

【新学術領域研究（研究領域提案型）】 理工系



研究領域名 **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**

東北大学・材料科学高等研究所・教授 **おりも しんいち
折茂 慎一**

研究課題番号：18H05512 研究者番号：40284129

【本領域の目的】

本領域の目的は、変幻自在な水素の性質（*）を人類が“使いこなす”ための指導原理となる新たな水素科学（ハイドロジェノミクス、Hydrogen（水素）～omics（～の学問体系））を構築することである。

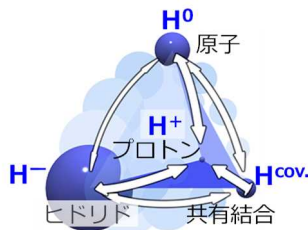


図 1 材料中での変幻自在な水素の結合性を示す水素ダイアグラム

（*）極めて広い濃度範囲で材料中に存在し、高い移動性や量子性、そして他の元素と多様な反応性を示す。このとき、周囲の状況に応じて、原子状態や共有結合性・イオン性（しかもプロトン H^+ とヒドリド H^- の両極性）、また、それらの中間状態にもなり、さらに、各状態で水素自体の大きささえも劇的に変える。（図 1 参照）

【本領域の内容】

ハイドロジェノミクスの構築を目指して、工学・化学・物理学等の学問分野の枠を超えた研究者相互の有機的連携によって多彩な「高次水素機能（後述する個別の水素機能の融合による相乗効果）」を誘起し、革新的な材料・デバイス・反応プロセスを実践的に創成する。

変幻自在な水素の性質に起因する個別の水素機能として、材料中での水素の「高密度凝集（研究項目 A01）」とともに、電子機能・力学特性等の強化のための微量水素の「界面局在（同 A02）」も重視する。また新発想デバイスの設計に向けた短・長距離に渡る水素の「高速移動（同 A03）」に加えて、新規物質変換プロセスのための水素の高活性化による「反応プロセス促進（同 A04）」にも着目する。さらに、これらの個別の水素機能を効果的に融合するために、材料中の水素の性質をこれまで以上に高精度に捉える「先端計測・シミュレーション（同 A05）」の研究も推進する。（図 2 参照）

領域全体での有機的連携を堅持しつつ三つの研究ステージで確実に研究を進めることで、上述した個別の水素機能の効果的な融合が進み、多彩な高次水素機能を誘起することができる。

多彩な高次水素機能の誘起

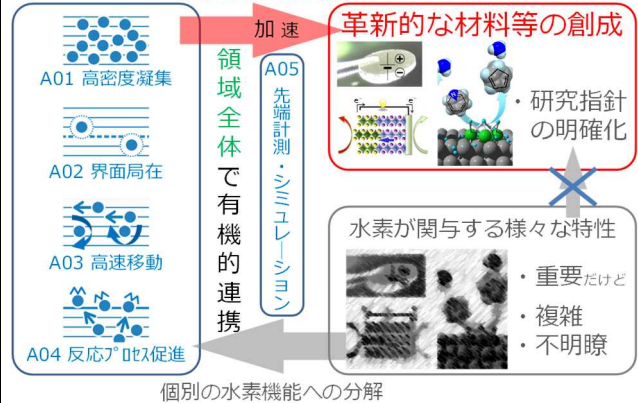


図 2 ハイドロジェノミクスの展開

【期待される成果と意義】

多彩な高次水素機能の誘起により、以下の革新的な材料等の創成が期待できるとともに、ハイドロジェノミクスの構築が進む。

- 水素化物超伝導・超イオン伝導材料等の超機能材料の合成。
- 水素化物エレクトロニクスデバイスの原理実証や太陽電池・高強度鋼の特性強化。
- 次世代創蓄電デバイスおよび水素-電子カップリングやヒドリド超イオン伝導材料を利用した新発想デバイスの設計。
- 水素を効果的に有用物質に変換する新規物質変換反応プロセスの創出。
- 水素データ同化技術による水素機能の発現機構の解明や解析・予測技術の高精度化、革新的な材料等の創成における格段の効率化。

さらに、水素科学分野における若手研究者の育成や国際ネットワークの形成、成果の社会実装が進む。

【キーワード】

ハイドロジェノミクス：水素を“使いこなす”ための新たな水素科学

高次水素機能：個別の水素機能の融合による相乗効果

【研究期間と研究経費】

平成 30 年度～34 年度
1,135,000 千円

【ホームページ等】

<https://www.hydrogenomics.jp>
orimo@imr.tohoku.ac.jp



Title of Project : **HYDROGENOMICS: Creation of Innovative Materials, Devices, and Reaction Processes using Higher-Order Hydrogen Functions**

Shin-ichi Orimo
(Tohoku University, WPI-AIMR, Professor)

Research Project Number : 18H05512 Researcher Number : 40284129

【Purpose of the Research Project】

Hydrogen in materials exhibits a wide range of concentration, high mobility, quantum nature, and superior chemical reactivity. All these features of hydrogen originate from its bonding and size flexibilities. (Fig. 1)

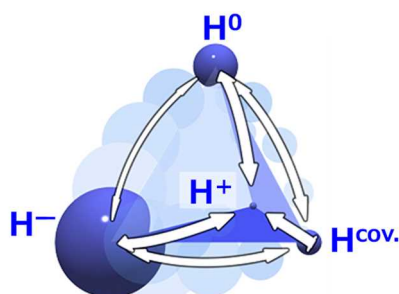


Fig. 1 Hydrogen diagram illustrating the bonding and size flexibility of hydrogen in materials; the spheres located at each vertex represent proton (H^+), hydride ion (H^-), covalently bonded hydrogen ($H^{cov.}$) and neutral hydrogen (H^0). The sizes of hydrogen are also drastically changed according to the bonding states.

The purpose of this project is to develop a new materials science of hydrogen / hydrides (hereafter referred to as “Hydrogenomics”, i.e., hydrogenomics) as a guideline to “fully utilize” the diverse functionalities of hydrogen in materials.

【Content of the Research Project】

The project will focus on the four most important functionalities of hydrogen originated from its bonding and size flexibilities (hereafter, referred to as “hydrogen functions”); i.e., “high densification ability (A01)”, “interfacial localizability (A02)”, “fast migration ability (A03)” and “high activation ability (A04)”. Then the project will merge them to induce unprecedented “higher-order hydrogen functions (synergistic effect between its individual hydrogen functions)” with the support of “advanced analysis and simulation techniques (A05)”, which will also be developed within this project to capture the hydrogen functions more accurately than ever done before. (Fig. 2)

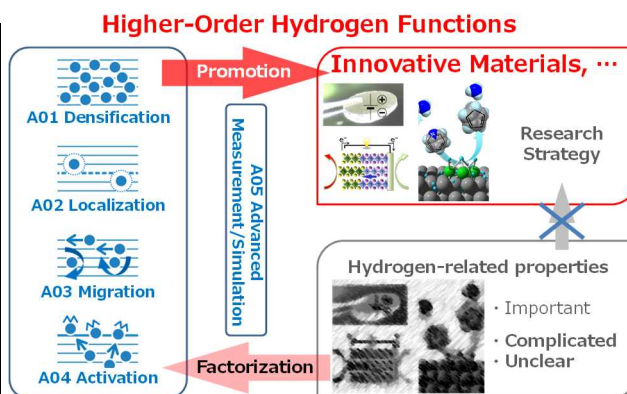


Fig. 2 Strategy of Hydrogenomics.

【Expected Research Achievements and Scientific Significance】

- Synthesis of hydride superconductors and super-ionic conductors.
- Proof-of-principle for hydride electronics, and enhancement of photovoltaics and high-strength steel properties.
- Production of advanced energy generation / storage and new-concept devices using hydrogen-electron coupling and hydride super-ionic conductors.
- Performing new material-conversion processes using hydrogen.
- Clarification of the mechanism determining the hydrogen functions and realization of high-accuracy analysis based on hydrogen data-assimilation technique.
- Promotion of young researchers training and social implementation, and formation of international network, in the related research field.

【Key Words】

Hydrogenomics, Higher-order hydrogen functions

【Term of Project】 FY2018-2022

【Budget Allocation】 1,135,000 Thousand Yen

【Homepage Address and Other Contact Information】

<https://www.hydrogenomics.jp>
orimo@imr.tohoku.ac.jp