

変幻自在な水素を「使いこなす」ためのサイエンス

Hydrogenomics

News Letter



CONTENTS

- P1 A03-1 計画研究紹介
- P3 A03-2 計画研究紹介
- P5 公募研究のご紹介
- P9 若手サイエンティストのご紹介
- P10 第3回全体会議・若手育成スクール
共用装置のご紹介
- P11 今後の予定



計画研究A03-1 「高速移動水素による次世代 創蓄電デバイスの設計」

山梨大学 教授 宮武 健治

目標は「リチャージابل 燃料電池」の実現

A03-1で取り組んでいる「高速移動水素による次世代創蓄電デバイスの設計」の概要を聞かせてください。

ハイドロジェノミクスでは、水素に特有の複数の機能を融合させて、これまでにない機能を作り上げていくことに取り組んでいます。その中で、A03-1で担当しているのは、その機能を蓄電池や燃料電池、キャパシタなどのエネルギーデバイスに展開することです。高次水素機能の組み合わせにより、性能や耐久性、価格など既存の製品が抱える課題を解決できると考えています。まずは、固体高分子薄膜中で水素を高速で動かす、水素を高密度に凝縮する、さらに、それを幅広い温度域や湿度、圧力でも維持できるように制御することに挑戦しています。また、応用と並行して水素に関する新たな学理の創出と確立も目指しています。

A03-1におけるそれぞれの先生方の役割を聞かせてください。

次世代の創蓄電デバイスを可能とするために、A03-1では有機高分子薄膜に関する研究を中心に進めています。

まず、私のテーマは、高分子薄膜中で、水素の陽イオンであるプロトンを高速で動かすことです。一方、早稲田大学の小柳津研一先生は、共有結合を介して水素を高密度で貯蔵できる高分子シート材料の開発に取り組んでいます。また、大阪大学の福井賢一先生は、有機薄膜と電極の界面で水素やプロトンがどのようにふるまうのかという難しいテーマに挑戦しています。さらに、協力研究者の名古屋大学の湯川宏先生は、無機薄膜材料中の水素選択透過に関する研究をしています。

これら研究成果を統合すると、例えば、蓄電池と燃料電池の両方の機能を兼ね備えたような新たなデバイスの実現に繋がることが期待できます。水素貯蔵性高分子シートとプロトン伝導性高分子薄膜を高活性電極触媒と組み合わせて界面構造を構築すると、高分子シートから直接水素が供給される(すなわち、高圧水素ボンベが不要になる)ことが作動原理となります。水素貯蔵性高分子シートは80℃程度に加熱するだけで水素を直ちに放出し、冷却すれば水素を吸収する特異な性質を持っており、水素吸蔵合金に比べてずっと軽くて薄いプラスチックでできています。現在の燃料電池は高圧の水素ステーションや水蒸気改質装置が必

要ですが、水素を高濃度で貯蔵できる高分子シートを用いれば、自立した燃料電池となります。この5年間で原理実証と高性能発電を目指します。

宮武先生の研究内容について、もう少し詳しく教えてください。

そもそも燃料電池は、原理的にはゼロエミッション、高効率であります。現在では構成材料が高額であったり、それらを製造、回収・リサイクルする過程が実は環境にあまりやさしくないといった課題があります。また、燃料電池の膜はプロトン伝導だけでなく水素と酸素を分離する役割もあるのですが、膜中の気体透過が十分に抑えられていないという課題も抱えています。これにより、水素と酸素が電池の中で直接化学反応(燃焼)してしまうため、発電効率が落ちたり、構成材料が劣化するという問題が起こっているのです。

これらの問題を解決するための新たな材料として私が着目しているが、スルホン酸化ポリフェニレン系高分子です。この有機高分子材料の構造的な特徴は、スルホン酸基(SO₃H)とベンゼン環のみからできているという点です。スルホン酸基は強酸性ですのでわずかでも水が存在すると容易に乖離して、プロトン

を生成します。水分子の含量が増えるにしたがってプロトン伝導性が增大するのですが、水とプロトンが連続的に結合したネットワークが形成されれば水素結合が入れ替わるだけで見かけ上プロトンが高速に移動する(いわゆるグロース機構)こととなります。この機能を薄膜中で極限まで高めたいと考えています。また、スルホン酸化ポリフェニレンは気体の透過が非常に小さいことが明らかになっています。無機材料に比べて薄膜化が容易であり、燃料電池発電条件で数千時間以上稼働させても性能が劣化しない優れた耐久性も併せもっています。薄膜にしてもプロトンが高速に動くというわけではありませんが、膜の面積抵抗を下げるには、薄膜化は有効であり、その点でスルホン酸化ポリフェニレンの優位性は高いと思っています。

実は私は、ハイドロジェノミクスが始まる前からこのスルホン酸化ポリフェニレン系高分子に着目していたのですが、プロトン伝導性薄膜材料とすることができませんでした。最近ようやく、ベンゼン環の繋がり方(すなわち、主鎖のベンゼン環がメタ位とパラ位で結合している割合)を最適化することで、高分子の分子量や有機溶媒への溶解性が改善するだけでなく、薄膜としての成型性が著しく向上することを見出しました。現在は、さらに高速にプロトンを動かすための構造設計に加えて、局所的にスルホン酸基を高密度導入する方法を検討しています。スルホン酸化ポリフェニレン系高分子では、なぜプロトンが高速に動くのか、実は詳細な原理がわかっていません。そのため、その原理も明らかにしたいと思っています。加えて、プロトンだけでなく他の陽イオン、例えばリチウムイオンやナトリウムイオンなどの伝導体としての可能性も探っていきます。アルカリ金属などの陽イ

オンにも対象を広げることでイオン伝導性薄膜の新たな設計原理を提案すること、ハイドロジェノミクスの波及分野を益々広げていくことを見据えています。

他の研究班との共同研究についても聞かせてください。

創蓄電デバイスは、さまざまな異種材料を組み合わせて創ります。そのため、単体では高い性能を発揮する材料でも、異種材料同士の界面が障壁となって、デバイス全体としては高性能が出ないというのはよくある話です。そのため、湯川先生に加え、A01など無機材料を専門に扱っている先生方との共同研究を進めています。特に、A02代表の東工大・一杉太郎先生とは、金属リチウムとの界面でのスルホン酸化ポリフェニレンの挙動を協力して解析しています。

A05-1とも共同研究を進めています。例えば、有機薄膜中で水やプロトンが互いにどのように結合し分布しているのかを、高エネルギー加速器研究機構の大友季哉先生のグループと一緒にJ-PARCで実験し解析を進めています。A05-2の東京大学・常行真司先生や大阪大学・濱田幾太郎先生にはプロトンが薄膜中で拡散する過程のシミュレーションなど議論させていただいています。

燃料電池のしくみや原理は、中学や高校の教科書にも載っており、水素と酸素が電気化学反応して水ができるということでもシンプルなものですが、その化学反応プロセスは、実は非常に複雑で解明すべき多くの課題が残っています。固体(有機薄膜、触媒)、気体(水素、酸素)、液体(水)、イオン、電子が関与する極めて複雑な発電装置であり、動的な環境下での反応プロセス解析は困難を極めます。先に述べた新しいコンセプトの燃料電池についても、どの反応プロセスが

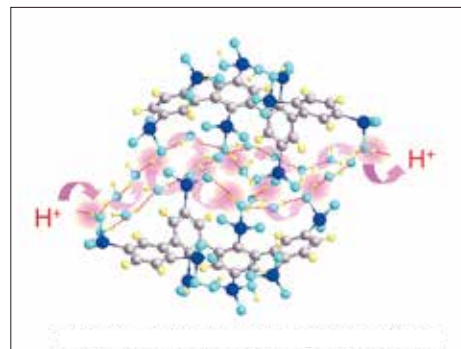
律速であるのかわからないと反応速度(電流)を上げることができません。そこがこの計画研究の最もむずかしい点であり、興味深いところでもあります。そのため、今後、反応プロセスを扱っているA04とも共同研究を進めていく計画です。

他方、A03-2では、分子科学研究所の小林玄器先生が、水素のマイナスイオンであるヒドリドの伝導材料を研究しています。水素原子、プロトン、ヒドリドのバルク材料中での挙動の違いについては、まだよくわかっていません。価数の違いが物性に及ぼす効果を解明できれば、水素の理解と制御に大きな貢献となります。

2019年3月ようやく初年度が終わったところで、他の計画研究との共同研究はまだ始まったばかりですが、その成果は徐々に表れてきており、メリットも強く感じています。4月からは公募研究の先生方も加わりましたので、一層強力な協力体制が整いました。

今後の目標を聞かせて下さい。

まずは、中間評価までにスルホン酸化ポリフェニレン系高分子でプロトンが高速に動く原理を明らかにし、より優れたプロトン伝導性有機薄膜材料を提案することです。並行して、新しい創蓄電デバイスの設計と有用性実証も進めていきますので、ぜひ期待してってください。(取材・文:サイエンスライター 山田久美)



▲ 高密度凝集したプロトンが高分子薄膜中を高速移動するモデル



計画研究A03-2 「高速・局所移動水素と電子とのカップリングによる新発想デバイスの設計」

東京大学 教授 **森 初果**

水素と電子の カップリング機構を解明

A03-2で取り組んでいる「高速・局所移動水素と電子のカップリングによる新発想デバイスの設計」とはどのような研究でしょうか。

水素には、原子(H^0)、プロトン(H^+)、ヒドリド(H^-)、水素分子中の水素(H)の4種類の状態があります。これらは水素と電子の関係性によって決まるものであり、これを「水素と電子のカップリング」と呼んでいます。このカップリングは、有機、無機を問わず、幅広い物質で起こっていて、様々な機能や特性を発現します。そこで、A03-2では、有機系、無機系、生体系という3分野の物質の研究者が集まり、このカップリングに関する共通の学理の研究を進めています。それにより、カップリング機構の解明と、新たな機能の発見、体系的な理解、そして、カップリング機構を用いた新発想のデバイスの創出を目指しています。

有機系、無機系、生体系物質での水素と電子のカップリング機構にはどのようなものがありますか。

まず、無機系では、現在、分子科学研究所の小林玄器先生が、無機物質中のヒド

リドの振る舞いを研究しています。特定の無機物質中では、水素がヒドリドのまま移動することができるため、適切な電極と電解質の組み合わせを見つけることで、水素ガスをヒドリドに変換し、反応場となる電極表面に供給することが可能になります。電極表面では、ヒドリドが電子と乖離してプロトンまたは分子中の水素となることが予想され、このデバイス反応では様々な化学反応が促進できると期待できます。

また、生体系では、兵庫県立大学の樋口芳樹先生が、ヒドロゲナーゼと呼ばれるタンパク質を研究しています。ヒドロゲナーゼは、生物の細胞内で水素分子をプロトンと電子に分解したり、合成したりする働きを担っている酵素です。そのため、樋口先生は、プロトンがタンパク質内でのように高効率に移動し、この酵素がどのようなプロセスで触媒反応を起こしているのかといった機構の解明に取り組んでいます。ヒドロゲナーゼによる水素の分解反応は、バイオ燃料電池の開発に有用です。現在、放射光施設、中性子施設などを使って、ヒドロゲナーゼの構造解析を進めており、複雑な構造のどこにプロトンを授受するチャンネルがあるのかといった経路を調べているところです。

一方、私自身は、長年、電子が主役となる

有機伝導体と磁性体の研究をしてきました。最近、有機物質中で、電子と水素がカップルすることによって発現する、新たな伝導、磁性現象を発見しました。通常、一成分の有機物は閉殻のため、半導体あるいは絶縁体となり、電子ドナーと電子アクセプターの二成分の有機化合物を作ると、電子をやり取りして、伝導キャリアとなるホールと電子を生成し、有機伝導体となります。我々は、電子ドナーであるばかりでなく、プロトンドナー(弱酸)であるプロトン-電子相関系の有機物を合成したところ、プロトンを引き抜いて、中性電荷を保つために伝導性のキャリアとなるホールをドーピングすることができたため、単成分ながら金属性を示す有機物を合成することに成功しました。

また、水素結合の水素を重水素に置き換えることにより、大きな同位体効果を見つけました。水素と重水素の質量や量子性の違いから、水素体では、低温まで水素が量子的に揺らいで、それとカップルした電子は低温まで量子的に液体である量子スピン液体状態となります。一方、重水素では185K以下で、重水素の移動性(熱的揺らぎ)が消えて局在化することにより、それとカップルした電子キャリアも局在化し、金属から絶縁体へスイッチングする現象を見出しました。このように、電子ばかりでなく水

素をカップルさせると、新たな「プロト・エレクトロニクス」に繋がります。

高い還元能力をもつ触媒の実用化を目指す

水素と電子のカップリング機構を用いた新発想のデバイスとは、具体的にはどのようなものでしょうか？

「ヒドリドリアクターデバイス」というものを目指しています。これは、水素ガスをヒドリドとして取り込み、ヒドリドが高速に移動する「ヒドリド伝導層」から反応場となる電極表面に供給するデバイスです。反応場ではヒドリドが触媒として機能し、水素化反応が効率的に進行します。従来の触媒反応と異なり、次々に反応性の高いヒドリドを供給できることが特徴です。

たとえば、現在、アンモニア(NH₃)を生成するには、白金やパラジウムを触媒に使っているため、高額で、資源の問題もあります。それに対し、ヒドリドリアクターデバイスが実現すれば、ありふれた元素、かつより低エネルギー環境下で、アンモニアを生成できるようになります。新しい産学連携の方向性を創り出すべく、5年間でデバイス作動原理の確立を目指しています。

そのため、現在、A03-2では、高速かつ高効率に移動するヒドリド伝導体などの材料開発を進めているところですが、デバイスとして完成させるには、A03-2だけでは不可能です。たとえば、デバイス全体の性能を高めるためには、電極/ヒドリド電解質との界面でヒドリドを効率的に拡散させることが重要となります。そこで、A02には、界面の評価をお願いしています。また、A04には、反応場での化学反応プロセス促進について、A05-1には、ヒドリドの伝導、水素と電子への解離・再結合について、オペランド計測で検証していただいております。さらに、A05-2には、理論計算をしていただくこと

で、ヒドリド伝導体や反応場の最適な分子構造を理論的に予測したり、実験結果を理解したりしています。

他班との共同研究には、他にどのようなものがありますか？

私の研究グループとA04との共同研究で、「プロトンスイッチング2層膜」の開発を進めています。これは、プロトンを供給する有機単相膜末端にある水素原子と、プロトンを受け取る有機単層膜終端にある窒素原子同士が水素結合をしている2層膜です。この2層膜間の水素移動で、電気伝導性がスイッチする機能性有機2層膜を目指しています。

もう1つは、無水純有機プロトン伝導体の開発です。無水なので、100℃以上の中温域でも使え、環境にやさしい有機物からできています。この系では、有機物を構成しているイミダゾール分子(C₃H₄N₂)の分子運動を介して、バケツリレー式に、共役酸が与えるプロトンが受け渡されて、プロトン伝導が実現しています。これにより、有機物質を使った中温域作動の燃料電池作製を最終目標としています。最近、NMR装置やX線を使って、イミダゾールの運動を計測したところ、フリップ運動や回転運動など様々な運動をしていること、運動が激しくなるにしたがって、プロトンの伝導性が上がっていくことが確認されました。そのため、今後は運動のしかたとプロトンの伝導性との相関関係をまず探っています。

次世代のエネルギーである水素に関する科学技術で世界に貢献

森先生が、A03-2に参加して良かったと思われることを聞かせて下さい。

ハイドロジェノミクスが始まる前は、実はヒドリドがほとんど解離することなく物質中を移動するなどとは想像できませんでした。

なぜなら、ヒドリドはエネルギーレベルが高いため、すぐにプロトンと電子に解離してしまうからです。さらに、ヒドリドによっては、周りの環境で解離を制御することができ、水素化や還元反応にも利用できるというのは、とても面白いと思いました。また、有機系だけでなく、無機系、生体系でも、水素と電子のカップリング機構がさまざまな機能を担っていることを知り、視野が広がりました。無機系、生体系の研究者も同様の感想を得ているようです。

森先生ご自身の研究目標についても聞かせてください。

通常、超伝導材料や磁性材料といえば、無機物質です。この50年で、有機物質でも実現できることが明らかとなりました。私は、さらに有機分子の様々な特性を生かすことによって、有機ならではの機能性物質、材料を作っていきたいと思っています。有機物質はフレキシブルで軽いですし、元素は120種類弱しかありませんが、有機分子を設計、合成することができるため、有機物質の可能性は無限です。特に、有機分子の機能の1つとして、水素と電子のカップリングに注目して、新機能を創出したいと考えています。また、それにより、プロトニクスとエレクトロニクスを合わせた「有機プロト・エレクトロニクス」という新分野を確立したいですね。

最後に森先生ご自身の夢を聞かせてください。

水素は石炭や石油に代わるクリーンで燃焼効率の高い次世代のエネルギーです。また、資源小国日本でも水素であれば作ることができます。そのため、水素に関する研究開発を通して地球全体への貢献を果たしていきたいですね。さらに、この新たな研究領域が他の領域にも波及し、科学技術のさらなる発展を後押しできればうれしいです。

(取材・文：サイエンスライター 山田久美)

A01

筑波大学 [表面科学・2次元物質]

近藤 剛弘



ホウ化水素を用いた高密度水素貯蔵材料の開発という課題を行います。このホウ化水素という物質は我々が2017年に初めて合成の報告をした物質で MgB_2 のマグネシウムカチオンとプロトンを用いたイオン交換することで生成する2次元物質です。加熱により $150^\circ C$ から $1200^\circ C$ で水素を放出するという特徴があります。先行する理論研究により、電子を注入すると水素との反結合性軌道に電子が入るために水素放出温度が低温化するという報告があります。そこで本研究ではホウ化水素シートに電子を供与するドーパントを導入し最適化することで高密度水素貯蔵材料を開発することを目的としました。

A01

東京工業大学 [固体化学]

飯村 壮史



ハイドロジェノミクスでは、「金属水素化物の非調和性と熱伝導」というテーマで水素の新しい学理の創出を目指します。非常に軽く、かつ、大きな電子分極を持つ水素化物イオンは非調和振動を示しやすいイオンと言えます。本研究では、金属水素化物の熱伝導率測定と第一原理計算を用いた振動解析を通して、水素化物イオンの高密度凝集と非調和性の関係を明らかにします。様々な分野の研究者と積極的に交流することで水素に対する理解をより一層深め、少しでも本プロジェクトに貢献できるよう努力していきたく思っております。

A01

京都大学 [固体物理]

前里 光彦



原理的にあらゆる物質に高濃度の水素をドーピングすることが可能な低温水素イオンビーム照射装置を利用して、高濃度水素を物質中に導入します。それにより、従来型の元素置換法では高濃度キャリアドーピングが困難な物質へのキャリアドーピングを行い、水素導入によるエキゾチック超伝導体の開発を行います。

特に、電子相関とスピン軌道相互作用が共存する新奇スピン軌道モット絶縁体 Sr_2IrO_4 などを対象として、良質の薄膜作成と低温水素イオンビーム照射によるキャリアドーピングおよびその場計測を行い、エキゾチックな水素誘起超伝導の開発を目指します。

A01

広島大学 [材料科学]

宮岡 裕樹



錯体水素化物やハロゲン化物は、分子状のアンモニア(NH_3)を吸蔵し「アンミン錯体」と呼ばれる安定相を形成します。これらアンミン錯体は、吸蔵体の種類や NH_3 との組成により、異なる物性を示すことから、エネルギー貯蔵物質やイオン伝導体等としての利用が期待されています。これらアンミン錯体の機能性には、水素が深くかかわっていると考えられ、特にポロハイドライドのアンミン錯体においては、 $H^{\delta-}$ と $H^{\delta+}$ が共存するため、水素が物性や機能性に及ぼす影響は大きいと推測されます。本研究では、アンミン錯体中の水素の状態等を実験的に分析し、その相互作用を理解することで、機能性発現メカニズムに関する知見を得ることを目的とします。

A02

東京工業大学 [触媒化学]

北野 政明



金属ナノ粒子を固定化したヒドリド化合物は、その界面において H^- イオンが担持金属ナノ粒子上での触媒反応に関与し、アンモニア合成などの各種水素化反応を著しく促進します。このとき、担体の H^- イオンの動きやすさすなわちヒドリドイオン導電性が触媒活性と強い相関関係があると考えられます。本研究では、様々なヒドリド化合物を自身で開発および共同研究により提供いただき、アンモニア合成をはじめとする各種水素化反応を行い、 H^- イオンの化学反応における役割を解明します。

A03

千葉大学 [表面電気化学]

中村 将志



電解質溶液と電極の界面には電気二重層が形成されており、溶媒やイオン種はバルクと異なる分布となります。近年、電気二重層のイオン種が変わると電極反応の活性や反応選択性が向上することが報告されています。採択課題では、電気二重層内におけるイオンの水和構造に着目し、水素発生反応を活性化することを目指します。イオンの疎水性度により水和水の水素結合構造は大きく変化し、界面におけるプロトン移動にも影響することが予想されます。そこで、アルキルアンモニウムのような有機イオンを用いて疎水性度や立体構造の制御により、高活性な電極界面を構築します。

A03

大阪大学 [酸化物エレクトロニクス、ナノ機能材料化学]

田中 秀和



遷移金属酸化物を中心に、超薄膜・ヘテロ構造・ナノ構造を作製し、物性研究を行っています。特に微細加工と薄膜結晶成長の融合により作製したナノ構造を用いた巨大な物性（電界効果、磁気抵抗、相変化）の創出に興味を持っています。今回の新学術領域研究では、究極的に小さいイオンであるプロトンに着目し、その強力な還元能による遷移金属イオンの価数制御より数桁に及ぶ物性変化を示しうる遷移金属酸化物を利用/探索し、さらに、プロトンの高速拡散に基づく微小な電界でも巨大かつ高速に電気抵抗をはじめとする物性を動的に制御可能な【酸化物プロトニクス】デバイスの実現を目指しています。

A03

大阪大学 [表面物理化学]

加藤 浩之



表面科学の研究手法をベースに、自己組織化膜に機能を付与する研究を進めています。公募課題では、プロトン(H⁺)のドナー膜/アクセプタ膜からなる異種二分子膜を自己組織化的に製膜し、電子-H⁺相関物性の発現と解明を目指して研究しています。近年、顕著な電子-H⁺相関物性がCat-TTF系分子結晶で見出されました。本課題では、このCat-TTF分子をH⁺ドナー膜とした異種二分子膜を作成し、外部刺激によってH⁺移動を誘起して分子膜の物性を制御したいと考えています。これまでに、この異種二分子膜の製膜手法を確立することができました。今後、新学術研究領域内外の方々と連携しつつ、H⁺移動の誘起と電子状態および物性の解明に挑戦します。

A03

九州大学 [電気化学・錯体化学]

山田 鉄兵



電気化学で温度差から電気エネルギーを作る「熱化学電池」を研究しています。熱化学電池では、酸化還元反応に伴うエントロピー変化がゼーベック係数(単位温度差辺りの電圧)に比例するため、可逆かつ大きな酸化還元反応エントロピーを有するレドックス対を探索しており、本課題ではプロトン共役電子移動(PCET)反応に着目しています。PCET反応では酸化還元に伴って放出するプロトンの溶媒和エントロピーが大きいので、大きなゼーベック係数が得られると考えられます。本申請ではその大きなゼーベック係数を実現すると共に、PCET反応が生じるメカニズムや、反応エントロピーの中身について探求したいと考えています。

A03

立教大学 [有機光化学]

森本 正和



本研究では、有機固体中の水素移動に由来する機能を分子光化学反応により操作できる高次水素機能分子デバイスを創出することを目的とします。有機分子結晶や高分子材料における水素移動と、フォトクロミック分子の光異性化反応とを強結合させることで、強誘電性やプロトン伝導性に対して光ゲート機能や光パターン化機能を発現させることに挑戦します。このような研究を通じて、水素機能の新しい光操作機構を提案・実証し、水素機能材料と光応答性有機分子の複合化に基づく「時空間制御型ハイドロジェノミクス分子デバイス」へ向けた物質設計の基礎を築くことを目指します。

A04

京都大学 [有機金属化学]

藤田 健一



本研究は、私たちが明らかにしてきた、イリジウム錯体と機能性配位子の協働による水素分子の可逆的ヘテロリシスに関する理解を深化するとともに、この素反応を活用した有機分子の高速水素化ならびに高速脱水素化を触媒的に実現することを目的としています。そして、上記の成果を発展させ、これまでにない水素貯蔵系を構築し、使用しやすい水素貯蔵材料の開発へ発展させることに挑みます。ハイドロジェノミクスという学理構築から基礎的触媒反応系の開発、加えて材料としての応用までのすべてに取り組む点が本研究の特色です。研究成果は、水素社会への移行に貢献し、人々の暮らしを支える社会システムの充実に役立つと期待しています。

A04

大阪大学 [有機金属化学、錯体化学、触媒化学]

劔 隼人



本新学術領域研究では、不均一系触媒での水素活性化により生じる金属ヒドリド種の分子モデルとして、複数の金属から成る金属クラスター錯体に対して金属ヒドリド錯体を導入したヒドリド複合クラスター錯体を合成し、原料として用いた金属クラスター錯体に含まれる金属元素の種類とヒドリド種の反応性の相関関係を明らかにすることを目的とします。

現在のところ、金属クラスター錯体として、不均一系触媒の担体として用いられているジルコニアやチタニア、セリアの分子モデルを既に合成しており、金属ヒドリド錯体の複合化に関する研究を実施しています。

A04

横浜市立大学 [計算科学]

石元 孝佳



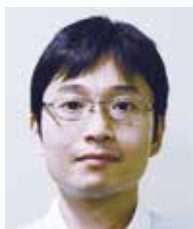
本研究では、金属ナノ粒子のような不均一場における水素ダイナミクスの高精度な取り扱いを可能とする新規計算理論の開発および応用計算に取り組んでいきます。

先日の領域会議の際、多くの先生方とのご議論の中から水素の量子性を取り込んだ計算手法の重要性を再認識しました。本領域には様々な材料、様々な手法で水素の姿を高精度に観測できる実験の先生が多くいらっしゃいますので、活発な交流を通し、実験・計算の両面から新しい水素の姿を解明し応用したいと思っています。

A05

東北大学 [固体イオニクス]

中村 崇司

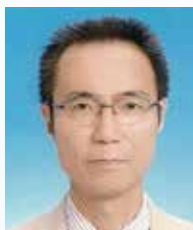


本研究ではプロトン伝導性セラミックス燃料電池(PCFC)空気極における「プロトンの電気化学的活性領域」を可視化する高度計測技術を開発し、電極設計の礎となる電極反応の解明を目指します。PCFC発電時、空気極では酸素とプロトンが反応する酸素還元反応が起こるため、実際に電気化学反応が進行する領域は還元状態になります。この還元状態の分布(=プロトンの電気化学的活性領域の分布)を、空気極材料の遷移金属をマーカーとしてX線吸収分光測定により可視化します。以上の検討を通して、高機能水素デバイスのOperando/In-situ計測技術を開発し、本領域の発展に貢献します。

A05

茨城大学 [中性子科学、材料科学]

大山 研司



専門は中性子散乱を用いた物質科学ですが、最近では、新しい中性子利用法としての「白色中性子ホログラフィー」の開発とそれを用いた局所構造研究に力をいれています。ホログラフィーは、特定の元素周りの原子構造を直接可視化する技術で、異種元素ドーブによる原子構造の歪みの観測や格子中でのドーパント位置の確定などに威力を発揮します。とくに中性子ホログラフィーならば水素などの軽元素の局所構造も観測できるはずで、成功すれば水素化物研究に新たな視点が導入できます。しかし私自身は水素化物の素人ですので、専門家のネットワークに参加したいと考え、応募いたしました。ぜひ共同研究をさせていただきたくおもいます。

A05

筑波大学 [理論生物物理学]

重田 育照



生命現象は生体内分子によって駆動される一連の化学反応によって支配されており、その根本的分子メカニズムは、化学反応に伴う電子状態変化と立体構造変化を探索することで明らかにできます。本公募研究グループは、量子論に基づく第一原理計算や、古典(統計)力学に基づく分子動力学計算などの計算科学的手法を駆使して、生体内分子に内在する動的な構造-機能相関を明らかにし、生命現象の本質を捉える研究を行っています。ハイドロジェノミクスにおいては、水素をプロトンと電子に可逆的に変換するヒドロゲナーゼを中心に、実験で捕らえられた未知の構造の妥当性の検証、酵素反応、電子・プロトン移動などの解析を行います。

A05

大阪大学 [計算物質科学]

越智 正之



専門は固体の第一原理計算で、これまで遷移金属酸化物・酸水素化物、強相関磁性体、熱電物質、トポロジカル物質、その他層状化合物などを研究してきました。また第一原理計算手法の開発も行なってきました。

本領域では、遷移金属酸水素化物における水素機能の理論解析・探究を行いたいと考えています。特に、第一原理計算と強相関有効モデルの解析を組み合わせた解析を行いたいと思っております。またそれ以外の物質についても、できる範囲で領域内の共同研究に貢献できればと考えています。

A05

徳島大学 [核磁気共鳴]

犬飼 宗弘



私が研究している固体材料の高分解能プロトンNMRは、水素の運動や位置を直接観測することができると有力な分光法の一つです。本研究では、水素が活性化し、水素機能が発現している環境下(高温、高圧ガス、水素ガス雰囲気下など)のその場高分解能プロトンNMR装置を開発します。開発した装置を用いて、触媒により乖離した水素などの活性水素の詳細な位置や拡散挙動を明らかにします。また、本領域で開発される多彩な水素機能材料の固体NMR解析にも取り組みます。材料中の水素の位置・運動と水素機能の相関を明らかにすることで、機能発現の機構解明を行います。

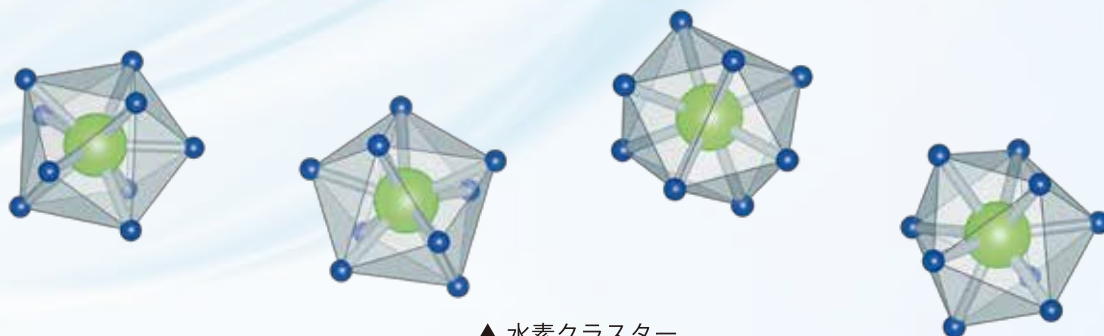
A05

横浜市立大学 [量子化学・計算化学]

立川 仁典



第一原理経路積分法等の量子化学手法を高度化することで、電子だけでなく水素原子核自身の量子効果も含めた多成分系量子化学計算手法を確立します。それにより、低障壁水素結合に着目した分子性結晶や表面化学、生体超分子等を対象とした大規模量子化学計算を実現し、プロトン自身の量子効果の影響やH/D同位体効果、さらには高次水素機能の発現機構解明や高精度予測を目指します。申請者の量子化学手法と実験研究者との有機的な結びつきにより、領域内での密な議論に基づき、本領域の研究推進に大きく貢献したいと思っております。



▲ 水素クラスター



分子科学研究所 物質分子科学研究領域

竹入 史隆

はじめまして。分子科学研究所小林グループの竹入です。私は学生時代から無機固体における新物質探索に取り組んでおり、現在はヒドリドデバイス開発に必要な新規ヒドリドイオン導電体の創出に注力しています。

ヒドリドを含む無機固体としては、古くからアルカリ・アルカリ土類金属などの水素化物が知られており、なかには高いヒドリド導電特性を示すものもあります。しかし、デバイス化を見据えた固体電解質として見ると、金属水素化物は非常に反応性が高く、電極と安定な界面を形成することがむずかしいという欠点があります。私は固体電解質として作動可能な化学安定性と、デバイス化に必要な導電率を兼ね備えたヒドリド導電体開発を目指して、主として酸水素化物をターゲットに物質探索をおこなっています。物質探索は失敗の連続が常ですが、そのぶんだけ成功した時の喜びはひとしおです。領域のみなさまにも一目置かれるような、インパクトある新物質の開発に挑戦します。

また、本領域における小林グループのミッションはヒドリドを用いた電気化学デバイスの開発です。上述した物質探索と並行して、適切な電極の選定や界面の作り込みにも挑戦しています。水素を扱う要素技術を豊富にお持ちの先生方からできるだけ多くのことを学び、ハイドロジェノミクスの推進に努めたいと思います。どうぞよろしくお願いいたします。



筑波大学 数理物質系物質工学域

武安 光太郎

私は、現在筑波大学にて、中村潤児教授、近藤剛弘准教授らと、燃料電池カソード極のメタルフリー酸素還元反応触媒およびCO₂還元反応触媒の機構解明、触媒開発を推進しています。どちらの触媒反応においても、水素による還元過程が含まれるだけではなく、反応サイトの活性化やエネルギー授受の媒介者として水素が重要になります。本領域では、水素の状態の解明や制御に関するスペシャリストが集まっており、連携させていただきながら、各種触媒反応における反応促進に向けた新概念を打ち出していければと思います。

私は、学生時代は東京大学生産技術研究所の福谷克之教授のもとで、物性物理学的な側面から固体表面における水素の研究に携わり、その後、反応における分子内自由度の効果や光触媒反応素過程の研究などを経て、現在では電気化学反応を主なフィールドとしながら、生体内反応の研究にも着手しています。本領域には、水素を軸として非常に多様なバックグラウンドを持つ研究者の方が集まっており、分野を幾つか跨いで研究を行っている私自身には非常に刺激的かつ親しみの湧く領域であると感じられます。現在は、領域の恩恵に預らせていただくことのほうが多い身ですが、自身の研究背景を活かして、ゆくゆくは本領域内のアクティビティに貢献できるよう努力させていただければと思います。



東京大学物性研究所 機能物性研究グループ

春山 潤

東京大学物性研究所の春山です。私はエネルギー問題の解決を目指し、現在はリチウムイオン電池に代表される車載用二次電池の研究を行なっております。主なテーマとして電極/電解液界面での電荷移動過程をミクロスコピックに記述するシミュレーションに取り組んでいます。近年の発展として、このような界面の電気化学的な過程を記述するためには電解液の分子を古典分子動力学計算のように陽(explicit)に扱うのではなく、電解液を分布関数として陰(implicit)に扱う方法が有効であることが分かってきました。この分布関数を直接解くようなシミュレーションを第一原理計算と組み合わせることで、電極電位などのマクロスコピックな量をミクロスコピックな計算から自然に得ることが可能になります。この話は第2回若手育成スクールで標準水素電極の計算例として紹介させていただきました。また同様のシミュレーションを用いることでリチウムイオン電池の電極/電解液界面の電荷移動過程の活性化エネルギーをミクロスコピックな計算から得ることができるようになりました。以上の知見を活かしハイドロジェノミクスでは固体/溶液界面に限らず固体/固体界面の電荷移動反応等に関しても取り組んでいければと考えています。皆様と一緒にハイドロジェノミクスの研究をすることを楽しみにしておりますので、どうぞよろしくお願いいたします。



全体写真

Hydrogenomics
2018-2022年度 新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」
高次水素機能による多量体材料「ハイド」形成プロセスの創成 -
第3回若手育成スクール/第3回全体会議
会期：2019年5月17日(金)～18日(土)
会場：東京工業大学大岡山キャンパス 高付階 デジタル多目的ホール

5月17日(金)
＜第3回若手育成スクール＞
10:30～10:35 開会
【若手発表】※8:30分(質疑応答含む)
10:10～10:20 A01：新井 望之(豊研機構)
10:20～10:30 A02：中山 真(豊研機構/東京大学)
10:50～11:00 A03：松川 幸志(自衛隊医科大学)
11:10～11:20 休憩
11:20～11:40 A04：松本 悠(NTT東日本)
11:40～12:00 A05：田中 一貴(豊研機構/東京大学)
12:00～12:10 全休研修、懇話
12:10～12:15 代表者挨拶

＜第3回全体会議(1日目)＞
13:30～13:35 開会、全休研修
13:35～13:50 新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」の創成
【特別講演】「2021年大会」2020年(公開研究会発表)
13:50～14:20 A01：新井 望之(豊研機構) / 山本 修(東京大学) / 田中 一貴(豊研機構)
14:20～14:50 A04：山内 英樹(九州大学) / 高橋 淳(東京大学)
14:50～15:00 休憩
15:00～16:00 公開研究プレビュー(1A39、スライド2枚)
16:00～17:30 公開研究ポスター発表
17:30～17:50 懇話会(懇話)
18:00～20:00 懇話会(東京工業大学豊田内 豊研会館 ロイヤルブルーホール)

5月18日(土)
＜第3回全体会議(2日目)＞
【特別講演】「2021年大会」2020年(公開研究会発表)
10:00～10:30 A03-1：高橋 淳(東京大学) / 田中 一貴(豊研機構) / 山本 修(東京大学)
10:30～11:00 A05-1：新井 望之(豊研機構) / 大塚 孝哉(豊研機構/東京大学)
11:00～11:30 A02-2：中山 真(豊研機構/東京大学) / 小松 実(分子科学研究所) / 植村 芳樹(自衛隊医科大学)
11:30～13:00 懇話、休憩、アンケート(懇話)
13:00～13:30 A02-1：中山 真(豊研機構/東京大学) / 和田 英二(東京大学)
13:30～14:00 A05-2：新井 望之(豊研機構/東京大学) / 杉野 俊(東京大学)
14:00～15:00 クロージング、全休研修、懇話

【連絡先】新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」東京工業大学・豊研機構 マテリアル・プラットフォーム
TEL: 03-5727-2622 / E-mail: msh@hydrogenomics.jp



ポスター発表の様子



一杉研究室ラボツアーの様子



グループミーティングの様子

2019年5月17日(金)-18日(土)東京工業大学大岡山キャンパスにおいて、第3回全体会議・若手育成スクールを開催しました。本会議には、新たに領域メンバーとして参画した公募研究の先生方19名を含めた総勢90名が参加しました。全体会議では、各計画研究代表者と研究分担者による研究成果・進捗状況の報告、今後の展開について説明がありました。公募研究の先生方からは、研究プレビュー、ポスター発表がありました。ポスター発表では、若手・ベテランという垣根を越えた活発な討議の場となり、研究の連携が勢い盛んになる大変有意義な場となりました。会議終盤には、各計画研究にてグループミーティングを行い、メンバー全員で今後の課題や研究の連携について意見交換をしました。

公募研究の先生方の参画により、これまで以上に研究の有機的連携を推し進めていく体制が整いました。精鋭なる本領域メンバーの今後のさらなる活躍をどうぞご期待ください。

共用装置のご紹介

水素化物対応高精度ガス/蒸気吸着量測定装置(BELSORP-maxII-114・マイクロトラック・ベル株)

細孔を有する固体試料に対し、比表面積0.01m²/g以上(N₂)、0.0005m²/g以上(Kr)、細孔分布(直径)0.35-500nmを測定可能であり、最大4検体の測定が可能です。前処理から測定まで完全自動化であり、精密な気体及び蒸気吸着特性を評価できます。



水素化物対応高精度ガス/
蒸気吸着量測定装置



水素化物対応触媒分析装置

水素化物対応触媒分析装置(BELCATII・マイクロトラック・ベル株)

昇温脱着法(TPD)や昇温反応法(TPR)による触媒中の酸・塩基点の評価や、BET比表面積や各種触媒反応の解析などが可能です。全自動測定が可能であり、混合ガスを含む8つのガスポートに加え蒸気導入ユニットの接続も可能です。

- 2019年8月23日(金)–24日(土)
「第4回若手育成スクール」を分子科学研究所にて開催いたします。
- 2019年11月22日(金)–11月23日(土)
「第4回全体会議」を山梨大学にて開催いたします。
- 2019年11月25日(月)–26日(火)
「第2回ハイドロジェノミクス研究会」を東京大学本郷キャンパスにて開催いたします。
- 2019年11月27日(水)–11月28日(木)
「第13回物性科学領域横断研究会(東京大学本郷キャンパス)」に参画いたします。
- 2019年12月10日(火)–14日(土)
「MRM2019(横浜シンポジウム)」に参画いたします。
- 2020年1月5日(日)–10日(金)
「第1回ハイドロジェノミクス国際会議」を札幌にて開催いたします。
- 2020年3月27日(金)–28日(土)
「第5回全体会議・若手育成スクール」を九州大学にて開催いたします。

■ 編集・発行

新学術領域研究Hydrogenomics アウトリーチ担当
E-mail : outreach@hydrogenomics.jp

ハイドロジェノミクスWebsiteに各種情報を掲載しております。是非、Website を検索してみてください!

<https://www.hydrogenomics.jp>

