

Hydrogenomics

News Letter



CONTENTS

- P1 領域代表ご挨拶 / 各計画研究代表 ～5年を振り返って～
- P5 第二期公募研究 ～ハイドロジェノミクスを通して～
- P9 評価グループ、国内・国際アドバイザリーグループ、学術調査官の皆様
- P10 第一期公募研究、若手サイエンティストの皆様
- P11 最終報告会 / 水素連研究会12月研究会 / 今後の予定

お礼:有機的連携による研究者ネットワークの形成

領域代表 東北大学 折茂 慎一



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(2018~2022 年度)」は、4年7か月の研究期間を経て本年度末で無事終了となります。本領域の準備・設置・運営に際しては、計画研究代表・分担・協力・評価グループ・アドバイザーの先生方、そして若手研究者や事務局の皆様方、さらには多面的にご指導頂きました歴代の学術調査官や領域外の先生方など、総勢200名以上の方々に支えて頂くことができました。この紙面をお借りしまして、心よりお礼を申し上げます。

ハイドロジェノミクスでは、水素を“使いこなす”ための指導原理となる水素科学の構築を目指して研究を進めて参りました。準備期間を含めると約7年にわたり幾多の議論を重ねて参りましたが、常に念頭においていたことは、工学・化学・物理学・生物学などの多様な研究者との「学問分野の枠を超えた有機的連携」の実現です。実際に、前半の2020年1月の国際会議(札幌)までは、対面での有機的連携を実感できました。一方それ以降の後半は、約2年半ものあいだ新型コロナウイルスの影響があり主にオンラインでの連携を余儀なくされましたが、前半の布石もあり着実に成果が創出されました。

個別の成果はもちろん重要ですが、研究者ネットワークの形成そのものがハイドロジェノミクスとしての最大の成果だと考えています。特に、新たな若手研究者が領域に参画して、有機的連携に戸惑いながらも成果をあげ、それに触発された他の若手研究者が奮起する、といった好循環が少なからず実現できたことは望外の喜びです。今後もこの研究ネットワークを存分に利用して頂き、また日本MRS水素科学技術連携研究会(Hydrogenomics Alliance, Japan)などの新たな活動を通じて、より大きな研究課題に挑戦して頂ければと願っています。私自身、今後もハイドロジェノミクスのさらなる高みを目指してご関係の先生方とともに研究を継続して参りますので、引き続きご指導ご鞭撻を賜りますよう、どうぞよろしくお願いいたします。

最後に、お世話になりましたすべての方々にあらためてお礼を申し上げますとともに、今後の研究の飛躍をお祈りしたいと思います。

各計画研究代表 ~5年を振り返って~

A01

計画研究代表

東北大学

折茂 慎一



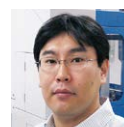
【研究分担】
山室 修
東京大学



【研究分担】
齋藤 寛之
量子科学技術研究開発機構



【研究協力】
清水 克哉
大阪大学



【研究協力】
亀川 厚則
室蘭工業大学



【研究協力】
中村 優美子
産業技術総合研究所



【研究協力】
宮岡 裕樹
広島大学

A01では、「高密度水素による超機能材料の合成」について様々な視点で研究を進めることができました。まず、領域内連携によって水素の高密度化技術を確認、単核金属Mでは最高配位となるMH₉型の高配位水素クラスターやB₁₂H₁₂型の籠状水素クラスターを有する高密度水素化物の合成とそれらを用いた高次水素機能の研究、そして中性子準弾性散乱での水素クラスターの剛体回転における広い緩和時間分布の観測などに挑みました。その結果、LiやNaなどの一価陽イオンに加えて、MgやCa、Mnなどの二価陽イオンが高速イオン伝導性を示す新たな高密度水素化物の合成、固体・液体電解質開発や次世代電池実証への展開、そして高圧下での超伝導性に関する研究も推進することができました。さらに、AlとFeなどありふれた金属だけから構成されるAl₃FeH₄や、水素が層状に局在したAl₂MnH₃など、従来は合成困難とされてきたAlベースの新たな高密度水素貯蔵材料の開発に向けた研究、さらにアンモニアとして水素を高密度に含むアンミン錯体材料などの研究も進展しました。

水素の「高密度化」に関しては、超伝導や超イオン伝導に関する新たな研究成果が国内外から続々と報告されており、今後も「超機能」の創成がおおいに期待できそうです。多彩な顔ぶれとなったA01の分担・協力の先生方との共同研究は、「(領域代表でなく)計画研究代表」の立場としてハイドロジェノミクスを楽しませて頂けるかけがえのない時間であり、そのことに感謝しています。世界に誇れる“高密度化チーム”であったと言えるよう、最終報告に向けてしっかり研究を纏め上げたいと思います。

A02

計画研究代表

東京大学
一杉 太郎



【研究分担】
宇佐美 徳隆
名古屋大学



【研究分担】
秋山 英二
東北大学



【研究協力】
長田 実
名古屋大学

今、静岡からの帰りで新幹線の中です。青い空、富士山の白い雪、そして黒い山体が美しい風景を作り出しています。車窓から景色を眺めながら、この5年を振り返ります。

折茂先生から新学術領域研究の申請についてうかがったことを、昨日のように思い出します。その後の素晴らしいリーダーシップについて私自身、多くを学びました。

私は計画研究を任せていただき、界面における水素の状態制御（濃度や荷電状態、移動性等）について、研究を推進しました。ハイドロジェノミクス内の多くの先生や学生さんの協力があったからこそ研究が進みました。この5年間で研究が大きく広がったと明言できます。皆様に心より御礼申し上げます。

「界面」では、異質なものが接します。そのとき、これまで想像もしなかった「新たなもの・こと」が生まれます。そこが「界面」の面白さです。物質同士の界面だけではなく、異なる研究分野同士、あるいは人と人の出会いも「界面」と言えるでしょう。そのような「界面」は新たな着想を生み、研究の原動力を生み出します。新学術領域研究の醍醐味は、まさに「界面」を多数作り出すことと言えます。実際に、ハイドロジェノミクスから生まれた研究の種が育ち、新たなプロジェクトも進めています。

新学術領域研究・ハイドロジェノミクスは終わりますが、水素のこと、そして、「界面」を創ることを常に意識して研究生を送りたいと考えています。車窓から見える風景にも「界面」があふれています。空気と雪、そして土が出会ったからこそ、皆の心を打つ景色ができあがったのでしょうか。

A03-1

計画研究代表

山梨大学
宮武 健治



【研究分担】
福井 賢一
大阪大学



【研究分担】
小柳津 研一
早稲田大学



【研究協力】
湯川 宏
名古屋大学



【研究協力】
森本 正和
立教大学



【研究協力】
中村 将志
千葉大学

A03-1では、プロトンが水中と同じように高速で伝導する高分子薄膜と、水素を高密度かつ可逆的に貯蔵できるプラスチックシートの機能を突き詰め、高分子化合物内での水素の挙動把握と制御に関する知見を集積することができました。これらを組み合わせた（高分子薄膜とプラスチックシートから成る）異種界面で、物質が効果的に移動・反応する構造を構築することによって、外部から水素を供給しなくても発電できる“リチャージャブル燃料電池”の発明に繋がりました。後半ではさらに新しい創蓄電デバイスとして、水素が関与するレドックス活性有機化合物を負極に用いた全固体空気電池の原理実証にも成功し、当初の期待を上回る成果を挙げる事ができました。デバイス開発に軸足を寄せていたこともあり他計画研究に比べて連携研究の数はそれほど多くはありませんでしたが、各研究の密度が濃く質の高い共著論文としての成果が得られ、特に、高分子内のプロトン・水分子の構造解析(A01、A05)、水素交換反応触媒(A04)、などは前倒しでの目標達成に大きく貢献しました。新型コロナウイルス禍で研究活動にも制約がかかる中、最大限にご尽力いただいた領域の皆様方に心よりお礼申し上げます。

水素科学の学理構築と次世代エネルギーデバイスの創出はここが終結点ではなく、次のステージの始まりです。折茂先生の強力なリーダーシップのもと、産業界のご支援も受けて水素科学技術連携研究会が発足し、工学・化学・物理学の分野から多くの技術者・研究者を集めて、水素の基礎科学から社会実装までを見通す討論のプラットフォームとして活動を始めました。小生も化学分科会の幹事長として参画させていただいております。政府が進めるGX実現に向けて水素科学は本丸の分野であり、ハイドロジェノミクスで生まれた連携研究が新たな国プロに繋がっています。水素科学のワクワクはまだまだ続きます。乞うご期待。

A03-2

計画研究代表

東京大学
森 初果



【研究分担】
小林 玄器
理化学研究所



【研究分担】
樋口 芳樹
兵庫県立大学



【研究協力】
西村 睦
物質・材料研究機構

A03-2では、「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」をテーマに研究を推進しました。計画研究の研究成果として、有機系の森は、無水有機プロトン伝導の新たな機構である「プロトン互変異性」を利用した超プロトン伝導を発見し、100°Cを超えても作動する燃料電池設計に一石を投じました。さらに、無機系の小林先生は、ヒドリドイオン電池に資する「ヒドリド超イオン伝導」、およびヒドリドの集団励起を見出してあります。また、生体系の樋口先生は、「ヒドロゲナーゼの水素分解・合成化学反応、H-D交換反応、および、オルト水素-パラ水素の変換反応」を同時に測定するラマン分光酵素活性計測を可能といたしました。

ハイドロジェノミクス内での連携研究として、有機系では、公募研究B02の加藤先生、公募研究A05立川先生、A04吉信先生と共同で、2分子層膜における水素-電子カップル型スイッチングの観測に初めて成功いたしました。さらに領域全体をまとめた学理として、4つの代表的な水素状態(プロトン、水素原子、水素分子、ヒドリド)に基づき、各状態が結合した新たな水素状態を見出し、その利用により新機能が創出されたことを明らかにしました。

5年前に、「ハイドロジェノミクス」がスタートしたとき、多様な分野の研究者が参画していたためか、領域の半分以下しか顔見知りではなく、学術に多様な価値観があることを改めて感じました。このように、私の「あたり前」が、他分野の研究者には「あたり前でない」ことを知りえて、一緒にハイドロジェノミクスで研究をさせていただいたことは大きな収穫です。今後もこの領域を基盤として、水素の学術が発展することを願うばかりです。

最後に領域代表の折茂先生、計画研究代表の皆様、メンバーの皆様、事務局の伊東様に心よりの感謝を述べて筆をおきたいと思えます。

A04

計画研究代表

九州大学
山内 美穂



【研究分担】
吉信 淳
東京大学



【研究分担】
張 浩徹
中央大学



【研究分担】
島 隆則
理化学研究所



【研究分担】
藤田 健一
京都大学



【研究協力】
永岡 勝俊
名古屋大学



【研究協力】
劔 隼人
大阪大学



【研究協力】
石元 孝佳
広島大学

A04は、高活性水素を利用した新規反応プロセスの開拓を目標とし、高選択、高難度、高効率の反応を実現するための水素の利用法の探索を行ってきました。領域研究の中で、酸化物電極でプロトンと電子の高度な制御によりアミノ酸の高選択合成に成功しました。また、CO₂やN₂さらにはバイオマスなどの安定で利用困難な物質を、ヒドリドクラスターあるいは錯体分子上に発生した高活性水素により有用物質に変換する新規の高難度反応や、光エネルギー変換による高活性水素の生成プロセスを介したCO₂固定や化成品の高効率合成を実現しました。さらには、二次元界面上での水素終端による高品質グラフェンの合成など、極めて独創性のある新規の反応プロセスを開拓しました。

A04には、シングルアトム界面(吉信先生)、ヒドリドクラスター(島先生)、電子プーリングクラスター(張先生)、水素のヘテロリティック開裂を可能とする錯体分子(藤田先生)と、他で聞くことのないような材料を扱う研究者が集結しました。メンバーと連携研究者である永岡先生、石元先生、劔先生のご尽力により、新しい反応プロセスを見出すだけでなく、水素を使いこなすためには水素分極の変化過程を高度に利用することが重要であるという統一的理解に至ることができました。独創的で、他では扱いが難しいほどデリケートな材料を扱ってきたからこそ、変幻自在に変化する水素の反応性を深くさらには俯瞰的に理解できたのではないかと考えております。また、A04内外の交流を通して私自身が研究者として成長できたと思えます。充実した5年間を過ごすことができたことに領域メンバーの方々に心よりお礼を申し上げます。

A05-1

計画研究代表

東京大学
福谷 克之



【研究分担】
大友 季哉
高エネルギー加速器研究機構



【研究分担】
町田 晃彦
量子科学技術研究開発機構



【研究協力】
幾原 雄一
東京大学



【研究協力】
下村 浩一郎
高エネルギー加速器研究機構



【研究協力】
田中 秀和
大阪大学

A05-1では、「水素の先端計測による水素機能の高精度解析」をテーマとして研究を推進しました。“観測困難な元素”とも言われる水素を高精度に観測すべく、計画研究の福谷グループではチャネリング核反応法、大友グループはスピン偏極中性子散乱、町田グループはX線のブラッグコヒーレント回折イメージング法、の開発に取り組み、それぞれの測定法の高度化に成功しました。水素化過程のその場観測を可能にするとともに、電気抵抗などの物性も同時測定できるようになり、計測の幅が広がったことを実感しています。一方で、領域の多くの方と連携・議論する機会を持つことができたことは、実に有意義でした。A02一杉・清水グループとの水素化物薄膜の解析、A03-2樋口グループとのオルトパラ水素分光による反応解析、A02宇佐美グループとの太陽電池積層膜における水素機能解析、A05-2志賀グループとの氷中ミュオンの状態解析、A05-2濱田グループとのチタン水素化物の構造解析、第一期公募研究の田中グループ、前里グループ、中村グループとの金属酸化物への水素ドーピングによる物性制御、など新たな研究テーマに挑戦する機会を得て、自分の視野が大きく広がったと感じています。試料作製にあたって、種々の試料を提供くださり、ときに快く装置を使わせてくださった一杉・清水グループと共同研究できたのは幸運でした。また、ハイドロジェノミクス解説論文執筆にあたって、A04吉信、山内、島先生とかわした密な議論は刺激的な体験でした。ここで培ったアイデア、様々な研究者の方とのつながりを基盤に、ハイドロジェノミクス研究をより一層発展させたいと思っています。最後になりますが、研究期間を通じて、常に細やかに気配りをしてくださった領域代表の折茂先生、事務局の伊東さんはじめ領域メンバーの皆さまに感謝します。

A05-2

計画研究代表

東京大学
常行 真司



【研究分担】
濱田 幾太郎
大阪大学



【研究分担】
志賀 基之
日本原子力研究開発機構



【研究分担】
杉野 修
東京大学



【研究協力】
有田 亮太郎
東京大学



【研究協力】
越智 正之
大阪大学

観測にかかりにくい水素を含む物質の構造を実験的に決定するのは、大変難しい問題です。一方、物質中の原子配列を理論予測することは、多数の原子座標からなる超次元空間のエネルギー最適化問題であり、計算科学の難問の一つと考えられています。そこで私たちは、実験とシミュレーションを相補的に組み合わせることで水素を含む物質の構造解明を実現し、ハイドロジェノミクス研究に貢献するという目標を掲げ、シミュレーション手法の開発と応用を行ってきました。

この5年間で、粉末回折実験の情報を構造シミュレーションに直に取り込むデータ同化構造探索手法を開発し、ノイズのある質の悪いデータや長波長領域に限られたデータから、結晶構造やアモルファス構造の確度の高い予測ができるようになりました。経路積分分子動力学法によって、水素原子核の量子効果が精密に計算され、量子効果の様々な役割が定量的に明らかになりました。また、精緻な第一原理電子状態計算を使って、表面分子吸着系の構造や反応、水素移動がもたらす固体の電子相転移機構、超イオン伝導体のイオン伝導機構などが明らかになりました。

これらの研究の多くは、本領域の実験研究者からの強いニーズありきで始まり、多数の連携研究、共同研究として進められました。その過程で既存の方法論の問題が明らかになり、新しい手法開発にもつながりました。材料における水素の多様な役割を目の当たりにし、私たちのものの見方も変わりました。分野横断的な本領域に関わりご尽力いただいた皆様に、心より感謝申し上げます。

B01

筑波大学

近藤 剛弘



私たちは、水素とホウ素という軽い元素のみで構成されるホウ化水素シートという二次元物質を合成することに成功して2017年に論文で発表しました。この物質は水素が質量当たり約8.5%含まれているという特徴があります。そこで、この物質を用いて新しい高密度水素貯蔵材料を開発したいと考え、これを目標としてハイドロジェノミクスの公募研究に第一期より参加させていただきました。領域内共同研究によりホウ化水素シートに関して様々な特異な性質を明らかにすることができました。特にA05-2の濱田先生との共同研究では、ホウ化水素シートが水に対して化学的に安定であることを実験と理論から示すことができ、2021年に論文発表ができました。また、ホウ化水素の水素欠損部に二酸化炭素が吸着することを見出し濱田先生の理論計算と一致する実験結果が得られました。さらに、約150°Cでも二酸化炭素がエタンに転換するCCカップリングの触媒機能があることも明らかにすることができ2022年に論文発表ができました。他にも領域内の様々な先生方と共同研究を実現できたことがこの領域で得た最大の宝となっています。今後も領域内で得られた人脈を大事にして研究を進めていきたいと思っています。

B01

北陸先端科学技術大学院大学

長尾 祐樹



私の中で2016年頃から課題でありました、炭素電極上の高分子電解質薄膜のイオン伝導度や分子配向状態を同定する方法を確立できたこと、さらにイオン伝導度や分子配向状態は界面によって変わると言う知見は、今後、界面をデザインしていく上で益々重要になっていくものと思われます。研究初期の段階で方針についてアドバイスを下さり、A03-1の福井先生に御礼を申し上げます。フォトリソグラフィーで歩留まりが良い評価システムを確立する方向に研究の舵を切った当初は、不慣れな研究で大変でしたが、最終的に目的の評価の確立につながれたことは、研究室内の若手メンバーの自信にもつながりました。

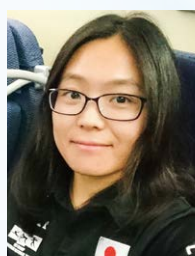
また、折茂領域代表のおかげで、A03-1の宮武先生、福井先生、小柳津先生、中村将志先生や森本先生と定期的に得られたデータを議論させていただく機会を得ることができ、私の研究の幅を広げることができました。公募研究B01の近藤先生や公募研究B02の正井先生とは時間をかけてデータの取得や中身を議論させていただきました。いずれの機会につきましても、今後成果として世に出ていくことを楽しみにしています。

水素を軸とした大変幅広く深い研究者の皆様と一緒させていただく機会に恵まれ、新たな人脈形成ができました。今後の研究活動に活かしていきます。皆様、お世話になりました。ありがとうございました。

B01

大阪大学

榮永 茉莉



本研究では水素化合物の高圧力で発現する高温超伝導を探索しています。この物質系の先駆けとなった硫化水素は、150 GPa (150万気圧) の高圧力で203 Kの超伝導転移温度 T_c を示しますが、本公募研究では、この硫化水素に炭素やリンなどの他元素をドーピングすることで、より高い T_c を得ることを目標としました。リンドーピング硫化水素は、再現性がとれないものの、硫化水素に比べて25 Kの T_c の上昇を観測しました。

公募研究以外にも、2年間の公募研究を通して、A05-2の常行先生との共同研究をスタートし、これまでに超伝導を発見したものの結晶構造の同定ができていない水素化物について、データ同化の手法により結晶構造の解明を進めていただいています。他にも、A01の折茂先生から水素化物の元となる化合物や新しい水素化物をご提供いただき、高圧力で高温超伝導を示す新規水素化物を継続して探索しています。第二期より2年間、公募研究B01に参画させていただき、共同研究などで新しい研究や人脈を得ることができました。ありがとうございました。これからも、高圧力を使ってこの研究領域へ少しでも貢献していけたらと思います。

B02

工学院大学

前野 禪



ゼオライト内Gaヒドリド種の局所構造をジヒドリド([GaH₂]⁺)に制御することで、エタン脱水素反応に高活性・高選択性・既報を上回るエチレン生成速度を示す白金フリー固体触媒を開発しました(Catal. Sci. Tech., 2022, 12, 986.)。また、ゼオライト構造がヒドリド種生成と触媒活性に与える影響を調査し、生成量と定常活性に明確な相関関係があることが分かりました(Cat. Today, 2023, in press)。

当初の計画にあったゼオライト内Gaヒドリド種のin situ分光測定に関する連携研究をA01齋藤先生と推進しました。また、公募研究B02北野先生とはバルク金属水素化物のアルカン変換能の連携研究を採択後に開始しました(いずれも論文投稿中)。

本領域で異分野の先生方との人脈が広がり、本領域終了後の新たな連携研究も動きだしています。何より、水素化物材料の面白さや難しさを実感できたことが、研究者として非常に大きく、水素化物触媒の研究を今後も推進したいと思えました。連携研究や報告会などでご指導頂いた先生方皆様にこの場を借りて感謝申し上げます。

B02

東京大学

山田 鉄兵



本公募研究ではプロトン共役電子移動(PCET)反応に着目し、酸化還元反応に伴う溶媒和エンタルピー変化を熱化学電池のゼーベック係数に利用しました。前半の2年ではこの動作原理を実証し、バナジウムアキア錯体へと展開することで、熱化学電池のベンチマークとなっているヘキサシアノ鉄イオン系を凌駕する性能指数を示すことに成功しました。後半の2年では、熱化学電池の逆反応を利用して電子冷却効果を実証しました。

上記に加えて、プロトン共役電子移動反応の触媒を有するA04山内先生と連携した熱化学電池を作成し、第一期公募研究の石元先生らの計算化学によるメカニズムの探索を行いました。これにより、プロトン脱離過程が当初の考えよりも遙かに複雑であることがわかりました。これは、さらに熱化学電池のゼーベック係数測定が、反応素過程の理解につながる新たな評価法としての有用性を示唆していると考えています。

ハイドロジェノミクスは物理と化学の交差点であり、別の言葉・趣味・文化の研究者がアルコールを触媒として交わることができたのが印象深かったです。研究成果に加え、教授へのプロモーションができたのも本領域のおかげと思っています。また後半の2年で行っていた電気化学ペルチェ効果を、従来の電子冷却系と比較することで、循環型ペルチェのアイデアが生まれ、さらにこれを逆転させて循環型熱化学電池の系にたどりついてCREST研究へとつなげることができました。折茂先生には迷惑ばかりおかけしましたが、これからも末永く恩返しができると思います。本当にありがとうございました。

B02

東京大学

正井 宏



はじめに、本領域に公募研究として2年間参画させて頂きましたことに、この場を借りて厚く御礼申し上げます。この公募研究によって、プロトンとの協働的な光分解性を持つ高分子材料を実現しました。これまで基礎的な物性や合成を中心に行ってきた私にとって、本領域における議論や共同研究は、材料中におけるプロトン運動性という新しい視点を、材料の設計に取り入れる貴重な機会となりました。その観点に基づき、公募研究B01の長尾先生との共同研究によって、プロトン拡散性と材料光分解性との関係を明らかにできたことも、本領域があってこそその成果といえます。

本領域は私にとって新しいフィールドであり、多くの先生方が初対面でしたが、班会議や全体会議においては多くの先生方からご議論を頂くことができました。期間の大半がコロナ禍でありオンライン会議がほとんどでしたが、検討段階であっても遠方の先生とも打ち合わせしやすく、重ねて議論ができたという、オンラインならではの恩恵も少なからずあったように思います。期間終盤では少しずつ対面の機会も得て、オンラインを体験したからこそ深い交流・人脈が形成されたようにも感じます。これからもそのつながりを元に、ハイドロジェノミクスの視点を生かした高分子材料研究を邁進してまいります。

B02

東京工業大学

北野 政明



ハイドロジェノミクスでは、第一期と第二期の両方において公募研究で採択いただき合計4年間お世話になりました。その中で私は、ヒドリドイオン(H⁻イオン)を含有する物質と担持金属ナノ粒子界面における水素のダイナミクスとアンモニア合成活性との関係性を中心に研究しました。本領域内には、ヒドリドを研究されている方が多く、ヒドリドイオン伝導を検討している第一期公募研究の飯村先生やA03-2の小林先生、ヒドリド錯体を研究されているA04の島先生など、普段同じ場で議論できない異分野の先生方が一堂に会して議論できたことは、自身の研究を理解していく上でも非常に貴重な機会となりました。飯村先生や公募研究B02の前野先生と共著で論文発表することができ、様々な触媒反応におけるH⁻イオンの有用性を発信することができました。また、研究期間終了後も共同研究を継続する先生方がおり、人脈を広げられたことも大きな成果です。一見全然異なる分野であっても、水素をキーワードにすることで、共通する現象が見いだせたことは大きな収穫であり、今後も知り合った先生方との継続的な連携を強化しながら、触媒のみならず水素科学の発展に貢献していきたいと考えています。

B02

京都大学

大木 靖弘



ハイドロジェノミクス領域の後半2年間で公募研究B02に加えて頂き、自然界の高効率触媒として働く酵素を手本とする錯体分子設計と水素関連機能の開発を進めました。特に、2つの金属原子が反応に関わるよう促す新しい分子を設計・合成することに成功し、また酵素機能から逆算して設計したクラスター錯体の反応性も幾つか明らかにできました。水素関連機能として掲げた目標の1つであるヒドリドの錯体への導入は、当初設計とは異なる形で実現することになりましたが、プロトンの反応利用も含め一定の結果が得られたと考えています。近い将来に論文化する予定です。

本領域の連携研究は、主にA04藤田先生、島先生と進めました。すぐに論文化できるレベルまでは到達しなかったものの、今後も連携を継続する種を生み出せたと考えています。

本領域を通して、関連する周辺領域の科学と考え方、特に固体化学の考え方やヒドリドの解釈、利用面について新たに勉強させて頂きました。主に分子レベルの合成化学を推進してきた者として、得た考え方や知識を今後役に立てるとともに、分子化学の考え方を固体化学にフィードバックできればと考えています。

B02

大阪大学

加藤 浩之



ハイドロジェノミクスの公募研究として、「二分子膜間でプロトン移動を能動的に誘起し、分子物性を可逆的に制御する」ことを目標に研究を進めて参りました。この間、A03-2森先生をはじめ、計画研究の先生方や公募研究の先生方から多くのご支援とご助言を賜り、結果としてデザインどおりの電界応答を得るに至りました。この目指し続けてきた研究成果が得られましたことを、とても感謝しております。ありがとうございました。くわえて、ハイドロジェノミクスの会議では、これまでの研究活動では拝見することがなかった多様な分野の研究を学ぶことができたことも、大きな収穫でした。最もシンプルな元素である水素の振る舞いが、物理化学における重要性にとどまらず、無機物と有機物の両者にわたる実用的な材料科学として未だ大きな可能性を秘めていることを改めて認識することができました。この新学術領域研究で一緒に活動できたことは、今後の研究指針を見定める重要な要素となっていると実感しています。引き続き得られた成果を発展させ、同領域に微力ながらも貢献したいと考えております。

B02

九州大学

中西 匠



プロトン移動とスピン転移が連動して発現するプロトン結合スピン転移(PCST)錯体を利用した機能(分極の光制御、磁性の電場制御)の実現、また固体中における新たなプロトン移動現象の開拓に取り組みました。従来と比べより多様な分子設計が可能となる新たな配位子を開発し、実際にその様な配位子を用いた錯体が熱および光誘起PCSTを発現することを確認しました。また、プロトン移動とスピン転移に加え、分子の回転が連動する新たなPCST錯体を開発することで、逆プロトン移動やリエントラントなプロトン互変異性挙動といった固体中における新たなプロトン移動現象を実現することが出来ました。

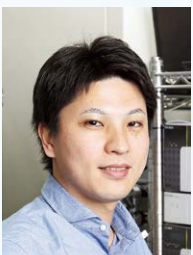
また、公募研究A05の堀先生との連携研究により、PCST現象が起こるメカニズムやPCST錯体の開発に応用可能な配位子設計の候補をDFT計算により明らかにしました。

ハイドロジェノミクスでの二年間の活動の中で水素連携研究会や国際学会への参加を通して異なる分野で扱われる水素の基礎的な側面から多彩な応用研究まで幅広く触れられる機会を頂き、自身のプロトン移動の研究の中では水素の特異性がどの様に活かされ、今後どの様に発展させるべきなのかを考える上で多くの知見を得る事ができました。

B02

東京理科大学

川脇 徳久



私は、このハイドロジェノミクスにて、新学術領域研究の公募研究B02に参画する機会を賜りました。右も左もわからない中で、A04山内先生にお声がけを頂いて、共同研究の目が出てきました。また、若手育成スクールでは講演の機会を賜り、A01折茂先生やA03-2小林先生から思ってもみなかった観点のご助言を頂いたことで、研究の幅が大きく広がりました。そのような先生方のご助言のもと、粒径1nm程度の極微細な金属ナノ材料である金属クラスターを利用したグリーン水素製造に向けた触媒の高機能化を目指しました。公募研究A05立川先生に計算科学の観点からの解析を、A04吉信先生に電子構造解析についてご協力を頂きながら研究を進めました。その結果、白金およびニッケルクラスターがそれぞれ水素生成および酸素生成反応に対して有用な触媒であることを明らかにしました。水素を軸とした分野横断的な本領域に参画できたことで、今後の研究にとってかけがえのない経験と人とのつながりができました。私が本領域に貢献できたことは微々たるものですが、本研究領域にて得られた交流を大切にさらに研究活動に邁進して、将来様々な形で恩返しができればと存じます。2年間大変お世話になりました。

A05

茨城大学

大山 研司



我々のグループは「白色中性子ホログラフィー」を世界で唯一実用化しています。これは、特定の元素周囲の原子構造を3次元的に可視化できる手法で、XAFS法と同様に、格子を組まない原子であっても構造を観測できます。さらに原理的には孤立した水素も観測対象となります。そこで公募研究A05のご支援によりこの手法を水素に拡大し、孤立水素の位置と置かれた環境の直接解明を目指しました。J-PARCにおいて世界初となる高エネルギー分解能多検出器ホログラフィー装置を構築し、元素選択性の大幅な向上に成功しました。公募研究以前には対象となる中心元素はB, Smなど限定されていましたが、これにより対象元素を拡大することに成功し、ようやく水素も視野にはいってきました。ハイドロジェノミクスへの参画により、水素の専門家とのつながりを持ってたことが水素の素人としては特に重要なことでありました。A01折茂先生はじめ、A02秋山先生、宇佐美先生に試料作成をしていただき、ホログラフィー実験が実現しました。世界でも特徴ある水素観測を目指してこれからもJ-PARCにおいて挑戦を続けていきますが、その上でこのつながりは何よりも貴重であります。改めて感謝申しあげたいと思います。

A05

筑波大学

堀 優太



2021年4月から2年間、生体内ハイドロジェノミクスの理論展開を目指し、公募研究A05として参画させて頂きました。特に水素の可逆的分解を行うヒドロゲナーゼに注目し、ヒドロゲナーゼの安定化を引き起こす内部構造について解析を行いました。

A03-2の樋口先生らと連携することにより、その内部の活性中心の具体的な構造や電子状態を特定することができました。さらに本領域では、ここでは挙げられないくらい多くの先生方と連携することができ、生体系だけではなく、材料や物質、これまで利用したことのない理論計算の検証など幅広い分野に対して研究を展開することができました。特に無水プロトン伝導物質の伝導機構解明に向けた理論解析では、単なる理論解析だけに留まらず、新規材料設計に向けた理論計算からのサポートも行うことができました。

変幻自在な水素を理解し使いこなすことを大きな目標として掲げている本領域においては、水素を直接取り扱うことが可能な理論計算は強力なツールであり、本領域内において理論計算の強みを最大限に活かした研究ができたのではないかと考えております。本領域内の先生方との連携や交流を通して、研究視野を広げることができ、また今後につながる新たな研究の開拓も行うことができました。本領域の一員になれたことを心より感謝申し上げます。

A05

横浜市立大学

立川 仁典



本新学術領域ハイドロジェノミクスでは二期にわたる公募研究に参画させていただき、特に(1)実験研究者との密な議論に基づいた高次水素機能の発現機構解明・予測、および(2)電子と原子核すべてを「まるごと」量子力学的に計算する新しい量子多成分系分子理論の開発を行いました。(1)では、公募研究B02の加藤先生が中心となり、A03-2の森先生とA04の吉信先生と共に、水素-電子カップリング系2分子膜を「新発想」素子として開発する際に、理論計算の立場で共同研究させていただきました。また、公募研究B02の川脇先生らの合成されたAu包接Ni多核錯体の理論計算など、数多くの共同研究も実施させていただきました。(2)では、第一期公募研究A04の石元先生と共に、表面への分子吸着に対する計算手法の開発や、backflow変換による新規分子振動状態理論を開発しました。このような理論計算と実験科学との協奏により、分子科学国際学術賞、また学生の講演賞受賞2件、ポスター賞受賞2件、最近では2022年度第9回HPCI利用研究課題優秀成果賞も受賞いたしました。いずれの受賞も、本ハイドロジェノミクスでの皆様との密な議論に基づいた共同研究のおかげであり、深く感謝申し上げます。

A05

東京大学

石河 孝洋



公募研究開始の前年に米国の高圧実験グループが報告したランタン水素化物における550 Kの室温超伝導を理論的に検証することを主な目的として、2年間のハイドロジェノミクスでは、進化的アルゴリズムと第一原理計算を使って高圧力下でのランタン-ホウ素-水素系及びランタン-窒素-水素系における高温超伝導相の探索に取り組みました。その結果、 $\text{La}_2\text{B}_3\text{H}_{30}$ などの新規超伝導相の予測に成功しましたが、いずれも超伝導転移温度が50 K程度であり、実験で観測された550 Kの超伝導はランタン水素化物にホウ素や窒素を加えた系では再現できないことが明らかになりました。ハイドロジェノミクスを通して研究を軌道に乗せることができましたので、今後も同テーマに取り組むことで更なる検証を続けたいと考えています。一方で、今回得られた $\text{La}_2\text{B}_3\text{H}_{30}$ などは熱力学的に合成可能な新物質相となっているため、これらの実証に向けて、ハイドロジェノミクスで交流を持った高圧実験の研究者の方々と共同研究を行いたいと思います。

また、A05の理論研究者の方々からは計算手法の点で貴重なアドバイスをいただき、研究を進める上で大変参考になりました。この場をお借りして感謝申し上げます。

A05

物質・材料研究機構

中野 智志



新規イオン伝導体・超伝導体の開拓に向け、ダイヤモンド・アンビル・セルと高圧ガス充填装置を用いて水素雰囲気中での高温高圧実験を行い、新規水素化物や構造相転移の探索を進めました。 $\text{Ca}(\text{BH}_4)_2$ 高圧相の構造解明や $\text{Ca}(\text{BH}_4)_2 \cdot (\text{NH}_3\text{BH}_2)_2$ 高圧相を見出すなど、アルカリ土類金属水素化物を中心に新たな知見が得られました。また、メガパスル圧力領域での三元系水素化物の合成も進めています。

実験試料の多くはA01折茂研究室より提供を頂くとともに、計算科学の方々の物性予測を指針とさせて頂き、ハイドロジェノミクスの研究コミュニティの方々と討論を深めながら、実験を進めました。また、他の公募研究の方々とも新たな共同研究を始めました。

高圧実験研究は研究内容や結果が出発試料に大きく依存しますし、水素化物の合成は誰でも容易にできるわけではありません。そのため、物質合成の最先端をゆく同コミュニティの方々との共同研究により、取り扱う物質を大きく拡大することができました。また、イオン伝導体合成の指針などで、視野が広がったと感謝しています。この公募研究の2年は大きな財産です。今後もこのコミュニティや共同研究の継続を希望します。

評価グループ、国内・国際アドバイザリーグループ、学術調査官の皆様

評価グループの皆様



菅野 了次
東京工業大学



河村 純一
東北大学



水木 純一郎
関西学院大学



西出 宏之
早稲田大学



塚田 捷
東京大学

国内アドバイザリーグループの皆様



岡田 益男
東北大学



射場 英紀
トヨタ自動車(株)

国際アドバイザリーグループの皆様



Prof. G. Galli
Univ.Chicago



Dr. A.J. Ramirez-Cuesta
Oak Ridge National
Laboratory



Prof. Li-Jun Wan
Chinese Academy of
Science, Beijing



Prof. A. Züttel
École polytechnique
fédérale de Lausanne (EPFL)



Prof. H.-J. Freund
Max Planck Institute,
Berlin

学術調査官の皆様



田中 優実
東京理科大学
(~2018年7月31日)



岩倉 いずみ
神奈川大学
(~2019年7月31日)



緒明 佑哉
慶應義塾大学
(~2020年7月31日)



古川 森也
北海道大学
(~2021年7月31日)



鈴木 大介
信州大学
(~2022年7月31日)



安田 誠宏
関西大学



桶葎 興資
北陸先端科学技術大学院大学

第一期公募研究、若手サイエンティストの皆様

第一期公募研究(2019~2020年度)

<p>A01</p>  <p>近藤 剛弘 筑波大学 【表面科学・ 2次元物質】</p>	<p>A01</p>  <p>飯村 壮史 旧:東京工業大学 現:物質・材料研究機構 【固体化学】</p>	<p>A01</p>  <p>前里 光彦 京都大学 【固体物理】</p>	<p>A01</p>  <p>宮岡 裕樹 広島大学 【材料科学】</p>	<p>A02</p>  <p>北野 政明 東京工業大学 【触媒化学】</p>	<p>A03</p>  <p>中村 将志 千葉大学 【表面電気化学】</p>	<p>A03</p>  <p>田中 秀和 大阪大学 【酸化物エレクトロニクス、 ナノ機能材料化学】</p>
<p>A03</p>  <p>加藤 浩之 大阪大学 【表面物理化学】</p>	<p>A03</p>  <p>山田 鉄兵 旧:九州大学 現:東京大学 【電気化学・錯体化学】</p>	<p>A03</p>  <p>森本 正和 立教大学 【有機光化学】</p>	<p>A04</p>  <p>藤田 健一 京都大学 【有機金属化学】</p>	<p>A04</p>  <p>劔 隼人 大阪大学 【有機金属化学、 錯体化学、触媒化学】</p>	<p>A04</p>  <p>石元 孝佳 旧:横浜市立大学 現:広島大学 【計算科学】</p>	<p>A05</p>  <p>中村 崇司 東北大学 【固体イオニクス】</p>
<p>A05</p>  <p>大山 研司 茨城大学 【中性子科学、 材料科学】</p>	<p>A05</p>  <p>重田 育照 筑波大学 【理論生物物理学】</p>	<p>A05</p>  <p>越智 正之 大阪大学 【計算物質科学】</p>	<p>A05</p>  <p>犬飼 宗弘 徳島大学 【核磁気共鳴】</p>	<p>A05</p>  <p>立川 仁典 横浜市立大学 【量子化学・ 計算化学】</p>		

若手サイエンティストの皆様 ※五十音順

明石 遼介(東京大学)
秋葉 宙(東京大学)
味戸 沙耶(東北大学)
飯村 壮史(物質・材料研究機構)
池田 一貴(高エネルギー機構)
泉 善貴(総合研究大学院大学)
出崎 亮(量研機構)
伊藤 良一(筑波大学)
上田 顕(熊本大学)
植田 寛和(原子力機構)
内村 祐(総合研究大学院大学)
内海 伶那(量研機構)
岡 弘樹(大阪大学)
岡崎 宏之(量研機構)
岡本 啓(東北大学)
小倉 正平(東京電機大学)
小澤 孝拓(東京大学)
押目 典宏(量研機構)

海和 雄亮(早稲田大学)
柿木 智紀(大阪大学)
木須 一彰(東北大学)
金 相侖(GIST)
楠本 恵子(総合研究大学院大学)
後藤 和泰(名古屋大学)
小林 浩和(九州大学)
古府 麻衣子(原子力機構)
小松 遊矢(東京工業大学)
近藤 亮太(関西大学)
櫻井 敦教(分子科学研究所)
笹原 悠輝(京都大学)
佐藤 豊人(芝浦工業大学)
佐藤 龍平(東北大学)
清水 亮太(東京工業大学)
周 泓遥(東京大学)
城 鮎美(量研機構)
新里 恵多(広島大学)

高木 成幸(東北大学)
竹入 史隆(分子科学研究所)
武安 光太郎(筑波大学)
田中 駿介(東京大学)
田邊 一郎(立教大学)
出倉 駿(東京大学)
堂ノ下 将希(九州大学)
中川 祐貴(北海道大学)
中田 明伸(京都大学)
長塚 直樹(京都大学)
中平 夕貴(量研機構)
中山 亮(東京大学)
西川 幸志(兵庫県立大学)
野口 朋寛(九州大学)
花森 祐一郎(大阪大学)
春山 潤(東京大学)
古川 翔一(京都大学)
北條 智彦(東北大学)

本田 孝志(高エネルギー機構)
松村 大樹(原子力機構)
松本 良明(大阪大学)
三宅 純平(山梨大学)
宮本 聡(名古屋大学)
桃野 法樹(大阪大学)
安村 駿作(北海道大学)
山川 紘一郎(原子力機構)
Ahmed Mohamed Ahmed
Mahmoud(山梨大学)
Bo Thomsen(原子力機構)
Huang Mengwen(北海道大学)
Qingde Zhuo(理化学研究所)

などの皆様

最終報告会(第10回全体会議)

2022年11月21日(月)-23日(水・祝)、ホテル日航つくばにて最終報告会(第10回全体会議)を開催しました。2020年1月5日(日)-10日(金)、札幌にて開催した第1回ハイドロジェノミクス国際会議以来、約3年ぶりとなる対面での開催となりました。3日間にわたって、計画研究24件、公募研究16件の研究成果の発表を行いました。討論の時間では参加者全員が参画し、活発な議論が交わされました。評価グループ、ゲストの皆様方から、5年間を振り返り大変貴重なご講評を賜りました。新学術ハイドロジェノミクスは本年度にてプロジェクト終了となりますが、学界・産業界を含めたハイドロジェノミクスの継続的な維持・発展のためのプラットフォームとなる、「日本MRS水素科学技術連携研究会」にて、水素科学技術の飛躍に貢献できるよう尽力してまいります。



日本MRS水素科学技術連携研究会 12月研究会(第32回日本MRS年次大会)

2022年12月5日(月)-6日(火)、横浜にて12月研究会(第32回日本MRS年次大会)を開催しました。招待講演9件(うち企業5件)を含む22件の口頭講演、ポスター講演9件、企業展示1件を行いました。学界、産業界から多分野にわたる講演は、水素をキーワードにして広がる人との繋がり、新たな研究の可能性を見出せる大変興味深い内容でした。2023年度も工学・化学・物理学の各トピックス研究会(オンラインにて開催)、前期研究会(東北大学にて開催)、諸々のイベントを企画しております。「水素」をテーマに沢山の方との繋がりを心より楽しみにしております。ぜひ、本研究会のウェブサイトもご高覧ください。

水素連携研究会ウェブサイト <https://hydrogenomics-alliance.jp/>

12月研究会(第32回日本MRS年次大会)プログラム

12月5日(月)

- 10:00 主旨説明 折茂(東北大)
- 10:10 招待 板倉(物材機構)
- 10:40 招待 畑田(産総研)
- 11:10 休憩
- 11:30 MRSより特別講演
- 12:30 昼食
- 13:30 一般創発 正井(東大)
- 13:50 一般創発 木須(東北大)
- 14:10 一般創発 堀(筑波大)
- 14:30 一般創発 味戸(東北大)
- 14:50 一般創発 星本(阪大)
- 15:10 一般創発 山川(原子力機構)
- 15:30 休憩
- 16:00 招待 トヨタ自動車
- 16:30 招待 三菱ケミカル
- 17:00 ポスター発表

12月6日(火)

- 09:20 招待 吉田(大阪公立大)
- 09:50 招待 熊田(原子力機構)
- 10:20 一般 小泉(茨城大)
- 11:30 MRSより特別講演
- 12:30 昼食
- 13:00 招待 日本製鉄
- 13:30 招待 神戸工業試験場
- 14:00 招待 豊田中央研究所
- 14:30 休憩
- 14:40 一般 田中(都立大)
- 14:40 秋永(東理大)
- 14:40 新林(京大)

水素連携研究会 今後の予定

- 2023年5月19日(金)
「第8回トピックス研究会(物理学分科会)」をオンラインにて開催いたします。
- 2023年7月19日(水)-21日(金)
「前期研究会(旧 6月研究会)」を東北大学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]

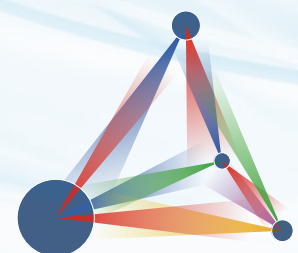
TEL：022-215-2093

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



Hydrogenomics