・工学部・理工学部・基礎工学部				
事業概要	<p>135 年の歴史を持つ本学の叡智を結集し、医療・生命科学や環境・エネルギー分野で活用される材料について、その特性向上と機能発現の根底にある表面・界面における水の挙動を体系的に理解・制御し、産業界のニーズに応える世界初の学際研究拠点を形成する。研究成果は国内外の学术界や産業界に広く伝達し、材料表面・界面の水の研究と言えは東京理科大学と国際的にも認識される「世界の理科大」への発展を目指す。</p>				
①事業目的	<p>我々の日常生活を支える人工関節等の医療材料や、産業活動を支える船舶や航空機といった輸送機材に使用される材料は、水が存在する大気中、水中、生体中などで機能し、これらの機能の発現には常に表面・界面の水が関与している。材料表面・界面に存在する水の吸着・濡れ・流れといった挙動は、材料表面の親水・撥水性や生体適合性等の諸機能の発現を決定付ける。本学の藤嶋学長が発見した酸化チタン表面における水の光分解現象（本多－藤嶋効果）を利用した光触媒機能や、光誘起超親水化現象を利用した環境浄化・機能素材への応用はその典型例と言える。一方で、材料の機能発現に深く影響する材料表面・界面における水の挙動は、材料表面の凹凸形状や化学組成等により複雑に変化するため、その予測・制御が難しく、体系立てて理解・制御する学理の構築そのものが立ち遅れている。そこで、本学の叡智を結集して「材料表面・界面における水の学際研究拠点」を世界に先駆けて形成し、材料表面・界面における水の挙動を体系立てて理解できる学理の創成を目指す。得られた科学的知見に基づき材料特性の飛躍的向上と新奇機能発現を先導し、医療や省エネルギー技術の革新をもたらすことを目標とする。</p>				
②H28 年度の実施目標及び実施計画	<p>&lt;目標&gt; 各種機能性材料に関する産業界からのニーズに基づき、計測機器を導入し、その整備と調整を行う。また、シミュレーションに最適な理論とアルゴリズムを検討する。</p> <p>&lt;実施計画&gt;</p> <p>【材料開発班】医療分野では、人工関節軟骨用高分子ゲルや埋め込み型医療デバイス表面などに適用できる生体適合性の高分子膜、運輸分野では、摩擦を低減する機能性素材等、医療、省エネ、安全技術に資する材料を選定する。</p> <p>【計測分析班】材料表面の化学組成と水分子の吸着構造に関するスペクトル分光用の一体型フェムト秒再生増幅装置一式と材料表面の吸着水の摩擦・粘性等の測定用の雰囲気制御走査型プローブ顕微鏡を導入・整備する。</p> <p>【理論設計班】材料表面の化学状態や、吸着した水分子のスペクトルを再現するシミュレーションについて、最適な理論とアルゴリズムを検討する。</p>				

<p>③ H28 年度の事業成果</p>	<p>【材料開発班】当該事業のスタートとして、医療分野で用いられる生体適合性材料についてはエチレングリコール (EG) ユニットの繰り返しから成る高分子 poly(ethylene glycol) (PEG) を固定化した表面を選定した。当該表面は、非特異的吸着に対する高い抑制能を示すことが知られている。PEG の修飾密度、高分子鎖長の他に、EG の骨格構造、PEG の末端官能基の違いによる生体適合性の違いについて、表面水和構造の違いの観点から、計測分析班、理論設計班と連携して研究する。省エネ材料については、カーボン系材料を中心として選定した。具体的には水トライボロジーで最も有力な材料であるダイヤモンドライクカーボン (DLC) 表面の水和構造について温度変化や加圧環境における違いを計測分析班と連携して検討する。この過程で高温・高圧となる真実接触面においてグラフェン様平面構造が卓越している可能性に備えてグラフェン表面の水和構造も理論設計班の予測結果と照らし合わせながら検討していく。</p> <p>【計測分析班】一体型フェムト秒再生増幅装置一式と雰囲気制御走査型プローブ顕微鏡の導入・整備が年度内に完了した。前者は材料表面の水和構造を、後者は表面の水の物性を計測する。これらの装置を設置する専用の部屋を大学として準備し、さらに同一の防振動台上に設営することで、両者を連動させた高度な運用も可能とした。</p> <p>【理論設計班】当該事業のスタートとして取り扱う理論・シミュレーションと対象は以下の通りである。(1) グラフェン表面に凝集した水の水素結合ネットワーク構造を分子動力学計算によって調査するとともに、グラフェン表面凝集水の赤外吸収スペクトルを第一原理電子状態計算に基づいて振動解析する新たなシミュレーション技術を開発し、計測分析班の結果と照合しながら、結果をデータベース化する。(2) 水中におけるバイオマテリアルの自己集合・形成プロセスにおける水の影響、特に流体力学的相互作用の効果を明らかにすることで、バイオマテリアルの合成・機能発現の機構解明に資するデータを提供する。(3) 親水表面と疎水表面での水の動力学挙動を、厳密な流体力学的シミュレーションによって明らかにすることで、材料の高機能化や微細加工表面の洗浄等に資する予測・解析データを材料設計班に提供する。</p>
<p>④ H28 年度の自己点検・評価及び外部評価の結果</p>	<p>(自己点検・評価) 材料・理論・シミュレーションとも、目標に沿った材料・手法を選定した。制御された PEG, DLC, グラフェンはすでに製作実績を有している。理論・シミュレーションでは、材料表面の水の構造と吸収スペクトルの計算、流体力学的相互作用の取り込み、材料表面の親水・疎水性を加味できるアルゴリズムについて試験的に開発が進んでいる。装置も導入が完了し、計画は予定通りに進んでいる。</p> <p>(外部評価) 医療用途材料、省エネ用材料が検討かつ具体的に明示され、最初のアプローチ項目も明確化されている。また本年度予定されていた装置の配備が予定通り完了している。材料表面の水の微視的構造と親水・疎水などの機能、また材料加工にも寄与する多角的な理論・シミュレーションが複数具体的に検討され、各班間の連携も検討されている。以上の観点から当該事業を問題なく推進しているものと判断できる。学術拠点であるが、当該事業が軌道に乗り始めたら、検討材料や計測条件などを徐々に拡大して、産業界との連携がますます促進されることを期待する。</p>
<p>⑤ H28 年度の補助金の使用状況</p>	<p>【装置費】一体型フェムト秒再生増幅装置 (¥39,886,560) 雰囲気制御走査型プローブ顕微鏡 (¥22,085,320) 【機器備品費】 計算機用サーバー3 台他 (¥5,983,039) 【消耗品費】 カンチレバー他 (¥245,463) 【会議開催費】 アドバイザリー委員会旅費等 (¥48,842) 【装置修理等作業費】 防振台移設作業 (¥635,040) 【シンポジウム・セミナー開催費】 キックオフミーティング開催費 (¥305,018) 【成果発信ウェブサイト構築費用】 HP 製作料等 (¥781,718) 【経費合計】: ¥69,971,000</p>