

# Aquatic Functional Materials News



April 2023 ▶ No. 15

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

## 水圏機能材料:環境に調和・応答するマテリアル構築学の創成

### 第6回領域会議 開催報告

日時: 2023年1月19日(木)

場所: 大阪大学会館

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

これまで新型コロナウイルス感染症の感染予防の観点から、対面での領域会議を控えておりましたが、第6回領域会議は大阪大学豊中キャンパス内の大阪大学会館にて、対面で開催しました。評価委員の先生方や文部科学省学術調査官瀧川紘先生にもご出席いただき、総勢約80名の会議を感染対策の下で行いました。

今回、ほぼすべての計画研究者と公募研究者が揃い、「水を分子としてとらえる」という共通の視座のもとに研究討議を行うことができました。領域内の計画研究の研究代表者および研究分担者からは、水と材料の物理と化学に関する研究成果を報告し、公募研究代表者からは0次元から3次元に次

元を分けて、水の科学に関する研究成果を報告しました。ポスター発表では、活発に情報交換を行うことができ、改めて対面で議論する重要性を認識しました。加えて、評価委員の先生方の高いご見識を踏まえ、国武豊喜先生、山本尚先生、黒田一幸先生、伊藤耕三先生よりご講演をいただきました。最後には4名の評価委員の先生から、各研究の進捗やその多様性について高い評価と提言のご講評をいただきました。

来年度で5年目を迎える本領域研究の飛躍的発展を実感し、「水圏機能材料構築学の創成」に向けて、ラストパートに向けた重要な会議となりました。参加者の皆様には深く感謝申し上げます。

(大阪大高等研・高島義徳)



## 第3回産学連携フォーラム 開催報告

日時：2023年1月20日（金）

場所：大阪大学会館

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

標記のように第3回産学連携フォーラムを開催いたしました。過去2回の本フォーラムはオンライン開催のために参加人数を制限しておらず、数百名の皆様にご参加頂きましたが、今回は3回目にして初めてのオンサイト開催となり、新型コロナウイルス感染症対策として領域外からの参加人数を40名あまりに制限させていただきました。招待講演として、株式会社メニコンの伊藤恵利様から水圏機能材料としてのコンタクトレンズの研究と開発を話題提供いただき、ものづくりにおけるサイエンスの重要性をわかりやすくお話いただきました。領域メンバーによる口頭発表・ポスター発表では、両セッションともに非常に活発な議論が繰り広げられ、対面開催による活気を感じるものとなりました。口頭発表セッションでは、企業の方からも質問が多く寄せられました。ポスターセッションでもCO<sub>2</sub>濃度の測定と換気を行いつつ、共同研究の可能性等について熱い議論が交わされました。事後に実施したアンケートでは、「水というキーワードを様々な切り口

から見る事ができたと共に、最新研究の話を聞くことができた非常に有用な機会であった」「研究者の方々と近い距離でコミュニケーションをとることができ、有意義で刺激的であった」など、多くの声が寄せられました。改めまして、参加者の皆様には深く感謝申し上げます。

（神奈川大理・辻勇人）



## 第2回水圏アカデミアインターンシップ 開催報告

日時：2022年12月20日（火）～2023年1月8日（日）

場所：兵庫県立大学神戸情報科学キャンパス、Web会議室

主催：新学術領域研究「水圏機能材料：環境に調和・応答するマテリアル構築学の創成」総括班

### 企画主旨

第2回アカデミアインターンシップを首記の要領で開催しました。2021年9月に行われた第1回（ニュースレター9号参照）に引き続き、本領域に参画する研究グループに所属する実験系の学生と若手研究者を対象として、参加者が分子シミュレーションを用いた材料研究について体験することで、それぞれの扱っている分子系に対する理解を深めることを目的としました。

前回との違いは、今回は対面であったことと、計画研究に加えて公募研究の研究室の方々にもご参加いただいたことです。チュートリアルや見学は、前半の12月20日（火）から23日（金）にかけて、兵庫県立大学神戸情報科学キャンパスにて対面で開催しました。神戸情報科学キャンパスは、神

戸市中央区のポートアイランドにあるスパコン富岳（理化学研究所計算科学研究センター）と同じ敷地にあります。今回は、11研究室から集まった17名の学部生、院生、博士研究員が参加しました。

### 導入・実習と富岳見学

初日の12月20日は今回の企画担当者である鷺津とA02渡辺から、分子シミュレーションを用いた水圏機能材料の研究事例について紹介しました。続く21日は石井特任講師から、研究目標の設定とLinux環境のセットアップの説明を行った後、参加者が実際の操作に入りました。講習では会場にて大きなタイルディスプレイを用い、ファイルの提示・回収や時間外の相談などにはSNS等を用いました。その他の固定資料は、鷺



渡辺による講義



スパコン富岳オンライン見学

津研究室のウェブサーバに提示しました。このように、今回は対面とオンラインツールを駆使して行いました。また、個別の作業や質疑応答には、ティーチングアシスタント (TA) の大学院生も対応にあたりました。

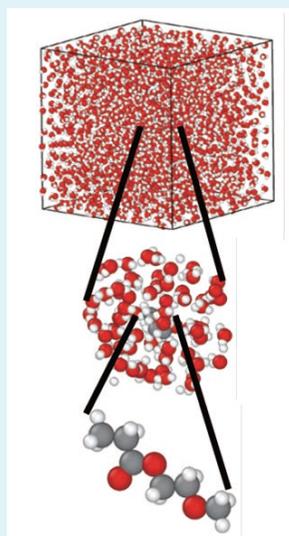
22日には初期状態の作製を行いました。計算機シミュレーション初学者が直面する「最初のポテンシャルバリア」(Linux を用いたアクセスと、分子モデルのファイルやシミュレーション結果の転送) については、今回も TA の大学院生がサポートすることで、参加者はスムーズに突破することができました。またこの日は、理化学研究所に依頼して、スパコン富岳のオンラインツアーを実施していただきました。

現地開催の最終日である 23 日には、それぞれの参加者が計算対象の分子を選定し、分子動力学計算を開始するところまで進みました。正月休みを挟んで、参加者はオンラインでシミュレーション研究を続けました。その間のサポートはオンラインツールを用いて行いました。

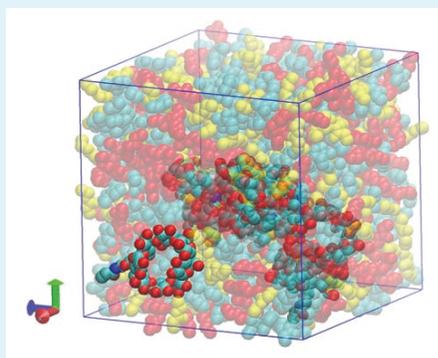
## 実習テーマ

実習テーマは、前回に引き続き、大きく分けて 2 つ準備しました。

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



テーマ 1 : 水和



テーマ 2 : 包接

いずれのテーマも、(1) 分子を描く、(2) 量子化学計算でモデルを決める、(3) この分子を周辺分子集団の中に配置する、(4) 物性を解析する、というプロセスを経ます。今回は、昨年度の分子モデリングソフトウェア (Winmostar) と並んで、文字列である SMILES 記法を用いた分子モデルの導入方法を新たに教材として開発したものを用いました。特に、テーマ 1 については、「水溶液中の自分の分子」について分子モデリングするという趣向で、参加者が普段扱っている分子を次々と水の中に投入し、水和状態を観察しました。

昨年度も驚いたのですが、今年度も参加者が短期間でシミュレーション技術を見事に習得した様子が伺えました。分子設計ソフト、量子化学計算、分子動力学計算などをすぐに使いこなし、思い思いの分子を描いて溶液構造の計算に取り組みました。解析では、基本的な手法である動径分布関数を用いたものから、専門家でも難しいとされる溶媒和自由エネルギー解析までを短期間にも関わらず実施することができました。

## 成果報告会

年明けの 2023 年 1 月 8 日には、領域代表の加藤隆史教授 (東京大学) および参加者の指導教員も交えて、ハイブリッド形式で成果報告会を行いました。今回も参加者全員のレベルは非常に高く、討論会として成立しそうなものでした。成果発表会の後には、加藤教授および指導教員から講評がありました。



現地最終日の集合写真

## まとめ

今回のアカデミアインターンシップでは、適切な方法を準備して集中して取り組めば、1 週間と正月休みという非常に短期間で、参加者自身が扱う有機分子の水和構造をシミュレーションできるようになることを示せたと考えています。領域の目標である材料と水との分子レベルでの相互作用の解明のために、分子シミュレーションを身近なツールとしてより多くの人に活用してもらう大変良い機会となりました。本インターンシップを通じて、本新学術領域における実験と理論の融合がますます進むことと期待されます。今後もこの方式をより広い分野に広められたらと思いました。ご参加、ご協力いただきました全ての皆様に感謝申し上げます。

(兵庫県大院情報・鷺津 仁志)

## 第3回若手スクール 開催報告

日時：2022年12月3日（土）

場所：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

この若手スクールは、本領域に参画する研究グループに所属する若手研究者と学生を対象とし、異分野の知識の習得と新たなネットワークの構築を促進することを目的としています。今回は、新型コロナウイルス感染症の状況を鑑み、当初は7月開催予定であったところを12月に延期し、SPring-8にて対面形式にて開催しました。感染予防対策としては、手の消毒やマスクの着用、距離をとる、換気の徹底など、最大限の対策を講じました。本領域の様々な研究分野から学生・ポスドク研究者14名、学生スタッフ3名、教員4名が参加し、異分野の学生と研究者間の交流が深まりました。



最初に A03 の松葉から、本領域の紹介と SPring-8 の紹介を行い、次いで参加学生から自己紹介を行い、研究内容や趣味などについて、非常に活発な議論が行われました。その後、午前、午後に分けてビームラインの見学を行いました。ビームライン BL43IR では、A02 の池本と学生スタッフが赤外顕微鏡を利用したマイクロビーム FT-IR 測定を行い、実際の実

験の様子を見学しました。また、小角・広角 X 線散乱のビームラインである BL03XU および硬 X 線光電子分光のビームラインである BL09XU も見学しました。ビームラインの見学時も参加学生から活発な質問が出るなど、興味の深さが伺えました。

参加学生からは、「他の参加学生がきちんと実験して、成果を残していることをみて非常に刺激を受けた。」「大きな研究施設である SPring-8 を見学し、ビームラインを見ることができて感動した。」「世界最高峰の装置である SPring-8 を肌で感じて、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ました。対面の議論を通して、学生・若手研究者同士の交流が深められた印象でした。本スクールが、参加者の科学の世界を広げる一助となれば幸いです。

（山形大院有機・松葉 豪）



Aquatic Functional Materials

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

「水圏機能材料：環境に調和・応答するマテリアル構築学の創成」

ニュースレター第15号（2023年4月発行）

■編集・発行 「水圏機能材料」総括班

〒113-8656 東京都文京区本郷 7-3-1

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

東京大学大学院工学系研究科 加藤研究室内