

私立大学研究ブランディング事業

平成30年度の進捗状況

学校法人番号	131065	学校法人名	東京理科大学		
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	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ば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。				
①事業目的	<p><本学、外部環境、社会情勢等に係る現状と課題の分析></p> <p>現在、日本が抱える問題である超高齢化社会に対応した医療技術の実現、エネルギー低自給率の解決、地球温暖化の抑制は急務であり、安全・環境低負荷はもとより様々な医療・省エネルギー技術を支える材料の高機能化は、日本が世界を先導し、地球規模の問題を解決していくための必須の技術課題である。135年の歴史を有する本学は、「理学の普及を以て国運発展の基礎とする」という建学の精神と「自然・人間・社会とこれらの調和的発展のための科学と技術の創造」という教育研究理念のもと、科学の発展への貢献と、産業界からのニーズに応えるべく、界面科学研究とそれに基づく材料・ものづくり技術の開発に全学を挙げて取り組んできた。さらに近年では、人口が集中する都市部にキャンパスを有する強みを生かし、近隣に多数存在する医科系大学や病院との緊密な共同研究体制を構築することで、医療分野で活用する材料開発や計測機器の開発にも積極的に取り組んでいる。</p> <p><現状と課題の分析内容に照らした研究テーマの設定></p> <p>人工血管や人工関節等の再生医療材料や、様々な局面で産業活動を支える機械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、その機能発現には常にその表面・界面の水が関与している。これらの水の吸着・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。しかしこれらの水の挙動は、材料表面の化学組成や微細な凹凸形状により複雑に変化するため、その予測・制御が難しく、研究の遂行に当たっては、物理・化学・材料科学・機械工学等の学問分野の垣根を超えた異分野融合を必要とする。そこで総合理工学系大学である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、再生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> <p><大学のブランドとして打ち出す研究テーマとしての妥当性></p> <p>水や材料表面の濡れや流れに関連する研究拠点としては、国内では安全・安心な水を提供できる革新的な造水・水循環システムの実用化に取り組む大学、水資源確保のための機能性浄化膜の開発に取り組む大学が存在する。また、国際的には、塗料などの複雑流体の濡れや流れを科学し、工学応用に役立てるドイツの工科大学に置かれた研究拠点等が存在する。しかし、材料表面・界面における水を学際融合的に研究し、材料の機能発現との相関を系統立てて応用まで結び付ける研究拠点は、日本はもとより世界にも類を見ず、本学独自の研究拠点の形成を目指す。</p>				
②H30年度の実施目標及び実施計画	<p><実施目標></p> <p>材料表面の形状や化学組成を系統的に変化させた標準モデル材料を作成し、材料上における吸着・濡れ・流れの各挙動がどのように系統的に変化するか計測・分析する。開発したシミュレーションによる計測結果の再現性を検証し、理論やアルゴリズムを改善する。</p> <p><実施計画></p> <p>【材料開発班】 複雑に相関する水の吸着・濡れ・流れを体系立てて理解する学理を深めるため、材料表面の凹凸のスケールや、表面水酸基や高分子密度等を系統的に振った標準モデル試料を作製し、計測分析班に提供する。</p> <p>【計測分析班】 上述した標準モデル材料の水の吸着構造・濡れ広がり・流れを計測し、系統的なスペクトル等のデータを得て、これらを理論設計班へ提供する。また次年度の湿度・温度等を変化させた実環境下の計測に備えた環境制御セルの設計・開発に着手する。</p> <p>【理論設計班】 開発したプログラムによるシミュレーションが、水の実際の吸着・濡れ・流れの挙動を再現できるか検証し、計測分析班から提供される系統的なデータに基づき、各種挙動のシミュレーションのベースとなる理論や計算のアルゴリズムを改善する。</p>				

③H30年度の事業成果

材料開発班、計測分析班、理論設計班が三位一体となり、学理の構築のためのモデル材料の創出、実環境・その場計測を目指す計測機器群の開発・整備、構造・濡れ・流れを統合的に扱うことのできる統合シミュレーターの創出に向けて、本年度は以下のような成果を上げた。

【材料開発班】 学術的また工業的にも重要な無機材料の代表として、シリコンならびにカーボン材料、特にナノカーボン材料を選定し、その表面に水和構造・濡れ・流れについての検討を進めた。シリコン基板においては表面の水酸基密度が、基板の洗浄方法によって大きく変わり、使用目的によって使いうる洗浄方法(プロセス)を確立した。またナノカーボン材料においては、種々のカーボンナノチューブの曲率、すなわちナノ細孔のスケールと、内包水のサイズとのマッチングによって、熱力学的物性が周期的に変動することを明らかにした。再生医療用材料としては、昨年度に引き続きオリゴエチレングリコール(OEG)重合体修飾表面について特に、基板の材質依存性、OEGの構造依存性(直鎖・櫛形等)について、表面分光計測に耐える自己組織化膜の作成を進めた。

【計測分析班】 昨年度開発した広帯域和周波発生(SFG)分光装置に分子の配向を捉えられるヘテロダイン(HD)検波法を適用し、世界的に見てもまだ稼働例が限られているHD-SFG装置が完成した。試験的にシリコン表面に適用した結果、表面水酸基や吸着水、また表面有機物の付着状況などを表面第一層、二層レベルで検出できることを明らかにした。また材料創成、特にコーティングプロセスで重要になる液膜の濡れ、ならびに濡れ広がりに対して、シリコン表面における液膜先端部分をナノスケールで計測できる方法を開発した。また温度・湿度制御での走査型原子間力顕微鏡(表面凹凸)、静的・動的接触角計(濡れ)が稼働し、構造の確認を材料設計班に、界面自由エネルギー値を理論班に受け渡せる下地が整った。またHD-SFG用の環境制御チャンバーの設計・作成に着手した。

【理論設計班】 親水性表面の代表例と予想される極性表面として、シリカ、窒化ボロン、マイカ、疎水性表面の代表例としてカーボンナノチューブ、グラフェンの表面の検討を行った。マイカ表面は、極性表面としての水和構造の特徴が現れ、特に走査型顕微鏡下での計測班との結果の比較が期待される。グラフェン表面では、水和層の数に応じて、特徴的な水和構造が予想されHD-SFG計測結果との比較検討の下地が整いつつある。また解析のためのスペクトル予測・機械学習的要素の検討を併せて進めた。濡れ・流れに関しては、熱力学的積分による、MDシミュレーションからの界面自由エネルギーの算出、表面の親水性・疎水性、並びに界面張力値を加味した凹凸表面でのシミュレーション方法も発展し、実試料表面での予測、検証が進展した。

④H30年度の自己点検・評価及び外部評価の結果

<自己点検・評価>

学部・学科の垣根を超えた共同研究が着実に進展しており、材料表面の水和構造・濡れ・流れを理解・制御するための各種材料表面の作成、新たな計測装置の導入・整備、用いる理論・シミュレーションとアルゴリズムの検討が概ね順調に進んでいる。PDCAサイクルを適正に回すため、東京理科大学で主催した国際会議WMS2018の1回を含む公開研究成果報告会2回、外部評価委員を招いての評価・助言委員会1回を開催した。主催した国際会議は産学合わせて340名を超える参加があり、成功裡に終了し、国際的な広報活動となった。大学・企業とも学部・学科・部署の垣根を越えて複数教員・企業の研究開発者が参加する産学連携研究会を、今年も、本学だけでなく共同研究先企業で行うなど、着実に大学(面)と企業(面)との共同研究・意見交換が進みつつある。また大学院学生向けの「ウォーターサイエンス特論」、また一般市民向け公開講座「そこが知りたい身の回りの水と最先端の科学」を開くなど、教育方面での取り組みも着実に展開している。

<外部評価>

H31年3月8日に外部有識者による外部評価・助言委員会を実施した。立ち上げから2年間で見事に形を成し、材料・計測・理論の「三位一体」の連携が充実しており、ブランディング事業の強みを発揮している。分子レベルでの相関と実際の現象をつなぐことが重要だが、これまでスケールの階層をまたいだ研究は多くなく、研究の進展が期待される。また統合シミュレータの開発もこの方向性で概ね良いと評価される。さらなる産学連携の促進に向けた取り組みも良い。「ワンストップ」がキーワードになる。独自の計測装置、独自のシミュレーション、機械学習、という3つを回していくことで良い正のスパイラルの創生につながるだろう。多くの研究事例を蓄えていくことが、今後技術の発展や機械学習にとっても重要になる。イベントやホームページを通して産業界にW-FSTセンターを知ってもらおうこと、発信を続けていくことが大事となる。企業としては、あまり学会には参加しないので、JST系のイベントや大学で開催するセミナーが重要となるだろう。

⑤H30年度の補助金の使用状況

【機器備品費】	環境制御セル、卓上型光表面処理等	4,286,972円
【委託費】	解析シミュレータの開発	1,998,000円
【会議・セミナー開催費用】	研究成果報告会の開催等	928,942円
【成果発信に関する費用】	HP管理、パンフレット等	644,760円
【報酬委託・人件費】	助教雇用等	21,214,312円
【消耗品等】		12,399,814円
【修繕費】		475,200円
【合計】		39,950,000円