

科学研究費助成事業「新学術領域研究（研究領域提案型）」 研究概要
〔令和2年度中間評価用〕

令和2年6月30日現在

機関番号：	11301
領域設定期間：	平成30年度～令和4年度
領域番号：	6001
研究領域名（和文）：	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
研究領域名（英文）：	HYDROGENOMICS: Creation of Innovative Materials, Devices, and Reaction Processes using Higher-Order Hydrogen Functions
領域代表者：	折茂 慎一 (ORIMO Shin-ichi) 東北大学・材料科学高等研究所・所長／教授
研究者番号：	40284129
交付決定（予定）額（領域設定期間全体）：	（直接経費）1,135,000,000円

研究の概要： 材料中の水素が示す個別の水素機能の高度化と融合によって多彩な“高次水素機能”を誘起し、革新的材料・デバイス・反応プロセスを創成する。これらの研究を通じて、水素の性質を“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）を構築する。

研究分野： 理工系

キーワード： 水素、ハイドロジェノミクス、高次水素機能、界面、ヒドリド、カップリング、データ同化

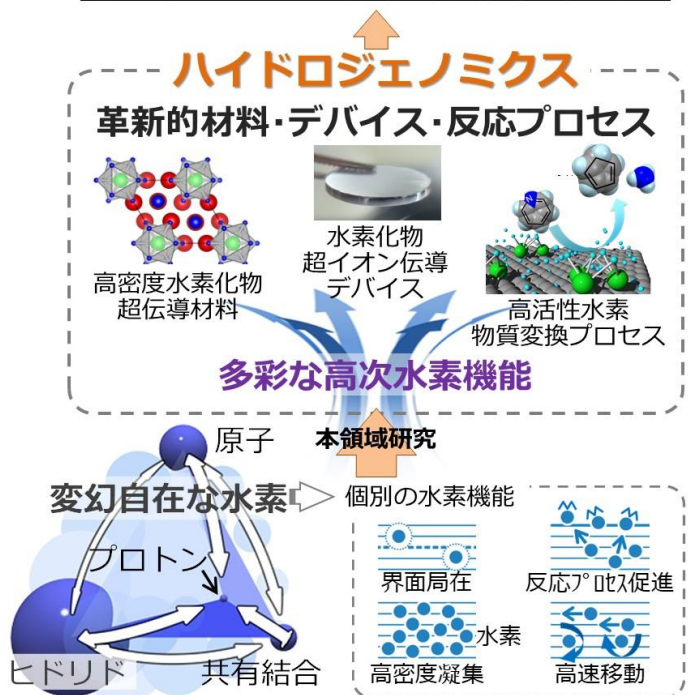
1. 研究開始当初の背景

水素は、変幻自在な元素である。極めて広い濃度（＝水素密度）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。この時、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、更に各状態で水素自体の大きささえも劇的に変える。変幻自在な性質を精密に捉えることは現在でも容易ではない。

これら水素固有の性質の一部は水素の有効な機能（＝**水素機能**）として実社会で活用されており、その社会的な重要性から、工学・化学・物理学・生物学等の各学問分野において個別の水素機能を追求する研究が進められてきた。

注目すべき最近の状況は、**従来の延長線上にない水素科学の萌芽**である。水素化物ルネサンスとされるこの萌芽の本質は、**複数の水素機能の相乗効果**による“**高次水素機能**”の誘起であることを、領域研究者らは掴んでいる。この誘起により**個別の水素機能だけでは実現困難な革新的材料・デバイス・反応プロセスの創成**が期待される（右図）。実際に多彩な高次水素機能を誘起するためには、**学問分野の枠を超えて有機的に連携した新たな水素科学が必要**となる。

次々世代のエネルギー変革、物質科学全体の飛躍



2. 研究の目的

上記のような背景から、合成・解析技術を含めた研究基盤を共有し、更に統計数理科学を含めた異分野技術も果敢に取込むことで、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））を早期・確実に構築すべき、との着想に至った。具体的には、高密度凝集や高速移動等の材料中の水素が示す**個別の水素機能の高度化と融合**によって**多彩な高次水素機能を誘起**し、次々世代のエネルギー変革等にも資する**革新的材料・デバイス・反応プロセスを創成**する。これらの研究を通じて、**変幻自在な水素を“使いこなす”ための新たな水素科学（ハイドロジェノミクス）を構築**することを、本領域の目的とする。

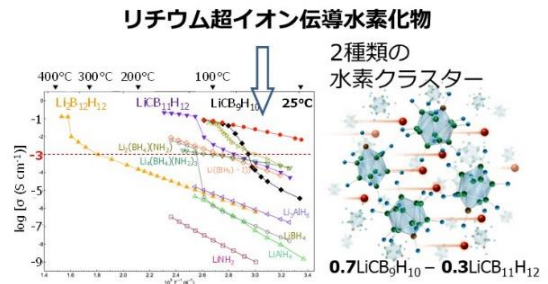
3. 研究の方法

学問分野の枠を超えた有機的連携のために、**水素の高密度凝集**(研究項目 A01 に対応)に加えて、電子機能・力学特性等の強化のために重要な**微量水素の界面局在**(同 A02)にも着目する。また**短・長距離に渡る水素の高速移動**(同 A03)とともに、新発想デバイスや新規物質変換プロセスのための電子とのカップリングや表面での高活性化による**水素が関与する反応プロセス促進**(同 A04)も重視する。更にこれらの推進のためには、材料中での“見えない”水素の性質を**これまで以上に高精度に解析・予測**(同 A05)する研究も不可欠と考える。

4. 研究の進展状況及び成果 (1)は進展状況、(2)は成果を示す)

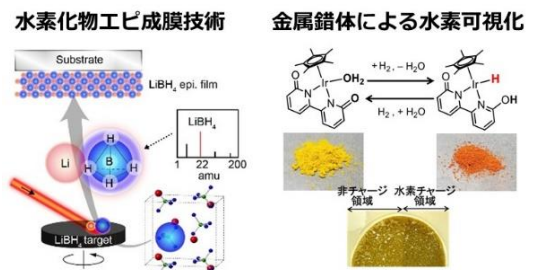
・研究項目 A01 水素高密度凝集機能

- (1) 高密度水素化物の高圧合成技術を確認して、水素化物超イオン伝導・超伝導材料等を合成するとともに、それらを用いたエネルギーデバイスを設計した。
- (2) 籠状水素クラスターの高次水素機能によりリチウム超イオン伝導材料の合成に成功(右図)、これを固体電解質として用いることで、リチウム負極型の全固体電池として世界最高のエネルギー密度に達することも実証した。



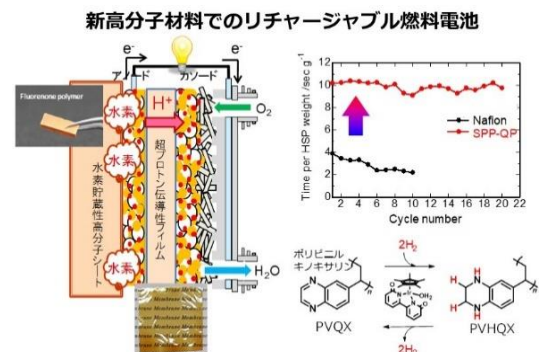
・研究項目 A02 水素界面局在機能

- (1) 水素の高精度局在化技術を確認して、ヘテロ界面での局在水素による新たな電子物性・機能を発現させるとともに、水素の新たな可視化技術の研究を進めた。
- (2) 水素化物エピタキシャル成膜技術により水素を高精度に局在させたヘテロ界面を作製、多様な金属・錯体水素化物の成膜が可能となった(右図)。また、イリジウム系金属錯体の水素化反応にともなう色彩変化を利用して、鉄中を透過する水素の可視化にも成功した(同)。



・研究項目 A03 (A03-1, -2) 水素高速移動機能

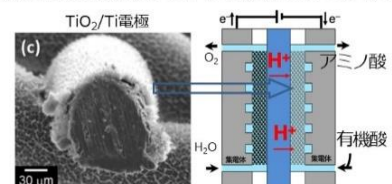
- (1) 高速プロトン導電・高密度水素貯蔵高分子材料を合成(A03-1)するとともに、広範な水素-電子カップリング制御に関する基盤技術の確立にも取り組んだ(A03-2)。
- (2) 高分子材料の高次水素機能によりリチャージャブル燃料電池を設計、発電・放電等の実証に成功した(右図)。また、金属水素化物との組合せによる高次水素機能により、水素の価数変化を利用した新たな反応の実証も進めた。



・研究項目 A04 水素反応プロセス促進機能

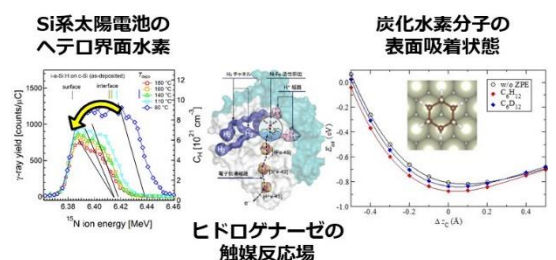
- (1) 水素の高活性化が期待できるナノ粒子・クラスター等の反応場を創出するとともに、高活性化のための条件やその解析等に関する基盤技術を確認した。
- (2) 酸化チタン電極表面での高次水素機能により、温和な条件での基質分子の水素化反応が可能となり、多様なアミノ酸を高選択的に合成することに成功した(右図)。

電極表面での高活性プロトン高選択的アミノ酸合成



・研究項目 A05 (A05-1, -2) 水素先端計測・シミュレーション

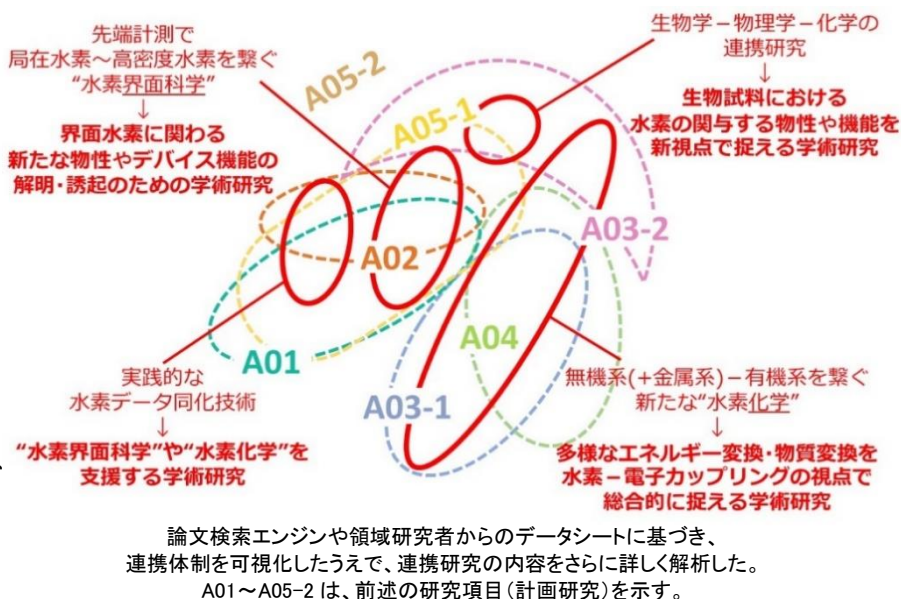
- (1) 材料中の水素に対するオペランド計測技術(A05-1)や第一原理電子状態計算技術(A05-2)等を開発、計測-計算情報の水素データ同化を通じて、領域内連携を展開した。
- (2) 核反応・中性子散乱・ラマン分光等の水素先端計測の整備、および水素の電子状態やプロトンの量子効果も含めた電子-格子相互作用等を高精度・高効率に記述する各種水素先端計算の整備を、それぞれ進めた。それらの技術を、シリコン系太陽電池やヒドロゲナーゼ等に適用した(右図)。



5. 今後の研究計画

これまでの研究により、多彩な高次水素機能を誘起するための領域全体での有機的連携体制が確立でき、**ハイドロジェノミクス**が着実に進展した。

連携研究の内容を解析すると、**4つの新たな学術研究群の萌芽**が認められる(右図)。これらは、本領域の目的であるハイドロジェノミクスの構築に繋がる革新的・創造的な学術研究群として重視する。また**高次水素機能の概念整理と更なる顕在化・誘起**に向けて、高密度水素の特異形状化や高速移動制御、および新たな水素化合物合成・解析技術の開発等の研究も進める。



6. 主な発表論文等(受賞等を含む)

- ・二重下線は計画・公募研究の代表者、一重下線は計画研究の分担者、*印は責任著者を示す。
- ・計画研究および公募研究を含めた雑誌論文等は計131報(令和2年6月末まで)。

- [1] *S. Kim, H. Oguchi, N. Toyama, T. Sato, S. Takagi, T. Otomo, D. Arunkumar, N. Kuwata, J. Kawamura, and *S. Orimo, "A complex hydride lithium superionic conductor for high-energy-density all-solid-state lithium metal batteries", Nat. Commun., 10, 1081(1-9), 2019. "新たなリチウム超イオン伝導材料を開発、全固体電池の高エネルギー密度化を一気に加速"(2019年3月7日)プレスリリース。
- [2] K. Fukui, *S. Iimura, T. Tada, S. Fujitsu, M. Sasase, H. Tamatsukuri, T. Honda, K. Ikeda, T. Otomo, and *H. Hosono, "Characteristic fast H⁻ ion conduction in oxygen-substituted lanthanum hydride", Nat. Commun., 10, 2578(1-8), 2019. "中温域で世界最高の伝導度を示すヒドroidイオン伝導体を実現"(2019年6月12日)プレスリリース。
- [3] J. Miyake and *K. Miyatake, "Quaternized poly(arylene perfluoroalkylene)s (QPAFs) for alkaline fuel cells - a perspective", Sustain. Energy Fuels, 3, 1916-1928, 2019.
- [4] T. Fukushima and *M. Yamauchi, "Electrosynthesis of amino acids from biomass-derivable acids on titanium dioxide", Chem. Commun., 55, 14721-14724, 2019. "電気エネルギーを使った有機酸と水からの高効率なアミノ酸合成に成功、再生可能電力を用いた低環境負荷型の化学合成プロセスとして注目"(2019年11月1日)プレスリリース。
- [5] Y. Sasahara, *R. Shimizu, H. Oguchi, K. Nishio, S. Ogura, H. Morioka, S. Orimo, K. Fukutani, and T. Hitosugi, "A hysteresis loop in electrical resistance of NbH_x observed above the β-λ transition temperature", AIP Adv., 9, 015027(1-5), 2019.
- [6] Y.K. Nakagawa, K. Nishikawa, S. Nakashima, S. Inoue, T. Ohta, T. Ogura, Y. Shigeta, K. Fukutani, T. Yagi, and *Y. Higuchi, "New assay method based on Raman spectroscopy for enzymes reacting with gaseous substrates", Protein Sci., 28(3), 663-670, 2019.
- [7] *D. Adachi, N. Tsujimoto, R. Akashi, S. Todo, and S. Tsuneyuki, "Search for common minima in joint optimization of multiple cost functions", Comput. Phys. Commun., 241, 92-97, 2019.
- [8] *L. Yan, Y. Yamamoto, M. Shiga, and O. Sugino, "Nuclear quantum effect for hydrogen adsorption on Pt(111)", Phys. Rev. B, 101, 165414(1-9), 2020.
- [9] *K. Kisu, S. Kim, M. Inukai, H. Oguchi, S. Takagi, and *S. Orimo, "Magnesium borohydride ammonia borane as a magnesium ionic conductor", ACS Appl. Energy Mater., 3(4), 3174-3179, 2020.
- [10] *Y. Kanematsu, H.S. Kato, S. Yoshimoto, A. Ueda, S. Yamamoto, H. Mori, J. Yoshinobu, I. Matsuda, and M. Tachikawa, "A computational examination of the electric-field-induced proton transfer along the interface hydrogen bond between proton donating and accepting self-assembled monolayers", Chem. Phys. Lett., 741, 137091(1-4), 2020.
- [11] *S. Ajito, T. Hojo, M. Koyama, K.-i. Fujita, and E. Akiyama, "Application of an iridium complex for detecting hydrogen permeation through pure iron", Int. J. Hydrogen Energy, in press, 2020.

受賞: 計62件(うち若手研究者39件)

領域公式ホームページ: <https://hydrogenomics.jp/>