

Hydrogenomics

変幻自在な水素を「使いこなす」ためのサイエンス

Vol. 5
2020

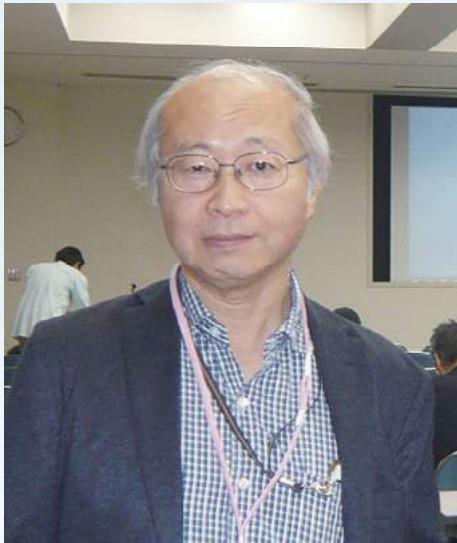
Hydrogenomics

News Letter



CONTENTS

- P1 A01 計画研究紹介 「高密度水素による超機能材料の合成」
- P3 A02 計画研究紹介 「局在水素によるヘテロ界面機能の強化」
- P5 各種会議
- P7 第1回ハイドロジェノミクス国際会議
- P9 若手サイエンティストのご紹介
- P10 研究ハイライトのご紹介
- P11 直近の論文投稿／共用装置のご紹介／今後の予定

研究
分担

計画研究 A01

「高密度水素による超機能材料の合成」

東京大学 教授 山室 修

～量子ビームによる高密度凝集課程の解説～

中性子線により、「見えない」水素の動きを捉える研究をされていらっしゃいますね。A01での研究内容を詳しく教えてください。

「見えない」水素とよく言われますが、これは水素原子は電子数が少なく、一般によく使われるX線では散乱強度が非常に小さいからです。その点、中性子は原子核で散乱されるため、水素に対しても十分な散乱強度をもちます。一つ気を付けておかねばならないのは、中性子散乱には回折現象を起こす干渉性散乱と起こさない非干渉性散乱があることです。水素の干渉性散乱断面積 σ_c は 1.76 b ($b: \text{barn}, 1\text{b} = 10^{-28} \text{ m}^2$) であり(重水素は $\sigma_c = 5.59 \text{ b}$)、これは他の原子の散乱断面積(例えば、 $\sigma_c(\text{C})=5.55 \text{ b}$, $\sigma_c(\text{O})=4.23 \text{ b}$, $\sigma_c(\text{Pd})=4.39 \text{ b}$, $\sigma_c(\text{U})=8.90 \text{ b}$ など)と同レベルです。したがって、金属水素化物などにおける水素原子の位置決定には中性子は特に有効です。さらに、H原子の非干渉性散乱断面積 σ_i が 80 b と他の原子より圧倒的に大きいことは、水素運動の研究に対して非常に有益です。これは、核スピン $1/2$ をもつ中性子が同じく核スピン

$1/2$ をもつ水素に散乱されるとき、複合核を形成する過程があり、そのスピン揺らぎが存在するためです。他の原子の σ_i は零か大きくて一桁なので、水素の局所振動や自己拡散を見る研究は、中性子の独壇場です。

以上のような中性子の特長を活かして、私たちのグループはこれまで様々な水素結合性固体、MOFなどの多孔性物質に包接された水やアンモニア、金属水素化物などの研究を行ってきました。その経験を活かして、A01では主に水素クラスター物質、特に折茂先生のグループにより合成された9配位の水素クラスター物質 $\text{Li}_n \text{MH}_{11}$ ($n=5, 6, M=\text{Nb}, \text{Mo}, \text{W}, \text{Ta}$) のダイナミクスの研究を行っています。これらは、高い水素濃度をもつとともに、高い Li イオン伝導が期待される点で、たいへん興味深い物質群です。私たちは、水素クラスター-MH₉の運動を調べるため、まず $\text{Li}_6 \text{NbH}_{11}$ の中性子準弾性散乱実験を行いました。様々な中性子散乱実験がありますが、準弾性散乱は原子の拡散や回転運動などを調べる手法です。準弾性散乱の原理は、よくドッpler効果に例えられます。観測する原子が止まっていると、それに衝突した中性子は衝突前と同じ速度で跳ね返される(弾性

散乱する)のですが、原子が動いていると、その速度の分だけ、観測者にとって中性子が速くなったり遅くなったりするようになります。実際には、散乱強度をエネルギー遷移に対してプロットすると、弾性散乱ピークがブロードになるように見えます。測定には、大強度陽子加速器施設(J-PARC)の物質・生命科学研究施設(MLF)に設置されたDNA(BL02)という分光器を用いました。なお、この研究を行っているのは、ハイドロジェノミクスの特任研究員である大政義典氏と助教の秋葉宙氏です。

非常に幸運なことに、すぐに NbH₉ クラスターの回転運動に関する準弾性散乱を発見しました。なぜ観測した運動が NbH₉ クラスターの回転と分かるかですが、それは準弾性スペクトルの運動量 Q (散乱角度と波長から得られる)に対する変化を、クラスターのサイズや対称性を考慮したモデルから計算したスペクトルの Q 变化と比較できるからです。このように、エネルギーと運動量の両方に対する情報である動的構造因子 $S(Q, E)$ を測定できるのが中性子散乱の最大のメリットです。ブロードになった弾性散乱ピークの幅から緩和時間が得られ、その温度変化をアレニウスプロットすることから、 3 kJ mol^{-1} と

いう驚くべき低い活性化エネルギーが得られました。このことはNbH_xクラスターの対称性が低いことに関係していると予想していますが、まだ詳細が明らかではないため、これから解明をしていきます。

A01でのもう一つの研究としては、プロトン性イオン液体(Protonic ionic liquid)のイオン運動とプロトン移動の関係を中性子準弾性散乱から調べています。この研究はロシアのボレスコフ触媒研究所のDaniil Kolokolov博士との共同研究です。これについては、実験の日程が決まっています(オーストラリア原子力研究所ANSTOの装置を使用します)、これから解明していくところです。

異分野との連携研究について教えてください。

他の計画研究との連携も活発に行っています。まずは、A03-2の森初果先生のグループとの無水有機プロトン伝導体の中性子準弾性散乱の研究です。この物質では、イミダゾリウムとジカルボン酸エステルからなる2次元水素結合ネットワーク内で、プロトンが高い伝導性を示します。水素の移動には、イミダゾリウムの回転運動が関与するグロータス機構を考えられています。グロータス機構とは、キャリア分子自身は並進運動をせずに、バケツリレーのようにプロトンを受け渡す伝導機構です。中性子準弾性散乱実験は、森研の特任助教の出倉駿氏と大学院生の砂入允哉氏と一緒に、J-PARCのDNA分光器で行いました。イミダゾリウムの回転かどうかはまだ分かりませんが、準弾性散乱の観測に成功しています。

もう一つの連携研究は、A05-2の福谷克之先生のグループと行っているパラジウム薄膜に水素を吸着させた系の中性子非弾性散乱の研究です。この研究は、

正味の重量がわずか0.1mgしかない水素原子の振動状態を見るという非常に難しい実験です。J-PARCの4SEASONS(BL01)という大強度非弾性散乱装置を用いたこともあって、実験は見事に成功し、水素の状態がバルクのパラジウム中と異なるだけではなく、それが温度変化することまで分かりました。なお実験は、福谷研の大学院生である小澤孝拓氏と元山室研助教で現在は日本原子力研究開発機構の副主任研究員である古府麻衣子氏と一緒に行いました。

研究の醍醐味は?

上で述べてきたように、私は若い頃から主に中性子や放射光の実験施設で研究をしています。J-PARCやSPring-8だけでなく、海外の施設も同じくらいの頻度で利用しています。このような大型実験施設の研究は大学の実験室の研究とは少し異なっています。まず、何千億円もの巨額のお金をつけ込んで作った施設ですし、運転経費もとんでもない高額です。よく中性子の実験はどれくらいのお金がかかっているの?と聞かれますが、加速器施設の場合、1日1台の装置に換算すると数百万円になります。お金よりも重要な観点は、このような実験施設での実験は、運転経費を確保する所長クラスの人たちから、加速器や原子炉を運転する技術者、実験課題採択や出張をマネージメントする事務系の人たち、実験の安全面を確保する人たち、現場で実験支援をする装置付の研究者や技術職員まで、非常に多くの人たちの労力により成り立っています。研究(特に実験)は一人では出来ないとよく言いますが、大型施設における実験はその最たるものです。このような状況ですから、実験の申請書は全力で書きますし、予備実験などで十分な準備をして本実験に臨みますし、実験中

は集中して限られた時間内で最高のデータが得られるようにベストを尽くします。このように書くと、大型施設の実験は本当に面倒くさいと感じる人も多いと思いますが、大型施設でしか得られない重要なデータはたくさんありますし(特に水素では)、実験が成功してよいデータが得られたときの喜びは、本当に言葉では表せないものがあります。それが、私にとっての研究の醍醐味です。

今後の目標を教えてください。

短期的な目標としては、前述のMH_xクラスター物質のダイナミクス研究を完結させ論文にすることです。MH_xクラスターには擬回転と呼ばれる特殊な回転が第一原理計算から予想されています。それを探すとともに、MH_xクラスターの回転とLiイオンの伝導との関係を明らかにしたいと考えています。もちろん、最近始めたCBクラスター系の研究や上記のプロトン性イオン液体の研究も完結させたいです。やや長期的な目標としては、2021年2月から再稼働する研究用原子炉JRR-3でハイドロジェノミクスに関する研究を行うことです。JRR-3は2011年の震災以来、おもに安全に関わる問題をクリアするために停止していましたが、我々の組織(東京大学物性研究所・中性子科学研究施設)はいつ動き出しても実験ができるよう、装置や試料環境機器の改良や整備を行ってきました。この原子炉で実験を再開することは、正に我々の悲願であったわけです。JRR-3はやや古い施設ですが、まだまだ世界の第一線の能力をもっていますし、中性子と相性がよい水素の研究なら、何の問題もなくハイクオリティのデータが得られると思います。このニュースレターの読者の皆様にもぜひ使っていただきたい施設です。興味のある方はぜひ私までご連絡下さい。

研究
分担

計画研究 A02 「局在水素による ヘテロ界面機能の強化」

名古屋大学 教授 宇佐美 徳隆

～界面機能の強化による 水素修飾太陽電池の創製～

水素修飾太陽電池について教えて ください。

太陽電池は、半導体が光を吸収することで生成される電子と正孔を外部に取り出すことで動作します。しかし、半導体の内部や電極との界面に構造の乱れた欠陥が存在すると、外部に取り出す前に消滅してしまうことがあります。つまり、光エネルギーから電気エネルギーへの変換効率が低下してしまいます。そこで水素の出番なのですが、水素には欠陥を不活性化する機能があることが知られています。例えば、標準的な太陽電池の量産プロセスでは、電極の抵抗を下げるための熱処理の間に、光反射を防止する膜の中に含まれている水素を欠陥まで拡散させることができます。また、結晶シリコンを光吸収層に用いた世界最高効率の太陽電池では、電気を取り出すための接合に水素を含む非晶質シリコン膜が使われています。

さらなる効率アップに向けては、エネルギー損失の要因となる非晶質シ

リコン膜での寄生吸収や、接合界面でのキャリア再結合を減らすことが求められています。私たちは、非晶質シリコン膜よりも透明な金属酸化膜を結晶シリコンとの接合に用い、さらに水素の持つ欠陥の不活性化機能を組み合わせることが有効だと考えています。透明性と導電性を両立し、かつ界面の欠陥を極力低減しなくてはならないという難しい課題なのですが、それを水素による界面機能強化により克服するのが私たちの目指す「水素修飾太陽電池」です。

水素が関わる界面の物性研究を されていますが、詳しくお話しいただけますか。

具体的に、水素修飾太陽電池の電子コンタクトへの応用を検討している酸化チタンという材料と結晶シリコンの界面を例にお話ししましょう。私たちは、酸化チタン薄膜の作製に、原料を一層だけ飽和吸着させる過程と酸化を繰り返すことで一層ずつ酸化物の薄膜を堆積する原子層堆積法という手法を用いています。原料には、チタンと水素が含まれているため、この方法では、水素を含む酸化チ

タン薄膜を高精度に膜厚を制御して形成することができます。

高効率太陽電池の実現に必要な界面物性の指標の一つに「キャリア寿命」があるのですが、酸化チタン薄膜と結晶シリコンの界面では、この指標の値が成膜前のシリコン表面の化学処理、成膜後の熱処理で数桁にもわたり大きく変化することを見出しました。この要因の解明に向け、A05-1の福谷先生のグループと連携し、共鳴核反応により深さ方向の水素分布を高精度に測定しました。またA02の秋山先生のグループと連携し、昇温脱離法により水素を含む結合の結合エネルギーの測定を行いました。その結果、キャリア寿命の長い高性能な試料では、界面の水素量が多く、結合エネルギーの大きい安定な結合が形成されていることがわかりました。この結果は、水素が界面機能強化に重要な役割を示すとのエビデンスといえます。さらに、界面近傍の微細構造や電子状態を調べることによって得られた知見を総合して、高性能界面をどのように形成すべきかについての指針を得ています。これまでに、低密度のシリコン酸化膜形

成、原子層堆積法による酸化チタン薄膜の作製、水素を含む雰囲気での熱処理から構成されるプロセスにより、高性能界面を実現しました。電気伝導性と界面の特性を総合的に示す指標では、世界トップレベルの性能を得ることに成功しています。最近では、水素プラズマを用いて界面に積極的に水素を導入することや、チタンの一部を別の元素で置き換えることなどでさらなる高性能化の可能性を探っています。A01の折茂先生のグループとの連携により、高圧水素の効果も調べてみたいと思っています。さらに、これらの材料・プロセスを実装した水素修飾太陽電池の作製を進める計画です。

異分野との連携研究を進めていらっしゃますが、手応えはいかがですか。

手応えはいいですね。私は2013年に東北大学から名古屋大学に異動したのですが、高校時代の同級生が情報学研究科にいて、着任してすぐに挨拶に伺った時に研究の話になりました。彼は、生体情報処理の専門家で、眼球運動や心拍変動などの生体信号から特徴抽出を行う研究をしていました。その時、材料科学の研究におけるさまざま計測データについても同様の手法が適用できると直観的に考えました。それから連携研究を始めまして、スペースモデリングや転移学習といった手法を利用した蛍光イメージからの結晶欠陥発生点の抽出、ニューラルネットワークを使った結晶方位分布や粒界物性の高精度予測などの開発に取り組んでいます。また、分子シミュレーションに機械学習を取り入れることで大規模な計算が出来るようになりつつあります。

す。ハイドロジェノミクスでもデータ科学応用の可能性について、多くの先生方と議論を重ねて連携を深めたいと思います。

研究室での研究の様子を教えてください。

研究室には各学年7～8名の学生が配属され大所帯になっています。シリコンをベースとする材料研究という緩やかな括りのもとでさまざまな研究を行っています。具体的には、水素の機能を利用した太陽電池関連材料の研究の他に、熱電材料、キャパシタ、量子コンピュータなどを研究対象としています。量子コンピュータ用に開発している同位体制御²⁸シリコンは核スピンを持たないため、結晶中に水素分子を導入すれば、母相の核スピンの影響を受けることなく水素分子の本質的な核スピン変換時間の測定が可能になると思います。こちらは、若手研究者の宮本さんが中心となりA02の長田先生との連携により実施することを計画しています。

研究は、週一回の研究室全員でのミーティング、スタッフミーティングの他、不定期にプロジェクト毎のミーティングを行いながら進めています。外国人のポスドクや留学生も多いので、資料は英語で作成するようにしています。学生には、国際会議発表、原著論文執筆、海外研究機関での共同研究などの機会に挑むように進めています。多くの学生が修士修了までに海外での国際会議発表と、筆頭著者での論文執筆を体験しています。これまでに、米国・UCLA、ドイツ・フランツホーファー研究所、ロシア・科学アカデミーなどに修士課程の学生

を数週間～数ヶ月派遣しており、成果は国際共著論文として纏めています。学生には、研究室での研究活動を通して、名古屋大学の教育目標でもある「勇気ある知識人」に成長し、グローバルに活躍してほしいと願っています。研究ばかりではなく、旅行、パーティ、スポーツ観戦などのイベントも多く、名古屋では珍しいのですが秋の芋煮会はOBも集まる恒例行事となっています。仙台風や山形風の芋煮に加えて、バウムクーヘンを作りすることもあります。みんな仲良く楽しい研究室だと思います。

私自身の目標ですが、大学教員としては、多くの優秀な人材を研究・教育活動を通して社会に送りだしたいと思っています。研究者としては、研究成果の社会還元を一つでも多く進めたいですね。ハイドロジェノミクスで取り組んでいる水素修飾太陽電池は是非成功させ、企業に技術移転できるとよいと思っています。また、異分野融合研究は新たな材料開発の方法論として体系化し、多様な材料に横展開可能な普遍的な学術領域まで育てたいと思っています。そのためにも、多様な専門分野の研究者と連携し、新しい分野の勉強も行って自分自身も成長したいと思っています。なかなか時間は取れないのですがPythonでコードを書いてデータ分析をすることもありますよ。

第4回全体会議



2019年11月22日(金)-23日(土) 山梨大学大村智記念学術館において、「第4回全体会議」を開催しました。公募研究9名の先生方、各計画研究から研究の進捗および成果の発表後、公募研究の先生19名全員によるポスター発表を行いました。ポスター発表は毎回、活気のあるセッションとなりますが、参加者同士の親交を深める場として、また新たな連携研究に繋がる情報交換の場として有意義な時間となりました。

第2回ハイドロジェノミクス研究会

2019年11月25日(月)-26日(火)東京大学本郷キャンパスにおいて「第2回ハイドロジェノミクス研究会」を開催しました。優秀な口頭発表を行った若手研究者に授与する「ハイドロジェノミクス奨励賞」は秋葉 宙さん(東京大学 物性研究所 山室研究室 助教)と岡 弘樹さん(早稲田大学 高分子化学研究室 LD3)が表彰されました。大変興味深いお話をいただきました、おめでとうございます!

秋葉 宙さん：左から3番目／講演題目：PdPtナノ粒子中の水素原子の構造と拡散ダイナミクス

岡 弘樹さん：左から4番目／講演題目：創蓄電デバイスの設計に向けた水素貯蔵高分子の高性能化



第13回物性科学領域横断研究会

2019年11月27日(水)-28日(木)東京大学本郷キャンパスにおいて、日本物理学会、日本表面真空学会の協賛のもと、物性科学に関連した8つの新学術領域研究(トポ物質科学、JPhysics、複合アニオン、材料離散幾何解析、量子液晶、機能コア科学、ハイパー物質、ハイドロジェノミクス)が合同で「第13回物性科学領域横断研究会」を開催しました。本年度も100名を超える研究者が参加し、領域間のシナジー効果を高めることができました。

詳細は以下のウェブサイトをご参考下さい。 <http://www.org.kobe-u.ac.jp/ryoikioudan/index.html>



Materials Research Meeting 2019 (MRM)

2019年12月11日(水)-13日(金)横浜シンポジアにて開催の「MRM2019」にて、折茂領域代表が代表オーガナイザーとしてシンポジウムに参画しました。本領域のシンポジウム「A-2 Hydrogen in Functional Materials」ではKeynoteにToyota Motor Engineering & Manufacturing North America, Inc.からRana Mohtadi博士をお迎えして「Enabling Energy Technologies Using Hydride Materials」をご講演いただきました。また、物質・材料研究機構(NIMS)から大橋直樹 機能性材料研究拠点長をお迎えして「Investigation on Defect Structures in Oxides with Hydrogen Impurity」をご講演いただきました。本領域からは口頭発表10名、ポスター発表15名の合計25名が発表をしました。ポスター発表では公募研究の先生方、学生の方の積極的な発表に多くの方が訪問されました。



PIMD ハンズオンチュートリアル

2020年1月16日(木)東京大学物性研究所にてPIMDハンズオンチュートリアルを開催しました。並列分子シミュレーションソフトウェアPIMDについての講習およびハンズオンチュートリアルを行い、参加者全員で知識を共有することが出来ました。※「PIMD」とは志賀基之博士(国立研究開発法人日本原子力研究開発機構・研究主幹)によって独自に開発された並列分子シミュレーションを対象とするオープンソース・ソフトウェアです。



第1回ハイドロジェノミクス国際会議

2020年1月5日(日)-10日(金)ホテルモントレエーデルホフ札幌において、「第1回ハイドロジェノミクス国際会議」を開催しました。12カ国から91名の参加があり、基調講演が4件、招待講演が19件、一般講演が13件、ポスター講演が45件の合計81件の研究発表がありました。



6日:Andreas ZÜTTEL 教授
(スイス、スイス連邦工科大学ローザンヌ校)
“200 YEARS AFTER INDUSTRIALISATION
THE TRANSITION TO RENEWABLE
ENERGY”



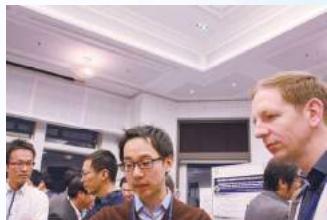
7日:Hans-Joachim FREUND 教授
(ドイツ、フリツ・ハーバー研究所)
“HYDROGEN ON AND IN CERIA AND
HYDROGENATION OF UNSATURATED
HYDROCARBONS”



8日:塚田 捷 名誉教授
(日本、東京大学)
“QUANTUM TRANSITION OF
HYDROGEN/ELECTRONS IN SOLID AND
SURFACES -Some theoretical aspects-”



9日:Timmy RAMIREZ-CUESTA 博士
(米国、オークリッジ国立研究所)
“VIOLATION OF THE SWITENDICK
CRITERION IN METAL HYDRIDES EVIDENCED
BY INELASTIC NEUTRON SCATTERING”



本国際会議初日(1/5(日))は17時からウェルカムセッションが行われ、参加者どうしが親睦を深める良い時間となりました。二日目(1/6(月))は開会の後、材料学分野を中心にAndreas ZÜTTEL教授の基調講演、招待講演を4件、一般講演を3件、夕食後にはポスターセッション(1日目)を行いました。三日目(1/7(火))は化学、計算学分野を中心にHans-Joachim FREUND教授の基調講演、招待講演を5件、一般講演を5件、夕食後には6日から引き続きポスターセッション(2日目)を行いました。四日目(1/8(水))は物理学分野を中心に塚田 捷 名誉教授の基調講演、招待講演を2件行い、午後は参加者の様々な意見を交換するために参加者交流の時間をとりました。五日目(1/9(木))はTimmy RAMIREZ-CUESTA博士の基調講演、招待講演を5件、一般講演を5件行い、夜はバンケットを開催しました。バンケットでは本国際会議で講演された中から最も優秀な講演者にHydrogen & Energy Awardを2名選定・表彰いたしました。また、ポスター発表45名の中からポスター最優秀賞を1名、ポスター優秀賞を6名選定・表彰いたしました。最終日(1/10(金))は新学術領域の若手育成担当による招待講演を3件行った後、閉会となりました。

本国際会議では、水素の製造・貯蔵・燃焼、さらに燃料電池、二次(蓄)電池、合成燃料などに関する幅広い分野の最新の研究発表がなされ、各分野をリードする研究者による極めて高水準の議論が活発に交わされました。

本国際会議を通じて、高密度凝集機能や高速移動機能などの個別の水素機能の高度化に関する研究交流と、複数の水素機能の相乗効果を誘起するための国際共同研究等の提案および次々世代のエネルギー変革等を目指した国際的視野での研究潮流の議論等が進みました。関連学術の発展ならびに国際交流に貢献する大変有意義な国際会議となりました。

第1回ハイドロジェノミクス国際会議 授賞式



Martin DORNHEIM 博士 (写真左)
Michel LATROCHE 博士 (写真右)



左から山本さん(代理 福谷先生)、岡さん、中川先生、木須先生
折茂先生、山室先生、近藤先生、北野先生(代理 一杉先生)

Science of Hydrogen & Energy Awards 2020 授賞式

Dr. Martin DORNHEIM (Helmholtz-Zentrum Geesthacht) と Dr. Michel LATROCHE (Centre national de la recherche scientifique) が選ばれ、オーガナイザーの一人である Andreas ZÜTTEL 教授より賞状および記念品が授与されました。

ハイドロジェノミクスポスター賞授賞式

会期中2日間にわたり45件のポスター発表が行われました。ポスター会場において、参加者全員が分野の垣根を越えて、活発な議論を行いました。基調講演者、招待講演者、ハイドロジェノミクス各計画研究代表者による審査の結果、最優秀賞1名と優秀賞6名が選ばれ、バンケットにて授賞式が執り行われました。受賞者の皆様、おめでとうございます。

ポスター最優秀賞

東京工業大学 元素戦略研究センター 北野 政明

この度は、ポスター最優秀賞に選んでいただき大変ありがとうございました。

受賞いただいた研究内容は、ヒドリド化合物(主に $\text{LaH}_{3-2x}\text{O}_x$)中の H^- イオンの動きやすさと、触媒活性点であるRuとの界面でのアンモニア合成における反応性との関係を明らかにするために、A01の飯村壮史先生と共同で行ったものです。飯村先生にも深く御礼申し上げます。今後、本研究をさらに発展させ、固体触媒中の H^- イオンの役割を明らかにしていくことで、 H^- イオンが関わる新たな学理を構築していきたいと思っています。



ポスター優秀賞：6名の皆さん

東京大学 物性研究所 中性子科学研究施設 山室 修

いやー、本当にびっくりしました。ぼくの知っている限りでは、一番年寄りのポスター賞受賞者だと思います。これまでポスター賞の審査はずいぶんやりましたが、もう自分でもらうことはないだろうと思っていたので、本当にうれしいです。このポスターで発表した内容は、ハイドロジェノミクス研究の最初の対象である水素クラスター物質 $\text{Li}_6\text{NbH}_{11}$ の中性子散乱実験に関するもので、試料を作成された折茂研の高木先生やQSTの齋藤先生、そして実際の測定をした山室研ポスドクの大政さんの努力による成果です。ぼくはそれを代表して発表しただけなので、ちょっと申し訳ない気もしています。今後も、ハイドロジェノミクス研究の発展に少しでも貢献できるように、研究室のメンバーと共同研究者の皆様とともに頑張りたいと思います。



筑波大学 数理物質系 物質工学域 近藤 剛弘

ポスター賞に選んでいただけて大変嬉しく思います。今回のポスター内容は共著者であります、東工大の細野先生、斎藤先生、藤本さん、農工大の山本先生、高知工科大の藤田先生、そして私の研究室の伊藤博士、後藤君、石引君との共同研究の成果となります。共著の先生方に深く感謝する次第です。

現在、この研究はハイドロジェノミクスメンバーの先生方との新たな共同研究を通して広がってきており、さらなる研究の発展が進んでいます。今回のポスター賞を励みに今後もハイドロジェノミクスに貢献できるように頑張っていきたいと思います！



東北大学 材料科学高等研究所 木須 一彰

このたびはポスター優秀賞にご選出いただきありがとうございます。私は東北大学の折茂研究室にて、錯体水素化物を用いた固体電解質や全固体電池の研究を行なっています。今回のポスター発表では、LiBH₄系錯体水素化物を固体電解質として用いた全固体リチウム硫黄電池の長期サイクル安定性向上に向けた電極微細構造の解析・評価を紹介させていただきました。ハイドロジェノミクス国際会議では、普段お会いすることのない広い領域の先生方が水素を共通点として一堂に会しており、ポスター発表の際には多くの参加者の方々から思いがけない様々なご指摘やご質問をいただくことができたため、大変勉強になると共にとても刺激を受けることができました。本受賞を励みにして、今後も次世代のエネルギーデバイスに向けた電池材料の研究開発に取り組んで参りたいと思います。



北海道大学 工学研究院附属エネルギー・マテリアル融合領域研究センター 中川 祐貴

はじめまして、北海道大学 工学研究院附属エネルギー・マテリアル融合領域研究センターの中川です。ポスター優秀賞を受賞させて頂きましたと同時に大変嬉しく思っております。今回、窒化ホウ素添加物による錯体水素化物のイオン伝導度の向上について発表させて頂きましたが、イオニクス分野に素人な自分にとって、大変有意義なご意見を頂くことができ、感謝しております。私は、これまで水素貯蔵材料を専門にしていましたが、最近はエネルギー材料の電子顕微鏡解析や水素化物材料のイオニクスにも注力しています。ハイドロジェノミクスの会議には今回初めて参加させて頂きましたが、幅広い研究分野の皆さまと交流させて頂き、刺激的な時間を過ごすことができました。今後も関連の会議などで交流させて頂けますと幸いです。どうぞよろしくお願ひ致します。



茨城大学院 量子線科学専攻 山本 隆文

この度の国際学会では、学生として「ポスター優秀賞」という名誉ある賞をいただきまして、ありがとうございます。ご審査いただきました選考委員の方々をはじめ、関係される諸先生に深く感謝いたします。今回のポスター賞は、このような大舞台でいただいた初めての賞だったので、大変うれしいです。これを励みに日々精進して、白色中性子ホログラフィーを用いた水素化物研究の発展に取り組み、水素貯蔵合金などといった材料の研究に、寄与していくことを思っております。今後、学会などでお会いすることができれば、ぜひ私の研究について議論していただけると幸いです。最後に、この場を借りて指導していただきました大山研司先生、様々な観点から助言やサポートをいただきました折茂慎一先生、佐藤豊人先生をはじめとする共同研究者の皆様にお礼申し上げます。



早稲田大学 先進理工学研究科 岡 弘樹

私は、早稲田大学 高分子化学研究室にて、新しい創蓄電デバイスの設計に向けた水素貯蔵高分子の高性能化に取り組んでおります。この度は、私の研究を評価いただき、Best Poster Awardを頂戴できましたこと、大変感激しております。いつもご指導いただいている小柳津先生、新学術領域研究ハイドロジェノミクスでお世話になっております先生方、今回の国際学会にご参加・ご支援いただきました方には、感謝してもしきれません。今後も若手サイエンティストのメンバーとして微力ではありますが、ハイドロジェノミクスに少しでも貢献すべく、気を引き締めております。今後ともご指導ご鞭撻のほど何卒よろしくお願い申し上げます。改めまして、この度は誠にありがとうございました。





東京工業大学 物質理工学院 清水 亮太

東京工業大学の清水亮太と申します。私は水素を含む無機材料の薄膜において、新しい物性・機能を探索する研究に取り組んでいます。これまで私は、主に酸化物を対象とした高品質な薄膜の合成や高分解能計測の研究を行ってきました。その経験を活かして研究を水素化物へと広げ、最近では酸素や窒素と組み合わせて生じる「水素ならでは」の機能にも着目しています。

他の元素にはない水素の魅力は、その変幻自在性にあると考えています。原子番号1に由来する「小ささ・軽さ」は、高い拡散能や高温超伝導のような特異な物性をもたらします。また、プロトン(H^+)・ヒドリド(H^-)に代表される「柔軟な荷電状態」はイオン伝導やエネルギー・バイス応用へと通じます。そのため、組成・結晶構造・界面などの物質デザインや、光や電界といった外場を用いることで、多彩な物性・機能を制御できる可能性を秘めています。

一方で、水素化物の薄膜研究はたやすいものではありません。最も困難な点は、水素が「どこに・どれだけ・どのような状態で」存在するか、を正確に把握しづらいことです。本新学術領域では、水素に関する高精度計測や理論計算に精通した研究者が多く在籍しており、その方々からの多くの力添え(共同研究)を受けつつ、日々研究を進めております。



日本原子力研究開発機構 先端基礎研究センター 山川 紘一郎

私は、東京大学生産技術研究所の福谷克之教授のご指導の下で博士号を取得後、学習院大学理学部物理学科にて7年間助教を務め、2019年4月から原研先端研のナノスケール構造機能材料科学研究グループに研究員として所属しています。研究対象は、「表面や固体内部といった凝縮系における分子ダイナミクス」であり、特に「核スピン異性体間の転換」、「分子クラスター」に興味を持って研究しています。実験では超高真空におけるその場分光測定を行っており、テラヘルツ・赤外吸収分光法、多光子共鳴イオン化法などの手法を用いています。上記2つの研究テーマは、いずれも水素がキーワードになっています。核スピン転換の測定対象は、水素、水、アンモニア、メタンといった、水素原子核(=陽子)を回転対称位置に有する分子であり、陽子の合成スピンによって区別される異性体間の転換の機構を、理論・実験の両面から調べています。分子クラスターの研究では、大気科学や星間化学で重要な役割を担う水クラスターに特に関心を持っており、この水クラスターの構造とダイナミクスを特徴づけるのは「水素結合」であることが知られています。本プロジェクトに関わる研究者の皆様との共同研究や意見交換を通じて、ハイドロジェノミクスを推進していきたいと考えています。どうぞよろしくお願いします。



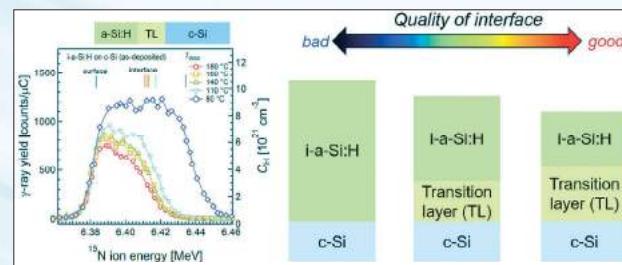
東京大学物性研究所 機能物性研究グループ 山本 良幸

初めまして、東京大学物性研究所の山本良幸と申します。杉野修教授のもとで特任研究員をしています。専門は第一原理計算です。最近は固体高分子形燃料電池(PEFC)の電極反応の研究を行なっています。特に白金代替電極触媒の候補である4族5族酸化物における酸素還元反応活性に関して、酸化物に特有の性質を研究しています。学生時代は常行真司教授の指導のもとでシリカ中の水素不純物に関する研究を行なっていました。当時は半導体中の H^0 に興味がありまして、 H^0 が H^+ や H^- へと遷移する際の最小エネルギー経路を計算する手法を開発し、各荷電状態の安定性を議論しました。PEFCの電極反応でも水素が現れてきますので、私の研究はずっと水素と関係していることになります。

ハイドロジェノミクスでは、半導体中水素不純物のキャリア捕獲確率の第一原理計算を行なっています。水素によるキャリア捕獲は多くの半導体物性に影響を与える一方で、非断熱効果、核量子効果、そしてフォノンの非調和性が効いてきますので第一原理計算の観点からは非常にチャレンジングです。ハイドロジェノミクスの会議では様々な分野での最先端の研究を知ることができて、いつも刺激を受けています。皆様とのコラボレーションを通じてプロジェクトに貢献していきたいと思っております。よろしくお願い致します。

研究ハイライトのご紹介-1

名古屋大学工学研究科物質プロセス工学専攻 助教 後藤 和泰



高品質な水素化アモルファスシリコンと結晶シリコンとのヘテロ接合界面の水素分布を解明

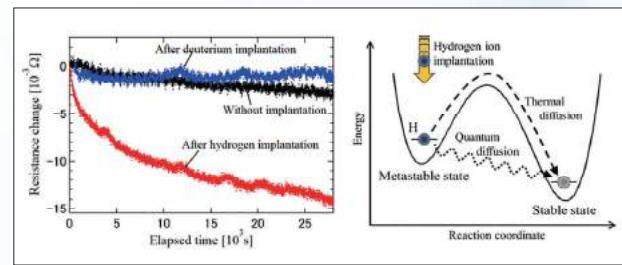
—結晶シリコンと異種材料とのヘテロ接合における水素分布の設計指針を提示—

水素化アモルファスシリコンと結晶シリコンの接合界面は、非常に高品質であることが知られています。その高品質界面は、結晶シリコン表面に存在する未結合手を水素が終端していることにより実現されているとされてきました。しかし、水素を検出することは非常に困難であったため、未だにその真偽は定かではありませんでした。そこで、我々が所有する水素化アモルファスシリコンと結晶シリコンの高品質界面を作製する製膜技術と、福谷グループ(A05-1福谷教授、Wilde准教授、小倉助教)の水素密度の精密解析技術とを連携させ、高品質界面の実現には水素化アモルファスシリコンの遷移層の存在が重要であることを明らかにしました。

結晶シリコンは2020年現在の我々の生活を支えている主要な材料の一つであり、結晶シリコン上への新規材料の実装は、新規材料の普及・拡大を促進する上では重要であると考えられます。本成果により、結晶シリコンと新規材料を接合する際の設計指針を示すことができました。さらに、我々は水素化アモルファスシリコンと結晶シリコンの高品質界面を有する基板を提供することが可能となりました。これら成果を他計画研究の先生方と協力することで革新的な材料・デバイス・プロセスの実現および普及・拡大に貢献したいと考えております。

研究ハイライトのご紹介-2

東京大学生産技術研究所 D2 小澤 孝拓



電気抵抗測定を用いてパラジウム中における水素原子の量子拡散の観測に成功

水素の効率的な貯蔵や純化は、水素エネルギーの普及に向けて更なる改良が必要とされています。水素の拡散プロセスは鍵となる重要な過程であり、その基礎的理解は不可欠です。理論的には高温で熱的に、低温では量子的に拡散すると考えられていますが、水素原子の直接観測は容易でなく、特に低温でトンネル拡散することを詳細に示した研究はありません。そこで我々は、電子の状態密度や移動度を反映する電気伝導に着目しました。電気抵抗は水素分布や吸蔵サイトの不可逆変化に敏感であり、水素拡散を検出するプローブとして非常に優れています。本研究では、試料作製を一杉研究室(A02:一杉教授、清水助教、笠原氏)にご協力頂き、低温下で水素イオンを注入することで作製した準安定なパラジウム水素化物が、水素の拡散によって安定状態に緩和する様子を抵抗測定によって観測することに成功しました。さらに軽水素と重水素の同位体効果からそれらが低温で量子拡散であることを明らかにしました。

本研究は水素の量子拡散を示しただけでなく、水素化物の準安定状態の存在を示唆しています。準安定水素化物は、高温超伝導や触媒反応など新奇な物性が期待されており、現在、準安定状態の解明のために中性子グループ(A01:山室教授、古府氏A05-1:大友教授、池田准教授)とも共同で実験を行っています。ハイドロジェノミクスの連携により、水素化物の状態制御による新たな物性の開拓・解明を目指しています。

直近の論文投稿

"Room temperature operation of all-solid-state battery using a *closو-type complex hydride solid electrolyte* and a LiCoO₂ cathode by interfacial modification"

Sangryun Kim, Kentaro Harada, Naoki Toyama, Hiroyuki Oguchi, Kazuaki Kisu, and Shin-ichi Orimo
Journal of Energy Chemistry, Volume 43, April 2020, Pages 47-51 DOI:10.1016/j.jecchem.2019.08.007

"Effect of forming gas annealing on hydrogen content and surface morphology of titanium oxide coated crystalline silicon heterocontacts"

Yuta Nakagawa, Kazuhiro Gotoh, Markus Wilde, Shohei Ogura, Yasuyoshi Kurokawa, Katsuyuki Fukutani, and Noritaka Usami
Journal of Vacuum Science & Technology A, 38, 022415(1-6), 2020, DOI:10.1116/1.5134719

"Geometrical Frustration of B-H Bonds in Layered Hydrogen Borides Accessible by Soft Chemistry"

Satoshi Tominaka, Ryota Ishibiki, Asahi Fujino, Kohsaku Kawakami, Koji Ohara, Takuwa Masuda, Iwao Matsuda, Hideo Hosono, and Takahiro Kondo
Chem, 6, 406-418, 2020, DOI:10.1016/j.chempr.2019.11.006

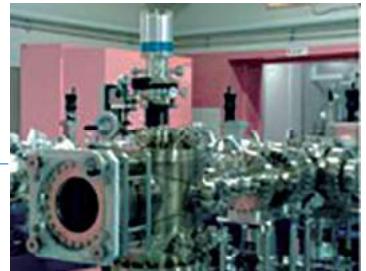
"A computational examination of the electric-field-induced proton transfer along the interface hydrogen bond between proton donating and accepting self-assembled monolayers"

Yusuke Kanematsu, Hiroyuki S. Kato, Shinya Yoshimoto, Akira Ueda, Susumu Yamamoto, Hatsumi Mori, Jun Yoshinobu, Iwao Matsuda, and Masanori Tachikawa
Chemical Physics Letters, 741, 137091(1-4), 2020, DOI:10.1016/j.cplett.2020.137091

共用装置のご紹介

水素の核反応計測装置 Nuclear Reaction Analysis (NRA)

- 目的:水素濃度深さ分布測定
- 仕様:超高真空中または高真空中。その場水素曝露、水素イオン打ち込み可能。温度可変(30-1000K)。
熱脱離分光、抵抗測定の同時測定可能。
- 応用例:水素化物薄膜の水素分布と定量、PV用薄膜の界面水素定量、酸化物デバイスの水素化過程
その場観測、水素拡散の観測などに利用されています。
- 連絡先:A05-1 福谷



今後の予定

- 2020年8月20日(木)-21日(金) 「第3回ハイドロジェノミクス研究会」をJ-PARCにて開催いたします。
- 2020年8月頃 「第6回若手育成スクール」を開催いたします。(詳細が決まり次第、WEBに掲載予定)
- 2020年11月27日(金)-28日(土) 「第6回全体会議」を東京大学物性研究所にて開催いたします。

[東北大学 折茂研究室 テクニカル・マネジメントサポート

TEL : 022-215-2093

mail : secretary@hydrogenomics.jp

[東京工業大学 一杉研究室 マネジメント・アウトリーチ

TEL : 03-5734-2636

mail : outreach@hydrogenomics.jp

