



変幻自在な水素を「使いこなす」ためのサイエンス

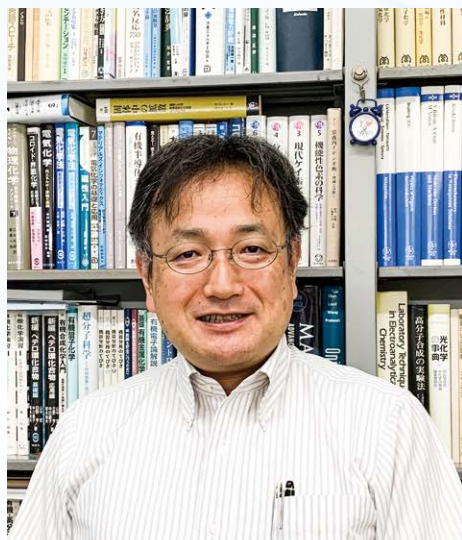
Hydrogenomics

News Letter



CONTENTS

- P1 A03-1 計画研究紹介
- P3 A04 計画研究紹介
- P5 A04 計画研究紹介
- P7 A05-1 計画研究紹介
- P9 A05-2 計画研究紹介
- P11 若手サイエンティスト紹介
- P12 研究ハイライト
- P13 第4回ハイドロジェノミクス研究会 / 第8回若手育成スクール / 第62回高圧討論会シンポジウム
- P14 日本MRS水素科学技術連携研究会 設立
- P15 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」

早稲田大学 教授 小柳津 研一

～創蓄電デバイスの設計に向けた
水素貯蔵性高分子材料の高性能化～

**全高分子形、充電可能な燃料電池
=リチャージャブル燃料電池を開発さ
れましたね。リチャージャブル燃料電
池について詳しく教えてください。**

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」の研究代表者である宮武健治教授(山梨大学)との共同研究により、全高分子形リチャージャブル燃料電池を開発しました。私の研究室では、水素を可逆的に貯蔵できる固体の高分子材料を見出しており、水素キャリア高分子として展開しています。この高分子を宮武研究室に提供し、充電可能な燃料電池の部材として実証していただきました。水素キャリア高分子を燃料電池の負極に組み込むと、外部から水素を供給しなくても高分子から発生した水素によって発電し、一方で、逆反応により生じた水素を高分子の中に貯めることができるので、燃料電池の充電が可能になります。私の研究室は、このような目的に合致した性能を示す水素キャリア高分子を選んで宮武先生にお届けしただけで、あとは全て宮武先生のところで

電池を構成され、論文(*Nature*姉妹誌 *Commun. Chem.* 2020)発表の時点で数十回以上におよぶ充放電サイクル特性が達成されました。この論文のタイトルにもある通り、水素キャリア高分子と共に、宮武先生が開発されたスルホン酸置換ポリフェニレン系高分子を、ガス透過性の低い電解質膜として用いたことが大きなポイントです。

ところで、電池は正、負極と電解質層から構成され、その仕組みは紙上で簡単に書き表すことができます。しかし、実際に電池を組んで部材性能を期待通りに引き出すのは容易ではなく、様々な工夫と諸因子の制御が必要です。私の研究室でも別の研究でラジカル電池をはじめ多様な有機二次電池を扱っているのですが、電池特性を実際に引き出すのが如何に大変かを身をもって体験しています。今回のリチャージャブル燃料電池の実現は、水素ガスを扱うデバイスである燃料電池に関してトップレベルのノウハウと知見を有する宮武研究室だからこそ可能となった成果であると思います。宮武先生から充放電サイクル特性のデータを見せてもらったとき、我々の水素キャリア高分子が本当に(!)水素の可逆的貯蔵を担っている

ことを実感しました。もちろん、材料レベルで動作していることはこれまで様々な観点から明確にしてきましたが、実デバイスのレベルで初めて実証できたことはインパクトがより大きいと考えています。

このような共同成果のさらなる展開も期待して、宮武研究室の博士院生であるGuo Linさんがこの10月から3ヶ月間インターンシップのため私の研究室に滞在し(写真)、学振特別研究員(DC1)の海和雄亮さん(ハイドロジェノミクス若手研究者)を中心とした水素キャリア高分子の研究グループに加わって、様々な高分子合成実験を行っています。



写真:グループセミナー風景
(左奥がGuoさん、その手前が海和さん)

より一層、高速かつ高密度に水素を貯蔵できる高密度水素貯蔵高分子の開発を推進されているんですね。

水素キャリア高分子は有機高分子材料であり、水素を化学結合によって高分子に固定します。したがって、水素の貯蔵密度やレート特性は、高分子の化学構造により決まります。有機材料の化学構造には無限の多様性があるので、今後さらなる高速化や高密度化に向けて大きな可能性があると考えています。例えば、固体の高分子全体が水素貯蔵の可逆性を示す条件において、質量水素密度が6wt%に迫るものが最近新しく得られました。高分子の密度(1g/cm³程度)は他の水素キャリア材料と比較して小さいので、その分、単位体積あたりの水素貯蔵量は低くとどまります。しかし、室温下1気圧の水素ガスによって迅速に水素化し、100℃程度の穏和な加温で水素発生するといった特徴に注目すると、安全で分解・劣化なく長期保存でき、特殊容器も不要な高分子(プラスチック)による貯蔵方法として、水素の大量備蓄用途に向いているのではと期待しています。

一方、パワー密度を高めるためには、水素キャリア高分子からの水素発生速度(レート特性)をさらに向上させることも必要です。水素化・水素発生反応が高分子の固体の中をどのように伝播しているのか、計画研究A03-1の中で福井賢一教授(大阪大学)と共同研究を行なっています。また、反応速度に関与する触媒については、計画研究A04の藤田健一教授(京都大学)とイリジウム錯体触媒に関する共同研究を進めています。水素発生の反応速度定数や活性化エネルギーをパラメータに用いて、レート特性を化学構造と相関させながら定量的に議論できるように

なりつつあります。このような基礎検討の先に、高速かつ高密度の水素貯蔵を担う夢の水素キャリア高分子が実現することを期待しています。

今後、高性能化することにより、多岐にわたる社会実装化が期待できますね。具体的な活用についてお話いただけますか。

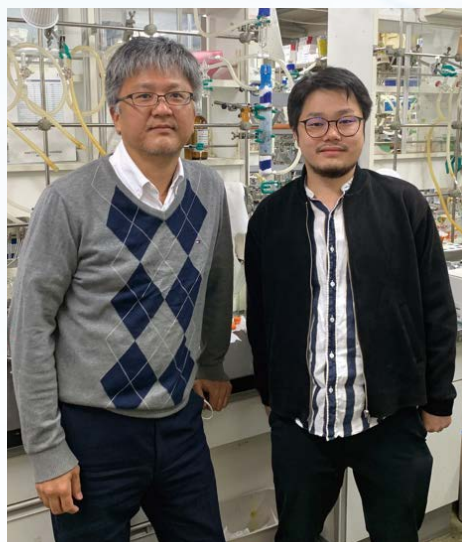
有機高分子材料としての水素キャリア高分子は、これまでにない用途での社会実装化が期待できます。安全で長期保存に適した性質は、水素の備蓄用途に向いていると考えられます。このような性質は、水素化された状態と水素発生後の状態が共に高い化学安定度(双安定性)を有するといった、水素キャリア高分子ならではの特徴に基づいています。

一方、水素を貯める際には水素ガスに抛らず、水中での電解によって水素化することも可能です。これは、最初に着想した水素キャリア高分子が有機二次電池の負極材料だったことにより、負極活物質に用いる電気的中性の(電荷を持たない)レドックス高分子は、電荷蓄積した状態のポリアニオンになると塩基性が増加するため、容易にプロトン付加が起こり、その結果としてレドックス反応の可逆性を失います。つまり、レドックス高分子を活物質に用いて可逆的に電荷を貯めるには、水などのプロトン源を電解液から厳密に排除する必要があります。しかし、有機活物質による電荷貯蔵が、電子交換反応によって活物質全体に伝播するのと同じ仕組みで、電子授受とプロトン付加が高分子全体に伝播すれば、それは水素を貯めたことになると気づきました。このアイデアを起点としている水素キャリア高分子は、水素化する前の

状態ではいずれもレドックス活性を有するため、水中での電解水素化が可能です。触媒を用いた水素発生を組み合わせると、反応全体としては、水素キャリア高分子を介して水電解により水素を取り出していることになります。従来の水電解と異なり、水素は高分子に直接固定されるため、隔膜不要の簡便な一室セルを利用可能で、水素と酸素の分離も不要です。投入電力に対するエネルギー変換効率は、水素化電位により制御できるので、再エネ電力と組み合わせることで、将来のグリーン水素製造法として有用であると期待しています。

最後に、小柳津先生の中長期的目標、夢を教えてくださいませんか。

水素エネルギーの今後益々の利用拡大に向けて、水素キャリアは重要な鍵を握る材料の一群に位置付けられます。水素キャリア高分子は、これまでの材料にない際立った特徴を有する一方で、もちろん万能というわけではなく弱点もあります。これを新しい個性を持ったメンバーとして、水素キャリア材料の仲間に加えてもらうことをまずは目標にしています。このようなモノづくり研究を通して、水素を使いやすくする物質・材料を合成化学の立場で創り出すことにより、ハイドロジェノミクスが目指す「水素を使いこなすためのサイエンス」に少しでも貢献できればと考えています。



計画研究 A04 「高活性水素の精密制御による 新規反応プロセスの創出」

中央大学理工学部 教授 張 浩徹

中央大学理工学部 助教 中田 明伸

～錯体化学・光応答型触媒による
化学エネルギー変換システムの創出～

光を活用した新規反応プロセスの
開発に着手された経緯を教えてください。

我々の専門分野は錯体化学なのですが、錯体化学の王道と言えやはり金属原子が持つスピン、電荷、そして電子が発現する様々な機能(磁性、伝導、触媒能等)を見いだす研究です。遡ると私(張)が大学院生時代(1990年代)においても世界の錯体化学の王道は金属中心の研究でした。しかし、当時の指導教員であった北川進現京都大学特別教授がUniversity of ColoradoのC. G. Pierpont先生を招聘された事が全ての始まりでした。Pierpont先生は金属原子を取り囲む配位子が示すレドックス(酸化還元)にいち早く着目され、合成化学的及び分光化学的手法を用いた先駆的な研究を展開されていました。それまでは教科書的には配位子はあくまで金属原子を取り囲むだけの脇役的な役割を担っているに過ぎないのが常識でしたが、Pierpont先生らの研究により配位子が錯体の物性を支配する可能性を示されました。これに共感し、学生時代は配位子が作り出す混合原子価状態やその磁性や伝導性に関する研究を行い学位を取得

しました。その後、レドックス活性な配位子を用いたレドックス活性液晶を提案し、JSTさきがけ研究に採択していただいたことを皮切りにレドックス活性配位子を用いた集積型錯体集合体の機能化学に関する研究を展開していました。2008年より北海道大学に異動した際、ある先生から「水を分解してください」とプロジェクト課題を頂きました。どうしたものかと同僚と頭を悩ませた結果、世界中で水分解触媒の研究が展開されている中、後追いでものまねをしてもしょうがない、プロジェクト期限内に水を分解できなくともベーシックサイエンスが残る研究をしようということでレドックス活性配位子を用いて一から水分解触媒の設計を始めました。結果的には水分解触媒の創成には至りませんでしたが、実はこの過程に当時ポスドクであった松本剛現東工大特任准教授がo-phenylenediamine(opda)とFe(II)が混合すると生成する $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{opda})_3]^{2+}$ 溶液に紫外線を照射すると水素分子が発生することを見つけてくれました(図1)。この反応は添加物無しで室温で進行すると共に電子・プロトン犠牲試薬であるヒドロキノン添加により触媒的に進むことがわかりました。J. Am. Chem. Soc.誌にダメ元で投稿したところ3人のレフリーから修正無しのコメントを貰えたと共に、同誌の表

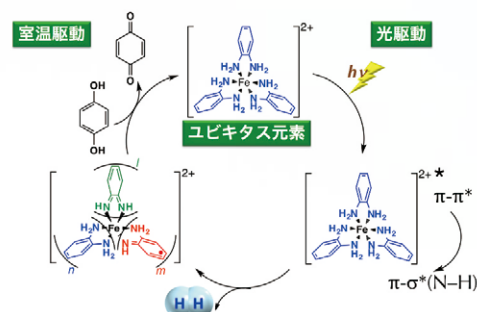


図1. $[\text{Fe}(\text{opda})_3]^{2+}$ が示す光水素発生

紙に採択されSpotlightsでも紹介をうけるという予想外(当然?)の評価を受けました(J. Am. Chem. Soc. 2013, 135, 8646)。ただ、当時水素の光発生機構については明確な証拠は無く、何が実際に起きているか興味を抱くようになりました。

光を活用した水素発生機構－励起状態水素脱離について詳しく教えてください。

現在の所属先である中央大学へ異動後まず進めたのは、発生した水素分子(2電子+2プロトン)の由来がopdaであるなら酸化・脱プロトン化した配位子が生成するはずだという仮定のもと、化学的に $[\text{Fe}^{\text{II}}(\text{opda})_3]^{2+}$ を酸化・脱プロトン化してみました。すると面白いことに3つあるopdaから段階的に2電子+2プロトンが脱離した3つの新たな化学種を単離することに成功しました(図2)。これによりこの錯体は原理的に6電子+6プロトン=3水素分子を貯蔵し発生しうることが示唆されまし

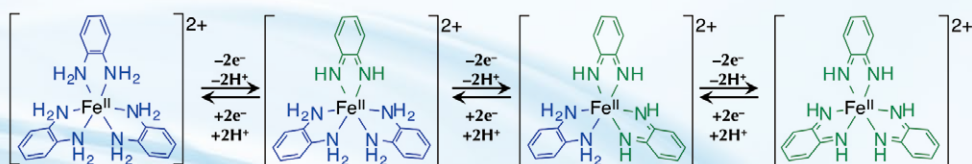


図2. $[\text{Fe}(\text{opda})_3]^{2+}$ が配位子上で示す逐次的な2電子・2プロトン移動プロセス

た。しかし、これをもってしても、光照射により引き起こされる初期過程については答を得るに至っていませんでした。

色々文献を調べている過程にDNA等の生体分子の光応答性に関する分野においてフェノールやアニリン、そしてopdaへの気相中における光照射により水素原子が発生することを知りました。しかし、我々の系は常温、溶液中であり果たして同様の水素原子発生が生じているか、また生じているならどの様にそれを証明するか試行錯誤に時間を費やしました。最終的には、溶液中に*t*-BuSHを共存させ光照射を行うと*t*-BuS-SBu-*t*が生成することを突き止め、系中に水素原子が発生していることを証明することができました。この光照射により引き起こされる水素原子が脱離する過程＝励起状態水素原子脱離(Excited-state hydrogen detachment (ESHD))が現在ハイドロジェノミクスプロジェクトにおいて我々が進めている反応開発の礎になります。ESHDは多様な有機分子(芳香族アミン、アルコール、チオール等)で引き起こすことが可能であることが確認されています。これらの芳香族有機分子を π - π^* 光励起状態へと誘起すると、失活過程と平行して円錐交差により π - σ^* 励起状態への熱的変換が進行する結果、例えばアニリンの場合ですとN-H結合が均等開裂し反応性の高い水素ラジカルが発生します(図3)。この反応をトリガーとし水素分子が発

生すると考えられます。興味深いことに類似錯体は無水MeOH中に溶解させ光照射すると同様にESHDが進行すると共に、MeOHから脱水素反応が進行しHCHOと水素分子を触媒的に生成します(Nat. Commun. 2016, 7, 12333)。また、フェノール誘導体を用いた場合は光オリゴマー化が、ベンゼンチオール誘導体を用いた場合は光ジスルフィド化が進むことから基質に依存し多様な反応が進行することを見いだすことができました(J. Org. Chem. 2021, 86, 959)。極めつけは、同様の反応をCO₂共存下で行ったところ配位子であるopda内のC-H(sp²)結合が添加物無しで常温で活性化され2,3-ジアミノ安息香酸を与えました(Sci. Rep. 2018, 8, 14623)。この反応は本領域発足後に抗炎症剤として知られるメサラジン(5-アミノサリチル酸)の合成にも応用可能な段階にまで展開することができています。

大変素晴らしい開発を進めていますね。今後、どのように活用および応用利用されていくのかお聞かせください。

我々が開発中のESHDをトリガーとした反応プロセスの特徴は、1) 常温常圧で進行すること、2) 溶媒以外の添加物無しで進行すること、3) 多様な芳香族化合物に適用できること等が挙げられます。現在基礎研究及び工業プロセスで用いられている反応の多くが高温高压下において活性化学種や貴金属触媒を必要とする反応であることを鑑みると、更なる研究により低エネルギーで進行するESHD特有の有用反応(化成品原料や医薬品原料等)を見いだせると期待しています。この研究のきっかけとなった光水素発生反応に関し

ては従来の熱源を必要とする有機ハイドライドとは異なり熱源を必要としない、光で駆動する水素・発生材料の開発を目指したいです。そのためにも従来の溶液系から固体材料化するための研究を現在展開中です。これにより光で水素の出し入れが可能な材料や光電池等への応用が期待できます。またCO₂の有効利用の観点からは究極的には大気中CO₂濃度(400ppm)下におけるCO₂の固定化や還元反応の達成を目指したいです(未発表ですが良い傾向が見え始めています)。そのためにも、実験研究は勿論ですが、量子化学計算を活用した反応機構の詳細な解明と反応設計が鍵の一つと考えていますので、本領域でも更なる共同研究を展開していきたいと考えています。

研究室での研究の様子、メンバーについて教えていただけますか。

国立大学とは異なり大学院進学率は50%程の本学ですが、水素科学やエネルギー問題に資する化学を研究してみたいと当研究室を希望してくれる学生がコンスタントに来てくれています。また博士後期課程の学生も在籍しており、ハイドロジェノミクス領域の後押しでオリジナリティーの高い研究を展開していこうと頑張ってくれています。スタッフは私と中田助教がおり、中田助教は学生といつも密に議論をしてくれ実験をサポートしてくれています。中田助教は半導体や錯体を用いた水分解反応やCO₂固定化反応を専門とすることから良い相乗効果を生み出せていると考えています。また折茂先生は勿論ですが、A04内の先生方からはプロジェクトの立ち上げ時期から度重なる議論の場で有益なアドバイスやサポートをしてくださり大変感謝しています。プロジェクトも後半戦に入りましたが、プロトン、ヒドリドに続く第三の活性水素種である「水素原子」にこだわり独創的な反応を見つけていきたいと考えています。

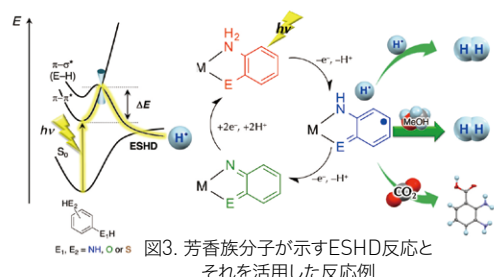


図3. 芳香族分子が示すESHD反応とそれを活用した反応例



計画研究 A04 「高活性水素の精密制御による 新規反応プロセスの創出」

京都大学大学院人間・環境学研究科 教授 藤田 健一

～遷移金属ヒドリド錯体を鍵化学種とする新規反応の開発とその応用～

イリジウム錯体触媒による脱水素化や水素化反応の研究をされていますね。詳しく教えてください。

私がイリジウム錯体の機能に注目する研究に取り組みはじめたのは、約25年前になります。既にその頃には、イリジウムは有機分子中に含まれる水素をヒドリド(H^-)の形式で引き抜く能力に長けていることが知られていました。ところが、多くの研究者がイリジウム錯体に関する基礎的な研究として、ヒドリド錯体を扱っていたものの、触媒反応に発展させている例は、当時はあまり知られていなかったのです。私は、イリジウム錯体の上記の能力を利用した触媒反応を開発したいと考えました。これが、イリジウム錯体触媒による脱水素化や水素化反応の研究に取り組むようになったきっかけです。実際に研究に取りかかってみると、有機分子から水素を引き抜くだけでなく、水素の引き抜きで生じたイリジウムヒドリド錯体から、別の有機分子へと水素をわたす性能も高いことがわかってきました。すなわち、イリジウムは「水素の運び屋」としてとても優秀だったのです。

研究を進めるうちに、イリジウムに結合

したヒドリド(H^-)に対して、プロトン(H^+)を作用させたら、興味深い触媒反応を実現できるのではないかと考えるようになりました。つまり、ヒドリドとプロトンの反応ですから、水素ガスが発生するのではないかと思ったのです。着想はシンプルでしたが、実際に錯体分子を設計・合成するとなると、いろいろな困難にみまわれました。それでも、一緒に研究を進めていた大学院生たちとアイデアを出し合うなかで、プロトンを提供する配位子をイリジウムの周辺に配置しておくことが重要だと考えようになりました。試行錯誤の後、最適の配位子が α -ヒドロキシピリジンだとわかり、有機分子の脱水素化触媒系の基礎が固まりました(図1)。簡単に説明しますと、 α -ヒドロキシピリジン配位子中のOH基の水素はプロトン性ですので、イリジウムに直接結合したヒドリドと作用して水素ガスを放出します。さらに重要なのは次の過程で、水素を失ったイリジウム種(α -ピリドナート形と表記)は有機基質を活性化し、イリジウムがヒドリドを、配位子がプロトンを受け取ります。この二つの素過程を何度も繰り返すため、有機分子の脱水素化が触媒的に進行します。イリジウムだけが機能するのではなく、配位子もその構造を変えながら大切な役割を果た

しますので、金属と配位子の協働効果に基づく触媒反応といえます。なお、有機分子の脱水素化反応は多くの場合、熱力学的には不利ですが、水素ガスを放出することによってエントロピーの点で有利となるため、開放系では効率的に進む反応となります。この考えを活用して、アルコールからのカルボニル化合物合成、メタノール水溶液を原料とする水素製造、ジオール水溶液からのジカルボン酸合成など、一般に高難度物質変換とされる触媒系の開発を進め、成果をあげることができました。

面白いのは、図1に示した触媒過程を逆向きに回転させることもできる点です。すなわち、同じイリジウム触媒を使用し、水素ガスが拡散される条件下なら脱水素化を、水素雰囲気や密閉してあれば水素化を、それぞれ実現することができます。これを活用した有機ハイドライド水素貯蔵法の研究なども進めてきました。有機ハイドライド水素貯蔵といえば、メチルシクロヘキ

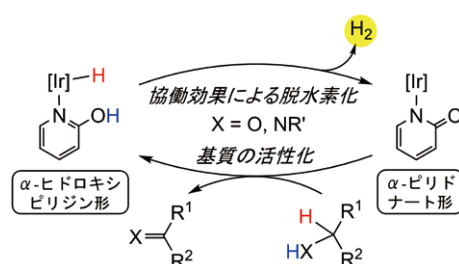


図1

サンとトルエンとの間の可逆的変換によるものが有名ですが、私たちの研究では、含窒素複素環式化合物を有機ハイドライドとして利用する研究に取り組み、脱水素化反応を比較的低温条件下で実現する反応の開発にも成功しています。

このように、金属と配位子の協働効果に基づき、ヒドリドとプロトンとの間の作用を活用する有機分子の脱水素化や水素化を開発してきました。もっと高性能な配位子や、優れた性能を示す金属、さらには協働効果における配位子と金属の相性など、今後も研究を進めて解明しなければならないことがたくさんあります。

イリジウム錯体を活用した水素可視化法について、開発された経緯をお聞かせください。

前述のとおり、私たちが従来研究を進めてきたイリジウム錯体は、ヒドリドを有する構造とヒドリドを失った構造との間で可逆的に変換されます。この構造変換にともなって、色が大きく変化します。色が変化することは、いまから5年以上前にはわかっていました。しかし、金属錯体の構造が変わることによって色が変化するのは珍しいことではありませんので、私はそのことをほとんど気に留めていなかったのです。

その後、ハイドロジェノミクスのメンバーに加えていただき、全体会議での発表のときに、水素の有無によって可逆的に変化するイリジウム錯体の色に関して、写真付きで発表・説明する機会がありました。発表後、計画研究A02の秋山英二先生から、「水素ガスと反応して色が変わる錯体なら、通常は目に見えない水素ガスを可視化していることになるので利用できる場面が多そうだ」というコメントをいただきました。そのときまで、イリジウム錯体の色の変化について、そのような観点でとらえていませんでしたので、かなり刺激的な出来

事でした。ラボに戻ったら早速、錯体の色の変化に目を向けた予備実験を行い、秋山先生とのディスカッションが始まりました。基礎的な情報交換のあと、秋山先生の研究室にて実験が進められ、味戸沙耶先生のご尽力もあって、純鉄を透過する水素の可視化法についての学術論文として公表されるに至っています。振り返ってみると、もともとの研究領域が大きく異なる秋山先生と私との間で初めて意見交換してから、投稿論文にまとめるまでの期間は1年足らずです。金属材料や腐食科学を専門とする研究者と、錯体化学や有機合成化学を基礎とする研究者が出会い、かなりのスピードで分野を越えた共同研究へと発展させることができたのは、ハイドロジェノミクスという異分野研究の有機的連携が上手く機能した好例だと思います。

多くの連携研究を進められています。が、手応えはいかがですか。

先にも述べましたとおり、A02の秋山英二先生のグループとの共同研究は順調に進み、その後も共同研究を続けさせていただいています。また、計画研究A03の小柳津研一先生のところで合成された水素貯蔵高分子材料を用い、私たちのところで開発したイリジウム触媒を使って、可逆的な脱水素化と水素化反応も実現しています。この共同研究も、小柳津先生と岡弘樹さんのご尽力により、取り扱いやすい水素貯蔵高分子として発展しています。学術雑誌において公表もされました。さらに、A01の折茂慎一先生のグループとの共同研究も進行中です。

A04内での共同研究も積極的に進めています。これまでに開発してきたイリジウム錯体の基礎的な性質に関する理解を一層深めるため、吉信淳先生から多くのご教示をいただき、実験をともなう測定を通じた連携を進めています。張浩徹先生のグルー

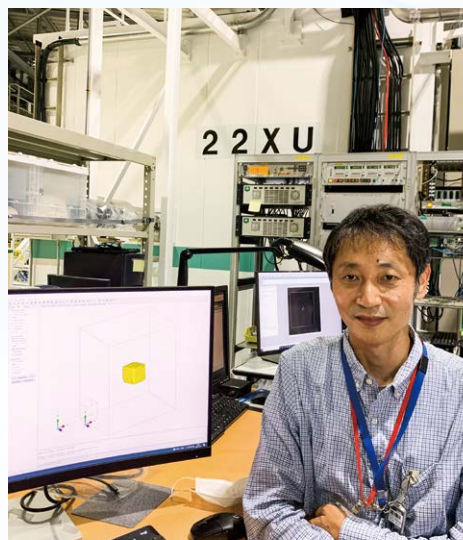
プの研究とは、使用している配位子に類似性があるので、情報交換を進めています。また、島隆則先生とは、金属ヒドリド錯体を取り扱うという共通点がありますので、引き続き連携していく予定です。そして、山内美穂先生とは、有機合成の観点で対象化合物に共通点がありますので、今後の情報交換を楽しみにしているところです。このほか、B02に最近参画された大木靖弘先生とは、研究内容もラボの距離も近いので、共同研究を始めたところです。いずれの連携・共同研究も刺激的な内容で、それぞれに相乗効果を生み出すことは間違いなく、今後の発展を楽しみにしています。

最後に研究室についてご紹介いただけますか。

現在の研究室メンバーは、私と新林卓也助教、博士後期課程院生3名、修士課程院生7名、学部生2名、研究生1名の合計15名です。錯体化学、有機合成化学、環境化学、エネルギー化学など、それぞれの研究テーマは多岐に渡っていますが、お互いが協力しながら、とても良い雰囲気です。研究室を盛り立ててくれています。月曜午前の研究室全員でのミーティングで一週間が始まりますが、その後はそれぞれの自主性に任せています。

当研究室が所属する人間・環境学研究科は、文理融合の大学院で、近隣の研究室は、言語学、文明学、社会学、法学、心理学などで、化学や工学とは離れた分野の研究室に囲まれています。そのような環境で研究できることを楽しみながら、切磋琢磨しています。





計画研究 A05-1 「水素の先端計測による 水素機能の高精度解析」

量子科学技術研究開発機構 上席研究員 町田 晃彦

～X線構造解析・
高輝度X線回折計測～

コヒーレントX線散乱による3次元イメージングについて、詳しく教えてください。

コヒーレントX線、すなわち波面の揃ったX線は高い空間的干渉性を持っており、これを利用した計測は比較的新しい手法となります。このようなコヒーレントX線を利用した計測手法の一つにコヒーレントX線回折イメージング(CDI)があります。CDIはX線顕微鏡法の一つで、コヒーレントX線を試料に照射して回折されたX線回折パターンを観測し、反復的位相回復計算によって試料像を得る手法になります。顕微鏡では結像のためのレンズが必要と思われると思いますが、X線では高い空間分解能を有するレンズ、光学素子を得ることが非常に困難です。CDIは結像レンズを必要としない手法で、代わりに位相回復計算によって実空間像を得ます。コヒーレントX線を試料に照射すると、スペックル散乱(斑点状の散乱)が観測されます。このスペックル散乱には散乱体の構造情報が含まれており、このスペックル散乱データを位相回復計算することによって散乱体の実空間での形状や電子密度などを再構成します。

CDIには観測する散乱データの種類によって小角散乱測定によるものとブラッグ回折測定によるものの2種類がありますが、ブラッグ回折を観測するのはブラッグコヒーレントX線回折イメージング(BCDI)と呼ばれています。私たちが先端計測手法として本格的に導入したのは、このBCDIです。BCDIはアメリカのAdvanced Photon Sourceで先行して開発された手法で、国内ではSPring-8 BL22XUで私たち量研のグループが初めて導入しました。BCDIはその名の通りブラッグ回折を用いるため、原子配列によってコントラストが付き、試料内部の格子ひずみやドメイン構造に敏感です。また、試料を数度回転させれば3次元像を得るために必要なデータが取得できます。BCDIでの実空間での分解能はどのくらいか気になると思います。先ほども述べましたがX線では開口の大きなレンズ系を組めません。代わりに広めの逆空間データから計算で位相回復させることによって分解能を確保しているのですが、現状では10nm程度の分解能となります。

反復的位相回復計算は回折データに対してフーリエ変換と逆フーリエ変換を繰り返していく計算手法ですが、実空間と逆空間で拘束条件をかけながら計算をしていきます。実空間での

拘束条件はサポートと呼ばれる3次元の領域で、最終的にはサポートの外側には電子密度がないという条件で計算をします。この位相回復計算を行うためにいくつか条件があります。測定対象のサイズがコヒーレンス長以下であり、照射領域内で孤立体であること、そして検出器がスペックルパターンを十分に分離できることです。エタノールなどに分散させた結晶粒をTEM用グリッドやSiNメンブレンへ滴下・乾燥させて測定を行っていますが、近くに他の結晶粒からの散乱があるとうまく解析ができないため、照射場所や角度を変えて条件に合うブラッグ回折を探して測定を行っています。実はこの探索に時間がかかっていますので、効率的に探索する方法を検討しているところです。

BL22XUでのBCDI測定は量研放射光科学研究センター内でグループを跨いだ連携で実施しています。町田に加えて同じ高圧・応力科学研究Grの押目博士研究員、コヒーレントX線利用研究Grの大和田GL、装置・運転管理室の菅原技術員、そして綿貫センター長が主要なメンバーとなります。金属水素化物以外にも酸化物誘電体や負熱膨張材料、準結晶などの測定を行って、BCDI測定の開発を進めています。

ブラッグコヒーレントイメージング法により、水素材料で何がわかるようになるのでしょうか。

BCDIでは材料中の水素を観測することはできませんが、水素が金属の結晶粒に侵入することによる格子膨張で生じる格子ひずみを捉えることができると考えており、水素化あるいは脱水素化の過程での格子ひずみの変化から結晶粒内での水素侵入の様子を可視化できるのではないかと考えています。その実証のためにA04の山内先生のご協力により京都大学の寺西先生グループが合成したPdのキューブ状ナノ結晶を提供してもらって測定を行っています。キューブ状Pdナノ結晶は水素・脱水素化の過程で圧力・温度等温曲線にバルクと同じようなプラトーの領域があります。これは水素固溶体と水素化物が共存していることを示していますが、ナノ結晶の内部での共存状態は良く分かっていません。一粒子の水素化の過程を明らかにできれば、カイネティクスなどのより詳細な議論が可能になるのではと考えています。また、この試料は形状とサイズが予め分かっているため、私たちのBCDI測定システムや解析方法のデモンストレーションとしても最適です。これまでに40nm級と70nm級のキューブ状Pdナノ結晶でBCDI測定を行いました。いずれもキューブ状の3次元像が得られています。特に40nm級ナノ結晶での測定は私たちのシステムで測定できる結晶粒のサイズをそれまでの100nmより大きいものから大幅に小さくすることに成功したことになります。現状で私たちのシステムでは40nmから500nmサイズの結晶粒であれば測定が可能となっています。また、水素ガス雰囲気下での測定も進行中ですので、近いうちに結果を報告できると思います。キューブ状以外の形状でも3次元像の回復は可能ですので、違う結晶面が出ているナノ結晶やバルクの粉末から取り出した結晶粒などでも測定を行い、結晶面の違いによる一結晶粒子の

水素化過程の可視化を進めたいと考えています。水素ガス雰囲気は現在のところ大気圧より下で可能ですが、より高い圧力への拡張も進めていきたいと考えています。もし何か測定してみたい試料がありましたらお気軽にご相談ください。

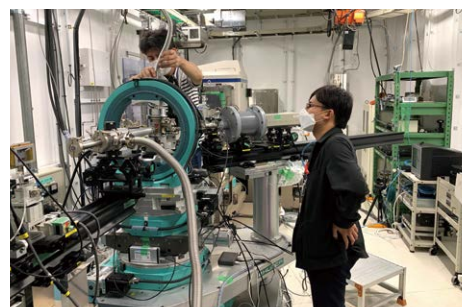
今までの研究の中で一番印象的だったことを教えてください。

A01研究分担の齋藤先生が高温高圧合成した AlH_3 の単結晶X線回折測定でX線の散乱断面積が小さい水素からの回折を観測できたことです。以前に MgH_2 の粉末X線回折プロファイルをマキシマムエントロピー法で解析して水素の電子密度分布を得たという報告はありましたが、その解析は簡単ではありません。 AlH_3 はその結晶構造での消滅則からAlサイトは禁制でHサイトからのみの回折が許容となるミラー指数のブラッグ反射があります。BL22XUで測定した振動写真で強度が弱いながらも回折スポットが観測できました。この一例だけですが、生の実験データとしてX線で金属中の水素由来の回折スポットを捉えられたことは非常に印象的でした。

最後に、町田先生のご経歴をお聞かせください。

私は名古屋大学工学研究科結晶材料工学専攻で守友先生(現、筑波大学)の指導のもと、当時盛んに研究が行われていた巨大磁気抵抗効果を示すペロフスカイト型マンガン酸化物の構造物性研究を行い、学位を取得しました。修士課程まではレーザーアブレーション法によって薄膜を作製し、その電子構造を光吸収測定や電気伝導度等の物性測定から調べていましたが、博士課程では放射光X線回折や中性子回折による結晶構造解析と物性測定による構造研究を行うようになりました。博士課程に進学した同じ年にSPring-8の粉末結晶構造解析ビームラインBL02B2

が共用開始となり、その装置グループが近くにいたことで精密構造解析にも興味を持つようになりました。また、中性子実験ではA05-1研究分担の太友先生や公募研究の大山先生にはこの頃から大変お世話になっています。学位取得後、日本原子力研究所(原研)放射光科学研究センター研究員に着任し、SPring-8 BL22XU(原研専用BL)やそこに設置されたダイヤモンドアンビルセル(DAC)回折計の立ち上げに携わり、DACを利用した高圧研究を開始しました。産業技術総合研究所から青木先生(現、東京大学)がGLとして移ってこられたのを機に、一緒に希土類金属水素化物の研究を始めたのが私の水素化物研究の始まりです。その後、産業技術総合研究所の秋葉先生(現、九州大学)がPLを務めたNEDO水素貯蔵材料先端基盤研究事業に参画しましたが、このプロジェクトのもとで原子力機構BLにおける水素化物研究の基盤を構築し、BL22XUではA01研究協力の中村先生のグループと協力して水素吸蔵合金の水素化過程における時分割X線回折も実現しました。その後も太友先生、中村先生のグループと協力して文部科学省の光・量子融合連携研究開発プログラムで放射光X線と中性子を相補的に利用した水素吸蔵合金のサイクル劣化メカニズム解明を目指し、特に二体分布関数(PDF)解析による局所構造研究を行いました。現在はナノからメゾスケール領域での構造変化の観測を行うためにPDF解析に加えてBCDI測定の開発を進めています。



BCDIセットアップ中
大和田GL(左)と押目博士研究員(右)



計画研究 A05-2 「水素の先端計算による 水素機能の高精度予測」

東京大学 教授 杉野 修

～第一原理計算と 非断熱効果～

第一原理計算と非断熱過程について、お話をいただけますか。

物質中での水素原子の動きを明らかにするというのがハイドロジェノミクスのハイライトの一つですが、物理学の基礎方程式を解くことによってこれを達成しようというのが本研究の目指すところです。シュレディンガー方程式やマックスウェル方程式をできるだけ忠実に解くというのが第一原理計算の立場であり、これは、できるだけ抽象化して問題を理解しようとする伝統的な物理学の方法とは対照的なアプローチであると言えます。解くべき方程式は極めて複雑ですので厳密に解けるわけではないのですが、半世紀にわたる先人たちの努力のおかげで、今のスパコンやソフトウェアを使えばかなり正確に解けるようになってきました。そのため第一原理計算は、基礎的な物性物理学の分野から企業での物質開発の現場まで広く用いられていることはよく知られています。ところが、水素原子が絡む場合には、今の第一原理計算のフレームワークでは十分な精

度が達成できないという局面に出くわします。水素原子核は軽量なので量子効果が強いのに加えて、電子の質量と比べて1800倍程しかないので水素の動きは電子の動きの影響を強く受けるためです。すなわち、原子核は古典粒子として扱うという近似が成り立たなくなる上に、電子が原子核の動きにいつも追従するというボルン・オッペンハイマー近似（断熱近似）も破綻するものと考えなければなりません。そのため第一原理計算をかなり拡張する必要があります。ハイドロジェノミクスのプロジェクトでこの問題に挑戦する機会が与えられたことには大変感謝しています。それを原子力機構の志賀基之氏を始め多くの共同研究と共に、さらに、研究室のメンバーが多数関わりながらこの研究に取り組んでいることはうれしい限りです。

ハイドロジェノミクスでの研究の紹介をしていただけますか。

本プロジェクトで最初に狙ったのは白金表面での水素の分布の解明です。この問題は触媒や燃料電池反応に深く絡むため多くの研究が行われてきましたが、結局水素がどこにいるのかに

関する決定的な証拠が得られていません。水素は測定がかなり難しくそれゆえ挑戦しがいがあるテーマであるということがここに顕著に表れています。理論的には高精度計算に基づき、吸着水素原子に対するポテンシャル分布を求めるというのが正攻法です。そこで研究室の研究員のヤン・レイ氏を中心となってスパコンを駆使した計算を行いました。計算ではまず、乱雑位相近似(RPA)と呼ばれる現在最高精度の密度汎関数理論(DFT)の方法を用いて電子相関の影響を考慮し、次に第一原理経路積分分子動力学法を用いて水素原子の量子効果を考慮しました。計算は志賀氏が開発したソフトウェアPIMDを使って行いました。計算の結果複雑な水素分布の様子が明らかになりました。水素原子が低被覆率で白金上に存在しているときには、量子効果で表面上に広がって存在することは先行研究が示しているのですが、高被覆率になると水素原子同士の反発力が強くなるのでその分計算は複雑になります。最終的にこの被覆条件においては、水素原子は互いをできるだけ避けるように白金原子直上に局在して配置することがわかりました。こ

れは水素原子の吸着位置や局在性などが被覆条件によって変わり得ることを如実に示す結果です。この結果はまた、燃料電池反応の科学にとっても、従来の古典論に基づく理解の再考を促す重要な結果だと考えています。

またシリコン中の水素不純物の拡散の問題にも研究室の研究員の山本良幸氏が中心となって取り組みました。水素の動きは半導体デバイスを制御するうえで重要な問題になるのですが、まだよくはわかっていないというのが現状です。興味深いことに、フェルミ準位の位置に依存して水素は H^- または H^+ として安定に存在するのですが、そこに外部から正孔や電子が供給されると準安定な H^0 の形成を伴いながら拡散する(ブルグアン・コルベット機構により拡散する)ことが知られています。これは中性状態と荷電状態がカップルして起こる典型的な非断熱過程であり、その過程が拡散全体を律速している現象ではないかと考えられてきました。その真偽を調べるために第一原理計算を予備的に行ったところ、残念ながら非断熱過程よりも断熱過程の方が速いこと、すなわち、実験では後者が律速していることを示唆する結果が得られました。もし非断熱過程が律速するのであれば、計算と実験結果を比較できるので、実験による検証を行いながら研究が進められたはずなのですが、シリコン中の水素はそういう系ではなさそうだとということで少し落胆しました。それでも次のベンチマーク系が見つかることを期待して量子非断熱の新しい計算手法の確立を目指した研究を継続して行っています。

現在では、分子科学研究所の小林玄器氏が開発したヒドリド伝導体の拡

散機構の解明を、山本氏と研究室助教の春山潤氏が中心となって取り組んでいます。このヒドリド伝導は量子効果や非断熱効果が顔を出す現象ではなさそうなのですが、大変興味深い研究対象です。この物質中でヒドリド(H^-)は、格子上にきちんと整列しているというよりも、協奏的に高速に動き回る液体のような状態として存在するという予備計算結果が得られています。この現象の本質が何に起因するかを説明できないか長時間の第一原理分子動力学シミュレーションを行いながら研究を続けてきたのですが、なかなか手に余る難しい対象だということで、ファインセラミックスセンターの桑原彰秀氏や山形大学の笠松秀輔氏も巻き込んでの共同研究に発展しています。またこのテーマに加えて、大学院生の片岡佑太氏が様々な金属表面での水素拡散の研究を行うなど、研究室では水素の研究が盛んにおこなわれるようになりました。

研究の醍醐味と今後の展望を教えてください。

さて、第一原理計算は冒頭で述べたように、物理学の基本方程式を忠実に解くことにより物性を定量的かつ演繹的に解き明かそうという研究分野であり、それを大型計算機というハードウェアと最新のソフトウェア技術を駆使して実現するという壮大な目標があります。かつては無謀な試みと揶揄された時期もありましたが、現在では存在が認められているように思います。そのような経緯を反映してか、目標の実現に向かってアイデアを出し合い、一つ一つハードルを越えることが研究分野内で重要視されており、そのような研究を行った時の達成感を強く感じ

ることができます。長期間かけて実験装置を組み立てる研究者と似たようなマインドがあるのではと考えています。そのため新たな現象を見つけることよりも新たな手法を開発することの方に惹かれる研究者が多い分野だとも言えるかもしれません。現在、研究室では大学院生の永井瞭氏が中心となって高精度の密度汎関数理論(DFT)計算手法開発に取り組んでいます。それを機械学習の方法を駆使して達成したことで将来的には著しい精度向上が果たせるのではないかと研究室が沸き立っています。また、研究員の横田猛氏は繰り込み群の方法を用いて多体相関を高精度に扱う方法を開発しており、これもブレークスルーをもたらすかもしれないと考えたりもしています。このような試みがいずれハイドロジェノミクス研究にも反映され、レベルアップにつながるのではないかと考えています。最後になりましたが、こういう手法開発志向の研究者も巻き込んで盛り上がるハイドロジェノミクスの懐の深さに感謝して筆を置きたいと思います。





量子科学技術研究開発機構 岡崎 宏之

量子科学技術研究開発機構(QST)の岡崎宏之と申します。高崎量子応用研究所で利用できるイオン・電子線照射技術を用いて(1)高活性化・高耐久化した白金(Pt)ナノ粒子触媒の開発に関する研究や(2)窒素(N)ドーピング炭素触媒の開発に関する研究を行っています。

(1)Ptナノ粒子触媒に関する研究では省Ptのために高活性化・高耐久化が求められていて、これまでにPtナノ粒子を担持している炭素担体にイオンビーム照射することで欠陥を導入し、Pt/C界面相互作用が変化することで高活性化・高耐久化することを報告してきました。このメカニズム解明のために、放射光施設を用いたX線吸収微細構造(XAFS)測定から、炭素担体への欠陥導入によってPt-C相互作用が増大して、Ptナノ粒子を歪ませていることが分かってきました。現在は触媒反応を模擬したオペランドXAFS測定を企画・実施して、欠陥導入による触媒性能向上メカニズム解明を目指しています。(2)窒素ドーピング炭素触媒に関する研究では、炭素材料へのNドーピング方法とイオン・電子線照射を併せることで、欠陥を利用してNドーピングした炭素触媒の作製を行なっている。

今後とも欠陥を利用した触媒材料の機能性向上やそのメカニズム解明に向けて、イオン・電子線照射技術や放射光を用いた分光測定を活かして、ハイドロジェノミクスの研究や水素社会実現に貢献していきたいと考えています。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。



東北大学金属材料研究所 金 相侖

東北大学金属材料研究所、折茂研究室の金相侖(きむさんゆん)と申します。私は固体化学、固体イオニクス、電気化学の境界領域で、新規エネルギーデバイスの創成を目指した全固体電池の材料研究を行っております。研究対象の材料は、水素化物、酸化物、硫化物など多岐にわたり、材料合成、特性評価、電池実装などの研究に取り組んでおります。また、単結晶エピタキシャル薄膜を用いた、イオン導電機構や界面反応機構の解明に関する研究も並行して進めております。

最近の研究では、水素化物を用いたイオン導電体の開発、そしてこの材料系を固体電解質に用いる全固体電池の研究に注力しております。特に、籠状の錯イオン($[B_{12}H_{12}]^{2-}$ 、 $[CB_9H_{10}]$ など)を有する水素化物材料に着目して、「錯イオンの分子レベルの共存化による構造無秩序化」という新しい材料設計法を構築し、リチウムイオンが自由自在に動き回りやすい構造を作ることによって、超イオン導電率の達成に初めて成功しました。また、水素化物固体電解質と金属電極間の高い化学・電気化学安定性を解明し、金属電極を負極とする様々な全固体電池の室温動作にも成功しております。

「ハイドロジェノミクス」では、水素化物を用いた新規イオン導電体の創成とその学理構築を目指して、新たな錯イオンの合成、錯イオンの回転挙動解明、低温物性に関する多様な連携研究を進めております。今後ともご指導のほど、何卒宜しくお願い申し上げます。



京都大学大学院理学研究科 長塚 直樹

京都大学理学研究科化学専攻 渡邊研究室助教の長塚と申します。令和元年2月までA05-1研究代表の福谷克之教授の研究室で研究を行っていました。

福谷研究室では、光触媒のモデル物質として知られる二酸化チタンと水素の相互作用について研究を行いました。一般に酸化物では、局所的な構造欠陥が電子状態を大きく変えるため、機能の解明には、欠陥が誘起する電子状態変化を理解することが重要です。私は光電子分光法と共鳴核反応法を駆使し、二酸化チタン表面及び内部の水素量を制御しながら電子状態変化と原子構造変化を観測しました。その結果、水素から供与された電子の空間的な広がりが、ルチル型では局在化、アナターゼ型では非局在化していることが明らかとなりました。また、二酸化チタン内部における水素の拡散定数が両者の間で大きく異なることや、拡散定数が電子の空間的な局在度に左右されている可能性を見出しました。

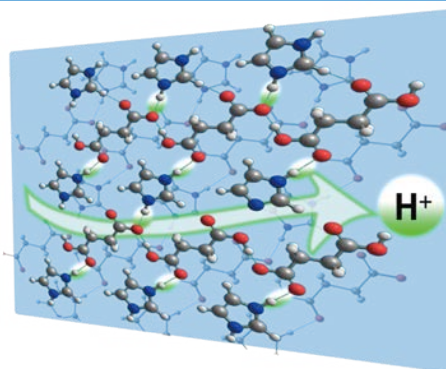
京都大学では、以上の現象をより詳細に理解するため、ヘテロダイン検出と周波発生振動分光の時間分解測定に挑戦しています。ヘテロダイン検出と周波発生振動分光は、結合の配向を時間領域で追跡可能な稀有な手法です。この実験が超高真空中で行えるのは世界中で渡邊研究室のみであり、触媒反応のように過渡的な状態の観測が有用な系に対して強力な手法であると言えます。ハイドロジェノミクスでは、水素の過渡的な状態を観測することにより、水素機能の解明に貢献したいと考えております。



筑波大学計算科学研究センター 助教 堀 優太
東京大学物性研究所 特任助教 出倉 駿

無水有機固体電解質中の局所構造と分子ダイナミクスに基づくプロトン伝導機構を解明

固体中で水素(プロトン: H^+)を流す“プロトン伝導体”は、液漏れがなく安全な水素燃料電池の電解質として盛んに研究されています。特に100°C以上でも動作可能な“無水プロトン伝導体”の開発が望まれています。しかし、無水プロトン伝導体では物質ごとに固有の分子が伝導を担うため、その伝導機構は不明な点が多く、次世代プロトン伝導材料の合理的な設計指針は未だ得られていません。本研究では無水プロトン伝導性有機結晶であるコハク酸イミダゾリウムを対象に理論計算(A05: 堀助教)と実験(A03-2: 出倉助教)とのインタープレイにより、イミダゾール分子の回転運動と分子間プロトン移動が連動することでプロトン輸送が実現することを明らかにしました。



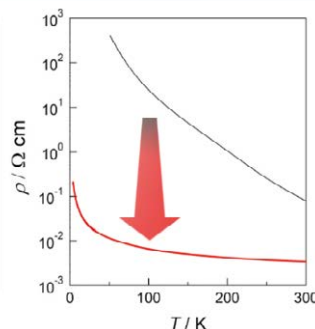
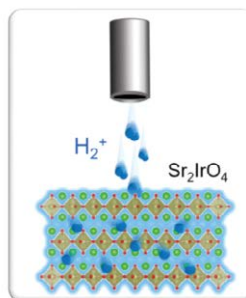
本研究によって高効率な水素燃料電池の電解質に対する分子レベルでの指針設計の確立に貢献することができました。本研究で示したプロトン伝導機構は、水素移動と周辺環境(分子運動や水素結合状態、電子状態)の変化とのカップリングと見做せます。したがって本研究のコンセプトを出発点として、有機・無機問わず様々な物質中で起こるプロトン(H^+)やヒドリド(H^-)伝導の解明を目指すことにより、統一的な水素輸送の学理構築に繋がることが期待されます。現在、ハイドロジェノミクスの様々なメンバー(計画研究A03-2: 分子研小林G、計画研究A05-2: 原研志賀G、計画研究A01: 東北大折茂G・東京大山室G、計画研究A05-2: 東京大杉野G等)と協力し議論を進めています。



京都大学大学院理学研究科 修士課程2年 山下 裕太
東京大学生産技術研究所 助教 小澤 孝拓
大阪大学大学院理学研究科 准教授 越智 正之

高濃度の水素注入による酸化物の高機能化に成功

水素は全元素の中で中程度の電気陰性度を持ち、様々な物質の格子に入り込んで電気的な特性を劇的に変化させるポテンシャルを有しています。我々が開発した水素イオンビーム照射装置は、低温・低エネルギーで水素の脱離や欠陥生成を抑制しながらの注入が可能で、原理的にはあらゆる物質に適用可能なことから新奇の物性探索の手法として利用することができます。本研究においては、スピンと軌道が結合した超伝導相の存在が期待されているイリジウム酸化物 Sr_2IrO_4 に対し水素イオンビーム照射を行い、超伝導状態の獲得を目指しました。その結果 $10^{22}cm^{-3}$ にせまる大量のn型キャリアの導入とそれに伴う電気伝導の大幅向上が観測されました。さらに小澤助教・福谷教授[A05-1]との連携による共鳴核反応法を用いた水素濃度分布の高精度測定と越智准教授[A05-2]との連携による理論計算によって、マクロ・ミクロ両方の観点で水素の位置に関する知見を得ることができました。



本研究で使用した水素注入法はバンド幅に影響を与えるような結晶構造変化を最小限に抑え、狭い固溶限をものともせず行えることが利点であり、本研究の対象である Sr_2IrO_4 以外の様々な系にも適用することで水素濃度を自由度とした電子相図の走査が行えると期待されます。このことは「ハイドロジェノミクス」が掲げる水素が誘起する高次機能性の創成およびその探索の効率を高めうることを示しています。



第4回ハイドロジェノミクス研究会

2021年8月19日(木)-20日(金)、オンラインにて「第4回ハイドロジェノミクス研究会」を開催しました。本領域内外の研究者11名にご講演いただきました。広く水素に関心のある研究者・学生62名に参加していただき、活発な質疑応答のもと盛会で終わりました。

プログラム

8月19日(木)

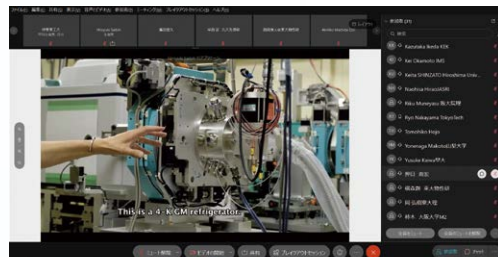
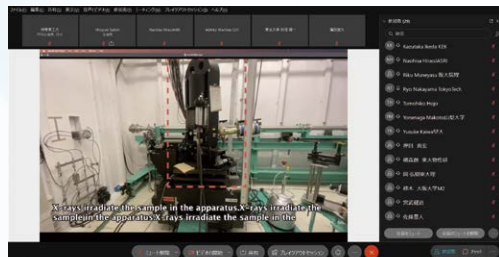
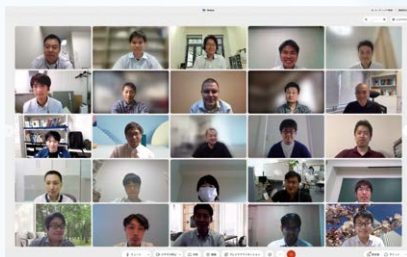
- 13:30 (招待) 有田亮太郎(東大院工)「高圧下水素化物の高温超伝導」
- 14:00 (招待) 鍵裕之(東大地域化学)「高圧下での鉄水素化物・金属塩水和物の挙動」
- 14:30 (招待) 松尾康光(摂南大理工)「生体系物質のプロトン伝導と燃料電池への展開」
- 15:00 (招待) 中西寛(明石高専)「合金触媒表面における水素化反応の理論計算」
- 15:30 break
- 16:00 (一般) 町田晃彦(量研機構)「ブラッグコヒーレントX線回折イメージングの開発とPdナノ結晶水素化過程の三次元可視化への適用」
- 16:30 (一般) 佐藤龍平(東大院理)「イットリウム酸水素化物薄膜のフォトリソリズム反応に関する第一原理計算」
- 17:00 (一般) 松澤郁也(東大生研)「水素化RNiO₃の金属-絶縁体転移」

8月20日(金)

- 10:00 (招待) 中村将志(千葉大院工)「界面の疎水性・親水性制御による電極反応の高活性化」
- 10:30 (招待) 佐治木弘尚(岐阜薬科大)「D₂ガスを經由する重水素標識法と重水素標識医薬品への展開」
- 11:00 (招待) 保田諭(原子力機構)「固体高分子形電気化学セルを用いた水素同位体ガス分離の研究」
- 11:30 (招待) 下村浩一郎(KEK機構研)「ミュオニウム超微細構造のマイクロ波分光」

第8回若手育成スクール

2021年8月31日(火)、オンラインにて「第8回若手育成スクール」を本領域研究主催、量子科学技術研究開発機構 放射光科学研究センター共催のもと開催し、43名が参加しました。綿貫放射光センター長による「放射光科学研究センターの紹介」を筆頭に口頭発表6名、ポスター発表12名の皆さんにご講演いただきました。また、高輝度光科学研究センター(JASRI)の平尾先生のご協力のもと、動画を利用した「バーチャルラボツアー」にて水素充填装置、高圧装置等を紹介していただきました。口頭発表、ポスター発表ともに活発な研究成果発表の場となりました。本若手育成スクールの世話人、齋藤先生のお力添えにより、放射光科学研究センターについても、より深く勉強することができ大変有意義な時間となりました。



第62回高圧討論会シンポジウム

2021年10月18日(月)、ハイブリッドにて開催された第62回高圧討論会シンポジウム「高圧科学と水素」に参画しました。高圧のみならず、広く水素がかかわるサイエンスに取り組んでいる研究者のみなさんから最新の研究成果や実験技術についての発表がありました。

高圧討論会において、「研究のアイデアの良さ」、「実験の見事さ」、「ポスターの分かりやすさ」などの点で見ると強くアピールするポスター発表を選び、その発表者に対して授与されるポスター賞に内海伶那さん(量研・兵庫県立大 博士前期課程2年)が表彰されました。おめでとうございます！



内海 伶那さん

講演題目

新規Al-Mn合金水素化物の高温高圧合成

コメント

この度は、このような素晴らしい賞をいただき、誠にありがとうございます。現地開催での参加は初めてでしたので、多くの刺激を受け、研究への熱意がさらに高まりました。今回の受賞を励みに、高圧を用いた新たな金属水素化物の合成の更なる発展にむけて研究に努めていきたいと思ひます。

日本MRS水素科学技術連携研究会 設立

2022年2月23日(水・祝)に「日本MRS水素科学技術連携研究会 設立研究会」をオンラインにて開催します。水素に関する基礎科学や技術開発に携わる多くの学界・産業界の皆様方のご参画をお待ちしております。

—水素科学技術の将来のために—

水素に関する基礎科学や技術開発(以下、水素科学技術)は、工学・化学・物理学・生物学など、極めて広範な学問分野にわたるため、最先端動向の共有や連携研究の促進のための場は必ずしも十分に整備されていないのが現状です。広範な学問分野をシームレスに繋ぐ複眼的な視野、そして基礎科学から技術開発・社会実装までを見通す中長期的な視点、さらに関連分野の将来を託す若手人材の育成などの観点で、水素科学技術を深化・拡大する取り組みとそのためのプラットフォームの形成が希求されています。

このような状況に鑑み、新学術領域「ハイドロジェノミクス」にご参画の先生方、日本MRSの執行部の先生方、さらに産業界の皆様方からのご指導やご助言を頂きまして、2022年2月に、日本MRS研究会制度のもとで「水素科学技術連携研究会(Hydrogenomics Alliance, Japan)」を設置させて頂くこととなりました。本研究会は、以下の活動を展開していきます。

新研究会の3つの活動と3つの視点

専門性、即応性、学際・国際性の視点で以下の活動を実施

① 定例研究会(専門性)

3分科会(工学、化学、物理学)合同で、学会形式で年1回開催。

② トピックス研究会(即応性)

産業界・学界からのニーズ・シーズに基づく各分科からの提案により、テーマを絞った研究発表や各種材料合成技術や計測・計算技術の共有なども含めて、小グループで年数回開催。

③ 日本MRSとの連携研究会(学際・国際性) ※日本MRSに別途申込の必要あり

日本MRS年次大会: 日本MRSで取扱う幅広い研究分野との学際的交流を通じて、新たな融合研究の促進を図る。※年1回開催

MRM 国際会議: 第一線級の海外研究者との国際的交流を通じて、各国の研究動向の把握と国際連携の促進を図る。※2年に1回開催



設立研究会を オンラインにて開催します!

日時 2022年2月23日(水・祝) 10:00~12:00

場所 オンライン開催

東北大 岡田益男名誉教授ならびに分子研 川合眞紀所長にご挨拶を頂きます。

東工大 細野秀雄名誉教授ならびにトヨタ自動車 射場英紀 CPE(チーフプロフェッショナルエンジニア)に特別講演を頂きます。

連絡先 office@hydrogenomics-alliance.jp

随時、情報をウェブサイトに掲載しています。

是非、ご高覧ください。

<https://hydrogenomics-alliance.jp/>

“学問分野の枠を超えた水素科学”の継続・発展のためのプラットフォーム

日本MRS
水素科学技術連携研究会
Hydrogenomics Alliance, Japan

皆様のご参画をお待ちしております。お気軽にお問い合わせください。

〒100-8362 東京都千代田区千代田 1-1-1 日本MRS研究会
〒100-8362 東京都千代田区千代田 1-1-1 日本MRS研究会
〒100-8362 東京都千代田区千代田 1-1-1 日本MRS研究会

E-mail: office@hydrogenomics-alliance.jp URL: <https://hydrogenomics-alliance.jp>

- **2021年11月26日(金)-27日(土)**
「第15回物性科学領域横断研究会」に参画いたします。
- **2021年12月12日(日)-17日(金)**
「MRM2021(MRS-J) シンポジウム」に参画いたします。
- **2022年2月23日(水・祝)**
「日本MRS水素科学技術連携研究会 設立研究会」を開催いたします。
- **2022年5月16日(月)-19日(木)**
「第2回ハイドロジェノミクス国際会議」を開催いたします。

[東北大学 折茂研究室 テクニカル・マネジメントサポート]

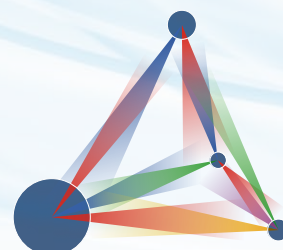
TEL : 022-215-2093

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



Hydrogenomics