

# 私立大学研究ブランディング事業

## 平成29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	<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。</p>				
①事業目的	<p><b>&lt;本学、外部環境、社会情勢等に係る現状と課題の分析&gt;</b>          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連発展の基礎とする」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><b>&lt;現状と課題の分析内容に照らした研究テーマの設定&gt;</b>          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><b>&lt;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&gt;</b>          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>				
②H29年度の実施目標及び実施計画	<p><b>&lt;実施目標&gt;</b>          省エネ用低摩擦材料、再生医療用材料等、各種機能性材料に関して、翌年度に設計パラメータを振ることのできる標準モデル材料を材料開発班が作製し、計測分析班や理論設計班に、実物試料ないしは設計基本情報を提供し始める。</p> <p><b>&lt;実施計画&gt;</b>  <b>【材料開発班】</b> 真実接触摩擦面のモデル化に役立つグラフェン、タンパク質の吸着・脱離等を議論できるオリゴエチレンジアミン自己組織化膜、関節軟骨モデルとしての相互侵入高分子網目ゲル等を作製する。開発を加速するため新規に蒸着装置を導入する。  <b>【計測分析班】</b> 物質・材料表面の化学状態を選択的かつ短時間に計測できる広帯域和周波発生分光計測装置を開発する。また濡れや流れ現象を可視化する高速度カメラや内部全反射蛍光システムを導入する。  <b>【理論設計班】</b> 材料表面の水の構造と吸収スペクトルを計算するアルゴリズム、材料表面の濡れ性や界面張力の局所変化などを加味できる理論・シミュレーションの開発を進め、統合シミュレーターの開発の礎を築く。</p>				

<p>③H29年度の事業成果</p>	<p>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。</p> <p>【材料開発班】 修飾密度が異なるオリゴエチレングリコール(OEG)重合体修飾表面を作製し、ある表面密度に達すると水の含有量が不連続に変化し、これがタンパク質の吸着抑制能と相関することを見いだした。また軟骨組織再生材料として実軟骨組織構造と類似し相互侵入高分子網目(IPN)ゲルを作製し、軟骨の再生を顕著に促すことを確認した。省エネ低摩擦材料として、新しい潤滑剤として期待されているシアノ系イオン液体を対象に、大気中の水が及ぼす効果を周波数変調走査型原子間力顕微鏡を用いて検討した。シアノ系イオン液体はマイカ表面上に数層からなる吸着構造を形成するが、水の添加により吸着構造が乱れる様子の観察に成功した。また優れた水潤滑面を与えるダイヤモンドライクカーボン(DLC)の真実接触面モデル材料として、シリカ上のグラフェンの摩擦特性に対する水吸着の影響を雰囲気制御走査型プローブ顕微鏡を用いて評価し、湿度の増加とともに摩擦力が低下する結果を得た。</p> <p>【計測分析班】 一体型フェムト秒再生増幅装置を用いて、水分子の吸着構造情報を得るための広帯域和周波発生(SFG)分光装置を開発、広帯域SFGスペクトルが取得できる装置が完成した。また材料表面の修飾に必要な小型研究開発用スパッタリング装置、ならびに動的濡れ性の評価に必要な高速度・高感度カメラシステム、材料表面・界面近傍の流れ場を可視化するTi-U 手動TIRFシステムを導入し稼働を開始した。これにより次年度、材料開発班により供給される各種パラメータを振った材料表面を計測し、理論設計班と情報を共有・解析する下地が整った。</p> <p>【理論設計班】 H29年度は(1) 材料表面・界面の水の構造と振動スペクトル、(2) 材料表面における単分子自己組織化膜の水和、(3) 濡れ性を取り入れた厳密な流体力学の3つのシミュレーション研究を推進した。(1)では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した。さら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ためのシミュレーション技術を開発した。(2)では再生医療用材料分野で重要となるタンパク質吸着に関わる各種自己組織化単分子膜を原子レベルでモデル化し、その界面の化学的性質と水の水和構造と動態との関連を分子動力学法により解析できる系を構築した。(3)では、材料表面における濡れ性に関わる諸物性の局所変化を考慮でき、実験観測結果と対応可能な円管内液柱駆動の流体力学的シミュレーションを実現した。</p>
<p>④H29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＞ 表面水和構造・濡れ・流れを制御するための材料表面の作製、新たな表面作製・計測装置の導入・整備、用いる理論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、公開研究成果報告会2回、学内での成果報告会1回を実施した。またイノベーション・ジャパン2017におけるプレゼンテーションとブース展示、10回以上に及ぶ産学連携研究会や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、産学連携活動並びに広報活動も実施した。研究における主要な成果は以下のとおりである。材料創成:トライボロジー分野におけるモデル材料のグラフェンの他にイオン液体系での検討。再生医療分野でのOEG単分子膜やIPNゲルの開発の進展。計測分野:広帯域和周波発生分光装置の完成・稼働。環境制御AFM装置の稼働。理論・シミュレーション:材料表面の水の構造と吸収スペクトルを計算するアルゴリズムの開発。材料表面の濡れ性・局所の界面張力の変化などを加味できる理論やシミュレーション手法の検討と開発。</p> <p>＜外部評価＞ H29年11月に成果報告会を兼ねた公開シンポジウムを実施、10社ほどの企業研究者からの外部意見を聴取、意見を反映させてH30年1月に外部評価委員を交えて第2回目の成果報告会を実施するなど、PDCAサイクルを着実に回していると判断できる。材料開発班では、医療用途でOEG修飾表面、省エネ材料として炭素系材料の研究が着実に進んでいる。計測分析班では、独自の広帯域和周波発生装置が完成している。理論・シミュレーション班では、材料表面の水の微視的構造や、表面濡れ性、界面張力の局所変化などを加味できる理論・シミュレーションを検討され論文も既に出始めている。以上の観点から当該事業を着実に推進しているものと評価できる。今後は非理系分野にも分かりやすい用語による研究内容説明や、企業研究者が参加しやすい技術説明会等への参加、ナノからマイクロのスケール別の材料・計測・理論シミュレーションの整備状況を可視化すると、さらにブランディングが加速すると期待される。</p>
<p>⑤H29年度の補助金の使用状況</p>	<p>【機器備品費】 スパッタリング装置等 47,556,966円 ※一部は私立大学等研究設備整備費等補助金の対象 【会議・セミナー開催費用】 研究成果報告会の開催等 1,602,707円 【成果発信に関する費用】 HP管理、パンフレット等 930,345円 【報酬委託・人件費】 解析シミュレータの開発、助教雇用等 8,212,145円 【消耗品等】 10,043,011円 【修繕費】 496,826円 【合計】 68,842,000円</p>