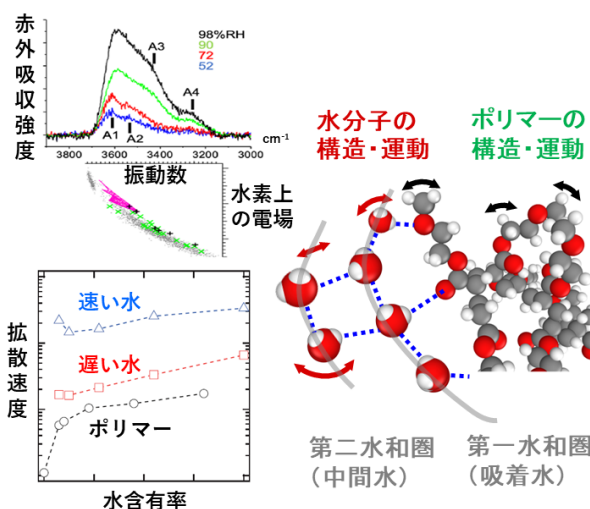


# A2-05 水圏機能材料の先端構造・状態解析

原田慈久（東大物性研）

先端構造・状態解析ツールを駆使する我々の研究グループは、界面水の構造・運動を定量的に評価できる中性子散乱・回折、水圏機能材料の機能の本質を理解するために、界面近傍における材料と水双方の構造変化と相互作用を抽出できる放射光赤外分光、水分子の集団的振る舞いを捉えるツールとして注目を集めるテラヘルツ分光、吸着・接着や反応など、電子の授受を伴う相互作用や界面水の局所構造を観測できる放射光軟X線分光を主軸として、計画研究・公募研究の緊密な連携により幅広い空間・時間スケールで水と材料の相互作用を観測している。これらの分光手法は、汎用的な赤外分光であっても界面水の構造・運動がどのようにスペクトルに反映されるかは自明ではない。そこで界面水の分光スペクトルを得ると同時に、その正しい解釈に向けた共同研究を進めている。

水分子の水素原子が感知する電場を計算することで、水のOH伸縮振動スペクトルが正しく記述できることから、生体親和性を示す poly(2-methoxyethyl acrylate) (PMEA) に特有の水和挙動を解釈した<sup>1)</sup>。中でも PMEA のカルボニル基と強く結合する水分子の存在が示唆され、これが軟X線発光分光、原子間力顕微鏡、水晶振動子マイクロバランスの組み合わせによって、中間水形成の足場として実験的に捉えられていることがわかった<sup>2)</sup>。軟X線発光分光は水の水素結合構造を、従来と異なり電子状態で捉える手法として注目を集めてきたが、そのシミュレーションによる裏付けも本領域内の連携研究で初めて実現した<sup>3)</sup>。一方、テラヘルツ分光で捉えられる界面水の回転運動は、吸着水（第一水和圏）と中間水（第二水和圏）における水素結合挙動の違いで変化することが示された<sup>4)</sup>。第二水和圏の水素結合挙動は生体親和性高分子ポリエチレンオキサイドの界面水の中性子準弾性散乱で得られており、バルク水より拡散速度の落ちた中間水の存在が示唆されている<sup>5)</sup>。このように、界面水の構造・運動を分光と理論シミュレーションの密な連携によって多角的に捉え、水圏機能材料における水の役割の理解に役立っている。



- 1) Y. Ikemoto, Y. Harada, M. Tanaka, D. Murakami, S. Nishimura, N. Kurahashi, T. Moriwaki, K. Yamazoe, H. Washizu, Y. Ishii, H. Torii, *J. Phys. Chem. B* **2022**, *126*, 4143.
- 2) D. Murakami, K. Yamazoe, S. Nishimura, N. Kurahashi, T. Ueda, J. Miyawaki, Y. Ikemoto, M. Tanaka, Y. Harada, *Langmuir* **2022**, *38*, 1090.
- 3) O. Takahashi, R. Yamamura, T. Tokushima, Y. Harada, *Phys. Rev. Lett.* **2022**, *128*, 086002.
- 4) Y. Higuchi, Y. Asano, T. Kuwahara, M. Hishida, *Langmuir* **2021**, *37*, 5329.
- 5) T. Tominaga, M. Hishida, D. Murakami, Y. Fujii, M. Tanaka, H. Seto, *J. Phys. Chem. B* **2022**, *126*, 1758.

## PROFILE

原田慈久（東京大学物性研究所・極限コヒーレント光科学研究センター 教授）

①東京大学大学院工学系研究科博士課程修了後、2000年理化学研究所基礎科学特別研究員、2007年東京大学特任講師、2009年同特任准教授、2011年東京大学物性研究所准教授を経て、2018年より現職。博士（工学）。専門は放射光軟X線分光の溶液系への拡張など、新規手法開拓と応用。日本放射光学会高良・佐々木賞（2023年）、日本物理学会論文賞（2004年）、日本放射光学会若手奨励賞（2005年）など。