

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 A01 計画研究紹介
- P3 A02 計画研究紹介
- P5 A04 計画研究紹介
- P7 各種会議
- P8 若手サイエンティストのご紹介
- P9 研究ハイライトのご紹介
- P10 共用装置のご紹介
- P11 今後の予定



計画研究
代表

計画研究 A01 「高密度水素による 超機能材料の合成」

東北大学 材料科学高等研究所 教授 折茂 慎一

高密度水素で、次世代の電池材料や新たな超伝導材料を設計する

ハイドロジェノミクスではどのような研究に取り組んでいますか？

できるだけ高密度の水素を材料中に詰め込むことにより、これまでにない画期的な機能を生み出す研究に取り組んでいます。この研究は、結合性が多様かつ複雑でまさに変幻自在といえる水素をうまく使いこなして、次世代の電池材料や新たな超伝導材料などを設計することに結びつきます。

それでは、まず電池材料について聞かせて下さい。

高密度の水素を詰め込んだ材料のひとつに、「錯体水素化物」があります。錯体水素化物では、ホウ素やアルミニウム、鉄などの中心元素が複数の水素と結合してつくられる錯イオン（陰イオン）と、リチウムやマグネシウムなどの陽イオンとが強固に結合しています。これらの錯イオンは、中心元素の周りに4～9個もの水素が結合して房（ふさ）のようになっていることから、私たちは「水素クラスター」と呼んでいます。

約15年前にこの錯体水素化物の研究を始めた当初は、一部の錯体水素化物を温めることで水素が発生することに注目して、燃料電池用の水素貯蔵材料としての開発を進めていました。ある時、食品を電子レンジで加熱するように、この錯体水素化物にマイクロ波を当ててみたところ、結晶内部のリチウムイオンが非常に高速で動く（伝導する）ことを偶然発見しました。さらに、周囲の水素クラスターの大きさなどを調整することで、リチウムイオンの動きをいっそう早めることができること、その結果リチウムイオン電池の固体電解質として利用できること、などが分かってきました。水素は、燃料電池にとっては燃料ですが、次世代電池にとってはリチウムイオンの動きを大きく促進する効果があるといえます。この発見は、今回のハイドロジェノミクスの申請のひとつの重要な契機となったといえます。

超伝導材料についてはいかがでしょうか？

木星や土星のような巨大惑星内部の水素は、数百万気圧という高圧のもとで超高密度化しており、金属状態になっている（すなわち金属水素になっている）と

いわれています。金属水素は、超高密度の水素同士の電子軌道が重なって伝導バンドを形成しており、室温近くで超伝導になり電気抵抗がゼロになると理論予測されてきました。しかし、現在のところまだ地球上ではだれも金属水素を実現できていません。ハイドロジェノミクスでは、高密度水素の研究を突き詰めることで、これを実現する研究も進めています。

異なる計画研究をつなぐ連携が、もっとも大切

ハイドロジェノミクスは、A01からA05までの計画研究に分かれています。それぞれの特徴と、それらの連携のイメージを教えてください。

A01では、量研機構の齋藤博士が高圧合成技術により新しい高密度水素化物を合成、その合成過程などを東京大学の山室教授が詳しく解析しています。この合成した高密度水素化物に関して、大阪大学の清水教授は先にお話しした超伝導機能の研究、室蘭工業大学の亀川教授や産総研の中村博士は水素貯蔵機能や磁性機能の研究、そして私は電池材料としての機能を高める研究などを進めています。

A01は水素を高密度にすることがポイントですが、A02では水素によって界面を制御すること、A03では水素を高速で移動させること、そしてA04では水素を新たな反応プロセスに使うこと、などを目指しています。これらに加えて、A05では最先端の計測・計算科学によって材料中の水素の高精度に解析することを目指しています。

ハイドロジェノミクスでは、これらの異なる計画研究をつなぐ連携がもっとも大切だと思っています。A01と他の計画研究との連携の場合、たとえばA02で作製した薄膜界面の水素を高密度にして、A05の解析技術を使って新たな機能を誘起したりします。またA03との連携により、錯体水素化物を使った新しいエネルギーデバイスの設計を進めます。さらにA04との連携では、A01で合成したいろいろな高密度水素化物を使って、高温・高圧でしか進まない化学反応を低温・低圧で進めるための研究を行います。

なぜ、連携が大切と思うのですか？

水素社会に向け、燃料電池車が市販され始め、また、水素ステーションといった水素を供給するインフラも整備され始めました。水素をエネルギーとして使うための多くの研究が進んでいます。しかし、結合性が多様かつ複雑で、まさに変幻自在といえる水素、あるいは、その水素を含む材料に関しては、合成や解析技術を含む研究基盤や関連情報が、異なる分野の研究者の間で十分には共有されていない状況にあります。例えば、水素を高速で移動させることが重要な燃料電池の研究と、水素を透過したり純化したりするための研究はお互いに近いようで遠く、実は十分な情報共有がされていないのです。そのた

め、水素や水素化物が持っている本来の性質をうまく使いこなせていない“もどかしさ”を感じている研究者がとても多いのです。もちろん私自身もそう感じていました。

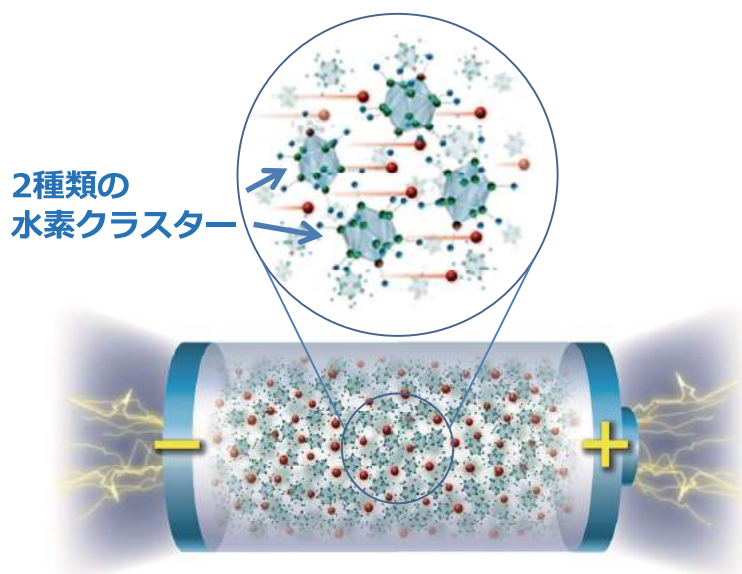
今回のハイドロジェノミクスの申請は、「学問分野の枠を超えて、有機的に連携した新たな視点の水素科学が必要」という研究者の強い想いが原点にありました。この原点を忘れないためにも、水素のように、変幻自在で柔軟な結合（連携研究）を推進することにより、革新的な材料・デバイス・反応プロセスを創成し、次々世代のエネルギー変革などに大いに貢献するとともに、水素を使いこなすための新たな水素科学である「ハイドロジェノミクス」を構築したいと考えています。

最後に、折茂先生ご自身のご経歴を聞かせてください。

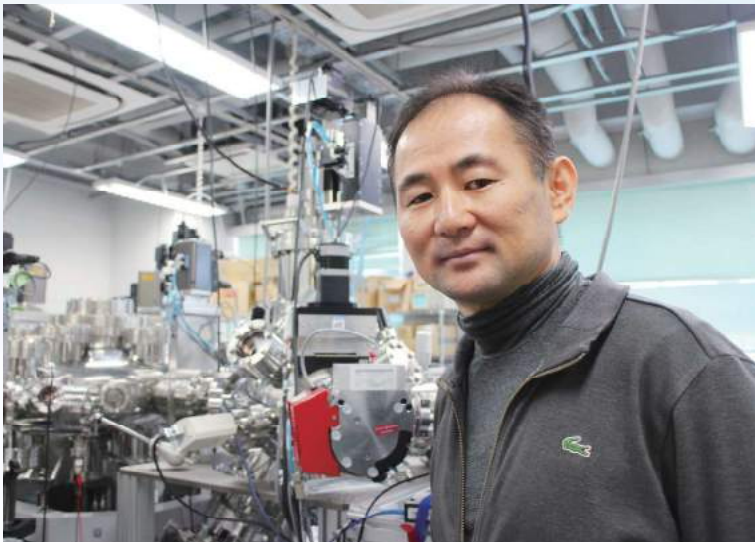
私は広島大学にて修士を取得後、企業に就職しましたが、やはり「水素」の

可能性を探求し解明していききたいという思いから、大学に戻り研究者となることを選択しました。博士を習得し、ドイツ・マックスプランク研究所へ1年半、留学をしました。その間、材料中の水素の動きをNMRで調べる、という研究をさせていただきました。帰国後の2002年より東北大学金属材料研究所、2013年からは材料科学高等研究所にも在籍し現在、同・副所長を拝命しています。思い返せば、企業での研究、海外の研究機関での研究、そして大学での研究を通して「水素」の研究を様々な環境の中で突き詰めてきました。本領域「ハイドロジェノミクス」を成功させるためにも、まさに「変幻自在な水素」のように、環境・状況に応じて私自身がフレキシブルに本研究に取り組んでいきたいと思っています。領域内外の研究者と協力して大きな成果に繋がりたいと思います。

(取材・文：サイエンスライター 山田久美)



リチウム超イオン伝導性を示す高密度水素化物とそれを用いた高エネルギー密度型全固体電池



計画研究 A02 「局在水素による ヘテロ界面機能の強化」

東京工業大学 教授 一杉 太郎

「界面」はデバイスの肝

A02で取り組んでいる「局在水素によるヘテロ界面機能の強化」とはどのような研究でしょう？

A02では「界面」をキーワードとして、水素原子の位置や濃度、動きを自在に制御するための研究をしています。「界面」とは、異なる物質同士の接合面のことです。たとえば、太陽電池など半導体デバイスではpn接合、蓄電池では正極や負極と電解質との接触面が「界面」です。「界面こそがデバイスである」という有名な言葉があるほど、「界面」はデバイスの肝であり、性能向上を目指す上でも、新たな機能を生み出す上でも重要な要素です。

具体的には、水素が物質表面や界面付近に高密度で蓄積している状態を作ることや、表面や界面を通して水素が物質中へ侵入することを防ぐ研究に取り組んでいます。それにより、太陽電池の発電効率を高める、金属が水素と反応して腐食するのを防ぐ、次世代の蓄電池を創製することなどが期待できます。

私自身は、厚さ約100ナノメートルの水素化物の薄膜をスパッタリングと呼

ばれる薄膜作製方法により作り、その物性を様々な顕微鏡や放射光を使って測定しています。それにより、界面で起きている反応や電子状態を理解し、新デバイスの創製や既存デバイスの性能向上につなげようとしています。

さらに、水素の役割についての本質を探るため、そのような薄膜を使ってモデルとなるデバイスを作っています。つまり理想的な環境下できれいな薄膜を作り、現象の本質を理解しようとしています。そのため、原子スケールで精密に制御した薄膜を作ることが極めて重要です。

また、超伝導や磁性、電気伝導などに関する新たな現象の探索も大きな目的です。特に超伝導に関しては、現在、最も高い温度で超伝導を発現する物質が水素化物ですので、水素化物による室温超伝導も夢ではないと我々は考え、日々研究に取り組んでいます。

現在、具体的にはどのような薄膜を作っているのでしょうか？

水素化リチウム(LiH)や水素化チタン(TiH₂)、水素化マグネシウム(MgH₂)などの水素化物です。これまで水素化物の高品質薄膜を作った報告例は極めて少ないので、条件の調整など手探りで

試行錯誤の連続です。

界面に水素を溜める、通りやすくする、逆に通りにくくするなどの調整は、界面近くの電子状態を変えることによって制御することができます。具体的には、界面近傍における原子の配列や組成を変える、原子と原子の間隔を制御するなどです。そのため、A05-2と共同で、電子状態を第一原理計算により予測し、その計算結果に基づき組成や原子配列間距離を薄膜で実現する試みを始めています。そして、それが狙い通りにできているかA05-1の最先端計測装置を使って確認します。構造や電子状態が詳細にわかりますので、それをA05-2にフィードバックし、狙う機能を発揮する物質を設計していきたいと考えています。

A02の他のメンバーとの役割分担についても聞かせて下さい。

名古屋大学の宇佐美教授は太陽電池デバイスの特性向上にむけた界面制御方法について研究しています。東北大学の秋山教授は主に金属材料の長寿命化を目的に、金属と水素が反応して脆化しないようにするための研究を行っています。名古屋大学の長田教授は原子1個程度の厚みしかない薄膜材

料の創製、東京工業大学の北野准教授は触媒材料の創製に取り組んでいます。連携してそれぞれの強みを活かすことにより、相乗効果を生み出す体制を築きつつあります。

本領域では、異分野の研究者同士の連携や融合を進めています。どのような手応えを感じていますか？

皆、水素をキーワードに、意欲にあふれた方々ばかりですので、A02に留まらず幅広い分野の研究者との共同研究の話が持ち上がっています。私自身はこれまで無機材料が中心でしたが、今後は有機材料にも研究を広げていきたいと考えています。

水素社会に貢献したい

水素研究の魅力を聞かせて下さい。

水素の魅力は、極微量でも様々な界面の特性を変化させることで、それを通じて材料全体の性質を制御できることだと思っています。たとえば、携帯電話やパソコンで計算を行うトランジスタの場合、シリコンの上に酸化物の膜を形成しますが、シリコンと酸素が結合していない場所に水素が入り込むことによって初めてデバイスとして機能するようになります。そのため、水素というのは非常に重要な役割を果たしているのです。このような事例は多数あります。

そしてもちろん水素が「変幻自在」ということも魅力です。我々が制御する余地が大きいということであり、新機能発現に向けて大きな可能性があります。

短期的な目標、長期的な目標を聞かせて下さい。

私自身の短期的な目標は、まずは高

品質な薄膜を作ることです。それを活用し、電池材料用の薄膜であれば、界面でどのような反応が起こっているかを調べ、電池の性能向上に結び付けることができます。物質表面で起きている触媒反応については、原子レベルで制御された表面で触媒反応を起こすことにより、そのメカニズム解明と新たな触媒材料の開発につなげることができます。長期的な目標は、水素社会に向けて水素化物を材料とした革新的なエレクトロニクスデバイスを創製することです。現在、エレクトロニクスデバイスは、シリコンやガリウムヒ素などで作られていますが、是非とも水素化物によるエレクトロニクスデバイスを実現させたいと思っています。

自然の神秘に触れたことが研究者としての原点

次に、一杉先生ご自身の研究経歴について聞かせて下さい。

私は大学院卒業後、企業で働いていたこともあり、好奇心に応じて研究することに加え、社会に貢献することが非常に重要であると考えています。基礎研究から実用化までの道のりは長く、その中で私が最も貢献できるフェーズはどこであるか考えたとき、基礎研究と応用研究の中間あたりに携わることが最良だと思っています。そこで、悩んだ末、企業を辞め大学で研究者として生きる道を選びました。

2007～2015年まで在籍していた東北大学では、金属酸化物の薄膜を構成する原子1個1個を、走査トンネル顕微鏡[STM]を使って初めて観察することに成功し、大変感動しました。原子1個1個をきちんと観察できるようにするには、その前段階として、平坦で高品質な薄

膜試料を作ることが大変重要です。そのための技術やノウハウが自分自身の強みとなっており、さらにそれがハイドロジェノミクス研究に活かされています。

研究の面白さや醍醐味を聞かせて下さい。

一番ワクワクするのは、これまで誰も知らなかったことを明らかにできた時です。また、大学は教育機関でもあるので、学生さんや若手研究者の成長を手助けすることも私の生きがいです。

私が元々研究者になるうと思ったのは、大学生時代、超伝導をテーマとする研究室に入り、自然の神秘に触れたことです。超伝導体は低温で量子効果により電気抵抗が完全にゼロになり、マイスナー効果などを発現します。この現象には大変魅了されました。日常生活とは異なる量子という、まさに神秘の世界が目の前で現れるわけです。学生の皆さんにも、そのような感動を少しでも多く味わってほしいと願っています。

(取材・文:サイエンスライター 山田久美)



薄膜を作製するためのパルスレーザー堆積法



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」

九州大学 教授 山内 美穂

「水素」を制御する

A04で取り組んでいる「高活性水素の精密制御による新規反応プロセスの創出」とはどのような研究でしょうか？

水素原子(H^0)には、電子が1個しかないため、電子1個の出入りによって、特性がダイナミックに変化します。電子が抜ければ、陽子1個の H^+ (プロトン)になり、外から電子が1個入れば、 H^- (ヒドリド)になります。このように、電荷が+から-まで自由に取り得る元素は、水素以外にありません。そして、それによって、他の元素との化学反応も大きく異なってきます。そこで、触媒に加え、電気エネルギーなどを使って水素を活性化させ、目的に応じて、 H^0 、 H^+ 、 H^- という3種類の水素を作り分けることにより、既存の化学反応を、より低エネルギーで起こさせたり、欲しい化合物だけを選択的に生成したり、さらには、これまでにない画期的な化学反応を創出しようというのが、A04の研究テーマです。

水素を活性化させるとはどのようなことでしょうか？

例えば、農作物を生産するには、化学

肥料が必要です。化学肥料に不可欠なアンモニア(NH_3)は、ハーバー・ボッシュ法によって作られています。ハーバー・ボッシュ法では、水素と窒素を高温・高圧の環境下で反応させているため、非常に多くのエネルギーが必要で、大きな課題となっています。高温・高圧を必要とするのは、メタン(CH_4)と水蒸気(H_2O)を反応させて水素分子(H_2)を生成するため、そして、窒素分子(N_2)を分解して水素分子と反応させるためです。それに対し、A04では、従来から発想を大きく転換し、水素を活性化させることで、より低エネルギーでアンモニアを合成しようと考えています。

まず、窒素分子を分解するには、通常、 $400^\circ C$ 、20気圧の温度と圧力が必要なのですが、A04のメンバーの1人である理化学研究所の島博士が、2014年に、遷移金属に複数個の水素が結合した水素クラスターが窒素分子を常温で分解することを発見しました。この発見を機に、「まず、窒素分子の結合を切ってからそれと水素を反応させる」といった具合に、窒素分子のような基質分子を起点に、化学反応を考えるのではなく、反応させる側の水素を制御することで、化学反応を促進できるのではないかと

という逆転の発想が生まれました。実は、このことが、A04の研究テーマの出発点になっているのです。

水と二酸化炭素だけからメタンやエチレンを生成

また、現在、工業的な水素の製造プロセスでは、 $1000^\circ C$ 、30気圧という環境下で、水蒸気改質という方法により、メタンと水蒸気を反応させて、水素分子を作っています。非常に高温・高圧であることも課題ですが、もう1つ大きな課題があります。それは、水素の原料となるメタンは、化石燃料の天然ガスであるということです。地球温暖化防止に向けては、化石燃料の使用量の低減が喫緊の課題です。ちなみに、現在、地球温暖化対策として、燃料電池車が注目されていますが、その燃料となる水素もまた天然ガス由来なのが現状です。

それに対し、水分子中の水素を活性化させることで、水から水素を作ることにも可能です。水は非常に安定な分子ですので、通常的环境下で、水素と酸素に勝手に分解することはありません。しかし、電気エネルギーを使って水分子を活性化することで、水素と酸素に分解でき

ます。ここで、電気エネルギーには、太陽電池などの再生可能エネルギーを使います。

さらに、水から水素を作り出すだけに留まりません。私は、活性化させた水素と二酸化炭素(CO₂)を反応させることにより、メタン、エチレン(C₂H₄)やエタノール(C₂H₅OH)といった有用物質を生成できると考えています。ここでのポイントは、水素の状態を、触媒を使って制御することにより、欲しい有用物質のみを選択的に生成するという事です。現在、これらの有用物質は、化石燃料から生成されていますが、分離するのも多大なコストを要しています。それに対し、触媒を使い分けることで、水と二酸化炭素から、たとえば、メタンだけ、エチレンだけといった具合に、欲しい有用物質のみを生成できるようになるというわけです。実際、私は、銅(Cu)とパラジウム(Pd)の触媒の下、活性化させた水原子と二酸化炭素を反応させることで、生成物選択性を制御することに成功しています。

3種類の触媒を使って水素を高精度に制御

触媒を駆使することで水素の状態を制御し、それによって化石燃料を使うことなく、低エネルギーかつ高効率に、欲しい有用物質だけを生成できるというのは、まさに理想ですね。

これが、+から-までの電荷を取り得る水素の特性を活かす「ハイドロジェノミクス」の醍醐味であると思います。触媒に関しては、現在、前述の島博士、中央大学の張教授による水素クラスターのほか、東京大学の吉信教授による透過膜、私が中心となって進めている金属ナノ粒子という3種類を研究開発しています。透過膜とは、水素を透過させるこ

とで、水素を活性化させることができる膜のこと、金属ナノ粒子とは、ナノスケール(ナノは10億分の1)の金属の粒子のことです。通常であれば、水素を吸蔵しない金属であっても、ナノ粒子にすることで、構造、つまり電子状態が変わり、水素を活性化できるようになります。これら3種類の触媒を組み合わせることで、反応性や化合物の生成効率を高めたりできると考えています。

その他、水素クラスターを使った水素の活性化で多くの実績をお持ちの京都大学の藤田教授や、アンモニア合成において、世界最高性能を誇る触媒を開発された大分大学の永岡准教授が研究協力者として、A04のメンバーに加わって下さっています。

さらに、反応プロセスの高効率化を図るには、水素を、材料中に高密度に溜めたり、材料中の水素を高速に移動させたりすることも大切です。そのため、A01~A05まで他の研究グループとも強固に連携しながら研究を進めていきます。

A04での目標を聞かせて下さい。

まずは、H⁰、H⁺、H⁻という3種類の水素を、触媒を使って高精度に作り分けられるようにすること。また、その背後にある学理を明らかにすることです。さらにそれにより、新規反応プロセスを創出し、最終的には、水や二酸化炭素などユビキタスな(ありふれた)物質を使って、医薬品や農薬の元となる中間物質の生成方法を確立できればうれしいですね。

ユビキタスな元素でエネルギー問題を解決し日本を幸せにしたい

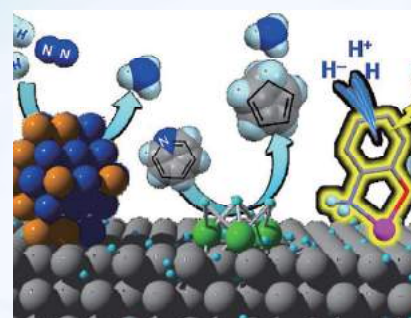
では、次に、山内先生ご自身の研究内容と夢について聞かせて下さい。

私も折茂教授同様、水素が大好きで、

ずっと水素の研究に携わってきました。きっかけは、筑波大学でポスドクをしていた時に、金属ナノ粒子中の水素の動きを固体NMRを使って観察する研究を始めたことでした。そして2003年、世界で初めて、水素原子がパラジウムの金属ナノ粒子中で、量子効果の1つであるトンネル現象を観測したのです。以来、私は、水素にすっかり魅了されてしまいました。そこで、新たに、金属ナノ粒子中に水素を溜める水素吸蔵の研究も始めました。さらに、水素をさまざまな元素と化学反応させてみたいと思うようになり、2008年、北海道大学の触媒センターに移り、触媒の研究を始めました。ここでは、水素原子を活性化させるための手段として、光エネルギーや電気エネルギーを使う方法を勉強しました。その後、2011年に現在の九州大学カーボンニュートラル・エネルギー国際研究所に移ってきたわけですが、これまでの水素に関するすべての研究が、A04での研究に活かされています。

日本は資源貧乏国で、そのため、一生懸命働いても、資源国に太刀打ちできない側面があります。それに対し、ユビキタスな物質を使って、資源問題を解決できれば、日本ももっと心豊かで幸せな生活が送れるはずですね。その実現に向け、今後も研究に尽力していきたいですね。

(取材・文:サイエンスライター 山田久美)



高活性水素物質変換プロセス

第2回全体会議・若手育成スクール

2019年1月11日(金)-12日(土)東北大学金属材料研究所において、第2回全体会議・若手育成スクールを開催しました。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の報告、若手育成スクールでは、若手サイエンティストからの研究成果の報告がありました。各計画研究の発表後は共通課題である「水素」を基に自らの研究の枠・領域を超えて活発な質疑応答がありました。普段はあまり関わりのない「物理」と「生物」といった異分野と議論することの楽しみ、「水素」によって他分野の多くの研究者と繋がる科学の醍醐味を感じました。有機的連携が順調に進み出しており、計画研究をまたいだ共著論文として次々と報告しています。若手育成スクールでは、若手サイエンティストのエネルギーな研究報告、質疑応答においては著名な先生方からの鋭い質問やアドバイスに、笑顔で真摯に受け答えをするフレッシュさが印象的でした。

会議の締めくくりでは学術調査官、評価グループ、ゲストの先生方から今後の研究について大変貴重なご意見を頂戴しました。いつもお力添えを賜っていることに感謝申し上げる次第です。

来年度は、新たに公募研究の先生方、多数の若手サイエンティストの方がメンバーに加入する予定です。新たな気持ちで研究に取り組むことをメンバー全員で共有して閉会となりました。



平成30-34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革新的材料・デバイス・反応プロセスの創成 -
第2回若手育成スクール/第2回全体会議

会期：平成31年1月11日(金)～1月12日(土)
場所：東北大学片平キャンパス 金属材料研究所2号館11F講堂
(〒980-8577 仙台市青葉区片平二丁目1-11)
(<http://www.imr.tohoku.ac.jp/ja/about/location.html>)

1月11日(金)
<第2回若手育成スクール>
 10:30～10:40 開会
 【若手発表】※20分 (質疑の都合あり)
 10:40～11:00 A05：藤山 浩(東京大学)
 11:00～11:20 A04：吉丸 和太郎(九州大学)
 11:20～11:40 A03：三宅 純平(山梨大学)
 11:40～11:50 休憩
 11:50～12:10 A02：北條 悠実(東北大学)
 12:10～12:30 A01：金 福成(東北大学)
 12:30～12:40 全体閉議、閉会

<第2回全体会議(1日目)>
 14:00～14:45 開会、全体挨拶、自己紹介
 【各計画研究による発表】※各45分(質疑の都合あり)
 14:45～15:30 A01：折茂 慎一(東北大学) / 山室 稔(東京大学) / 齋藤 悠之(量子科学技術研究開発機構)
 15:30～16:15 A02：一杉 太郎(東京工業大学) / 宇佐美 徳隆(名古屋大学)
 16:15～16:30 休憩
 16:30～17:15 A03-1：宮北 輝治(山梨大学) / 小橋 新一(甲種田大学) / 福井 舞一(大阪大学)
 17:15～17:45 コロッセー
 18:00～20:00 意見交換会(宇内レストラム棟)

1月12日(土)
<第2回全体会議(2日目)>
 【各計画研究による発表】※各45分(質疑の都合あり)
 10:00～10:45 A03-2：森 功康(東京大学) / 植川 芳樹(兵庫県立大学) / 小林 玄彦(分子科学研究所)
 10:45～11:30 A04：山内 崇徳(九州大学) / 菊池 徹(中央大学)
 11:30～13:00 昼食
 13:00～13:45 A05-1：濱田 悠之(東京大学) / 野田 博康(量子科学技術研究開発機構)
 13:45～14:30 A05-2：栗川 真司(東京大学) / 志賀 基之(日本原子力研究開発機構)
 14:30～15:30 全体閉議、コメント、閉会

【連絡先】新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」マネジメントサポート担当(東北大学・新研究棟)
 TEL: 023-255-2973
 E-mail: secretary@hydrogenomics.jp



第2回全体会議・若手育成スクール

新規加入された若手サイエンティストの皆さん ※敬称略

佐藤 龍平(東京大学) 宮本 聡(慶應義塾大学) 小松 遊矢(東京工業大学) Bo Thomsen(原子力機構) 山本 良幸(東京大学)

【共催】さきがけマテリアルズインフォマティクス領域国際シンポジウム



さきがけマテリアルズインフォマティクス領域国際シンポジウム

2019年2月9日(土)-11日(月)東京大学本郷キャンパスにおいて開催された、さきがけマテリアルズインフォマティクス領域国際シンポジウムに本領域「ハイドロジェノミクス」も共催しました。理論・実験・計算科学とデータ科学が連携・融合した先進的なマテリアルズインフォマティクスのための基盤技術の構築において、広範な内容の講演・ディスカッションが行われました。海外からの招待講演者13名を含む205名に参加いただいた盛大なシンポジウムとなりました。



東京大学生産技術研究所基礎系部門

小倉 正平

東京大学生産技術研究所の小倉正平です。若手とみなしていただきありがとうございます。

私はこれまで水素のエネルギー媒体としての利用を目指して、特に水素の貯蔵・純化用材料の高性能化という観点から水素吸蔵材料であるパラジウムの合金における水素の吸収・放出ダイナミクスの研究を行ってきました。主に共鳴核反応法と呼ばれる材料中での水素の深さ分析が可能な手法と、水素の放出温度や放出量の分析が可能な昇温脱離法を組み合わせる研究を行い、水素の吸収・放出ダイナミクスが表面構造や表面吸着物によって大きく変化することを見出してきました。

最近では炭化水素の水素化反応などの水素が関わる表面での化学反応にも興味があり、また表面における水素のスピンドイナミクスの解明や制御を目指して電子と核のスピンを偏極した水素原子ビーム装置の開発も行っています。ハイドロジェノミクスの会議に参加させていただき、自分が水素のほんの一面しか知らなかったことを痛感するとともに、今まで知らなかった水素の多彩な面に触れることができ、水素の重要さ、奥深さ、可能性の大きさを改めて感じています。少しでも本プロジェクトの発展に貢献できるようがんばりたいと思っています。



大阪大学大学院基礎工学研究科物質創成専攻機能物質化学領域 田邊 一郎

大阪大学大学院基礎工学研究科の田邊一郎です。2016年4月から、福井賢一教授の研究室で助教をしています。所属学会は日本化学会、応用物理学会、電気化学会、日本分析化学会、日本表面真空学会、日本分光学会で、波長200nm以下の遠紫外域とよばれる波長域を含めた紫外分光をメインに研究を進めています。紫外分光では物質内の電子励起に伴う吸収を検出することができ、私たちの装置は減衰全反射法(ATR法)を採用することで表面感性という強みも有しています。

ハイドロジェノミクスでは現在のところA03-1で水素貯蔵高分子の測定を進めており、大きな分子内に水素原子が一つ入る(ケトンからアルコール)だけで大きく電子励起スペクトルが変化することが分かってきました。今後は、多角入射解析や電気化学環境下におけるスペクトル測定を通して、水素貯蔵と放出の過程における材料組成変化の様子を表面からの深さ情報も含めて分光学的に明らかにしていきたいと考えています。

2013年4月からこれまでに酸化チタンをはじめとした無機半導体やイオン液体などの機能性材料のATR紫外分光研究を進めてきましたが、この新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」で応用分野が広い魅力的な新しい材料群の研究に携われることを嬉しく思っています。



山梨大学クリーンエネルギー研究センター

三宅 純平

山梨大学の三宅です。私は、有機合成化学的アプローチによる新規高分子の合成を専門にしております。現在は主に、固体高分子形燃料電池(PEFC)への応用を目指した新規高分子電解質の合成、ならびに、その薄膜の物性・構造解析、プロトンの挙動解明に関する研究に取り組んでいます。

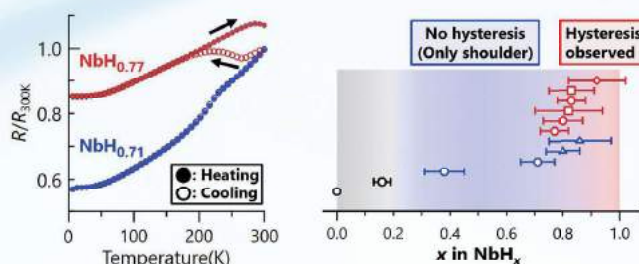
現行のPEFCには、性能と耐久性に優れるフッ素系電解質膜が利用されていますが、ガス透過性、環境適合性、コスト等の観点から、構成元素にフッ素を含まない非フッ素系(炭化水素系)電解質膜が、次世代膜として期待されています。しかし、これまでに開発されてきた非フッ素系電解質膜は、個別の物性においてはフッ素系電解質膜の物性を凌駕する材料はあるものの、全ての物性を考慮するとフッ素系電解質膜に置き換わる非フッ素系電解質膜は存在しません。特に、機械的・化学的安定性を担保しつつ、薄膜中のプロトン導電率を著しく向上させることは困難であり、これを打破するための有効な分子設計は重要な課題です。

私は、高分子電解質のプロトンの空間的な配置を精密に設計し、薄膜中におけるプロトンの高速移動機能と高密度機能の融合による課題解決にチャレンジしてみたいと考えています。本領域には異なる分野の材料系研究者に加えて、最先端の解析やシミュレーションを専門とする先生方が結集しており、皆様と一緒に、ハイドロジェノミクスに取り組めることを、楽しみにしております。

研究ハイライトのご紹介①

東京工業大学物質理工学院

助教 清水 亮太 M2 笹原 悠輝



ニオブ水素化物薄膜の成長方位と薄膜内水素の含有量を制御し、室温よりも高い領域にまで及び抵抗の温度ヒステリシスの観測に成功。

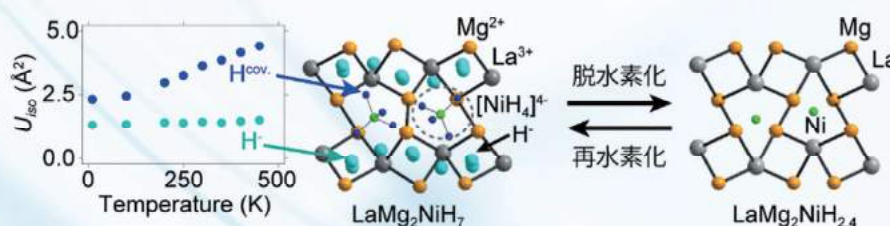
金属水素化物は固体内の水素密度に依存して光学・電気特性ががらりと変化します。また最近では、100万気圧以上の高水素密度環境下において200 K以上の超高温超伝導も報告され、次世代の電子材料の1つとして注目されています。しかしながら、エレクトロニクス応用に向けた高品質な薄膜合成と、物性制御の鍵となる水素密度制御による薄膜物性研究はほとんどなされていませんでした。そのような背景のもと、本研究ではニオブ水素化物の構造・電気伝導性に着目し、我々の強みである薄膜界面制御・評価技術に加え、折茂研究室(A01:折茂教授、大口准教授)における水素化物の取り扱いに関する知見と、福谷研究室(A05-1:福谷教授、小倉助教)における水素密度の精密解析技術とを融合することで、本成果が達成されました。

本成果の対象であるニオブ水素化物だけでなく、様々な金属の水素化物の薄膜においても光学・輸送特性が薄膜内水素密度に敏感であり、薄膜・界面における水素の密度や構造・化学状態を理解することは共通の重要な課題です。金属水素化物の薄膜・界面物性の包括的な理解と新奇機能発現に向け、現在、放射光X線や中性子を用いた先端計測グループ(A05-1)や理論計算グループ(A05-2)との共同研究も進めています。このように、新学術領域「ハイドロジェノミクス」における連携は我々の研究においてますます大きな位置づけとなっています。

研究ハイライトのご紹介②

東北大学金属材料研究所

助教 佐藤 豊人



共有結合性とイオン結合性の水素が共存する錯体水素化物の脱水素化反応機構を結晶構造と水素の結合状態の観点で解明するとともに、その再水素化反応機構も明らかにした。

本研究では、共有結合性水素(H^{cov})とイオン結合性水素(H^-)が共存する錯体水素化物 $LaMg_2NiH_7$ の脱水素化反応の機構解明を目的にX線・中性子回折、中性子非弾性散乱を用いて $LaMg_2NiH_7$ の脱水素化反応過程での結晶構造と原子・分子の振動が観測されました。その結果、 H^{cov} の温度因子(U_{iso})は、 H^- に比べて大きな値を示し、このことにより H^{cov} を含む錯イオン $[NiH_4]^{4-}$ 周りの化学結合が弱体化され、脱水素化反応が誘発されることが示唆されました。また、 $LaMg_2NiH_7$ の脱水素化反応過程において新規水素化物相 $LaMg_2NiH_{2.4}$ が発見されるとともに $LaMg_2NiH_7$ と $LaMg_2NiH_{2.4}$ の間では、可逆的な脱水素化・再水素化反応が進行することが明らかになりました。

このようにX線と中性子の相補利用による結晶構造(静的情報)と振動(動的情報)に関する結果から原子・分子及び水素の結合状態の観点での錯体水素化物の脱水素化反応の機構解明と新規水素化物相を介する可逆的な脱水素化・再水素化反応の発見につながりました。従って、本研究で用いられたような複数の評価・解析及び結果を統合的に考察することでハイドロジェノミクスが掲げる水素の結合性による高次水素機能の誘発及び、革新的な材料・デバイス・反応プロセスの創成につながることが期待されます。

合成・試料作製

高分子・有機系薄膜作製装置

- サンクメタル社製
- 高次構造や膜厚が制御された高分子薄膜を作製し、他計画研究と薄膜試料を共有する
- 設置場所: 山梨大学 宮武研究室



熱分析・質量分析

水素化物飛行時間型質量分析装置 JMS-T200

- EI(Electron ionization),FI(Field desorption) 水素化物の質量分析測定に使用
- 設置場所: 東京大学物性研究所 森研究室



電気特性・電気化学測定

電気化学インピーダンス装置

- Metrohm Autolab社製
- 電極界面でのインピーダンスを測定する [10 μ Hz~1MHz, 1m Ω ~100G Ω]
- 設置場所: 大阪大学 福井研究室



顕微鏡

その場観察装置

- キーエンス社製
- 600°Cまで加熱可能
- 熱処理によるモフォロジー変化のその場観察に使用
- 設置場所: 名古屋大学 宇佐美研究室



その他

触媒分析装置

- MicrotracBEL BEL-CAT
- 四極子MAS、TPD、TPR、TPO測定、パルス吸着測定、BET 比表面積測定などの触媒評価
- CO 酸化、プロックス反応 (2CO+O₂→2CO₂)
- 設置場所: 九州大学 I²CNER



- 2019年5月17日(金)–5月18日(土)
「第3回全体会議・若手育成スクール」を東京工業大学大岡山キャンパス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月中～下旬
「第2回ハイドロジェノミクス研究会／第4回若手育成スクール」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)
「MRS-J(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。

■ 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>

