

領域略称名：ハイドロジェノム
領域番号：6001

令和2年度科学研究費助成事業
「新学術領域研究（研究領域提案型）」
に係る中間評価報告書

「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」

領域設定期間

平成30年度～令和4年度

令和2年6月

領域代表者 東北大学・材料科学高等研究所・教授・折茂 慎一

目 次

研究組織

1 総括班・総括班以外の計画研究	2
2 公募研究	3

研究領域全体に係る事項

3 研究領域の目的及び概要	5
4 審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況	7
5 研究の進展状況及び主な成果	9
6 研究発表の状況	14
7 研究組織の連携体制	19
8 若手研究者の育成に関する取組状況	20
9 研究費の使用状況・計画	21
10 今後の研究領域の推進方策	22
11 総括班評価者による評価	24

研究組織

(令和2年6月末現在。ただし終了した研究課題は終了時現在、補助事業廃止の研究課題は廃止時現在。)

1 総括班・総括班以外の計画研究

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
X00 総	ハイドロジェノミクスの 研究推進	平成30年度 ～ 令和4年度	折茂 慎一	東北大学・ 材料科学高等研究所・ 教授	3
A01 計	高密度水素による 超機能材料の合成	平成30年度 ～ 令和4年度	折茂 慎一	東北大学・ 材料科学高等研究所・ 教授	3
A02 計	局在水素による ヘテロ界面機能の強化	平成30年度 ～ 令和4年度	一杉 太郎	東京工業大学・ 物質理工学院・教授	3
A03-1 計	高速移動水素による 次世代創蓄電デバイスの設計	平成30年度 ～ 令和4年度	宮武 健治	山梨大学・総合研究部・ 教授	3
A03-2 計	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	平成30年度 ～ 令和4年度	森 初果	東京大学・物性研究所・ 教授	3
A04 計	高活性水素の精密制御による 新規反応プロセスの創出	平成30年度 ～ 令和4年度	山内 美穂	九州大学・カーボン ニュートラル・ エネルギー国際研究所・ 教授	4
A05-1 計	水素の先端計測による 水素機能の高精度解析	平成30年度 ～ 令和4年度	福谷 克之	東京大学・ 生産技術研究所・教授	3
A05-2 計	水素の先端計算による 水素機能の高精度予測	平成30年度 ～ 令和4年度	常行 真司	東京大学・大学院理学系 研究科(理学部)・教授	4
総括班・総括班以外の計画研究 計 8 件					

[1] 総：総括班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

2 公募研究

研究項目[1]	課題番号 研究課題名	研究期間	研究代表者 氏名	所属研究機関・部局・職	人数 [2]
A01 公	ホウ化水素を用いた 高密度水素貯蔵材料の開発	令和元年度 ～ 令和2年度	近藤 剛弘	筑波大学・ 数理物質系・准教授	1
A01 公	非調和振動を活用した 新規高速ヒドリドイオン 伝導体の探索	令和元年度 ～ 令和2年度	飯村 壮史	東京工業大学・元素戦略 研究センター・助教	1
A01 公	イオン照射による水素誘起 エキゾチック超伝導の開発	令和元年度 ～ 令和2年度	前里 光彦	京都大学・ 理学研究科・准教授	1
A01 公	アンミン錯体における水素の 状態分析と機能性発現 メカニズムの解明	令和元年度 ～ 令和2年度	宮岡 裕樹	広島大学・自然科学研究 支援開発センター・ 准教授	1
A02 公	ヒドリドイオン導電性が およぼす触媒作用機構の解明	令和元年度 ～ 令和2年度	北野 政明	東京工業大学・ 元素戦略研究センター・ 准教授	1
A03 公	電気二重層内の高速プロトン 移動による水素発生反応の 高活性化	令和元年度 ～ 令和2年度	中村 将志	千葉大学・ 大学院工学研究院・ 准教授	1
A03 公	ナノ領域水素反応場を有する 遷移金属酸化物プロトニクス デバイスの形成	令和元年度 ～ 令和2年度	田中 秀和	大阪大学・ 産業科学研究所・教授	1
A03 公	自己組織化二分子膜における 電子-プロトン相関物性の 探求	令和元年度 ～ 令和2年度	加藤 浩之	大阪大学・ 理学研究科・准教授	1
A03 公	プロトン共役電子移動反応を 利用した熱電変換デバイスの 創成	令和元年度 ～ 令和2年度	山田 鉄兵	東京大学・大学院理学系 研究科・教授	1
A03 公	水素移動と光化学反応の 強結合による高次機能分子 デバイスの創出	令和元年度 ～ 令和2年度	森本 正和	立教大学・理学部・教授	1
A04 公	金属錯体による可逆的ヘテロ リシスに基づく水素の 高活性化と水素貯蔵材料開発 への展開	令和元年度 ～ 令和2年度	藤田 健一	京都大学・ 人間・環境学研究科・教授	1
A04 公	遷移金属ヒドリド錯体と ペロブスカイト酸化物の 融合による新規ヒドリド触媒 の開発	令和元年度 ～ 令和2年度	劔 隼人	大阪大学・ 基礎工学研究科・准教授	1

A04 公	金属ナノ粒子の不均一表層における水素ダイナミクスと触媒活性	令和元年度 ～ 令和2年度	石元 孝佳	横浜市立大学・理学部・准教授	1
A05 公	プロトンセラミックス燃料電池空気極のプロトン活性領域可視化と高性能電極への展開	令和元年度 ～ 令和2年度	中村 崇司	東北大学・多元物質科学研究所・准教授	1
A05 公	水素吸蔵物質での水素位置確定法：粉末中性子ホログラフィーの実現	令和元年度 ～ 令和2年度	大山 研司	茨城大学・理工学研究科(工学野)・教授	1
A05 公	生体ハイドロジェノミクスの理論解析	令和元年度 ～ 令和2年度	重田 育照	筑波大学・計算科学研究センター・教授	1
A05 公	強相関酸水素化物における新しい水素機能の第一原理的解析	令和元年度 ～ 令和2年度	越智 正之	大阪大学・理学研究科・助教	1
A05 公	高温・高圧環境下における活性水素の高分解能NMR計測	令和元年度 ～ 令和2年度	犬飼 宗弘	徳島大学・大学院社会産業理工学研究部(理工学域)・講師	1
A05 公	高次水素機能の発現機構解明および高精度予測に向けた多成分系量子化学手法の高度化	令和元年度 ～ 令和2年度	立川 仁典	横浜市立大学・データサイエンス学部・教授	1
公募研究 計 19 件 (廃止を含む)					

[1] 総：総括班、計：総括班以外の計画研究、公：公募研究

[2] 研究代表者及び研究分担者の人数（辞退又は削除した者を除く。）

研究領域全体に係る事項

3 研究領域の目的及び概要

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究目的及び全体構想について、応募時の領域計画書を基に、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、どのような点が「革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域」であるか、研究の学術的背景や領域設定期間終了後に期待される成果等を明確にすること。

目的・学術的背景：

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り、多彩な高次水素機能を誘起、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）を構築することを、本領域の目的とする（図1）。

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、さら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いる。燃焼や燃料電池反応等の様々な反応を介したエネルギー源や有用物質の原料としての活用、材料中に入出入りすることでの材料特性向上のための活用等である。これらの社会的重要性から、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鋭意進められてきた。

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。合成・解析技術の進歩により新たな高密度水素化物やヒドリド置換化合物の報告例が増加するとともに、 $LiBH_4$ や H_2S 等の既知の水素化物でも超イオン伝導や超伝導が観測されている。水素化物ルネサンス(*1)とされるこの萌芽の本質は、複数の水素機能の関与、即ち複数の水素機能の相乗効果による、従来は顕在化しなかった“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。例えば、材料中の水素が「高密度凝集して水素クラスター(*2)を形成する機能」と「高速移動する機能」との高次水素機能の誘起により、超イオン伝導や新発想デバイス等の実現が期待できる（図2）。まさに“1+1 >> 2 の機能”といえる。

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視点の水素科学が必要となる。しかし従来の研究で得られた個別の情報を持ち寄るだけでは真の連携が進まないことは明白である。各国が水素化物ルネサンスに基づく探索研究を活性化させるなか、日本の優位性低下に繋がる水素科学連携の遅れは決して看過することはできない。

以上の学術的背景から、合成・解析技術を含めた研究基盤を共有し、さら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（本提案でハイドロジェノミクスと命名、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。まさに、変幻自在な水素の性質を“使いこなす”ために必要な指導原理を獲得する研究提案である。学問分野の枠を超えて新たな水素科学の構築を目指す研究提案は、国内外を含め、また歴史的にも、類を見ない。

(*1) 領域代表者とトヨタ北米研究開発センターを代表する気鋭研究者との Nature 誌レビュー論文。超イオン伝導や超伝導等の機能発現により再注目される水素化物の事例を紹介（Highly Cited Paper, Web of Science, 申請時～令和2年6月時点）。

“The Renaissance of Hydrides as Energy Materials”, R. Mohtadi, S. Orimo, Nat. Rev. Mater. (2016).

(*2) 複数の水素と、他元素・格子欠陥等とが結合した、高密度水素を含む分子・イオン・局所構造を示す。

次々世代のエネルギー変革、物質科学全体の飛躍



図1. 本領域の学術的背景と目的、展開。

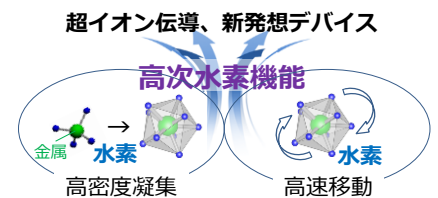


図2. 高次水素機能の例。

概要・学術研究への貢献：

学問分野の枠を超えて有機的に連携することで、多彩な高次水素機能を誘起、**変幻自在な水素の性質を余すことなく活用して革新的な材料等を創成**する。そのために、**水素の高密度凝集**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**にも着目する。また**短・長距離に渡る水素の高速移動**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**も重視する。これらの推進のために、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**する研究も不可欠と考える（図3）。

さらに、領域全体での有機的連携を確実に進めるために、以下の**研究戦略[1][2]**を設定、順に展開する：

- [1] 個別の水素機能の高度化（下記の**ステージ I**に相当）
- [2] 複数の水素機能の融合（同、**ステージ II**と**III**に相当）

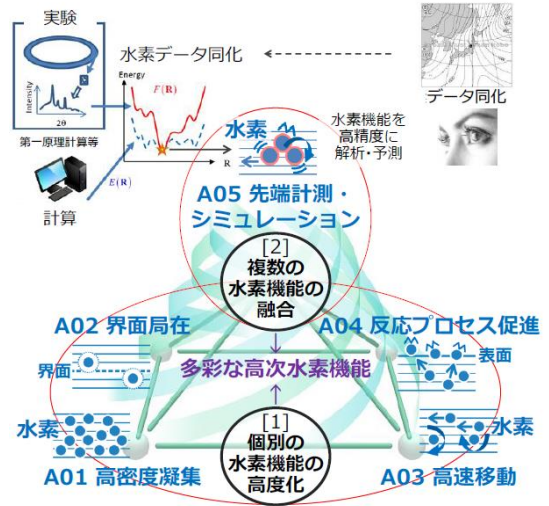


図3. 研究戦略[1][2]の概念図
(図中のA01～A05は研究項目に対応)。

この研究戦略の導入により、多彩な高次水素機能を確実に誘起することができ、個別の水素機能だけでは実現困難な材料・デバイス・反応プロセス等の創成、および変幻自在な水素の性質を“使いこなす”ための指導原理となる新たな水素科学(=水素学)の構築が可能となる。これらの点で、本提案は、**革新的・創造的な学術研究の発展が期待される研究領域**といえる。



ステージ I：

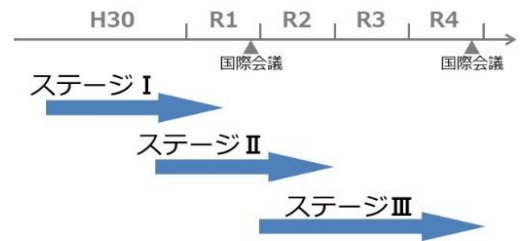
主に**研究戦略[1]**に対応。研究項目 **A01～A04** に関わる4つの個別の水素機能を高度化する。同 **A05** はデータ同化技術等の導入を進める。

ステージ II：

主に**研究戦略[2]**に対応。**A01～A04** で水素機能を高度化した多岐に渡る材料系に対して、**A05** の水素先端計測・計算を適用する。これにより、研究項目の枠を超えて複数の水素機能を効果的に融合することで、高次水素機能を誘起する。

ステージ III：

学問分野の枠を超えて領域全体が一体化した研究に移行することで多彩な高次水素機能を誘起、革新的な材料等を創成するとともに、これらの研究を通じて水素学を構築する。



領域設定期間終了後に期待される成果等：

以下のような材料・デバイス・反応プロセスの創成に関する成果が期待される：

- ・ 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反応プロセスの創出
- ・ 水素データ同化技術等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

これらの研究を通じて構築する水素学は、変幻自在な水素の性質を“使いこなす”ために必要な指導原理の獲得そのものであり、**実社会の快適性向上から次々世代のエネルギー変革に至るまで全世界が恩恵にあずかる**ことから、社会的意義・波及効果は多大である。さらに、従来は各学問分野で水素そのものの捉え方（【水素観】=水素学における「用語」や「研究指針」など）が大きく異なっており、主に個別の水素機能を追求する研究にとどまってきたが、**水素学の構築により学問分野の枠を超えて統一的な水素観を共有**できる点で、“新学術領域ならではの”意義・波及効果も多大である。

4 審査結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況

研究領域全体を通じ、審査結果の所見において指摘を受けた事項があった場合には、当該指摘及びその対応状況等について、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

1) 採択時の所見（留意事項）

“中性子散乱、スピンエコー装置等について、国内事情に鑑み、海外研究拠点・施設との連携を密に行うことが望まれる（原文）”

対応状況：

領域内の連携研究の促進や重層的な若手育成も視野に、主に水素先端計測に関わる以下の海外研究拠点・施設との共同研究やそれに向けた協議を密に進めた。

・ドイツ・ミュンヘン工科大学・研究用原子炉(FRM II)、飛行時間型分光器(TOFTOF)

新たに合成した水素クラスター $[\text{MoH}_9]^{3-}$ を有する高密度水素化物($\text{Li}_5\text{MoH}_{11}$)の中性子準弾性散乱を測定し、 $[\text{MoH}_9]^{3-}$ の回転機構を調べるとともに、リチウムイオン伝導との関連を明らかにすることを目指す。A01 分担・山室らの指導で若手研究者らが領域設置直後の平成30年9月に課題申請、令和元年1月に採択された。FRM IIの計画外停止や新型コロナウイルス対策のため、実験は同2年10月以降を予定。同2年3月、ミュンヘン工科大学にて、TOFTOFの装置責任者のWiebke Lohstroh博士およびMarcell Wolf博士らと上記実験について密な協議を進めた。

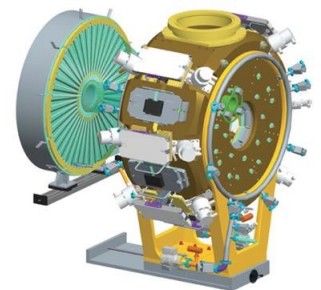
【連携: A01、A05-1、A05-2】



・アメリカ・オークリッジ国立研究所・パルス中性子施設(SNS)、振動分光装置(VISION)

新たに合成したマグネシウム系高密度水素化物中の水素原子の振動現象を観測、その水素近傍の他元素依存性を解明するとともに、水素化・脱水素化反応特性との相関解明も目指す。A01 代表・折茂らの指導で若手研究者らが令和元年9月に課題申請、11月に採択された。同2年6~8月の測定を予定しているが、新型コロナウイルス対策のため延期、調整中。VISIONの装置責任者であり本領域の国際アドバイザーでもあるTimmy Ramirez-Cuesta博士とは、同元年7月のゴードンリサーチ会議(スペイン)や同2年1月のハイドロジェノミクス国際会議(札幌)の機会に上記実験に関して密な協議を進めている。さらにA05-1 分担・大友と同博士は、上記ハイドロジェノミクス国際会議を機に、(中性子回折実験で一般的に用いられる)軽水素を含む化合物の構造決定について情報交換を始めた。同博士が保有する氷(H_2O)の動的構造因子 $S(Q,E)$ のデータから静的構造因子 $S(Q)$ を導出し、中性子回折実験における非弾性散乱の寄与および補正方法を検討する予定である。

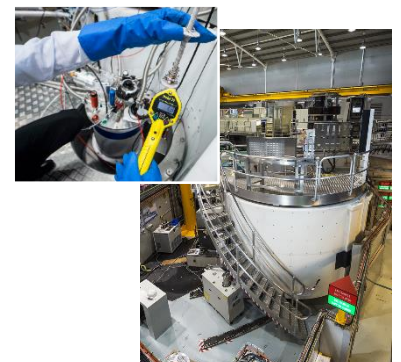
【連携: A01、A05-1、A05-2】



・オーストラリア原子力科学技術機構・中性子散乱センター(ACNS)、後方散乱装置(EMU)

A03-1 代表・宮武およびA03-2 代表・森に関係するプロトン性イオン液体の中性子準弾性散乱を測定し、イオンの回転および並進運動の機構を調べるとともに、プロトン伝導との関連を明らかにすることを目指す。A01 分担・山室らが令和元年9月に課題申請、同2年1月に採択された。同年4月に実験予定であったが、新型コロナウイルス対策のため、秋以降に延期。EMUの装置責任者のNicolas De Souza博士が令和元年10月に来日した機会等に、プロトン性イオン液体や金属水素化物についての密な情報交換を進めている。

【連携: A01、A03-1、A03-2、A05-1、A05-2】



- ・イギリス・ラザフォード・アップルトン研究所・中性子散乱施設 (ISIS)、ミュオン施設
レーザー照射 μ SR により、GaAs 中の負電荷ミュオニウムの電子状態
(ヒドリドに相当) の解明を目指す。A05-1 協力・下村らが令和元年 10
月に課題申請、同年 12 月に採択された。同 2 年 11 月に実験予定である。
装置担当者の Koji Yokoyama 博士とは、試料環境の整備等についての
密な情報交換を進めている。

【連携: A02、A03-2、A05-1、A05-2】



- ・その他、アメリカ・アルゴン国立研究所やイギリス・Diamond Light Source、
放射光施設の利用や技術協力等により、A05-1 代表・福谷、同分担・町
田らの指導で若手研究者らが国内でのブラッグコヒーレント X 線回折
イメージング法による計測の確立を目指すことを検討中。これにより、
水素化物ナノ結晶粒子の外形や内部を約 10nm の空間分解能で 3 次元
的にイメージングすることが可能になる。水素ガス雰囲気下 (数気圧)
と温度 (室温以上) の平衡状態での測定を目指した測定環境開発・整
備を実施している。

【連携: A01、A02、A04、A05-1、A05-2】



2) 採択時の所見 (参考意見)

“計画研究 A02 において PD を 3 名雇用することへの妥当性が不明であるとの意見が複数あった(原文)”

対応状況：

ハイドロジェノミクスに相応しい研究実施により、1 名の PD 雇用で当初計画以上の成果を上げている。

- ・A02 の研究内容 (ステージ I) である水素化物エピタキシャル成膜技術に関して、若手研究者の東工大・笹原悠輝氏 (現学振 DC2) や同大学・清水亮太助教 (現准教授) らが大きく貢献した。
- ・さらに、計画研究内の連携を加速するために、成膜技術の Si 系太陽電池への展開を目指して、名古屋大・宮本聡博士を本研究領域の経費で採用した。
- ・この Si 系太陽電池への展開に関しては、宮本博士に加えて、同大学・後藤和泰助教も大きく貢献した結果、A05-1 を含めた他の計画研究との連携 (ステージ II) も一気に加速した。
- ・結果的に、A02 では 1 名の PD 雇用で当初計画以上の成果を上げている (20、47、52 ページにも記載)。

3) 採択時の所見

(指摘事項ではございませんが、審査結果の所見本文に下記の記載がございましたので、対応状況を簡潔に纏めさせて戴きます。)

“異分野間の有機的連携に向けた意思疎通がうまく機能することを期待したい(原文)”

対応状況：

- ・関連する国内外会議・研究会を平成 30 年度から令和元年度にかけて集中的に開催、工学 (材料科学)・化学・物理学・生物学等の各学問分野・専門分野での【水素観】の相違の認識とその合わせ込みを鋭意進めることで、異分野間の有機的連携に向けた下地を強化した：

- ・計画研究代表者会議 (計 11 回)
- ・計画研究「内」の会議 (計 34 回)
- ・計画研究「間」の会議 (計 42 回)
- ・公募申請促進のための説明会 (計 13 回)
- ・ハイドロジェノミクス国際会議の開催
- ・ハイドロジェノミクス研究会の新設
- ・主催／共催研究会等 (計 17 件)、等



5 研究の進展状況及び主な成果

(1) 領域設定期間内及び中間評価実施時までには何をどこまで明らかにしようとし、中間評価実施時までにはどこまで研究が進展しているのか、(2) 本研究領域により得られた成果について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。(1)は研究項目ごと、(2)は研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で記載すること。なお、本研究領域内の共同研究等による成果の場合はその旨を明確にすること。

(1) 領域設定期間内及び中間評価実施時までには何をどこまで明らかにしようとし、中間評価実施時までにはどこまで研究が進展しているのか

●研究項目 A01 水素高密度凝集機能



- ・計画研究 A01「高密度水素による超機能材料の合成」として実施している。
- ・領域設定期間内の予定（申請書通り）：
従来の水素密度の限界を突破した新たな水素クラスター等を合成、領域内連携での高次水素機能の誘起により水素化物超イオン伝導・超伝導等の超機能材料の合成を目指す。
- ・中間評価実施時までの進展：
高圧合成等での水素の高密度化技術の確立：ステージⅠとして、高圧合成等を含む水素の高密度凝集（高密度化）技術を確認、新たな高密度水素化物の高圧合成に成功した。
水素クラスターの創製と高次水素機能の誘起：ステージⅡとして、水素クラスターを含む高密度水素化物を合成するとともに、高次水素機能の誘起により新たな水素化物超イオン伝導・超伝導材料等を創成、さらにそれらを用いたエネルギーデバイスの原理実証も進めた。

●研究項目 A02 水素界面局在機能



- ・計画研究 A02「局在水素によるヘテロ界面機能の強化」として実施している。
- ・領域設定期間内の予定（申請書通り）：
水素を高精度に配置したヘテロ界面を創製、領域内連携での高次水素機能の誘起により電子物性・機能や力学特性等の強化を狙う。
- ・中間評価実施時までの進展：
ヘテロ界面での水素の高精度局在化技術の確立：ステージⅠとして、水素化物エピタキシャル成長を含む水素の高精度局在化技術を確認した。
ヘテロ界面水素等に誘起される新物性の発現：ステージⅡとして、ヘテロ界面での局在水素による新たな電子物性・機能の発現に成功、さらに金属錯体による鉄中を透過した水素の新たな可視化技術の原理実証も進めた。

●研究項目 A03 水素高速移動機能



- ・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」および計画研究 A03-2「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」として実施している。
- ・領域設定期間内の予定（申請書通り）：
多彩な材料中での水素の移動現象を促進させるとともに、高速・局所移動する多様な水素種と電子とのカップリングを制御、領域内連携での高次水素機能の誘起により次世代創蓄電デバイス等の設計を目指す。
- ・中間評価実施時までの進展：
高速プロトン導電／高密度水素貯蔵高分子材料の創製：ステージⅠとして、次世代創蓄電デバイスに適用可能な高速プロトン導電高分子材料（プラスチックフィルム）ならびに高密度水素貯蔵高分子材料を創製した。
広範な水素-電子カップリング制御技術の確立：同じくステージⅠとして、無機系材料においてはヒドリド伝導や水素の価数変化、有機系材料においては π 電子物性や分子回転、そして生体系材料においてはヒドロゲナーゼでの触媒反応場と中間体等に注目することで、広範な水素-電子カップリング制御に関する基盤技術を確認した。
新発想デバイスの設計と原理実証：ステージⅡとして、高密度水素貯蔵高分子材料から直接水素供給するリチャージャブル燃料電池、および高速ヒドリド伝導材料での水素の価数変化を利用した化学反応等の、新発想デバイスの原理実証を進めた。



●研究項目 A04 水素反応プロセス促進機能

- ・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」として実施している。
- ・領域設定期間内の予定（申請書通り）：
多様な水素種を効果的に高活性化・精密制御できる反応場を構築、領域内連携での高次水素機能の誘起により水素を効果的に有用物質に変換する新規反応プロセスの創出を狙う。
- ・中間評価実施時までの進展：
水素の高活性化のための反応場の創製：ステージ I として、水素の高活性化が期待できるナノ粒子やナノカプセル、酸化物電極、合金透過膜、水素クラスター等の反応場を創製、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立した。
高活性水素を利用した高効率・高選択物質変換の実現：ステージ II として、核磁気共鳴測定や雰囲気光電子分光・表面赤外分光測定による水素高活性化過程の解明を通じて、Pd ナノ粒子表面や TiO₂ 電極表面、PdCu 合金透過膜表面での物質変換を促進した。



●研究項目 A05 水素先端計測・シミュレーション

- ・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」および計画研究 A05-2 「水素の先端計算による水素機能の高精度予測」として実施した。
- ・領域設定期間内の予定（申請書通り）：
材料中の水素に対するオペランド計測技術や第一原理電子状態計算技術等を開発、計測－計算情報の水素データ同化を通じて、領域内連携での高次水素機能の誘起による革新的材料・デバイス・反応プロセスの創成の格段の効率化を目指す。
- ・中間評価実施時までの進展：
オペランド計測に向けた技術・装置の整備：ステージ I として、核反応法（NRA）、中性子散乱、放射光回折、ラマン分光等の整備を進めた。
水素データ同化に向けた第一原理解析手法等の整備：同じくステージ I として、水素データ同化技術の高度化と、水素の電子状態、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かつ高効率に記述する各種水素先端計算の整備を進めた。
水素先端計測・計算技術の領域内連携：ステージ II として、水素先端計測・計算技術を、多様な高次水素機能に係る領域内連携に適用した。

(2) 本研究領域により得られた成果について、具体的かつ簡潔に記述（領域内連携を含む場合は【☆】）

●研究項目 A01 水素高密度凝集機能 計画研究



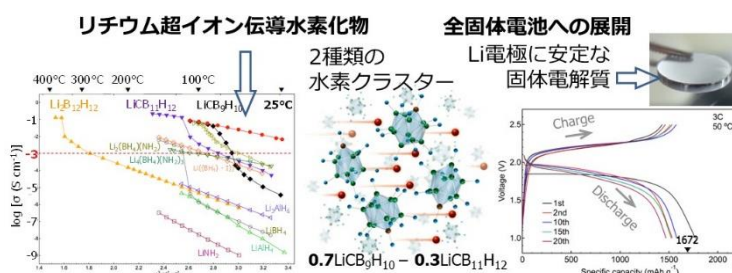
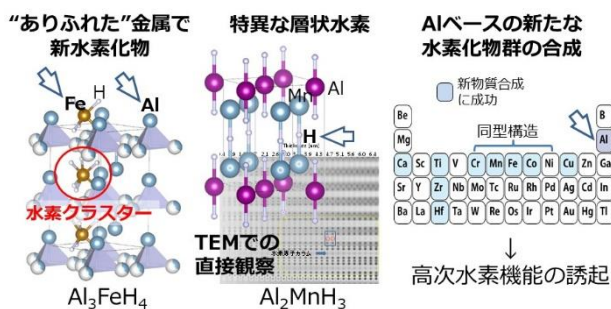
- ・高圧合成技術における一般的な内部水素源は、水素放出温度が約 400°C と高く、それ以下の温度領域での高圧合成には適さない。そこで、室温近傍での水素放出が見込まれ、かつ大気中で取り扱いが可能なアンモニアボラン（NH₃BH₃）を用いた独自の水素源開発を行い、水素の高密度化技術を確立した。
- ・これにより、Al と Fe 等のありふれた金属だけから構成される Al₃FeH₄ や、水素が層状に局在した Al₂MnH₃ 等、新たな高密度水素化物の高圧合成に成功した。後者では透過電顕での水素の直接観察にも成功した。従来は合成困難とされてきた Al ベースの新たな高密度水素化物群での高次水素機能の誘起に向けた研究を展開中。【☆】
- ・また、水素とホウ素から形成された水素クラスター（錯イオン）の高次水素機能により、リチウムが超イオン伝導を示す新たな高密度水素化物も合成した。この水素化物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（一部は特許出願中、非公開部分に記載）。現在、水素クラスターの回転挙動とリチウム超イオン伝導性との相関等の解明を進めている。【☆】
- ・さらに、高配位水素クラスターを有する高密度水素化物 Li₅MoH₁₁ が、常圧下では絶縁体であるが高圧下で超伝導化することも発見、現在さらなる材料探索を進めている。【☆】

公募研究

- ・高密度水素を配位したホウ化水素（Hydrogen Boride）シートの高純度合成と多機能化（水素発生・貯蔵や触媒機能）、アルカリ・アルカリ土類金属ボロハイドライドのアンミン錯体形成プロセスやその構造変化に起因する高速イオン伝導性に関する領域内連携が進んだ。さらに、ヒドリドの“柔らかさ”に起因する新たな物性や機能性の探索等も進んだ。【☆】

高次水素機能：高密度+局在(クラスター化, 層状化)

高次水素機能：高密度+局在(クラスター化)+高速移動(回転)



●研究項目 A02 水素界面局在機能 計画研究

- ・反応性スパッタ法やパルスレーザー堆積法による水素化物エピタキシャル成膜技術を確認、レーザーパワーや基板等の最適化により水素を高精度に局在化させたヘテロ界面を創製、TiH₂、NbH、MgH₂、YH₂、EuH₂、YO_xH_y、Ca₂NH 等の金属水素化物に加えて、LiBH₄ 等の錯体水素化物の成膜にも成功した。
- ・これらの技術による高次水素機能の誘起に向けて Y を含む酸水素化物薄膜を合成、光照射による金属-絶縁体転移をはじめとするヘテロ界面での特異物性の解明も進めた。また、TiO_x/c(結晶)-Si ヘテロ界面に対して水素プラズマ処理を実施、その界面での水素の局在性や結合性を詳細に解明することで、電子伝導や表面パッシベーション機能の観点で優れた高効率 Si 系太陽電池の設計指針を得た。【☆】
- ・さらに、Ir 系金属錯体の水素化反応に伴う色彩変化を利用して、鉄中を透過した水素の可視化にも成功した。ヘテロ界面に関わる高次水素機能を利用した新たな水素検出 (定量化と分布観察) 技術の原理実証であることに加え、金属工学-錯体化学という顕著な異分野連携の例として注目される。【☆】

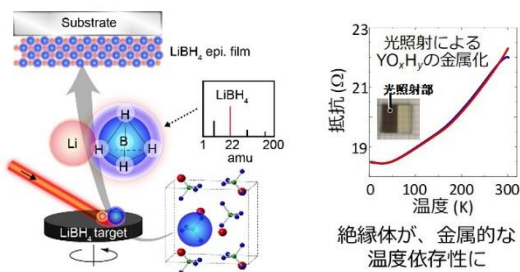
公募研究

- ・新たなヒドリド化合物-金属ナノ粒子活性界面の形成による物質変換プロセスの促進、および酸窒素水素化合物での触媒反応機構の解明等の研究が進んだ。【☆】

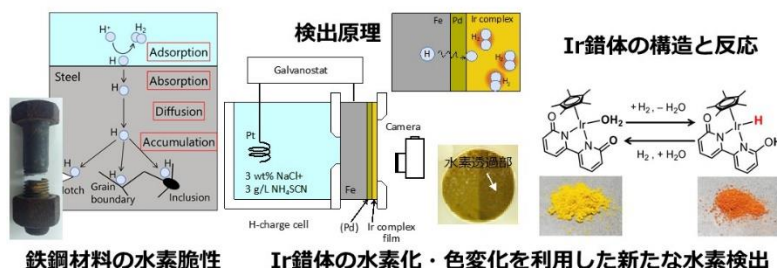
高次水素機能：局在+高密度+高速移動

高次水素機能：局在+高活性+高速移動

水素化物エピ成膜技術の確立、ヘテロ界面での新物性



金属材料中を透過する水素の、金属錯体による検出の原理実証に成功



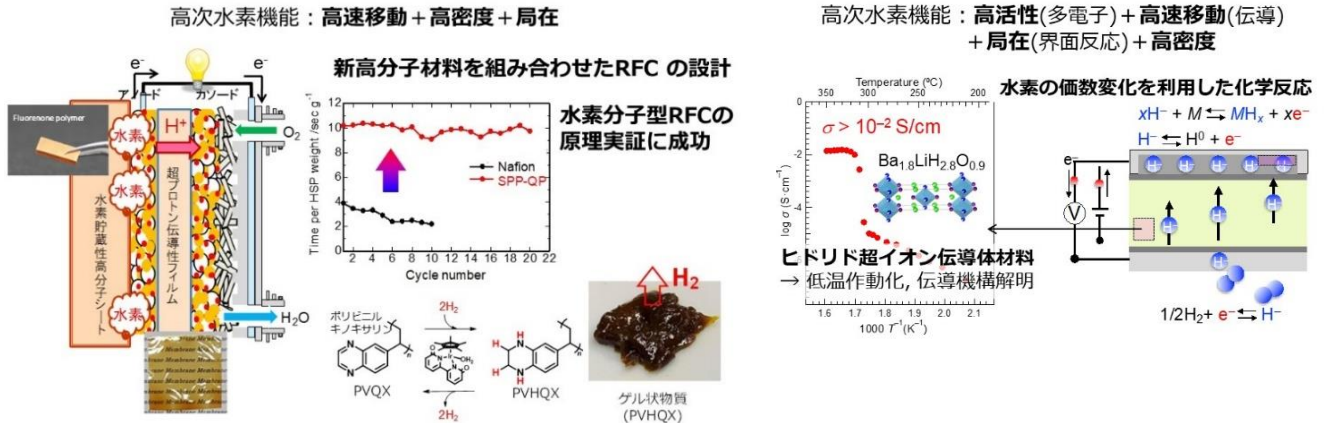
●研究項目 A03 水素高速移動機能 計画研究

- ・高分子材料中での個別の高次水素機能の誘起により、高速プロトン導電ならびに高密度水素貯蔵等の機能性を大幅に向上させた。前者では、親水部としてスルホン酸基を高密度に導入したスルホフェニル環からなる共重合体構造とすることで、プロトン導電率を 4.5 倍増大させた。現在、透過電顕や X 線・中性子小角散乱での相分離構造解析等も進めている。後者では、コンパクト分子構造であるポリピニルキノキサリンを合成、Ir 触媒や溶媒添加によりゲル状態で常圧・80~120°Cの温和な条件下において可逆的な水素化 (水素貯蔵)・水素発生が進行することを実証した。【☆】
- ・さらに、高速プロトン導電と高密度水素貯蔵高分子材料とを組み合わせることで初めて誘起できる高次水素機能も狙い、新発想デバイスとしてのリチャージャブル燃料電池 (R-FC) を設計した。実際に 80°Cでの発電と放電サイクル等の実証に成功した (特許出願中、非公開部分に記載)。【☆】
- ・また、別の新発想デバイスとして、高速ヒドリド導電を示す無機系材料 Ba_{1.8}LiH_{2.8}O_{0.9} での水素-電子カップリング制御に注目し、金属水素化物との組み合わ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化学反応の原理実証にも成功した。【☆】

- ・高次水素機能の誘起に向けた水素-電子カップリング制御に関しては、上記の無機系材料に加えて、有機系材料や生体材料系にも展開した。前者では、水素の局所移動がトリガーとなる π 電子系スイッチング機能の外場応答を調査し、電場印加で可逆な抵抗スイッチングによるメモリ効果、また圧力印加で超伝導転移の観測に成功した（一部は特許出願中、非公開部分に記載）。後者では、生物酵素・ヒドロゲナーゼでの触媒反応場と中間体の解析を進め、核スピン異性体比のその場計測による反応解析に成功した。【☆】

公募研究

- ・水素高速移動と光反応の融合によるプロトン応答性蛍光スイッチ分子や水素結合性フォトクロミック分子等の設計、さらに有機酸の水素化を介した熱電変換（逆電流発生）の誘起等に関する領域内連携が進んだ。【☆】



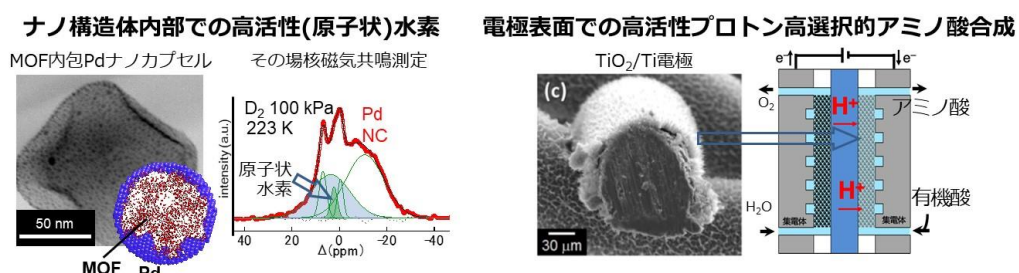
●研究項目 A04 水素反応プロセス促進機能 計画研究

- ・新たなナノ構造材料の例として、アークプラズマ蒸着法により、多孔性配位高分子（Metal Organic Frameworks, MOF）を Pd ナノ粒子で覆った MOF 内包 Pd ナノカプセルを創製した。Pd ナノ粒子表面での高次水素機能により MOF 上へスピルオーバーする水素が存在することが核磁気共鳴測定（水素圧力および温度可変）により観測された。この水素は原子状であると予測されるので、水素を効果的に高活性化する反応場として注目される。【☆】
- ・また、水の電気分解により電極上に発生する電界活性化水素にも注目した。この場合、TiO₂ 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が可能となり、バイオマスから調達可能な α -ケト酸と窒素源であるヒドロキシルアミンとの反応により、アラニン・グリシン・アスパラギン酸・グルタミン酸・ロイシン・イソロイシン・フェニルアラニン等の多様なアミノ酸を高選択的に合成（=高選択物質変換）することに成功した。
- ・さらに、水素を効果的に高活性化する反応場として期待される PdCu 合金透過膜への水素の吸着・吸蔵過程に伴う表面組成と化学状態について、雰囲気光電子分光・表面赤外分光を用いて解析、Pd サイトで解離し Cu(111) 表面にスピルオーバーした高活性水素と Cu 表面間の振動の観測に至った。今後は、合金透過膜表面での高次水素機能により、メタノール等の有用物質への合成（=高効率物質変換）の実現を目指す。【☆】

公募研究

- ・BCC 型 Ru-Fe ナノ合金上での高効率アンモニア合成、および有機酸イオンとプロトンの TiO₂ への共吸着による反応物安定化等に関する DFT 計算による機構解明が進むとともに、Ir 系金属錯体を触媒等に用いた領域内連携が大いに進んだ。【☆】

高次水素機能：高活性(ナノ構造(NC), 電気化学)+高密度+高速移動





●研究項目 A05 水素先端計測・シミュレーション 計画研究

- 水素先端計測に関しては、オペランド計測も見据えた関連技術・装置の整備を進めた。核反応法では水素のアンチコインシデンスによる背景信号の低減等により測定時間の短縮と測定感度の向上 ($7 \times 10^{18} \text{cm}^{-3}$ @150 nA) を達成、結晶構造中での水素位置同定のためにチャネリング核反応法の開発も進めた。また、中性子散乱ではノイズ低減デバイスの導入による S/N 比の 100 倍もの向上、放射光 X 線回折では高 Q 分解能と高 Q 領域を両立した全散乱プロファイル測定法の開発による実空間分解能の微小化 ($\sim 0.03 \text{nm}$)、等を達成した。さらにラマン分光では軽水素 (H) - 重水素 (D) 交換およびオルト水素 - パラ水素変換の同時計測装置を整備した。
- これらにより、水素クラスターの原子構造解析 (A01 と連携)、水素化物エピタキシャル成膜技術や優れた Si 系太陽電池の設計指針の確立 (同 A02)、さらに高速プロトン・ヒドリド伝導材料の各種構造解析やヒドロゲナーゼでの触媒反応場と中間体の解析 (同 A03) 等、多様な高次水素機能の誘起に係る領域内連携が大いに促進された。【☆】
- 水素先端計算のうち、水素データ同化技術に関しては、実験データのノイズが大きく、小さな回折ピークを観測できない場合や、結晶構造が非常に複雑な場合に対応するため、回折強度情報を利用する方法を開発し、構造探索の成功率が格段に高まることを検証した。また、エネルギーとペナルティ関数を足し合わせず、それらを個々に原子座標微分して得られる勾配情報を用いて構造探索する、新しい同時最適化手法 (COM: Combined Optimization Method) を開発した。この手法により、複数の実験データを容易に利用することが可能になった。また、原子核の量子効果を取り入れた第一原理計算を可能とするオープンソース・ソフトウェア PIMD の高度化と公開 (ハンズオンチュートリアルの実施) を進め、VASP や Quantum Espresso、CP2K を利用した電子状態計算の階層的並列化によってスーパーコンピュータ上での計算性能を大幅に上げることに成功した。【☆】
- これらにより、リチウム超イオン伝導性を示す高密度水素化物の低・高温相や高压合成によって新たに得られた水素化物群 (A01 と連携) や Y 等を含む酸水素化物薄膜 (同 A02) 等の構造決定、さらに高速ヒドリド伝導を示す無機系材料の物性解析 (同 A03)、表面等での高効率・高選択物質変換における同位体効果の解明 (同 A04)、アモルファス氷中におけるミュオンの解析 (同 A05) 等、多様な高次水素機能の誘起に係る領域内連携が大いに促進された。【☆】

公募研究

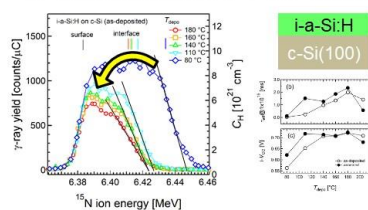
- 水素先端計測に関しては、水素可視化ホログラフラーによる B ドープ Si 中での B 周囲の微量水素の検出や各種高密度水素化物の核磁気共鳴測定による解析、また水素先端計算に関しては、TiO₂ 電極表面での物質変換反応や有機系・生体材料系での水素-電子カップリングに関する理論計算等、多様な領域内連携が進んだ。【☆】

水素先端計測：ヘテロ界面やスピン状態の精密・時系列解析

水素先端計算：水素データ同化および水素量子状態の解明

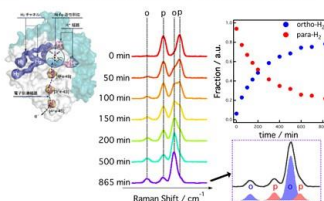
Si系太陽電池：

ヘテロ界面水素でのキャリア長寿命化



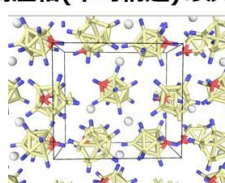
ヒドロゲナーゼ：

触媒反応場と中間体の解析



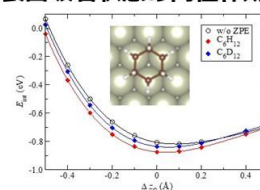
水素クラスター：

高温相 (平均構造) の決定



炭化水素分子：

表面吸着状態の同位体効果



6 研究発表の状況

研究項目ごとに計画研究・公募研究の順で、本研究領域により得られた研究成果の発表の状況（主な雑誌論文、学会発表、書籍、産業財産権、ホームページ、主催シンポジウム、一般向けのアウトリーチ活動等の状況。令和2年6月末までに掲載等が確定しているものに限る。）について、具体的かつ簡潔に5頁以内で記述すること。なお、雑誌論文の記述に当たっては、新しいものから順に発表年次をさかのぼり、研究代表者（発表当時、以下同様。）には二重下線、研究分担者には一重下線、corresponding author には左に*印を付すこと。

計画・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）。
連携研究の成果の場合は、主たる研究者が所属する研究項目で分類しており、重複記載は無い。

●研究項目 A01 水素高密度凝集機能 計画研究



- [1] *H. Saitoh, M. Morimoto, T. Watanuki, T. Sato, S. Takagi, and S. Orimo, "Hydrogenation reaction of Co₃Ti alloy under high pressure and high temperature", Int. J. Hydrogen Energy, in press, 2020.
- [2] *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.
- [3] H. Saitoh, A. Machida, T. Hattori, A.S. Furukawa, K. Funakoshi, T. Sato, S. Orimo, and *K. Aoki, "Neutron diffraction study on the deuterium composition of nickel deuteride at high temperatures and high pressures", Physica B, 587, 412153(1-6), 2020.
- [4] *S. Takagi, T. Ikeshoji, T. Sato, and S. Orimo, "Pseudorotating hydride complexes with high hydrogen coordination: A class of rotatable polyanions in solid matter", Appl. Phys. Lett., 116, 173901(1-5), 2020. "多数の水素からなるクラスターの“擬回転”を利用した室温超イオン伝導の新たな発現原理を確立" (2020年4月22日) [プレスリリース](#).
- [5] *H. Oguchi, S. Kim, S. Maruyama, Y. Horisawa, S. Takagi, T. Sato, R. Shimizu, Y. Matsumoto, T. Hitosugi, and S. Orimo, "Epitaxial film growth of LiBH₄ via molecular unit evaporation", ACS Appl. Electron. Mater., 1(9), 1792-1796, 2019.
- [6] *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](#).
- [7] *T. Sato, L.L. Daemen, Y. Cheng, A.J. Ramirez-Cuesta, K. Ikeda, T. Aoki, T. Otomo, and S. Orimo, "Hydrogen release reaction of complex transition metal hydride with covalently bound hydrogen and hydride ions", ChemPhysChem, 20, 1392-1397, 2019.
- [8] *D. Meng, M. Sakata, K. Shimizu, Y. Iijima, H. Saitoh, T. Sato, S. Takagi, and S. Orimo, "Superconductivity of the hydrogen-rich metal hydride Li₅MoH₁₁ under high pressure", Phys. Rev. B, 99, 024508(1-6), 2019.
- [9] S. Orimo, "Complex hydrides for energy device research", Materials Research Meeting 2019 (2019年12月10～14日, 横浜) [招待講演](#).
- [10] H. Saitoh, "High-pressure and high-temperature synthesis of novel hydrides", International meeting on study of matter at extreme conditions (SMEC2019) (2019年3月30日～4月6日, フロリダ) [招待講演](#).
- [11] 山室修, 森初果, 吉信淳, 杉野修, 東京大学柏キャンパス一般公開・物性研究所の企画「ISSP de ハイドロジェノミクス」(2019年10月25～26日, 柏) [アウトリーチ](#).
- [12] 齋藤寛之, 兵庫県立大学理学部オープンキャンパス (2019年8月22日, 上郡) [アウトリーチ](#).

公募研究

- [13] R. Kawamura, N. Thanh Cuong, T. Fujita, R. Ishibiki, T. Hirabayashi, A. Yamaguchi, I. Matsuda, S. Okada, *T. Kondo, and *M. Miyauchi, "Photoinduced hydrogen release from hydrogen boride sheets", Nat. Commun., 10, 4880(1-8), 2019. "軽量で安全な水素キャリア材料を開発 —室温・大気圧において光照射のみで水素を放出—" (2019年10月25日) [プレスリリース](#).
- [14] K. Fukui, *S. Jimura, 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リドイオン伝導体を実現" (2019年6月12日) [プレスリリース](#).
- [15] 前里光彦, "Artificial control of materials properties", Zhou Huijiu Forum (2019年6月3日, 西安) [招待講演](#).

●研究項目 A02 水素界面局在機能 計画研究



- [1] *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.
- [2] *T. Hojo, B. Kumai, M. Koyama, E. Akiyama, H. Waki, F. Nishimura, H. Saitoh, A. Shiro, R. Yasuda, T. Shobu, and A. Nagasaka, "Hydrogen embrittlement resistance of pre-strained ultra high-strength low alloy TRIP-aided steel", Int. J. Fracture, in press, 2020.

- [3] M. Semma, *K. Gotoh, M. Wilde, S. Ogura, Y. Kurokawa, K. Fukutani, and N. Usami, "Impact of deposition of indium tin oxide double layers on hydrogenated amorphous silicon/crystalline silicon heterojunction", AIP Adv., 10, 065008(1-9), 2020.
- [4] *Y. Nakagawa, K. Gotoh, M. Wilde, S. Ogura, Y. Kurokawa, K. Fukutani, and N. Usami, "Effect of forming gas annealing on hydrogen content and surface morphology of titanium oxide coated crystalline silicon heterocontacts", J. Vac. Sci. Technol. A, 38, 022415(1-6), 2020.
- [5] *S. Miyagawa, K. Gotoh, S. Ogura, M. Wilde, Y. Kurokawa, K. Fukutani, and N. Usami, "Effect of hydrogen plasma treatment on the passivation performance of TiO_x on crystalline silicon prepared by atomic layer deposition", J. Vac. Sci. Technol. A, 38, 022410(1-6), 2020.
- [6] *Y. Sasahara, K. Kanatani, H. Asoma, M. Matsuhisa, K. Nishio, R. Shimizu, N. Nishiyama, and *T. Hitosugi, "Ultrahigh-pressure fabrication of single-phase α -PbO₂-type TiO₂ epitaxial thin films", AIP Adv., 10, 025125(1-5), 2020.
- [7] *K. Gotoh, M. Wilde, S. Kato, S. Ogura, Y. Kurokawa, K. Fukutani, and N. Usami, "Hydrogen concentration at a-Si:H/c-Si heterointerfaces - the impact of deposition temperature on passivation performance", AIP Adv., 9, 075115(1-7), 2019.
- [8] *T. Mochizuki, K. Gotoh, Y. Kurokawa, T. Yamamoto, and N. Usami, "Local structure of high performance TiO_x electron-selective contact revealed by electron energy loss spectroscopy", Adv. Mater. Interfaces, 6, 1801645, 2019. "太陽電池の高性能化に有用な新材料の開発" (2018年12月25日) [プレスリリース](#).
- [9] 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.
- [10] E. Akiyama, "Hydrogen embrittlement of high strength steels assisted by corrosive environment", International Ocean and Polar Engineering Conference, ISOPE-2019 (2019年6月16~21日, ホノルル) [招待講演](#).
- [11] N. Usami, "Multicrystalline informatics for silicon ingot with ideal microstructures", European Materials Modeling Council International Workshop 2019 (2019年2月25~27日, ウィーン) [招待講演](#).
- [12] 一杉太郎, "高大連携特別授業「サマーレクチャー」" (2019年9月3日, 東京) [アウトリーチ](#).
- [13] 宇佐美徳隆, "PV2019 太陽光発電展示会&フォーラム" (2019年7月10~12日, 東京) [アウトリーチ](#).
- [14] 宇佐美徳隆, "磐田南高等学校ミニ大学" (2018年9月12日, 磐田) [アウトリーチ](#).

公募研究

- [15] *M. Kitano, J. Kujirai, K. Ogasawara, S. Matsuishi, T. Tada, H. Abe, Y. Niwa, and *H. Hosono, "Low-temperature synthesis of perovskite oxynitride-hydrides as ammonia synthesis catalysts", J. Am. Chem. Soc., 141(51), 20344-20353, 2019. "貴金属使わずアンモニア合成触媒となる新物質発見" (2019年11月22日) [プレスリリース](#).

●研究項目 A03 水素高速移動機能



計画研究 (A03-1)

- [1] Z. Long, J. Miyake, and *K. Miyatake, "Proton exchange membranes containing densely sulfonated quinquephenylene groups for high performance and durable fuel cells", J. Mater. Chem. A, in press, 2020.
- [2] K. Oka, C. Strietzel, R. Emanuelsson, H. Nishide, *K. Oyaizu, M. Strømme, and *M. Sjödin, "Conducting redox polymer as a robust organic electrode-active material in acidic aqueous electrolyte towards polymer-air secondary batteries", ChemSusChem, 13, 2280-2285, 2020.
- [3] K. Oka, S. Furukawa, S. Murao, T. Oka, H. Nishide, and *K. Oyaizu, "Poly(dihydroxybenzoquinone): Its high-density and robust charge storage capability in rechargeable acidic polymer-air batteries", Chem. Commun., 56, 4055-4058, 2020.
- [4] Y. Morino, *Y. Yokota, H. Hara, K. Bando, S. Ono, A. Imanishi, Y. Okada, H. Matsui, T. Uemura, J. Takeya, and *K. Fukui, "Rapid improvements in charge carrier mobility at ionic liquid/pentacene single crystal interfaces by self-cleaning", Phys. Chem. Chem. Phys., 22, 6131-6135, 2020.
- [5] D. Okaue, I. Tanabe, S. Ono, K. Sakamoto, T. Sato, A. Imanishi, Y. Morikawa, J. Takeya, and *K. Fukui, "Ionic-liquid-originated carrier trapping dynamics at the interface in electric double-layer organic FET revealed by operando interfacial analyses", J. Phys. Chem. C, 124, 2543-2552, 2020.
- [6] T. Kimura, A. Matsumoto, *J. Inukai, and *K. Miyatake, "Highly anion conductive polymers: How do hexafluoroisopropylidene groups affect membrane properties and alkaline fuel cell performance?", ACS Appl. Energy Mater., 3, 469-477, 2020.
- [7] R. Akiyama, N. Yokota, and *K. Miyatake, "Chemically stable, highly anion conductive polymers composed of quinquephenylene and pendant ammonium groups", Macromolecules, 52, 2131-2138, 2019.
- [8] K. Shiino, J. Miyake, and *K. Miyatake, "Highly stable polyphenylene ionomer membrane from dichlorobiphenyls", Chem. Commun., 55, 7073-7076, 2019.
- [9] K. Oyaizu, "Reversible hydrogen storage with polymers", 9th Jilin-Korea-Waseda Alliance Annual Symposium (2019年8月23日, 長春) [招待講演](#).
- [10] K. Miyatake, "Anion exchange membranes containing quinquephenylene groups", Workshop on Ion Exchange Membrane for Energy Applications (2019年6月26日, バッドツビッシェナーン) [招待講演](#).
- [11] K. Fukui, "Structuring of interfacial liquid relevant for electrochemical devices", International Joint

Symposium: "Interfacial Science for Green Innovation" (2018年11月20日, 神戸) [招待講演](#).

- [12] 宮武健治, "未来の科学者訪問セミナー" (2019年11月2日, 山梨) [アウトリーチ](#).
[13] 小柳津研一, "早稲田応用化学会先進研究講演会" (2019年5月18日, 東京) [アウトリーチ](#).
[14] 福井賢二, "研究室公開およびデモ実験・講義の実施" (2019年5月3日, 大阪) [アウトリーチ](#).

公募研究 (A03-1)

- [15] R. Iwai, *[M. Morimoto](#), and M. Irie, "Turn-on mode fluorescent diarylethenes: Effect of electron-donating and electron-withdrawing substituents on photoswitching performance", *Photochem. Photobiol. Sci.*, in press, 2020.
[16] [中村将志](#), "酸素還元反応を活性化する電気二重層の構造", 第124回触媒討論会 (2019年9月18日, 長崎) [招待講演](#).
[17] [森本正和](#), "フォトクロミック分子に関する出張授業 (JST 次世代人材育成事業)" (2020年2月4~5日, 2019年8月8~9日) [アウトリーチ](#).

計画研究 (A03-2)

- [1] Y. Sunairi, S. Dekura, A. Ueda, T. Ida, M. Mizuno, and *[H. Mori](#), "Anhydrous purely organic solid-state proton conductors: Effects of molecular dynamics on the proton conductivity of imidazolium hydrogen dicarboxylates", *J. Phys. Soc. Jpn.*, 89, 051008(1-11), 2020.
[2] *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.
[3] K. Nishikawa, *H. Ogata, and *[Y. Higuchi](#), "Structural basis of the function of [NiFe]-hydrogenases", *Chem. Lett.*, 49(2), 164-173, 2020.
[4] [小林玄器](#), "ヒドリド導電体 ~物質開発の現状と電池への応用可能性~, 電気化学, 87, 227-232, 2019.
[5] *A. Ueda, K. Kishimoto, T. Isono, S. Yamada, H. Kamo, K. Kobayashi, R. Kumai, Y. Murakami, J. Gouchi, Y. Uwatoko, Y. Nishio, and *[H. Mori](#), "Pressure-induced hydrogen localization coupled to a semiconductor-insulator transition in a hydrogen-bonded molecular conductor", *RSC Adv.*, 2019(9), 18353-18358, 2019.
[6] S. Yokomori, *A. Ueda, T. Higashino, R. Kumai, Y. Murakami, and *[H. Mori](#), "Construction of three-dimensional anionic molecular frameworks based on hydrogen-bonded metal dithiolene complexes and the crystal solvent effect", *CrystEngComm*, 21, 2940-2948, 2019.
[7] *A. Ueda, K. Kishimoto, Y. Sunairi, J. Yoshida, H. Yamakawa, T. Miyamoto, T. Terashige, H. Okamoto, and *[H. Mori](#), "Hysteretic current-voltage characteristics in the deuterium-dynamics-triggered charge-ordered phase of $\kappa\text{D}_3(\text{Cat-EDT-TTF})_2$ ", *J. Phys. Soc. Jpn.*, 88, 034710(1-6), 2019.
[8] F. Takeiri, A. Watanabe, A. Kuwabara, H. Nawaz, N. Ayu, M. Yonemura, R. Kanno, and *[G. Kobayashi](#), " Ba_2ScHO_3 : H⁻ conductive layered oxyhydride with H⁻ site selectivity", *Inorg. Chem.*, 58, 4431-4436, 2019.
[9] 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.
[10] [G. Kobayashi](#), "Study on H⁻ conductive oxyhydrides", IMS-PCOSS Bilateral Symposium (2019年12月21~24日, 廈門) [招待講演](#).
[11] [Y. Higuchi](#), "Structural studies on [NiFe]-hydrogenases -role of water/proton-network for O₂-stability", ISF-3/ICARP2019 (2019年11月19~21日, 広島) [招待講演](#).
[12] [H. Mori](#), "Novel molecular functional materials utilizing proton dynamics", ISCOM2019(13th International Symposium on Crystalline Organic Metals, Superconductors and Magnets) (2019年9月22~27日, トマール) [招待講演](#).
[13] [小林玄器](#), "K-ARCシンポジウム2019" (2019年11月15日, 鶴岡) [アウトリーチ](#).
[14] [森初果](#), "第3回やっぱり物理が好き! ~物理に進んだ女子学生・院生のキャリア~" (2018年11月17日, 栢) [アウトリーチ](#).

公募研究 (A03-2)

- [15] H. Inoue, Y. Liang, *[T. Yamada](#), and N. Kimizuka, "Enhanced Seebeck coefficients of thermocells by heat-induced deposition of I_3^- /hydrophobized α -cyclodextrin complexes on electrodes", *Chem. Commun.*, in press, 2020.
[16] T. Yamanaka, *A. Hattori, L. Pamasi, S. Takemoto, K. Hattori, H. Daimon, K. Sato, and *[H. Tanaka](#), "Effects of off-stoichiometry in the epitaxial NdNiO_3 film on the suppression of its metal-insulator-transition properties", *ACS Appl. Electron. Mater.*, 1(12), 2678-2683, 2019.
[17] S. Yamamoto, *[H.S. Kato](#), A. Ueda, S. Yoshimoto, Y. Hirata, J. Miyawaki, K. Yamamoto, Y. Harada, H. Wadati, [H. Mori](#), [J. Yoshinobu](#), and *I. Matsuda, "Direct evidence of interfacial hydrogen bonding in proton-electron concerted 2D organic bilayer on Au substrate", *e-JSSNT*, 17, 49-55, 2019.

●研究項目 A04 水素反応プロセス促進機能

計画研究

- [1] T. Matsumoto, R. Yamamoto, M. Wakizaka, A. Nakada, and *[H.-C. Chang](#), "Molecular insights into the ligand-based six-proton and -electron transfer processes between tris-ortho-phenylenediamines and tris-ortho-



- benzoquinodiiimines", Chem.-Eur. J., in press, 2020.
- [2] *T. Shima, "Multimetallic rare earth and group 4 transition metal hydrides for novel transformations of small molecules", J. Phy. Soc. Jpn, 89, 051014(1-9), 2020.
- [3] Y. Shiozawa, T. Koitaya, K. Mukai, S. Yoshimoto, and *J. Yoshinobu, "The roles of step-site and zinc in surface chemistry of formic acid on clean and Zn-modified Cu(111) and Cu(997) surfaces studied by HR-XPS, TPD, and IRAS", J. Chem. Phys., 152, 044703(1-12), 2020.
- [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] *M. Yamauchi, S. Hata, H. Eguchi, S. Kitano, T. Fukushima, M. Higashi, M. Sadakiyo, and K. Kato, "Catalytic enhancement on Ti-Zr complex oxide particles for electrochemical hydrogenation of oxalic acid to produce an alcoholic compound by controlling electronic states and oxide structures", Cat. Sci. Tec., 9(23), 6561-6565, 2019.
- [6] J. Tang, S. Yamamoto, T. Koitaya, A. Yoshigoe, T. Tokunaga, K. Mukai, *I. Matsuda, and *J. Yoshinobu, "Mass transport in the PdCu phase structures during hydrogen adsorption and absorption studied by XPS under hydrogen atmosphere", Appl. Surf. Sci., 480, 419-426, 2019.
- [7] T. Shima, "Multinuclear hydride clusters: Activation and transformation of small molecules", The 5th Japan - Korea Joint Symposium on Hydrogen in Materials (2019年11月6～8日, 東京) [招待講演](#).
- [8] H.-C. Chang, "New challenges in the molecular functional chemistry of redox-active ligands", China-Japan Symposium of Functional Coordination Chemistry (2019年4月11～14日, 広州) [招待講演](#).
- [9] M. Yamauchi, "Inorganic nanocatalysts for efficient power storage into liquid", 2nd International Conference on Materials Chemistry (2019年3月20～21日, ロンドン) [招待講演](#).
- [10] J. Yoshinobu, "Gas exposure effects on monolayer pentacene FET studied by using non-invasive GaIn probes", 9th Workshop on Advanced Spectroscopy of Organic Materials for Electronic Applications (2018年10月23～26日, シュルックセ) [招待講演](#).
- [11] 島隆則, "Tokyo Tech CAMPUS Asia Summer School 留学生研究室見学会" (2019年7月18日, 和光) [アウトリーチ](#).
- [12] 張浩徹, "中央大学附属高校説明会" (2018年12月14日, 東京) [アウトリーチ](#).

公募研究

- [13] H. Sakagami, M. Tachikawa, and *T. Ishimoto, "Hydrogen/deuterium adsorption and absorption properties on and in palladium using a combined plane wave and localized basis set method", Int. J. Quant. Chem., e26275(1-7), 2020.
- [14] G. Toyooka and *K. Fujita, "Synthesis of dicarboxylic acids from aqueous solutions of diols accompanied by the evolution of hydrogen catalyzed by an iridium complex bearing a bipyridonate ligand", ChemSusChem, 13, 2020.
- [15] Y. Ueda, *H. Tsurugi and *K. Mashima, "Cobalt π -catalyzed *E*-selective cross-dimerization of terminal alkynes: A mechanism involving cobalt(0/II) redox cycles", Angew. Chem. Int. Ed., 59, 1552-1556, 2020.
- [16] 藤田健一, "京大 de ハイドロジェノミクス", (2019年10月19日, 開催) [アウトリーチ](#).

●研究項目 A05 水素先端計測・シミュレーション



計画研究 (A05-1)

- [1] K. Shimizu, *W.A. Dino, H. Nakanishi, H. Kasai, K. Takeyasu, K. Fukutani, and A. Yajima, "Dynamical quantum filtering via enhanced scattering of para-H₂ on the orientationally anisotropic potential of SrTiO₃ (001)", Sci. Rep., 10, 5939(1-11), 2020.
- [2] *K. Yamakawa and K. Fukutani, "Nuclear spin conversion of H₂, H₂O, and CH₄ interacting with diamagnetic insulators", J. Phys. Soc. Jpn., 89, 051016(1-12), 2020.
- [3] *N. Nagatsuka, M. Wilde, and K. Fukutani, "Hydrogenation and hydrogen diffusion at the anatase TiO₂(101) surface", J. Chem. Phys., 152, 074708(1-6), 2020.
- [4] T. Ozawa, R. Shimizu, S. Ogura, T. Hitosugi, and K. Fukutani, "Fabrication of nm-thick palladium hydride and observation of its relaxation", J. Vac. Surf. Sci., 62, 492-497, 2019.
- [5] *T. Kawamura and K. Fukutani, "Changes of RHEED intensity with hydrogen position on metal surface", Surf. Sci., 688, 7-13, 2019.
- [6] *W. Mao, L. Zhang, M. Wilde, S. Ogura, T. Chikada, K. Fukutani, H. Matsuzaki, and T. Terai, "Ab initio calculations for the H-decorated neutral and charged oxygen vacancy in erbium oxide", Fusion Eng. Des., 144, 188-192, 2019.
- [7] Y. Ohashi, *N. Nagatsuka, S. Ogura, and *K. Fukutani, "Hydrogen distribution and electronic structure of TiO₂(110) hydrogenated with low-energy hydrogen ion", J. Phys. Chem. C, 123, 10319-10324, 2019.
- [8] K. Asakawa, Y. Miura, N. Nagatsuka, K. Takeyasu, M. Matsumoto, and K. Fukutani, "Electronic and spin states modulation on Fe₃O₄(111) surfaces", Phys. Rev. B, 99, 085442(1-8), 2019.
- [9] 小倉正平, 福谷克之, "表面吸着水素の物理", 固体物理, 53(11), 661-671, 2018
- [10] *S. Ogura, S. Ohno, K. Mukai, J. Yoshinobu, and K. Fukutani, "H-D exchange mechanism of butene on a D-

absorbed Pd-Au alloy surface", J. Phys. Chem., 123, 7854-7860, 2018.

- [11] *W. Mao, *M. Wilde, S. Ogura, J. Chen, K. Fukutani, H. Matsuzaki, and T. Terai, "Hydrogen-accelerated phase transition and diffusion in TiO₂ thin films", J. Phys. Chem. C, 122, 23026-23033, 2018.
- [12] K. Namba, *S. Ogura, S. Ohno, W. Di, K. Kato, M. Wilde, I. Pletikosic, P. Pervan, M. Milun, and K. Fukutani, "Acceleration of hydrogen absorption by palladium through surface alloying with gold", PNAS, 115(31), 7896-7900, 2018.
- [13] K. Fukutani, "Rotational dynamics of molecular hydrogen on surfaces and in scattering", 4th International Workshop on Scattering of Atoms and Molecules from Surfaces (2019年9月24~27日, マドリード) [招待講演](#).
- [14] 町田晃彦, "高温高压下における反強磁性 MnD_x の磁気転移", 第22回 CROSSroads Workshop 「中性子で見る水(氷)・水素化物の物質科学」 (2019年5月15日, 東海) [招待講演](#).
- [15] K. Fukutani, "Interdisciplinary Study with Quantum Beams", The 18th CNS International Summer School, (2019年8月23-24日, 東京) 夏の学校講師 [アウトリーチ](#).

公募研究 (A05-1)

- [16] *M. Inukai, T. Kurihara, Y. Noda, W. Jiang, K. Takegoshi, N. Ogiwara, H. Kitagawa, and K. Nakamura, "Probing dynamics of carbon dioxides in a metal-organic framework under high pressure by high-resolution solid-state NMR", Phys. Chem. Chem. Phys., in press, 2020.
- [17] K. Ohoyama, "Novel usages of neutrons; White neutron holography in J-PARC", 14th International Conference on the Structure of Non-Crystalline Materials (2019年11月3~8日, 神戸) [招待講演](#).

計画研究 (A05-2)

- [1] *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.
- [2] R. Miyazaki and *I. Hamada, "Geometric and electronic structures of acene crystals: A van der Waals density functional theory study", J. Comput. Chem. Jpn, 18, 205-207, 2020.
- [3] *O. Sugino, "Hydrogen at electrochemical interfaces", J. Phys. Soc. Jpn., 89, 051013(1-6), 2020.
- [4] *H. Kimizuka, S. Ogata, and M. Shiga, "Unraveling anomalous isotope effect on hydrogen diffusivities in fcc metals from first principles including nuclear quantum effects", Phys. Rev. B, 100, 024104(1-22), 2019.
- [5] *S.E.M. Putra, *F. Muttaqien, Y. Hamamoto, K. Inagaki, I. Hamada, and Y. Morikawa, "Van der Waals density functional study of formic acid adsorption and decomposition on Cu(111)", J. Chem. Phys., 150, 154707, 2019.
- [6] *Y. Kawashima, K. Ishimura, and *M. Shiga, "Ab initio quantum mechanics/molecular mechanics method with periodic boundaries employing Ewald summation technique to electron-charge interaction: Treatment of the surface-dipole term", Journal of Chemical Physics, 150, 124103(1-14), 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. Sun, Y. Yamamoto, S. Kasamatsu, I. Hamada, and O. Sugino, "Hydrogen adsorption on Pt(111) revisited from random phase approximation", J. Chem. Phys., 11549(16), 164702(1-7), 2018.
- [9] 常行真司, "不完全な実験データを用いたデータ同化結晶構造探索", 早稲田大学材研オープンセミナー (2019年11月11日, 東京) [招待講演](#).
- [10] O. Sugino, "Density functional approach to hydrogen on electrode", Asian workshop on first-principles calculation (2019年10月28日, 大阪) [招待講演](#).
- [11] M. Shiga, "Ab initio molecular simulations of hydrogen bonded systems", Seminar at Department of Chemistry, New York University (2019年8月20日, ニューヨーク) [招待講演](#).
- [12] S. Tsuneyuki, "Crystal structure prediction by assimilating incomplete powder diffraction data", The 18th International Conference on Density Functional Theory and its applications (2019年7月21~27日, アリカソテ) [招待講演](#).
- [13] I. Hamada, "Image potential state from van der Waals density functional", Quantum Simulations: From Chemistry to Materials Science (2018年12月17~21日, 香港) [招待講演](#).
- [14] 志賀基之, 春山潤, 濱田幾太郎, "PIMDハンズオンチュートリアル (<https://ccse.jaea.go.jp/software/PIMD/index.jp.html>)" (2020年1月16日, 千葉, 柏) [アウトリーチ](#).

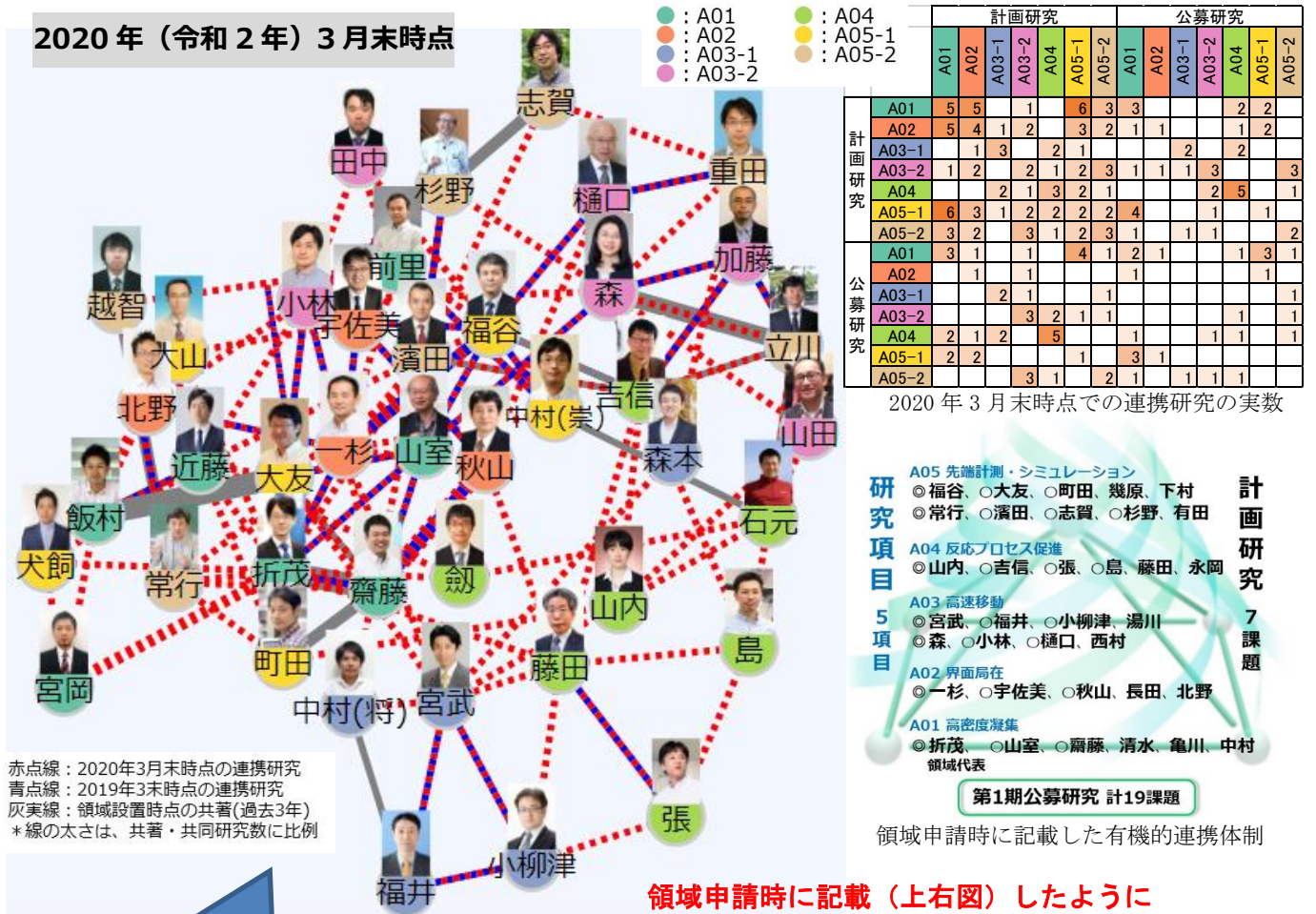
公募研究 (A05-2)

- [15] *T. Takahashi, R. Harada, and *Y. Shigeta, "Distribution of counter ions in negatively-charged lipid/water/air interface: Molecular dynamics study", Chem. Lett., 49, 361-363, 2020.
- [16] K. Hengphasatporn, T. Matsui, and *Y. Shigeta, "Estimation of acid dissociation constants (pKa) of N-containing heterocycles in DMSO and transferability of Gibbs free energy in different solvent conditions", Chem. y Lett., 49, 307-310, 2020.
- [17] M. Ochi, "Effective Coulomb interaction in strontium oxyhydrides evaluated by the constrained random-phase approximation", 5th Japan-Korea Joint Symposium on Hydrogen in Materials (2019年11月6~8日, 東京) [招待講演](#).
- [18] M. Tachikawa, "Path integral simulation for accurate calculation of hyperfine coupling constants of muoniated molecules", Ninth Conference of the Asia-Pacific Association of Theoretical and Computational Chemists (2019年9月30日~10月3日, シドニー) [招待講演](#).

7 研究組織の連携体制

研究領域全体を通じ、本研究領域内の研究項目間、計画研究及び公募研究間の連携体制について、図表などを用いて具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

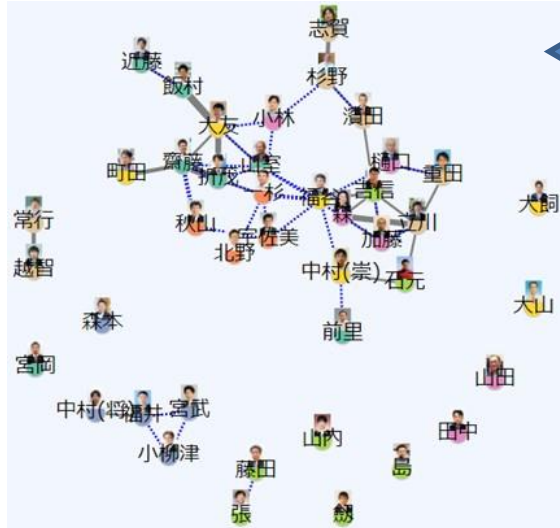
論文検索エンジン“Dimensions”や領域研究者からのデータシートに基づき、連携体制の構築過程を時系列的に可視化（JavaScriptライブラリ D3.js を使用）。下表には、2020年（令和2年）3月末時点での本研究領域内の研究項目間、計画研究及び公募研究間の連携研究の実数を示す。



領域申請時に記載（上右図）したように「領域全体での有機的連携体制」が実際に確立でき、ハイドロジェノミクスが着実に進展したといえる。（連携研究の詳細等は22ページに記載）

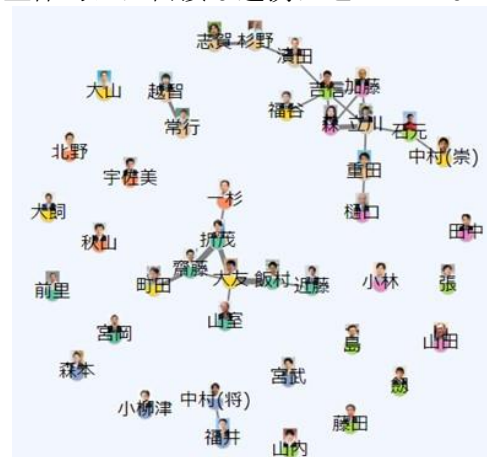
2019年（令和元年）3月末時点

2つの研究グループが、界面研究や先端計測・計算等を通じて連携し始めている。



2018年（平成30年）8月時点

領域設置時点では、主に材料研究と物性研究の2つの研究グループが形成されているものの、全体的には密接な連携は進んでいなかった。



8 若手研究者の育成に係る取組状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の研究遂行に携わった若手研究者（令和2年3月末現在で39歳以下。研究協力者やポスドク、途中で追加・削除した者を含む。）の育成に係る取組状況について、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

- 研究遂行の軸としての本領域研究に関わる165名の若手研究者（39歳以下、直接雇用の10名を含む）に対して、**3つの重層的視点での若手育成**を展開した：



1) 領域全体からの視点：水素先端計測等に関わる海外研究拠点・施設との共同研究やそれに向けた協議の場に積極的に参加させることで、**実践的に国際的視野を広げる**取り組みを進めた。例えば、アメリカ・オークリッジ国立研究所との共同研究のひとつである「水素化合物中の水素原子の振動現象観測」を若手研究者が主体となり進めている。これらの**若手研究者を中心にした海外連携に向けた取り組みは30件以上にのぼる**。

2) 各計画研究からの視点：ハンズオンチュートリアル等の企画を通じて、**異分野連携の素養を高める**取り組みを進めた。例えば、物質・分子科学の研究者に対して、原子核の量子効果を取り入れた第一原理計算の実務指導を行うことで、水素データ同化技術とニューラルネットワークポテンシャルとを組合せて構造探索の高精度化を狙う、等の**若手研究者同士の新たな連携研究が活発化**している。

3) 若手主体の視点：若手研究者が中心となり宿泊型の若手育成スクールを開催することで、講演テーマの設定等も含めた**企画・運営・発信に至る総合的な研究遂行能力の向上を図る**取り組みを進めた。2019年8月の若手育成スクール（自然科学研究機構・岡崎コンファレンスセンターにて開催）には39名の参加があり、



水素データ同化技術とニューラルネットワークポテンシャルとを組合せて構造探索の高精度化を狙う、等の**若手研究者同士の新たな連携研究が活発化**している。助教等の若手研究者が博士学生のキャリアパスの相談に対応する、あるいは大型研究施設担当の研究者が若手研究者に課題利用申請書類の記載方法をアドバイスする、等の密な交流があり、その後の**領域全体での連携研究をおおいに加速**させている。

- さらに、新設した水素研究学会においても**積極的に若手研究者を顕彰**するなど、領域内外で若手研究者のビジビリティを高める活動も推進している。その結果、国内外の学協会・財団・大学等からの**若手研究者の受賞件数は39件**にもものぼる（雑誌論文に関しては32ページに記載）。

- 以下に、各計画研究での若手研究者の活躍例をまとめる：

A01	A02	A03-1	A03-2	A04	A05-1	A05-2
 <p>金 相命 (東北大 助教) 連携研究「リチウム超イオン伝導水素化合物の合成と全固体電池への応用」を実施、Nature Comm. 誌に掲載。 「2019年日本金属学会奨励賞」「2020年トーキン科学技術賞」などを受賞。</p>	 <p>後藤 和泰 (名大 助教) 連携研究「界面水素でのSi太陽電池のキャリア長寿命化」を実施、AIP Adv. 誌に掲載。 「学振委員会イノベーションPV奨励賞」などを受賞。</p>	 <p>岡 弘樹 (早稲田大 LD3) 「有機ポリマーを負極とした高出力高耐久性空気二次電池」を創製、Chemical Comm. 誌に掲載。 「第1回水素研究国際会議ポスター優秀賞」などを受賞。</p>	 <p>西川 幸志 (兵庫大 助教) 連携研究「ラマン分光法を用いた気体基質と反応する酵素の新活性定量」を実施、Protein Sci. 誌に掲載。</p>	 <p>福嶋 貴 (九大 助教) 「高効率電気化学的アミノ酸合成」を達成、Chemical Comm. 誌に掲載 (Inside Front Coverとして採択)。 日経電子版、月刊化学にも掲載。</p>	 <p>小澤 孝拓 (東大 D2) 連携研究「Pd薄膜の準安定水素化合物形成とその緩和の観測」を実施、表面と真空誌に掲載。 「第1回水素研究国際会議奨励賞」などを受賞。</p>	 <p>香山 潤 (東大 助教) 東大物性研にてPIMDハンズオンチュートリアルを企画・開催をする等、学生指導に貢献。</p>
	 <p>笹原 悠輝 (東工大 D2) 連携研究「二オキシ水素化合物薄膜における抵抗の温度ヒステリシス観測」を実施、AIP Adv. 誌に掲載。 「第1回水素研究国際会議奨励賞」を受賞。</p>			 <p>Bo Thomsen (原子力機構 研究員) 連携研究「原子核の量子効果に関する理論的解析」を実施、実験グループと広く連携してアモルファス氷中のミュオン存在状態を解明。海外ネットワークの構築にも貢献。</p>		



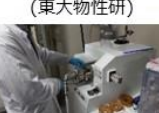



9 研究費の使用状況・計画

研究領域全体を通じ、設備等（本研究領域内で共用する設備・装置の購入・開発・運用、実験資料・資材の提供など）の活用状況、研究費の使用状況や今後の使用計画、研究費の効果的使用の工夫について、総括班研究課題の活動状況と併せて具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

・設備等は、各計画研究において厳選し、平成30年度～令和元年度前半に集中して購入、多くを共用装置として整備・管理している。**新規購入・既存を含め75にものぼる装置群に関して、領域メンバー専用ウェブサイトで情報共有して、有機的連携のための有効利用に徹した**（右図）。その際、各管理担当者も掲載することでノウハウを含めて情報共有し易くするとともに、「合成・試料作製」、「回折・散乱」、「分光」、「熱分析・質量分析」、「電気特性・電気化学測定」等の目的や用途別に分類掲載する工夫も進めた。



- 例えば、計画研究 A03-1 では、高分子・有機系薄膜作製装置を平成30年度に導入して12月からすぐに運用を開始、「高精度かつ大面積での有機高分子化合物の成膜技術」を構築した。この設備を活用して、「高次構造や膜厚を制御した高分子薄膜」を作製し、高速プロトン導電性高分子材料の合成やリチャージャブル燃料電池の設計・実証等に広く活用している。これらの試料の提供・共用により、現在、計画研究 A02、A03-2、A04、A05-1、および公募研究 A03 等の8件の連携研究が進行している。
- また A01 では、「高密度水素化物の合成後の液相での水素同位体置換（軽水素－重水素置換）」に加え、平成30年度からの調整金の有効利用により同位体置換型水素化物原料を購入して、より精密な「合成過程での水素ならびにホウ素同位体置換」を進めた。これにより、当初計画での解析に加えて、さらに高精度の中性子散乱測定や核磁気共鳴測定等も実施可能となるので、計画研究 A02、A04、A05-1、A05-2 および公募研究 A01、A05-1 等の7件の連携研究を加速している。
- 領域内の共用装置は若手研究者（直接雇用の10名を含む）が主体となって運用**しており、数々の連携研究を展開して当初計画以上の成果を創出している。今後の計画としては、新型コロナウイルス感染の状況も見極めながら、共用装置の使用のための国内旅費や関連する海外研究拠点・施設との共同研究のための海外旅費等を拡充することで、「**領域内の連携研究の促進**」・「**重層的な若手育成**」・「**共用装置の有効活用**」を連動させることで、**研究費の効果的使用とハイドロジェノミクスの進展**を図る。
- 以下に、各計画研究での主要装置の例と活用状況をまとめる：

A01	A02	A03-1	A03-2	A04	A05-1	
<p>光学ディラトメーター (東大物性研)</p>  <p>各種水素化物の原子・電子構造解析のための熱膨張係数の精密計測等に使用。A02、A03-1、A04、A05-1、A05-2との連携研究が進行。</p>	<p>金属・無機系薄膜作製装置 (東工大物理工)</p>  <p>金属水素化物および錯体水素化物の成膜試料の合成等に使用。A01、A03-1、A03-2、A05-1との連携研究が進行。</p>	<p>高分子・有機系薄膜作製装置 (山梨大FCセンター)</p>  <p>高速プロトン導電高分子材料の合成やリチャージャブル燃料電池の設計・実証等に使用。A02、A03-2、A04等との連携研究が進行。</p>	<p>水素化物対応飛行時間型質量分析装置 (東大物性研)</p>  <p>水素－電子カップリング系有機材料の基盤分子の同定や無水純有機プロトン伝導体の特性最適化等に使用。A01、A03-1、A05-1、A05-2との連携研究が進行。</p>	<p>水素化物対応高精度ガス/蒸気吸着測定装置 (中央大)</p>  <p>各種水素化物の熱的安定や微細構造解析等に使用。A03-1、A03-2との連携研究が進行。</p>	<p>水素化過程核反応計測装置 (東大生研)</p>  <p>材料内部やヘテロ界面での水素分布および精密定量等に使用。A01、A02、A03-1、A05-2との連携研究が進行。</p>	<p>水素化過程中性子散乱計測装置 (東大生研、KEK)</p>  <p>微小試料や薄膜試料を含めたあらゆる形状の各種水素化物の原子構造解析に使用。A01、A02、A03-1、A03-2、A04、A05-2との連携研究が進行。</p>

- 総括班経費は、本領域の連携研究支援、国際ネットワーク強化のための国際会議開催費、これらに係わる旅費、研究成果の国内外への情報（ニュースレター発行等）発信に使用している。予算の有効活用のため、各種会議・研究会等の開催においては、できるだけ複数を連続する日程で実施することで、出席者が参加しやすくまた旅費負担も削減できるよう十分配慮している。研究成果を高インパクトかつタイムリーに国内外に情報発信するためにアウトリーチ担当者および厳正な経費管理を含めた適正な領域運営を担うための事務担当者の雇用を継続する。

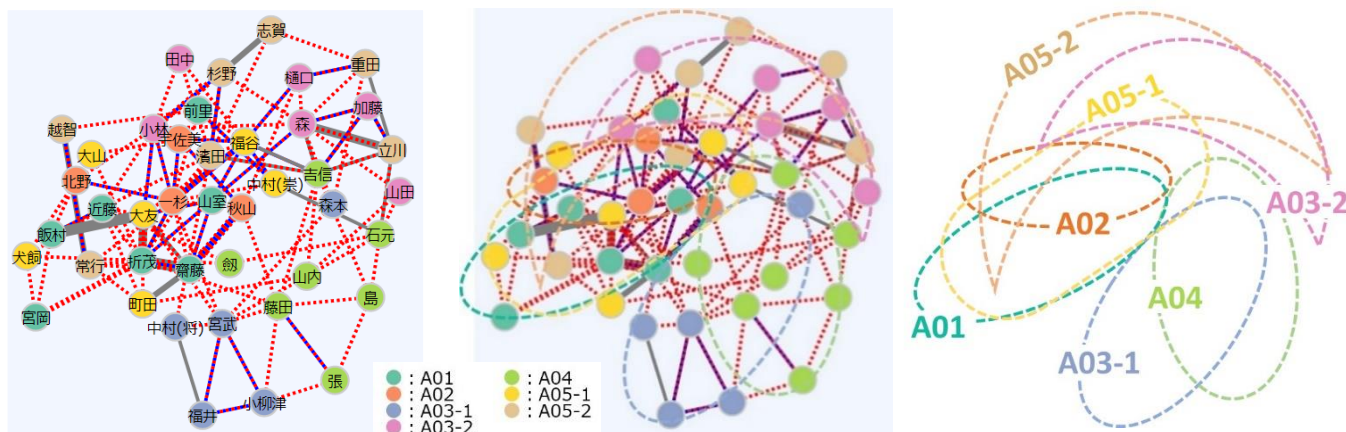
10 今後の研究領域の推進方策

研究領域全体を通じ、今後の本研究領域の推進方策について、「革新的・創造的な学術研究の発展」の観点から、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、今後公募する公募研究の役割を明確にすること。また、研究推進上の問題点がある場合や、国際的なネットワークの構築等の取組を行う場合は、その対応策や計画についても記述すること。

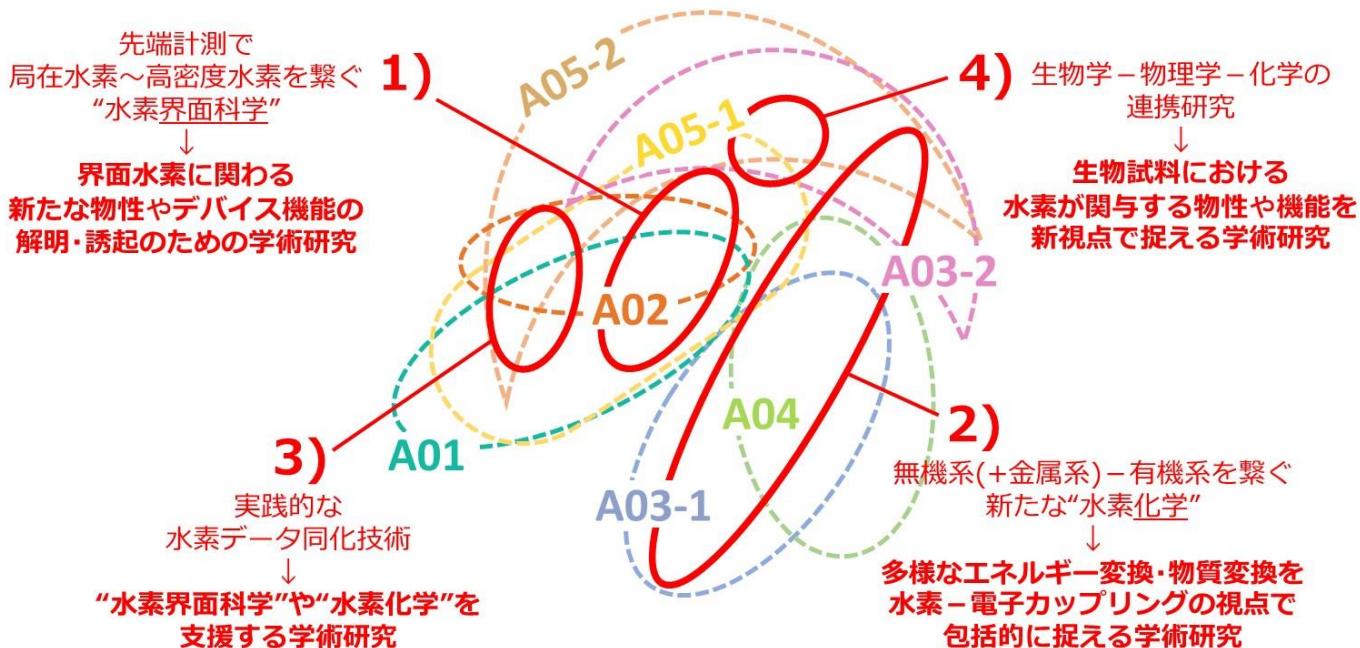
推進方策1：新たな学術研究群を重視した研究推進

・19 ページに記載した通り、これまでに領域全体での有機的連携体制が確立した。連携研究の内容をさらに詳しく解析すると、**下図の赤字**で示す**4つの新たな学術研究群の萌芽**が認められる：

- 1) 界面水素に関わる新たな物性やデバイス機能の解明・誘起のための“水素界面科学”
- 2) 多様なエネルギー変換や物質変換を水素-電子カップリングの視点で包括的に捉える“水素化学”
- 3) “水素界面科学”や“水素化学”を支援する実践的な水素データ同化技術
- 4) 生物試料における水素が関与する物性や機能を新視点で捉える連携研究



上段左は、19ページに記載した連携体制の図（顔写真は削除）。それを研究項目で分類した図が、上段中央（連携体制に投影）および上段右（研究項目のみ表示）。下段は、連携内容の詳細であり、1)~4)の新たな学術研究群の萌芽が認められる。



・上記の1)~4)は、**本領域の目的である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)の構築に繋がる革新的・創造的な学術研究群として重視**しており、**将来的には、4学術研究群を統合した「あらゆる物質・材料系の内部・界面・表面での水素-電子カップリングの静的・動的挙動の理解と精密制御」といった学理に繋がることが期待される**。第2期公募研究でも、これらの4学術研究群に関連する研究テーマを重視したい。

推進方策2：高次水素機能の顕在化・誘起に向けた研究推進

- 水素を使いこなして革新的材料等を創成するためには、**世界に先駆けて提唱した「高次水素機能（＝複数の水素機能の相乗効果）」の概念整理と、さらなる顕在化・誘起に向けた研究**が必要である。なかでも、これまでの取り組みや成果を通じて、特に以下の2つの概念が重要と考える：

【A】単一材料に内在する複数の水素機能の相乗効果

- 高密度＋局在(クラスター化)＋高速移動(回転) A01：リチウム超イオン伝導
- 高速移動(双平衡・プロトン)＋高密度＋局在 A03-1：高密度水素貯蔵・プロトン高速伝導
- 高密度＋局在(分子設計)＋高速移動(回転) A03-2：プロトン高速伝導
- 高活性(シート化)＋局在＋高密度 A01(公募)：多機能ホウ化水素シート、等

→無機系(金属系含む)・有機系含めて、**高密度水素の特異形状化や高速移動の制御等によって【A】をさらに顕在化**することができ、**伝導特性・光学特性・触媒特性等に関する多様な物性が誘起**できると予測する。

【B】複数の材料が発現する水素機能の相乗効果

- 高活性(多電子)＋高速移動＋局在(界面反応) A03-2、A02、A01：ヒドリド伝導の新デバイス展開
- 高速移動(プロトン)＋高密度(電解質)＋局在 A03-1、A02、A01：リチャージャブルFCの原理実証
- 高活性(電気化学活性)＋高速移動＋高密度 A04：電極表面での高選択物質変換
- 局在(界面反応)＋高活性(錯体)＋高速移動 A02、A04：新たな水素可視化技術、等

→前ページ記載の“**水素界面科学**”や“**水素化学**”の推進によって【B】をさらに顕在化することができ、**エネルギー・物質変換等に関する多様な機能が誘起**できると予測する。

- 今後、【A】と【B】**各々の概念の顕在化に加えて、両概念の融合**を進めたい。そのために、例えば、前ページの4学術研究群を通じて蓄積される多くの計測・計算データを領域内外で広く共用すること、そしてそれらを水素データ同化技術や将来の“水素に関わるデータ駆動科学（水素データ駆動科学）”として展開すること、さらに新たな水素化合物合成・解析技術としてフィードバックすること、等も重要になるであろう。第2期公募研究ではこれらの研究テーマも重視したい。

推進方策3：国際的ネットワークの構築も含む 発信力強化に向けた研究推進

- 領域設定期間内での水素ジェノミクスの推進はもとより期間後の継続的な維持・展開のためにも、産業界・学界・官公庁・自治体等への発信を一層強化する。これまで、「化学と工業, 08 Vol.72-8 August (2019), “特集 水素を活かす最新の科学と技術”」および「Journal of the Physical Society of Japan, 89, No.5 (2020), “Special Topics: Frontier of Hydrogen Science”（編集担当 A01分担・山室、A05-1代表・福谷、A01代表・折茂、A05-2代表・常行）」等で発信している。今後、日本金属学会会報および日本セラミックス協会誌の特集等での発信も予定している。
- 国際的ネットワーク構築の観点からも、本領域・国際アドバイザーとの連携もさらに発展させる。例えばH.-J. Freund教授（ドイツ）がEditor-in-Chiefを務めるTopics in Catalysis (Springer)のSpecial Issueでの領域全体の取り組みに関する発信を予定している。また2021年1月には、A. Züttel教授（スイス）と連携して、主に欧州・水素科学コミッティが主催する国際会議に共催して、スイスにて「第2回水素ジェノミクス国際会議」を開催する予定である。

研究推進上の問題点

- 新型コロナウイルス感染の影響で、令和2年度以降、国際会議等での発表の機会や海外研究拠点・施設への渡航や滞在が制限されることが問題である。これに対しては、オンラインでの発表や情報交換の場を最大限活用するとともに、水素ジェノミクスの意義・重要性を広く発信したうえで、再稼働した施設等に対して優先的に使用させて戴くための働きかけを多面的に行っている。

11 総括班評価者による評価

研究領域全体を通じ、総括班評価者による評価体制（総括班評価者の氏名や所属等）や本研究領域に対する評価コメントについて、具体的かつ簡潔に2頁以内で記述すること。

・評価グループ

菅野了次先生（東京工業大学・教授・工学）、河村純一先生（東北大学・特任教授・工学）、水木純一郎先生（関西学院大学・教授・物理学）、西出宏之先生（早稲田大学・特任研究教授・化学）、塚田捷先生（東京大学・名誉教授・物理学）*申請段階の寺倉清之先生からご交代戴きました。

・国際アドバイザーグループ

Prof. A. Züttel (EPFL (スイス)・工学)、Prof. G. Galli (Univ. Chicago (米国)・計算/理論)、Prof. H.-J. Freund (Max Planck Institute, Berlin (ドイツ)・表面化学/物理)、Prof. Li-Jun Wan (Chinese Academy of Science, Beijing (中国)・電気化学/デバイス)、Dr. A.J. Ramirez-Cuesta (Oak Ridge National Laboratory (米国)・量子ビーム計測)

・評価コメント

菅野了次先生

水素に関連する様々な重要な課題を設定し、数多くの優秀な研究者を取りまとめて、優れた成果を上げつつある。それぞれの課題について、めざましい進歩が見られると共に、研究開始以降の研究者間のネットワークが構築されはじめている。ネットワークの形成は、これまでにない学問領域の構築に向けた一歩であることから、非常に期待できる。例えば、界面の課題への取り組みや、計算化学と実験との融合領域などでは、既存の学問では限界があるため、大きな進展が期待できる。計画研究の各課題について、優れた特性を持つ新規物質が多く発見されているのは、特筆すべき成果である。特にリチウムイオン導電体やヒドリドイオン導電体の発見は、素晴らしい。「水素を使いこなす」ための新たな水素科学の構築に繋がる革新的・創造的な学術研究群を新たに強化する方針も妥当である。

本領域研究の結果として生み出された新たな水素科学が、将来の学術分野として主流となるためには、この領域研究からは、はみ出すかもしれないが、応用分野への展開と、この新たな水素科学が産業として育つことが必須である。新たな科学を立ち上げるためには、本研究領域で行われているように、学術的な面白さをまず追求して、様々な研究者の垣根を取り払い、新たなグルーピングを行う現状の取り組みが極めて重要であり有効である。この点は極めてよく運営されている。その上で、次世代の産業への展開を見据えて、現在の様々な試みが、将来の産業へとつながることも視野に入れた捉え方があっても良いかもしれない。

河村純一先生

高次水素機能をキーワードに無機から有機まで様々な物質群について、基礎から応用まで幅広い研究を組織され、水素の新たな側面がクローズアップされ素晴らしい。特に、令和元年度には公募班が加わったことで研究の幅が広がり、しかも公募班も含めて班を越えた共同研究が急速に拡大している事も喜ばしい。今後、これらの素晴らしいメンバー・研究グループが具体的な「高次水素機能」の更なる発見と、そのメカニズム解明により、日本発の新たな学問領域 Hydrogenomics として「水素」研究ブームを巻き起こす事を期待したい。

高密度水素化物の高圧下での超伝導の発見は特筆すべき成果であり、今後世界的に大きな研究展開が予想される。これも含めて、令和2年1月の札幌での国際会議のつながりを活用するなどして、今後開催される国際学会での特別セッションや Web 国際シンポジウムを企画するなどして、Hydrogenomics が物質・材料科学のエマージング・キーワードになるように戦略的に PR 活動を工夫して欲しい。

水木純一郎先生

「ハイドロジェノミクス」という新しい領域を作り、新しい機能開拓につながる統一的な水素観の構築を目指すもので、非線形な成果が期待され夢が広がる研究ターゲットである。プロジェクトが開始されまだ2年足らずであるが、すでに期待される以上の成果が出ている。例えば、高次水素機能を目指したデバイスとしてのリチャージャブル燃料電池を設計し、発電と放電サイクルの実証に成功したことは今後の発展が楽しみである。本中間成果報告書にもあるように、すでに進められている研究領域の連携、さらに今後新たに進めるべき連携とそのターゲット設定は、領域代表者のリーダーシップが発揮されている。エネルギー空間、あるいは実時間でダイナミックスの研究には、国が支援する大型共同利用研究施設である J-PARC、SPring-8、SACLA、富岳、の利用が欠かせない。今後も上記大型共同研究施設を協奏的に利用することが期待される。

研究目的・目標の達成と同じように重要なのは若手研究者の育成である。この点、若手育成スクールを活発に進めていることは評価される。さらに女性研究者の増加や若手研究者のキャリアパスの多面的拡大を目指した「水素科学連携研究拠点」の創設を目指して早期実現を期待する。

西出宏之先生

領域代表の強いリーダーシップのもと、5計画班と公募班が「水素を使いこなす」の旗印のもと学術「ハイドロジェノミクス」の開拓・確立に向けて着実に組織研究として進展している。領域代表の従来実績と学術水準高い起点のもと、掲げられている指導原理が、全班員にいき亘っている。領域代表の包含力のもと異分野また若手激励までの融合、代表が自身の時間を最大限注いで推進に当たっていることに敬意を表すものである。専門を異にする研究者（間）の新鮮な挑戦も多くあり、シンポジウム・全体会議での発表・議論からも新しい学術領域の曙が強く印象づけられる。

予想を超える、また従来の延長線上にない成果、例えばアルミニウムで新たな水素化物群の創出、室温リチウム超イオン伝導体、充電可能な燃料電池など、はまさに（物質レベル）機能の相乗と、研究連携によるもので、学術的にもワクワクするとともに、実用に向けた入口まで繋がれば大成功である。論文質数、国際招待・基調講演、共同件数などファクトは充分で揺ぎ無い。一方、組織研究として戦線の拡がり過ぎが若干懸念される。例えば統計数理も含めたアプローチはノイズ多い水素に不可欠であろうが、一方で、第4のサイエンスAIの勃興が、我々が慣れ親しみ信じる演繹法の限界と、MI・インフォマティクス帰納法への流れの警鐘を鳴らしている。いずれにせよ、すべての学問分野にありながら捉え方や用語すらも異なった「水素」を統一的に考えるプラットフォームとして本新学術領域への期待は極めて大きい。

塚田捷先生

物質科学、有機化学、表面・界面科学、計測科学、計算科学にわたる異分野の専門家を結集して、物質における水素の総合的な科学「ハイドロジェノミクス」を切拓こうとするものである。すでに多数の高濃度水素貯蔵物質を生成し、世界的に注目されている研究代表者は、この新分野を開拓する牽引役として最適任であり、優れたリーダーシップを発揮し画期的な成果を上げつつある。テーマ群の選択もよく考え抜かれており、それぞれに相応しい優れた研究者が参加していることも高く評価できる。

多くの成果の中でも、Al や Fe をベースとした新規高密度水素化物の合成、Li 負極全固体電池における高エネルギー密度の実現、Ir 錯体系水素化反応を利用する水素検出法の提案、高分子系の高速度プロトン移動を用いるリチャージャブル燃料電池の設計、ヒドリド導電材を利用する化学反応原理、電界活性化水素によるアミノ酸類の選択合成などは特筆すべきである。さらに、 π 電子系の外場応答を利用したメモリーデバイス、PdCu 透過膜による水素反応場構築なども水素の新機能の開発に向けた興味深い展開であり注目される。ハイドロジェノミクスを支援する先端計測手法として、核反応法、中性子散乱法など水素の観察に適した実験方法の開発が順調に進捗していること、一方、計算科学の側面では第一原理大規模計算と実験データとを連携させるデータ同化技術の開発に成功したことが大きな成果と言える。さらに、幹となる計画研究を補完するように、それぞれが独創性に富んだ公募研究が採択され、領域全体の研究布陣に適切に参加していることは高く評価できる。また若手研究者の育成についても、新学術領域全体として十分に手段を講じており、グループ内や外部向けの情報発信も良好である。

Prof. A. Züttel

The "Hydrogenomics" project is the largest Japanese project on hydrogen science, uniting the most important and active scientists in Japan working on the various aspects of hydrogen. Hydrogenomics represents the world largest and most powerful combination of high level scientists for the creation of new materials with specific functions demonstrated by the very impressive achievements i.e. more than 100 scientific papers published in only two years (2019 & 2020). Hydrogen plays a very important role in the renewable energy economy especially for the storage and transport of hydrogen. (以上要約)

Prof. H.-J. Freund

In view of the importance of hydrogen to sustainable energy generation it is important to investigate hydrogen and its chemistry in and between materials from a variety of points of view at the fundamental research level. While in the beginning each of those sub-projects develop at their own pace, the project is now in a phase where close collaboration between the various sub-groups is initiated. In the opinion of this advisory board member this is a world leading project, and I do not know of any major project world-wide, that could compete with the broad and yet clearly focused approach of the "Hydrogenomics" activity. (以上要約)

Dr. A.J. (Timmy) Ramirez-Cuesta

Overall the Hydrogenomics program is a world-leading effort for a future society based on hydrogen energy. There is a clear vision for the project, and results so far are very encouraging. The variety of methods and techniques by the Hydrogenomics researchers cover most of the state of the art of the field. Advanced characterization methods and the use of computer modeling to analyze and interpret the experimental results are especially notable. Particularly, the use of neutron scattering techniques at J-PARC showed significant technical advances, like the use of neutron holography to investigate hydrides. Japanese scientists are the leading experts in this methodology, and it produces very impressive results. (以上要約)