

先端国際共同研究推進事業
2023 年度採択
「Top 研究者のための ASPIRE」
マテリアル分野

2023 年度～2024 年度
年次報告書（公開版）

研究課題名	巨大分子の精密認識を可能にする革新的ナノ空間 材料の開発
日本側研究代表者	植村 卓史 東京大学 教授
相手側研究代表者	Christian Serre, Research Director, PSL University
研究期間	2023 年 2 月 1 日～2029 年 3 月 31 日

1. 研究成果の概要

① 研究構想にかかる成果

<実施したこと>

研究構想を実現するにあたり必要となる研究環境の整備を行った。植村研では、多階層的な空間構造を有する金属有機構造体 (Metal Organic Frameworks; MOF) を効率的に合成するための自動合成設備の設計および導入、MOF を用いた極微量化合物の分析に必要な水晶振動子マイクロバランス (Quartz Crystal Microbalance ; QCM) 分析設備の導入、MOF 単結晶素子を利用した極微量分離分析デバイスの評価に必要な共焦点レーザー蛍光顕微鏡の導入と実験環境の整備を実施した。長岡研が中心となり、巨大分子系の分子吸着・認識過程を解析するために、統計力学理論の高効率計算アルゴリズムを開発した。また粗視化モデルを開発して高分子合成触媒の分布状態を解析できるようにし、pH 依存特性を調べるための計算手法の開発を進めた。柳田研では MOF の多様なデバイスへの実装にむけて、基板上で高い密着性を有した MOF 薄膜の合成を行なった。植村研、柳田研、Serre 研、Thiébaud 研の円滑な共同研究推進のため、学生・研究員同士の定期的なミーティングを設定するだけでなく、実際に担当学生・研究員を派遣し密なコミュニケーション環境の構築を行った。

<得られた成果>

植村研では、高速液体クロマトグラフ (High Performance Liquid Chromatography; HPLC) 固定相用にカスタマイズした MOF 微粒子の合成法や階層化手法の確立、QCM を用いた微量分析デバイスのプロトタイプ開発、共焦点レーザー蛍光顕微鏡を用いた MOF 単結晶素子中の物質拡散挙動の実時間観測と解析手法の開発に成功し、巨大分子の微量物質分離・分析技術開発に向けて順調な成果が得られた。長岡研では、XMOZ 理論の高効率手法の開発により、従来法に比べメモリ使用量を 50%程度削減することに成功した。また、RISM/3D-RISM 理論を基盤としてポリエチレングリコールの慣性半径を種々の溶媒種に対して算出する手法を開発し、溶媒依存性の一端を解明した。同様にこの方法を用いて、包接化合物 (ククルビット 7 ウリル) の分子認識機構の解析に取り組み、水・エタノール混合系での分子間相互作用と脱溶媒和効果などのように分子認識の親和性に影響を及ぼすかを解明した。さらには、触媒を双極子を持った棒状分子として近似する粗視化モデルを考案し、全原子モデルを用いて同等な系を取り扱った場合に比べて、計算速度を約 1000 倍高速化することに成功した。現在、全原子モデルの計算結果を参照データとして、粗視化モデルの最適化が進んだ。物質系全般の pH 依存特性の研究に適した定 pH 法の開発に見通しがついた。柳田研独自の戦略を利用して、高い密着性を有した MOF を基板上で作製することに成功した。また、本手法により水晶振動子マイクロバランス (QCM) 上で MOF を合成することによって、既存研究と比較して最大の感度を示す QCM ヘキサガスセンサの構築に成功した。今後、本手法を用いて多様なデバイス上に MOF を堆積し、巨大分子の定量解析に用いる予定である。

② 国際ネットワーク構築・拡大／国際頭脳循環の促進に資する若手研究者の人材育成に関する成果

<実施したこと>

植村研では、前年度に引き続きフランスの Serre 研との学生交換を行い、国際共同研究を推進した。加えて、学生 2 名、教員 1 名を欧州へ派遣し、複数の研究機関と国際共同研究を開始した。また、MOF 関連の国際会議にも総勢 9 名の人員を派遣した。これらの取り組みを通し、国際ネットワークの拡大と若手研究者の育成を行った。また、2025 年 2 月より研究員 (Malvina Supper) をドイツから招へいする手続きが完了し、専門家の頭脳循環促進に関しても順次進めることができる環境を整えた。フランス・トゥールーズで開催された

SMS2024 への出席・講演の機会を活用して、INSA（フランス国立応用科学院）トゥールーズや MIT、モンペリエ大学等の計算グループと研究交流し、INSA トゥールーズの院生の研究を指導した。柳田研の学生 3 名（殿元祐介、武田勝学、三田村紗江）が Jilin 大学に赴き、Geyu Lu 研が主催する国際ワークショップに 4 日間参加した。また、UC Berkeley の Ali Javey 教授を東京大学に招待し、講演会と交流会を開催した。

<得られた成果>

植村研では、武富大空がパリ文理研究大学の Serre 研および Thiébaud 研に滞在して MOF 合成およびスプレードライ法を用いた MOF の粒径制御技術の習得、およびカラム作成を行った。その後、国際交流と共同研究推進のための、武富が作成した数種類の MOF カラムを日本に持ち帰り、2024 年 2 月から 4 月まで、Serre 研の Soraya Bouras（当時博士課程学生）を東大の植村研に招へいし、二人が中心となって MOF カラムを使った巨大分子のクロマトグラフィー分離・分析研究を行った。鈴木 晴陽が Daturi 研を訪問し、ビニル系高分子の MOF への導入および認識におけるメカニズムの解明と空間内での拡散挙動の解析を行った。Daturi 研が所有する最先端のオペランド IR 測定機器を実際に扱い、高分子導入状態の MOF の液中 IR 測定系の試作および測定作業を行った。データを東大に持ち帰り、Daturi 研のメンバーとメールおよびオンライン会議を通して解析について検討を進めている。鳥本明大が半年間ベルギーの Desmet 研に滞在し、現地で理論的なアプローチによる MOF 充填カラムの分離メカニズムの解明に挑んだ。これにより、MOF 細孔内部での物質拡散係数の見積もりに成功した。また、Desmet 研の得意とするマイクロフレイディクス技術による分離チップの可能性についても検討を始めることができた。細野暢彦准教授がフランス、ベルギー、オランダの研究機関を訪問し国際ネットワーキングおよび共同研究に関する打ち合わせを行った。開発チームの Serre 研、Thiébaud 研、Maurin 研も訪問し、現地の設備状況の視察や共同研究計画に関する打ち合わせを行った。本 ASPIRE プログラムにおけるスタートアップ創出に向けた若手の人材育成に関しても進展があり、植村研の 2 名の学生（運愛斗および辰巳遥真）が日本貿易振興機構（JETRO）の主催する J-StarX（起業家等の海外派遣プログラム）に採択された。2 ヶ月の国内研修の後、運はシンガポールに 1 週間、辰巳はオランダ、フランス、ベルギーに計 3 週間渡航し、現地のスタートアップ企業の視察やインタビュー、ピッチイベントを通して起業家人材としての育成研修を受けた。また、運は JST の早暁プログラムへの採択内定が決定し、2025 年度よりディープテック・スタートアップ経営人材としてのメンタリングを受けながら MOF 関連事業の創出に向けて取り組みを始める。

加えて、INSA トゥールーズの院生の共同指導やグルノーブルアルプ大学との共同研究の計画を提案するに至った。

Geyu Lu 研主催のワークショップにおいて、柳田研から参加した学生はセンサデバイスに関する知見を得るとともに、国際的な学生ネットワークの構築を行った。また、Javey 教授の滞在時には、今後の柳田研からの学生の長期派遣（約半年間）を含めた共同研究に関する相談を行った。

2. 研究実施体制

研究テーマ	中心となる研究者氏名	所属機関・部署・役職名
研究テーマ1 超階層的に 構造制御さ れたMOFの 設計	Christian Serre	PSL University・Institute of Porous Materials of Paris・Research Director

研究テーマ2 巨大分子の 吸着・認識 とメカニズム 解明	植村 卓史 長岡 正隆	東京大学・工学系研究科・教授 名古屋大学・未来社会創造機構・特任教授
研究テーマ3 MOF充填 HPLCカラム の開発	Didier Thiébaud	PSL University ・ Chemistry Biology Innovation Institute ・ 分析化学研究室 ・ Professor
研究テーマ4 単結晶 MOFによる 極微量分析	柳田 剛	東京大学・工学系研究科・教授
研究テーマ5 汎用プラスチ ックの分離・ リサイクル	植村 卓史	東京大学・工学系研究科・教授

3. 代表的な業績（原著論文、プレスリリース、表彰など）

<原著論文>

- [1] Youven Benseghir, Min Ying Tsang, Flora Schöfbeck, Daniel Hetey, Takashi Kitao, Takashi Uemura, Hidetsugu Shiozawa, Michael R. Reithofer, Jia Min Chin
Electric-field assisted spatioselective deposition of MIL-101(Cr)PEDOT to enhance electrical conductivity and humidity sensing performance
J. Colloid Interface Sci. **2025**, 678, 979-986.

- [2] Hirotaka Taketomi, Nobuhiko Hosono, Takashi Uemura
Selective Removal of Denatured Proteins Using MOF Nanopores
J. Am. Chem. Soc. **2024**, 146, 16369-16374.

- [3] Nobuhiko Hosono, Yu Kono, Nagi Mizutani, Daichi Koga, Takashi Uemura
Detecting Single-Point Isomeric Differences in Polymer Chains by MOF Column Chromatography
Chem. Commun. **2024**, 60, 13690-13693.

- [4] Kentaro Nakamura, Tsunaki Takahashi, Takuro Hosomi, Wataru Tanaka, Yu Yamaguchi, Jiangyang Liu, Masaki Kanai, Yuta Tsuji, Takeshi Yanagida
Van der Waals interactions between nonpolar alkyl chains and polar oxide surfaces prevent catalyst deactivation in aldehyde gas sensing
Nat. Commun. **2024**, 15, 9211.