

領域略称名：ハイドロジェノム
領域番号：6001

令和5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）」
に係る事後評価報告書

「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5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 交付決定額	6
4 研究領域の目的及び概要	7
5 審査結果の所見及び中間評価結果の所見で指摘を受けた事項への対応状況	9
6 研究目的の達成度及び主な成果	11
7 研究発表の状況	16
8 研究組織の連携体制	21
9 研究費の使用状況	22
10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況	24
11 若手研究者の育成に関する取組実績	25
12 総括班評価者による評価	26

研究組織

(令和5年3月末現在。ただし完了した研究課題は完了時現在、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	18H05512 水素ジェノミクス 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	18H05513 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	18H05514 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・特任教授	3
A03-1 計	18H05515 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・大学院総合研 究部・教授	3
A03-2 計	18H05516 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	18H05517 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・先導物質化学 研究所・教授	5
A05-1 計	18H05518 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	18H05519 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・教授	4
総括班・総括班以外の計画研究 計 8 件					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、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	19H05046 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	19H05050 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	19H05052 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	19H05059 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	19H05051 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	19H05048 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	19H05055 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	19H05056 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	19H05061 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	19H05064 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	19H05053 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	19H05057 遷移金属ヒドリド錯体とペロ	令和元年度 ～	劔 隼人	大阪大学・基礎工学研究科・准教授	1

	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2年度			
A04 公	19H05062 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	広島大学・先進理工系科学研究科(工)・教授	1
A05 公	19H05044 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	19H05045 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・教授	1
A05 公	19H05047 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	19H05058 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・准教授	1
A05 公	19H05060 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・講師	1
A05 公	19H05063 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
B01 公	21H00015 ホウ化水素ナノコンポジットを用いた高密度水素貯蔵材料群の創出	令和3年度 ～ 令和4年度	近藤 剛弘	筑波大学・数理解物質系・教授	1
B01 公	21H00020 電極・活物質界面における高分子の分子配向とプロトン輸送	令和3年度 ～ 令和4年度	長尾 祐樹	北陸先端科学技術大学院大学・先端科学技術研究科・教授	1
B01 公	21H00022 硫化水素を母物質とした高温超伝導体の探索	令和3年度 ～ 令和4年度	榮永 茉利	大阪大学・基礎工学研究科・助教	1
B02 公	21H00012 ゼオライト細孔内での表面ヒドリド種の精密制御による白金族フリー脱水素触媒の開発	令和3年度 ～ 令和4年度	前野 禪	工学院大学・先進工学部・准教授	1
B02 公	21H00017 PCET 反応を利用したラストマイルクーリング素子の探索	令和3年度 ～ 令和4年度	山田 鉄兵	東京大学・大学院理学系研究科・教授	1

B02 公	21H00018 プロトンと光を用いた高分子材料の反応性と機能性の自在制御	令和3年度 ～ 令和4年度	正井 宏	東京大学・大学院総合文化研究科・助教	1
B02 公	21H00019 格子窒素及び水素を利用した活性触媒界面の形成とその作用機構解明	令和3年度 ～ 令和4年度	北野 政明	東京工業大学・元素戦略MDX研究センター・教授	1
B02 公	21H00021 酵素の作用機序に学ぶ金属－水素化合物の創製と反応機能開発	令和3年度 ～ 令和4年度	大木 靖弘	京都大学・化学研究所・教授	1
B02 公	21H00024 自己組織化二分子膜における電子－プロトン相関物性の創出	令和3年度 ～ 令和4年度	加藤 浩之	大阪大学・理学研究科・准教授	1
B02 公	21H00025 プロトンスピン連動を基盤とする多機能分子材料の開発	令和3年度 ～ 令和4年度	中西 匠	九州大学・先導物質化学研究所・学術研究員	1
B02 公	21H00027 原子精度で制御された金属ナノ構造体の創製と水素生成電極触媒への展開	令和3年度 ～ 令和4年度	川脇 徳久	東京理科大学・理学部第一部応用化学科・講師	1
A05 公	21H00013 物質中で孤立した水素の新しい観測法の確立：中性子ホログラフィーの応用	令和3年度 ～ 令和4年度	大山 研司	茨城大学・理工学研究科・教授	1
A05 公	21H00014 水素活性と輸送に立脚した生体内水素ジェノミクスの理論展開	令和3年度 ～ 令和4年度	堀 優太	筑波大学・計算科学研究センター・助教	1
A05 公	21H00026 高精度予測に向けた量子多成分系分子理論の高度化による高次水素機能の発現機構解明	令和3年度 ～ 令和4年度	立川 仁典	横浜市立大学・生命ナノシステム科学研究科・教授	1
A05 公	21H00029 ランタン－ホウ素－窒素－水素系における室温超伝導水素化物の探索	令和3年度 ～ 令和4年度	石河 孝洋	東京大学・大学院理学系研究科・特任研究員	1
A05 公	21H00030 メガバール超高压高温水素との反応による新規高密度・高配位水素化物の探索	令和3年度 ～ 令和4年度	中野 智志	物質・材料研究機構・機能性材料研究拠点・主幹研究員	1
公募研究 計 35 件 (廃止を含む)					

[1] 総：総括班、国：国際活動支援班、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 交付決定額

年度	合計	直接経費	間接経費
平成 30 年度	289,510,000 円	222,700,000 円	66,810,000 円
令和元年度	260,260,000 円	200,200,000 円	60,060,000 円
令和 2 年度	255,840,000 円	196,800,000 円	59,040,000 円
令和 3 年度	259,480,000 円	199,600,000 円	59,880,000 円
令和 4 年度	255,710,000 円	196,700,000 円	59,010,000 円
合計	1,320,800,000 円	1,016,000,000 円	304,800,000 円

4 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（＝結合多様性を示す）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。これらの性質を精密に捉えることは現在でも容易ではないが、実社会では水素の有効な機能（＝水素機能）として多方面での活用が進められている。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、材料中に入り出す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。

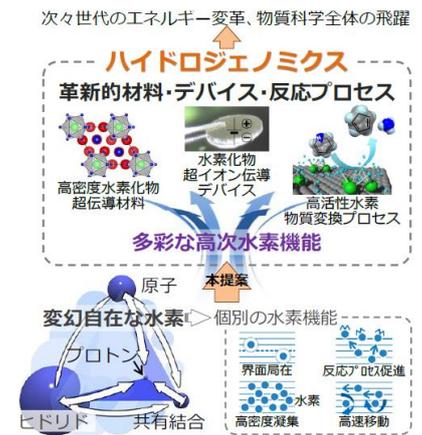


図1. 本領域の学術的背景と目的、展開。

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合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 等の既知の水素化合物でも超イオン伝導や超伝導が観測されている。水素化合物ルネサンス(*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た異分野間での有機的連携に基づく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。各国が水素化合物ルネサンスに基づく探索研究を活発化させるなか、日本の優位性低下につな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。

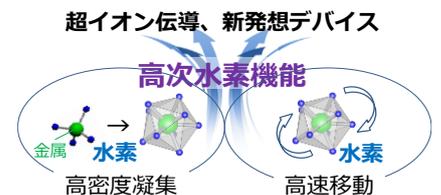


図2. 高次水素機能の例。

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、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。学問分野の枠を大きく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合物の事例を紹介（Highly Cited Paper, Web of Science, 申請時～令和5年6月時点も継続中）。“The renaissance of hydrides as energy materials”, R. Mohtadi and S. Orimo, *Nat. Rev. Mater.* (online in 2016, published in 2017).

(*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。

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、**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・長距離にわたる水素の高速移動**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**する多面的な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）

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（＝**水素科学**）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わたる材料系に対して、**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**水素科学**を構築する。

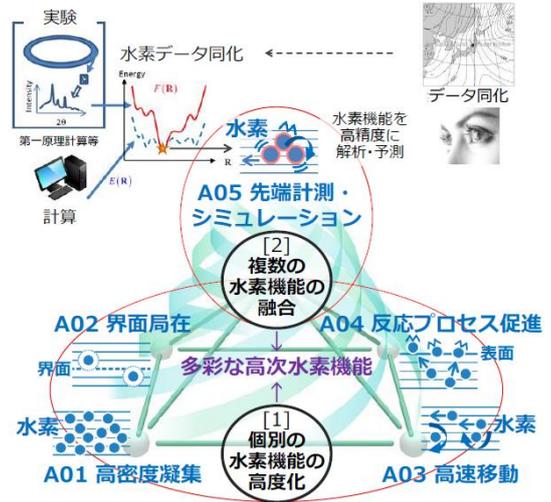
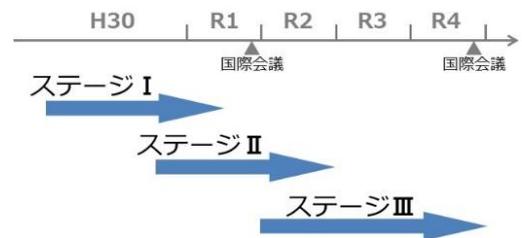


図3. 研究戦略[1][2]の概念図（図中の**A01～A05**は研究項目に対応）。



領域設定期間終了後に期待される成果等：

世界に先駆けた**水素科学の構築**により水素の性質を“使いこなす”ことが可能となり、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できる：

- ・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
- ・水素を用いた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の数理科学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

これらの成果により、例えば**利便性や資源性が格段に優れた新たな燃料電池や蓄電デバイス、高効率でのアンモニアやアミノ酸等の有用物質の合成プロセス**の実現が期待できることから、社会的な意義・波及効果は極めて大きい。また、従来は各学問分野で水素そのものの捉え方（水素観＝水素科学における「用語」「研究指針」「研究アプローチ」等）が著しく異なるために、長年にわたり個別の水素機能を追求する研究に留まってきたが、本領域で「**水素**」を対象とした**材料合成技術や計測・計算技術等の共有**が進むことで**学問分野の枠を超えた統一的な水素観の共有**も期待できる。これは、新たな研究者の参入や学問領域の活性化・体系化等も含めて、“**新学術領域研究**ならでは”の中・長期的な観点での学術的な意義・波及効果であるといえる。

5 審査結果の所見及び中間評価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、審査結果の所見及び中間評価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。

(審査結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

留意事項

“中性子散乱、スピネ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)”

対応や成果

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結果、**コロナ禍にもかかわらず数多くの秀逸な海外連携が進行、若手の活躍として結実**した。例えば、米国・オークリッジ国立研究所・パルス中性子施設(SNS)等との連携による金属水素化物の結晶構造とその内部の原子振動に関する研究は、**3カ国連携**(日本・米国・スイス)ならびに**領域内連携**の成果となり、さらに第一著者の若手研究者・佐藤豊人氏の昇任採用(東北大・助教→芝浦工大・特任准教授)にも至った。25ページにも関連事項を記載。参考：T. Sato et al., “Effect of Co-substitution on hydrogen absorption and desorption reactions of YMgNi₄-based alloys”, J. Phys. Chem. C, 126(40), 16943-16951, 2022.

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)”

対応や成果

A02 の研究内容である**水素化物エピタキシャル成膜技術**に関して、清水亮太氏(東工大・助教→同准教授)らが大きく貢献した。さらに、計画研究内の連携を推進するために、**成膜技術の Si 系太陽電池への展開**を目指して宮本聡氏(名古屋大・特任講師)を主に本研究領域の PD 経費で採用した。この Si 系太陽電池への展開に関しては、宮本氏に加えて、後藤和泰氏(名古屋大・助教→新潟大・准教授)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も加速した。宮本氏は水素を利用した新規成膜技術の量子コンピュータ応用も提案し、ムーンショット型研究開発事業にもつなげた。これらを総合的に鑑み、計画研究 A02 では**1 名分の PD 雇用費で当初計画以上の成果**を上げたといえる。

採択時の所見

(指摘事項ではございませんが、審査結果の所見の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いただきます。)

“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)”

対応や成果

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(11回)、計画研究内の会議(34回)、計画研究間の会議(42回)、公募申請促進のための説明会(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(17件)、等。その後も、オンライン・オンサイトを含めて継続的に国内外会議・研究会・研究打合せ等を実施した。

(中間評価結果の所見において指摘を受けた事項への対応状況)

留意事項

“計測系と計算系のチームに関して、Corresponding author となる主体的な研究成果が多数あることが望ましい。計測・計算に関わるグループが主体となって共同研究を実施することで、材料開発の更なる**加速がなされることを期待したい(原文)**”

対応や成果

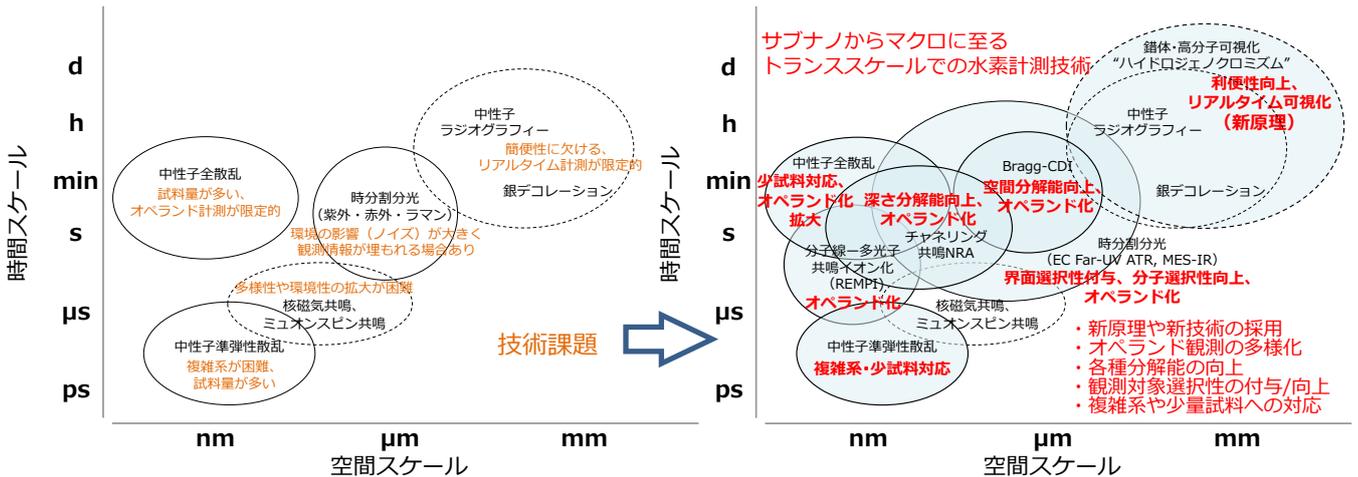
領域設定期間前半(2018~2020 年前半)での**水素先端計測のための装置群の整備やそれらと関係する水素先端計算技術の高度化に対する集中した取り組みが奏功**して、**期間後半(2020 年後半以降)では水素先端計測・計算を含めた領域全体での連携が大いに進展**した。その結果、水素クラスターや酸水素化物、有機・無機材料(高分子材料を含む)や生体材料、各種反応プロセス等の、各研究項目における研究が一気に加速され、その結果、12 ページ以降に記載の本領域を代表する秀逸な成果につながった。水素先端計測・計算に関わる論文は毎年増加しており、総計 200 報に至った。

留意事項

“物質中の水素の位置と動きが重要であるとの主張に対して、それを直接観測・理解する計測技術の進展が不足しているように見受けられる。マルチスケールの可視化技術を活用・発展させ、普遍的な学理の構築につなげてほしい(原文)”

対応や成果

期間後半での水素先端計測・計算が主体となる領域内連携のために、水素科学分野のマルチスケール（以下、**時間・空間スケールをシームレスかつ重層的に結合する「トランススケール」**と捉える）計測技術の構築を目指した。その際、若手を含む領域研究者で集中的に検討、領域内で多用される一般的な水素計測技術における研究現場での技術課題等を抽出した（下段左図）。そのうえで各技術課題を克服するための新原理・新技術の採用やオペランド観測の多様化等を鋭意進め、**トランススケールでの水素計測先端技術を構築**した（下段右図）。これらの取り組みは、領域設定期間だけでなく、**より中・長期的な観点でも水素科学分野における極めて大きな成果**と言える。22～23 ページにも関連事項を記載。



留意事項

“様々な成果を取込んだ包括的な学理としての描像がやや不鮮明に見えるため、新たな学理創成に向けて一層の展開を期待する(原文)”

対応や成果

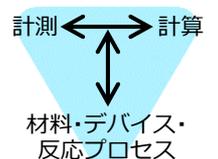
7 ページに記載の「**水素の結合多様性**（原子状態・共有結合性・イオン性）」だけではなく、それらの**結合状態からの逸脱(ずれ)や状態間の連続的変化**が高次水素機能の発現における**支配要因**となりうることを提起した。これは、まさに**水素科学における包括的な学理創成のための新たな基盤**として強調したい。24 ページにも関連事項を記載。

参考意見

“計測系と計算系の研究成果に関して明確な回答を得る事ができなかった。特に、計算専門の研究代表者がヒアリングに参加していた一方で、研究成果に関して具体的な発言・説明が何もなかったことが気にかかる(原文)”

対応や成果

中間評価時点では先端計測用装置群の整備や計算基盤の高度化が進行中であり、発言・説明はやや慎重姿勢であったが、後半では**水素先端計測・計算を含めた領域全体での連携が大いに進展**、12 ページ以降に記載の本領域を代表する秀逸な成果につながった。



参考意見

“アウトリーチ活動だけでなく、**材料・デバイス技術等の社会実装への展開にも期待したい(原文)”**

対応や成果

全体会議各回において産業界のアドバイザーも参画しており、材料・デバイス・反応プロセス等の成果を社会実装に展開するために有益な助言を得た。これに基づき 2022 年度には**本領域を母体とする研究会（日本 MRS 水素科学技術連携研究会）**の活動も本格化、産業界約 25 社・学界約 120 名や公的機関賛助会員も含め、**ハイドロジェノミクスの多様な成果の社会還元とさらなる産学連携を推進**している。

6 研究目的の達成度及び主な成果

(1) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか、(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) 領域設定期間内に何をどこまで明らかにしようとし、どの程度達成できたか。

●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」として実施した。
- ・何をどこまで明らかにしようとしたか(以下、申請時の記載通り):
→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。
- ・領域設定期間内にどの程度達成できたか:
→**高圧合成による材料中での水素の高密度化技術**を確立(8ページ中段に記載のステージI)、水素クラスター等を含む多彩な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(ステージII)。さらに水素先端計測・計算との連携により、**多価イオン高速伝導から二酸化炭素の低温転換反応に至るまで、高密度水素が関与する研究**が想定以上に進展した(ステージIII)。研究目的は十分達成した。

●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」として実施した。
- ・何をどこまで明らかにしようとしたか(以下、申請時の記載通り):
→水素を高精度に配置したヘテロ界面を創成、領域内連携での高次水素機能の誘起により、水素化物エレクトロニクスデバイスにつながる電子物性・機能や力学特性等の強化を狙う。
- ・領域設定期間内にどの程度達成できたか:
→**水素化物エピタキシャル成長を含むヘテロ界面での水素の高精度局在化技術**を確立(ステージI)、**局在水素による新たな電子物性・機能**の発現に成功するとともに、**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**等も進めた(ステージII)。さらに後半、水素先端計測・計算との連携により、**酸水素化物での光誘起金属-絶縁体転移現象の誘起**等の水素化物オプトエレクトロニクスに関する研究が想定以上に進展した(ステージIII)。研究目的は十分達成した。

●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」として実施した。
- ・何をどこまで明らかにしようとしたか(以下、申請時の記載通り):
→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。
- ・領域設定期間内にどの程度達成できたか:
→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**ならびに**高密度水素貯蔵高分子材料**を創成(ステージI、主にA03-1)、当該高分子材料から直接水素を供給する**リチャージャブル燃料電池等の原理実証**を進めた(ステージII、同)。また、**ヒドリド伝導や水素の価数変化、 π 電子物性や分子回転、そして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**も確立(ステージI、主にA03-2)、**ヒドリド超イオン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(ステージII、同)。さらに後半、水素先端計測・計算との連携により、次世代創電デバイスとして**リバーシブル燃料電池(可逆反応を示す全固体空気電池)**の開発に加えて、**水素-電子カップリングに関する学理等、多様な高速移動水素が関与する高次水素機能の研究**が想定以上に進展した(ステージIII)。何れも、研究目的は十分達成した。



●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。
- ・何をどこまで明らかにしようとしたか（以下、申請時の記載通り）：
→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。
- ・領域設定期間内にどの程度達成できたか：
→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成することで多様な水素種の**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（ステージI）、各種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高活性水素を利用した高効率・高選択物質変換を促進した**。さらに後半、**合金透過膜表面でのグラフェン等の高純度合成や多核ヒドリドクラスターを用いた高難度合成等の高活性水素が関与する研究**が想定以上に進展した（ステージIII）。**研究目的は十分達成した**。



●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。
- ・何をどこまで明らかにしようとしたか（以下、申請時の記載通り）：
→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・反応プロセス創成の格段の効率化を目指す。
- ・領域設定期間内にどの程度達成できたか：
→**核反応分析、中性子散乱、放射光回折、ラマン分光等のオペランド計測に向けた技術構築、さらに水素データ同化解析に加え水素の電子状態や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ための計算基盤整備**を進め（ステージI）、水素先端計測・計算技術を**領域内連携に適用することで多様な高次水素機能に係る研究を先導した**（ステージII）。さらに後半、水素先端計測・計算が主体となる領域内連携が大いに進展し、**各研究項目における研究が一気に加速された結果**、以下のような**本領域を代表する秀逸な成果**につながった（ステージIII）。**研究目的は十分達成した**。

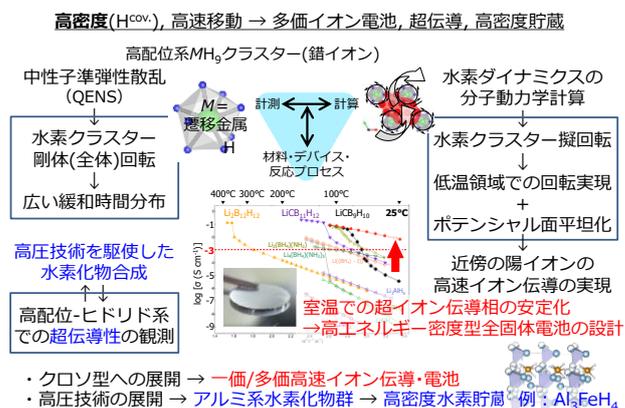
(2) 本研究領域により得られた成果について、具体的かつ簡潔に記述（**領域内連携**に【☆】を付記）

●研究項目 A01 水素高密度凝集機能



計画研究

- ・適温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）等を用いた独自の水素源開発を進めることで、水素の高密度化技術を確認、単核金属 M では最高配位の MH₉ 型水素クラスター（錯イオン）や B₁₂H₁₂ を代表とするクロソ（籠）型水素クラスターを有する多彩な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が可能となった。
- ・また**水素先端計測・計算が主体となる領域内連携**（下段に例示）により、中性子準弾性散乱法（QENS）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に成功、低温からの擬回転によるポテンシャル面平坦化による多様な陽イオンの高速伝導性等の高次水素機能の予測も進んだ。【☆】
- ・これらの結果、Li や Na 等の一価陽イオンに加えて、Mg や Ca、Mn 等の二価陽イオンが高速（超）イオン伝導性を示す新たな高密度水素化物の合成が加速でき、固体・液体電解質としての開発や次世代電池実証が進展するとともに、高圧下での超伝導性に関する研究にも展開できた。【☆】
- ・さらに、Al と Fe 等の汎用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。後者では高分解能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貯蔵材料の開発に向けた研究が進展した。【☆】



公募研究 (顕著な研究成果の例)

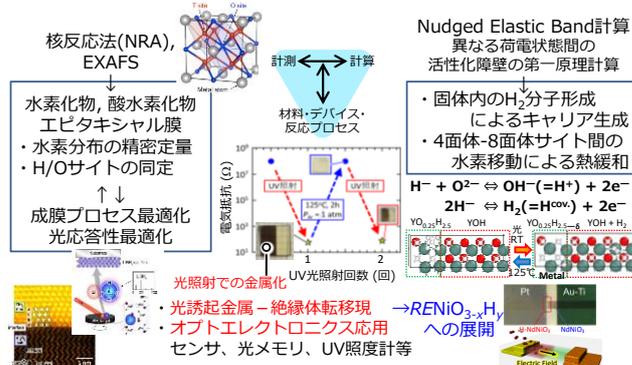
- ・ 超高压力下で高温超伝導を示す硫化水素への他元素ドーピングとその超伝導の実証 【☆】
- ・ 錯体水素化物アンミン錯体における水素間相互作用の解明
- ・ ホウ水素化カルシウム高压相の構造解明とそのアンモニアボラン複合体の高压相の発見 【☆】

●研究項目 A02 水素界面局在機能

計画研究

- ・ パルスレーザー堆積法における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成する技術を構築、TiH₂やNbH等の金属水素化物に加えて、LiBH₄やNaBH₄等の錯体水素化物、YO_xH_yやCa₂NH等の酸・窒水素化物のような高度な水素化物エピタキシャル膜の合成とそれらを用いた高次水素機能の研究が可能となった。
- ・ また水素先端計測・計算が主体となる領域内連携(下段に例示)により、核反応分析(NRA)での原子層ごとの水素分布の精密定量に成功するとともに、Nudged Elastic Band計算による異なる荷電状態間の活性化障壁の第一原理計算により、酸水素化物中でのH₂分子形成によるキャリア生成や四面体-八面体サイト間の水素移動等の解析が進んだ。【☆】
- ・ これらの結果、例えば酸水素化物YO_xH_yでの光誘起金属-絶縁体転移現象等の高次水素機能の誘起と機構解明、電場での増強効果等の研究が加速でき、水素化物オプトエレクトロニクス応用に向けた研究にも展開した。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、触媒材料として知られるIr系金属錯体や導電性高分子として知られるポリアニリン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(=新原理のリアルタイム水素可視化技術(ハイドロジェノクロミズム))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大いに注目される。【☆】

界面局在(H⁻⇌+/cov.), 高速移動, 高密度 → (オプト)エレクトロニクス



公募研究 (顕著な研究成果の例)

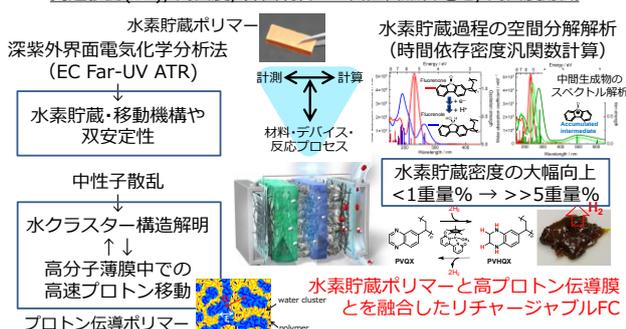
- ・ カルシウムイミドのアニオン欠陥を利用した貴金属フリー低温アンモニア分解触媒の実現 【☆】
- ・ 水素化強相関ニッケル酸化物超薄膜を用いた高速抵抗スイッチングデバイスの創成 【☆】
- ・ 水素化学種のセンシング・イメージングへ向けた蛍光スイッチ分子の設計指針の確立 【☆】

●研究項目 A03 水素高速移動機能

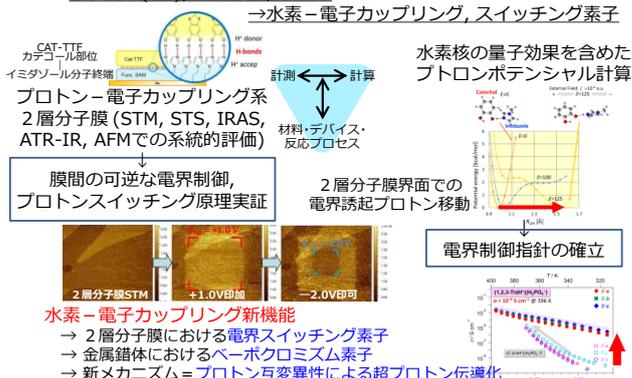
計画研究

- ・ 計画研究 A03-1 においては、スルホン酸化ポリフェニレン系での高速プロトン導電ならびにキノン系での高密度水素貯蔵等、高分子材料中での多様な高次水素機能の誘起に成功した。
- ・ さらに、水素先端計測・計算が主体となる領域内連携(下段左に例示)により、深紫外界面電気化学分析法(EC Far-UV ATR)での水素貯蔵・移動機構における双安定性の解明、中性子散乱での水クラスター構造の解明、時間依存密度汎関数計算での水素貯蔵過程の空間分解解析等が進み、プロトン導電(従来の4.5倍)や水素貯蔵(1重量%以下から5重量%以上)双方の機能の大幅向上を実現した。【☆】

高速移動(H⁺), 高密度, 界面制御 → 次世代燃料電池, 高密度貯蔵



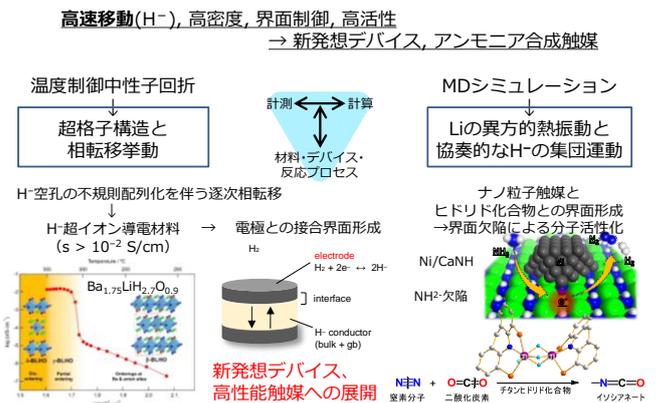
高速移動(H⁺), 界面制御, 高密度 → 水素-電子カップリング, スwitching素子



- ・ リバーシブルFC (全固体空気電池) の創製と高電圧化 (>3.0V) への道筋
- ・ アニオン伝導膜への展開と高効率水電解セル(水素生成)

- これらの結果、双方の高分子材料を組み合わせることで、次世代創電デバイスとしてのリチャージャブル／リバーシブル燃料電池（可逆反応を示す全固体空気電池）が開発でき、80°Cでの発電と放電サイクル等の実証に成功するとともに、高電圧化のための開発指針も解明した。【☆】
- 計画研究 A03-2 においては、水素－電子カップリングの視点での有機・無機材料や生体材料における多様な高次水素機能の研究が進化した。【☆】
- ここでも水素先端計測・計算が主体となる領域内連携（前ページの下段右に例示）により、例えば、アゾール系有機材料 2 層分子膜の場合、走査トンネル顕微鏡／同分光（STM／STS）等を駆使した系統的解析に加えて、水素の量子効果を含めたプロトンポテンシャル計算が進み、水素の局所移動と電場印加が連動した可逆的な π 電子系スイッチング機能や圧力印加で超伝導機能の研究が加速できた。また、生体材料としての Ni-Fe 系ヒドロゲナーゼでの触媒反応場と中間体の分子線－多光子共鳴イオン化法（REMPI）測定による核スピン異性体比のその場計測によるオペランド反応解析にも成功した。

- さらに、酸水素化物（無機）材料 Ba-Li-H-O 系の、Li の局所ダイナミクスに伴う新たな格子間位置や欠陥生成とヒドリド (H⁻) 集団運動によるヒドリド超イオン伝導や高効率物質変換反応の誘起、さらに金属水素化物との組み合わせによる水素の価数変化を利用した新発想デバイスの原理実証にも成功した（右に例示）。【☆】



公募研究（顕著な研究成果の例）

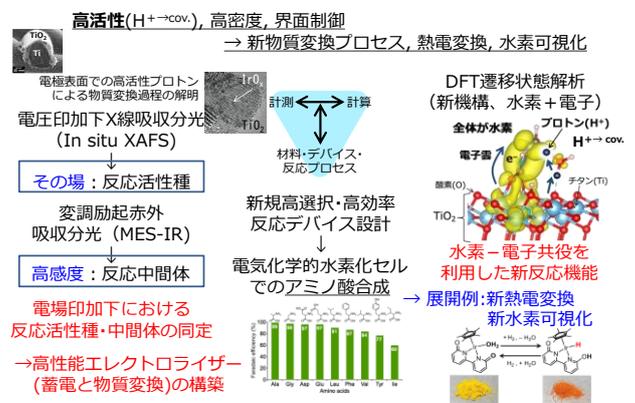
- 中温域で世界最高のヒドリドイオン伝導度を示す材料を開発【☆】
- 水素ドナー／アクセプタ型二分子膜を用いた抵抗変化型分子メモリの実証
- ゼオライト内 Ga ヒドリド種の構造制御によるエタン脱水素反応用高機能 Pt フリー固体触媒の開発【☆】
- プロトンと光を組み合わせた結合切断反応で高分子材料の温和な分解を実現【☆】
- 固体中におけるプロトン移動・スピン転移・分子配向の変化に基づく新たな水素移動現象の実現【☆】

●研究項目 A04 水素反応プロセス促進機能



計画研究

- プロトンやヒドリドに加えて原子状およびラジカル水素等、様々な高活性水素の生成とそれらを利用した高次水素機能による高選択／高効率／高純度／高難度反応プロセスに関する研究が進んだ。【☆】
- 並行して進めた水素先端計測・計算が主体となる領域内連携（下段に例示）により、例えば、TiO₂ 電極上に発生する電界活性化プロトンの場合、電圧印加下 X 線吸収分光法（in-situ XAFS）での反応活性種や変調励起赤外吸収分光法（MES-IR）での反応中間体の精密解析も踏まえた DFT 遷移状態解析に至った。また、水素を効果的に高活性化する反応場としての PdCu 合金透過膜等の原子状（スピルオーバー）水素に関する雰囲気光電子分光（AP-XPS）・表面赤外分光を用いた解析等も進んだ。
- これらの結果、各種反応プロセスの研究が加速でき、前者では水素－電子カップリングを利用したバイオマス由来の原料から室温でのアミノ酸の高選択合成に成功、高効率水電解技術の開発に向けた研究にも展開した。また、後者では Pd サイトで解離し Cu(111) 表面にスピルオーバーした原子状水素と Cu 表面間の振動の観測等に成功、合金透過膜表面でのメタノール等の有用物質の高効率合成やグラフェン等の高純度合成にも展開した。【☆】
- さらに、多核ヒドリドクラスターを用いた窒素とアルケンからのアミン合成、Ir 錯体を用いたバイオマス由来のプロトンとヒドリドからの水素製造等、多様な高難度反応に関する研究も進展した。【☆】



公募研究（顕著な研究成果の例）

- 2つの金属を反応に関わらせる分子反応場の構築とコバルト二核錯体の合成【☆】
- プロトン共役電子移動反応を利用した電気化学ペルチェ素子の実証【☆】
- Pt ナノクラスター触媒による高効率な光触媒水分解水素生成反応の発現【☆】



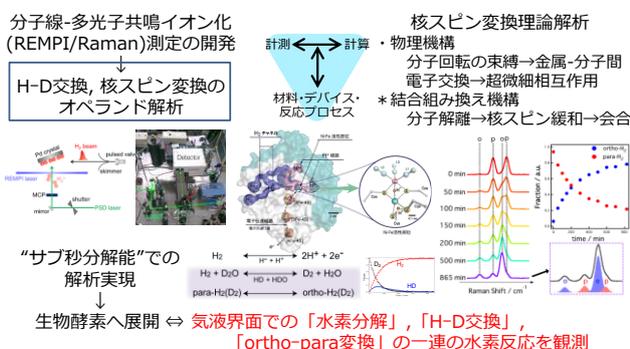
●研究項目 A05 水素先端計測・シミュレーション

計画研究

- 水素先端計測として、イオンビームを用いたチャネリング核反応分析法 (NRA) や放射光ブラッグコヒーレント回折イメージング法 (BCDI) 等の高度化に成功し、ナノ～メソスケールのトランススケールオペランド水素計測を実現した。これらを駆使して、 $B_{12}H_{12}$ を代表とするクロソ (籠) 型水素クラスターの原子構造の解明、Ti 水素化物薄膜における水素占有サイトや量子効果の詳細な解析、界面水素量を制御した高性能 Si 系太陽電池の創出、Pd 水素化物中の量子拡散におけるプロトン-電子カップリングの評価、金属ナノ粒子を含む水素化物の詳細な反応機構の解明、さらにはヒドロゲナーゼでの触媒反応場と中間体の解析に至るまで、高次水素機能の誘起にかかわる領域内連携において極めて多彩かつ不可欠な貢献をした (下段左右に例示)。【☆】
- 水素先端計算に関しては、まず計算手法の開発を進めた。水素データ同化に関してはペナルティ関数を導入した実験データを利用する構造探索技術を確立、また水素原子核の量子効果を取り入れた第一原理計算に関してはオープンソース・ソフトウェア PIMD の高度化と公開を進めた。これらの計算手法を高次水素機能の誘起にかかわる課題に適用することで、高速イオン伝導や金属-絶縁体転移を示す高密度水素化物群の原子構造解析、固体表面での高効率・高選択物質変換における (異常) 同位体効果、水素の量子拡散における共鳴トンネル効果、水中プロトンの存在状態、などの詳細な解明に至り、水素先端計測と同様に領域内連携において極めて多彩かつ不可欠な貢献をした (下段右に例示)。【☆】

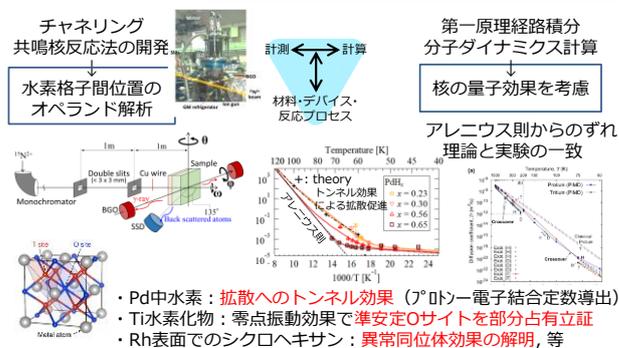
水素反応オペランド計測, 水素核スピン/H-D交換

→ 生物酵素の機能解析・設計



水素状態オペランド計測, 先端計算

→ 零点振動/トンネル効果/同位体効果の精密解析



公募研究 (顕著な研究成果の例)

- 中性子ホログラフィーでの Si および Pd 単結晶中の水素の観測 【☆】
- プロトン伝導セラミックス燃料電池の空気極反応機構の解明 【☆】
- 新規第一原理経路積分法の開発による水素移動反応での Grotthuss 機構の H/D 同位体効果の解明 【☆】
- 理論計算による無水プロトン伝導物質の伝導機構や酸水素化物の非従来型超伝導物性の解明 【☆】
- タンパク質に対する実験データを同化させた自由エネルギー計算手法の確立

7 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、一般向けアウトリーチ活動等の状況。令和5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 722 報（令和5年6月まで）。

●研究項目 A01 水素高密度凝集機能



計画研究

- [1] *K. Kisu, R. Mohtadi, and *S. Orimo, "Calcium metal batteries with long cycle life using a hydride-based electrolyte and copper sulfide electrode", *Advanced Science*, in press. "カルシウム蓄電池の長期充放電に成功" (2023年5月23日) [プレスリリース](#)
- [2] *R. Sato, K. Akagi, S. Takagi, K. Sau, K. Kisu, H. Li, and *S. Orimo, "Topological data analysis of ion migration mechanism", *J. Chem. Phys.*, 158(14), 144116(1-8), 2023.
- [3] *T. Sato, K. Ikeda, T. Honda, L.L. Daemen, Y.Q. Cheng, T. Otomo, H. Sagayama, A.J. Ramirez-Cuesta, S. Takagi, T. Kono, H. Yang, W. Luo, L. Lombardo, A. Züttel, and S. Orimo, "Effect of Co-substitution on hydrogen absorption and desorption reactions of YMgNi₄-based alloys", *J. Phys. Chem. C*, 126(40), 16943-16951, 2022. [9ページで紹介](#)
- [4] Y. Ohmasa, S. Takagi, K. Toshima, K. Yokoyama, W. Endo, *S. Orimo, H. Saitoh, T. Yamada, Y. Kawakita, K. Ikeda, T. Otomo, H. Akiba, and O. Yamamuro, "Rotation of complex ions with ninefold hydrogen coordination studied by quasielastic neutron scattering and first-principles molecular dynamics calculations", *Phys. Rev. Res.*, 4(3), 33215(1-9), 2022. [22ページで紹介](#)
- [5] E.M. Dematteis, *S. Orimo et al., "Hydrogen storage in complex hydrides: past activities and new trends", *Prog. Energy*, 4(3), 032009(1-41), 2022.
- [6] *H. Saitoh, T. Sato, M. Tanikami, K. Ikeda, A. Machida, T. Watanuki, T. Taguchi, S. Yamamoto, T. Yamaki, S. Takagi, T. Otomo, and S. Orimo, "Hydrogen storage by earth-abundant metals, synthesis and characterization of Al₃FeH_{3.9}", *Mater. Des.*, 208, 109953(1-7), 2021. "希少な元素を使わずにアルミニウムと鉄で水素を蓄える -水素吸蔵合金開発の新たな展開を先導-" (2021年7月29日) [プレスリリース](#)
- [7] *K. Kisu, S. Kim, T. Shinohara, K. Zhao, A. Züttel, and S. Orimo, "Monocarborane cluster as a stable fluorine-free calcium battery electrolyte", *Sci. Rep.*, 11, 11915(1-9), 2021. "資源性に富むカルシウムを用いた新たな電池材料を開発" (2021年4月7日) [プレスリリース](#)
- [8] *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](#)
- [9] *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](#)
- [10] S. Orimo, "Super-ionic conduction of mono-/di-valent cations and advanced battery application of complex hydrides: Viewpoint from "HYDROGENOMICS" project", 15th International Symposium Hydrogen & Energy (2023年1月25日, オンライン) [基調講演](#)
- [11] 齋藤寛之, 令和2年度文部科学省ナノテクノロジープラットフォーム 学生研究プログラム (2020年8月3~7日, 佐用) [アウトリーチ](#)

公募研究

- [12] *K. Sugawara, S. Orimo, M. Toyoda, S. Saito, T. Kondo, *T. Sato et al., "Direct imaging of band structure for powdered rhombohedral boron monosulfide by microfocused ARPES", *Nano Lett.*, 23(5), 1673-1679, 2023. "微小な粉状結晶の電子構造測定に初めて成功" (2023年3月2日) [プレスリリース](#)
- [13] K. Fukui, *S. Jimura, T. Honda, K. Ikeda, T. Otomo, *H. Hosono et al., "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](#)
- [14] 榮永茉莉, "第5回女性研究者サミット@阪大豊中" (2023年3月14日, 豊中) [アウトリーチ](#)

●研究項目 A02 水素界面局在機能



計画研究

- [1] *R.S. Varanasi, *M. Koyama, H. Saitoh, R. Utsumi, T. Sato, S. Orimo, and E. Akiyama, "Phase transformations and microstructure evolutions during depressurization of hydrogenated Fe-Mn-Si-Cr alloy", *Int. J. Hydrog. Energy*, 48(27), 10081-10088, 2023.
- [2] *R. Nakayama, Y. Kawaguchi, R. Shimizu, K. Nishio, H. Oguchi, S. Kim, S. Orimo, and T. Hitosugi, "Fabrication and growth orientation control of NaBH₄ epitaxial thin films using infrared pulsed-laser

- deposition", Cryst. Growth Des., 22(11), 6616-6621, 2022. [21ページで紹介](#)
- [3] S. Chon, Y. Sugisawa, S. Kobayashi, K. Nishio, M. Wilde, N. Kishi, D. Sekiba, [K. Fukutani](#), [T. Hitosugi](#), and R. Shimizu, "Selective epitaxial growth of Ca₂NH and CaNH thin films by reactive magnetron sputtering under hydrogen partial pressure control", J. Phys. Chem. Lett., 13(43), 10169-10174, 2022.
- [4] H. Kakinuma, S. Ajito, T. Hojo, M. Koyama, and [E. Akiyama](#), "Real-time visualization of hydrogen distribution in metals using polyaniline: An ultrasensitive hydrogenochromic sensor", Adv. Mater. Interfaces, 9(18), 2101984(1-7), 2022.
- [5] Y. Komatsu, *R. Shimizu, *R. Sato, M. Wilde, K. Nishio, T. Katase, D. Matsumura, [H. Saitoh](#), M. Miyauchi, J. Adelman, R. McFadden, D. Fujimoto, J. Ticknor, M. Stachura, I. McKenzie, G.D. Morris, W. Macfarlane, J. Sugiyama, [K. Fukutani](#), [S. Tsuneyuki](#), and [T. Hitosugi](#), "Repeatable photoinduced insulator-to-metal transition in yttrium oxyhydride epitaxial thin films", Chem. Mater., 34(8), 3616-3623, 2022. "光と加熱で、金属と絶縁体を行ったり来たり" (2022年4月7日) [プレスリリース](#)
- [6] R. Tsubata, *K. Gotoh, M. Matsumi, M. Wilde, T. Inoue, Y. Kurokawa, [K. Fukutani](#), and *[N. Usami](#), "Silicon nanocrystals embedded in nanolayered silicon oxide for crystalline silicon solar cells", ACS Appl. Nano Mater., 5, 1820-1827, 2022. "ナノ結晶を電子の通り道とする酸化シリコン保護膜を実現 一次世代シリコン系太陽電池の開発に期待" (2022年1月31日) [プレスリリース](#)
- [7] *M. Koyama, [H. Saitoh](#), T. Sato, [S. Orimo](#), and [E. Akiyama](#), "Depressurization-induced diffusionless transformation in pure iron hydrogenated under several gigapascals", Mater. Lett.: X, 11, 100078(1-3), 2021.
- [8] *R. Shimizu, Y. Sasahara, [I. Hamada](#), H. Oguchi, S. Ogura, T. Shirasawa, M. Kitamura, K. Horiba, H. Kumigashira, [S. Orimo](#), [K. Fukutani](#), and [T. Hitosugi](#), "Polarity reversal of the charge carrier in tetragonal TiH_x (x=1.6-2.0) at low temperatures", Phys. Rev. Res., 2, 033467(1-9), 2020.
- [9] *S. Ajito, T. Hojo, M. Koyama, [K. Fujita](#), and [E. Akiyama](#), "Application of an iridium complex for detecting hydrogen permeation through pure iron", Int. J. Hydrogen Energy, 45, 25580-25586, 2020.
- [10] *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.
- [11] *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(1-7), 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](#)
- [12] [N. Usami](#), "Research on next-generation PV technology in Japan", 2nd Indo-Japan Joint Workshop on Photovoltaics (2023年3月9日, チェンナイ) [招待講演](#)
- [13] 清水亮太, "2020年日本表面真空学会学術講演会併催実用新技術セミナー 特別講演" (2021年11月18日, オンライン) [アウトリーチ](#)
- [14] [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](#)

公募研究

- [15] K. Ogasawara, T. Nakao, K. Kishida, T. Ye, Y. Lu, H. Abe, Y. Niwa, M. Sasase, *[M. Kitano](#), and *H. Hosono, "Ammonia decomposition over CaNH-supported Ni catalysts via an NH²⁻-vacancy-mediated Mars-van Krevelen mechanism", ACS Catal., 11, 11005-11015, 2021. "貴金属を使わずに高効率でアンモニアを分解" (2021年8月31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] M. Yonenaga, Y. Kaiwa, K. Oka, [K. Oyaizu](#), and *[K. Miyatake](#), "All-solid-state rechargeable air batteries using dihydroxybenzoquinone and its polymer as the negative electrode", Angew. Chem. Inter. Ed., in press. "繰り返し充放電可能な全固体空気二次電池を開発" (2023年5月16日) [プレスリリース](#)
- [2] R. Kumao and *[K. Miyatake](#), "Sulfonated and fluorinated aromatic terpolymers as proton conductive membranes: Synthesis, structure, and properties", Bull. Chem. Soc. Jpn., 95(5), 707-712, 2022.
- [3] M. Yonenaga, Y. Kaiwa, K. Oka, [K. Oyaizu](#), [K. Miyatake](#), Y. Morino, and *[K. Fukui](#), "Interface behavior of electrolyte/quinone organic active material in battery operation by *Operando* surface enhanced Raman spectroscopy", Langmuir, 38, 3951-3958, 2022.
- [4] K. Oka, Y. Tobita, M. Kataoka, K. Kobayashi, Y. Kaiwa, H. Nishide, and *[K. Oyaizu](#), "Hydrophilic isopropanol/acetone-substituted polymers for safe hydrogen storage", Polym. Int., 71, 348-351, 2022.
- [5] Z. Long and *[K. Miyatake](#), "ePTFE reinforced, sulfonated aromatic polymer membranes enable durable, high-temperature operable PEMFCs", iScience, 24, 102962(1-15), 2021. "燃料電池の高温低湿度作動を可能とするイオン性薄膜の開発に成功" (2021年8月17日) [プレスリリース](#)
- [6] *Y. Morino, Y. Yokota, K. Bando, H. Hara, A. Imanishi, J. Takeya, and *[K. Fukui](#), "*Operando* atomic force microscopy study of electric double-layer transistors based on ionic liquid/rubrene single crystal interfaces", Appl. Phys. Lett., 118, 243301(1-4), 2021.
- [7] *K. Hatakeyama-Sato and *[K. Oyaizu](#), "Generative models for extrapolation prediction in materials informatics", ACS Omega, 6, 14566-14574, 2021.
- [8] K. Shiino, [T. Otomo](#), T. Yamada, H. Arima, K. Hiroi, S. Takata, J. Miyake, and *[K. Miyatake](#), "Structural investigation of sulfonated polyphenylene ionomers for the design of better performing proton-conductive membranes", ACS Appl. Polym. Mater., 2, 5558-5565, 2020.

- [9] J. Miyake, Y. Ogawa, T. Tanaka, J. Ahn, K. Oka, K. Oyaizu, and *K. Miyatake, "Rechargeable proton exchange membrane fuel cell containing an intrinsic hydrogen storage polymer", *Commun. Chem.*, 3, 138(1-7), 2020. "世界初 繰り返し充放電可能な全高分子形燃料電池開発" (2020年10月8日) [プレスリリース](#)
- [10] K. Oka, Y. Kaiwa, M. Kataoka, K. Fujita, and *K. Oyaizu, "A polymer sheet-based hydrogen carrier", *Eur. J. Org. Chem.*, 2020, 5876-5879, 2020.
- [11] 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*, 8, 12134-12140, 2020.
- [12] K. Shiino, J. Miyake, and *K. Miyatake, "Highly stable polyphenylene ionomer membrane from dichlorobiphenyls", *Chem. Commun.*, 55, 7073-7076, 2019.
- [13] K. Miyatake, "Polyphenylene ionomer membranes: Effect of reinforcement", *Solid State Proton Conductors*, SSPC-20 (2021年9月28日, オンライン) [招待講演](#)
- [14] 福井賢一, "阪大SEEDSプログラム 化学が拓く新たな科学" (2023年10月5, 7日, 豊中) [アウトリーチ公募研究](#)
- [15] G.M. Russell, T. Kaneko, *H. Masai, and *J. Terao, "Transient photodegradability of photostable gel Induced by simultaneous treatment with acid and UV light for phototuning of optically functional materials", *Adv. Funct. Mater.*, 32, 2205855(1-9), 2022. "光に対して安定なのに、光で分解できる材料を開発" (2022年8月18日) [プレスリリース](#)
- [16] R. Iwai, *M. Morimoto, and M. Irie, "Turn-on mode fluorescent diarylethenes: Effect of electron-donating and electron-withdrawing substituents on photoswitching performance", *Photochem. Photo. Sci.*, 19, 783-789, 2020.

計画研究 (A03-2)

- [1] K. Okamoto, F. Takeiri, Y. Imai, M. Yonemura, T. Saito, K. Ikeda, T. Otomo, T. Kamiyama, and *G. Kobayashi, "Impact of Na concentration on the phase transition behavior and H⁻ conductivities in the Ba-Li-Na-H-O oxyhydride system", *Adv. Sci.*, 10, 2203541(1-7), 2023.
- [2] *S. Dekura, M. Mizuno, and *H. Mori, "Isotropic anhydrous superprotonic conductivity cooperated with installed imidazolium molecular motions in a 3D hydrogen-bonded phosphate network", *Angew. Chem. Inter. Ed.*, 61, e202212872(1-7), 2022. [21ページで紹介](#)
- [3] K. Okamoto, F. Takeiri, Y. Imai, M. Yonemura, T. Saito, K. Ikeda, T. Otomo, T. Kamiyama, and *G. Kobayashi, "Stabilization of a high H⁻-conducting phase via K doping of Ba-Li oxyhydride", *J. Mater. Chem. A*, 10, 23023(1-5), 2022.
- [4] *H. Mori, S. Yokomori, S. Dekura, and A. Ueda, "Proton-electron-coupled functionalities of conductivity, magnetism, and optical properties in molecular crystals", *Chem. Commun.*, 58(38), 5668-5682, 2022.
- [5] F. Takeiri, A. Watanabe, K. Okamoto, D. Bresser, S. Lyonard, B. Frick, A. Ali, Y. Imai, M. Nishikawa, M. Yonemura, T. Saito, K. Ikeda, T. Otomo, T. Kamiyama, R. Kanno, and *G. Kobayashi, "Hydride-ion-conducting K₂NiF₄-type Ba-Li oxyhydride solid electrolyte", *Nat. Mater.*, 21, 325-330, 2022. "ヒドリド超イオン導電体の発見" (2022年1月14日) [プレスリリース](#)
- [6] S. Dekura, Y. Sunairi, K. Okamoto, F. Takeiri, G. Kobayashi, *Y. Hori, Y. Shigeta, and *H. Mori, "Effects of mechanical grinding on the phase behavior and anhydrous proton conductivity of imidazolium hydrogen succinate", *Solid State Ion.*, 372, 115775(1-7), 2021.
- [7] T. Hiromoto, K. Nishikawa, *T. Tamada, and *Y. Higuchi, "The challenge of visualizing the bridging hydride at the active site and proton network of [NiFe]-hydrogenase by neutron crystallography", *Top. Catal.*, 64, 622-630, 2021.
- [8] *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.
- [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] H. Mori, "Novel proton-electron coupled functionalities in molecular materials", *Materials Research Meeting (MRM2021)* (2021年12月13~17日, 横浜) [招待講演](#)
- [11] 森初果, "東京大学柏キャンパス一般公開(物性研究所)" (2022年10月22日, 柏) [アウトリーチ](#)
- [12] 樋口芳樹, "兵庫県高校教育研究会 科学部会・生物部会総会" (2021年7月8日, 姫路) [アウトリーチ公募研究](#)
- [13] A. Sato, Y. Hori, and Y. Shigeta, "Characterization of the geometrical and electronic structures of the active site and its effects on the surrounding environment in reduced high-potential iron-sulfur proteins investigated by the density functional theory approach", *Inorg. Chem.*, 62(5), 2040-2048, 2023. [21ページで紹介](#)
- [14] R. Muneyasu, T. Yamada, M. Akai-Kasaya, and *H.S. Kato, "Self-assembly of heterogeneous bilayers stratified by Au-S and hydrogen bonds on Au(111)", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 24, 22222(1-9), 2022.
- [15] 山田鉄兵, "第75回サイエンスカフェ@ふくおか" (2020年7月10日, 福岡) [アウトリーチ](#)

●研究項目 A04 水素反応プロセス促進機能



計画研究

- [1] Y.H. Choi, S.E.M. Putra, Y. Shiozawa, S. Tanaka, K. Mukai, I. Hamada, Y. Morikawa, and J. Yoshinobu, "The quantitative study of methane adsorption on the Pt(997) step surface as the initial process for reforming reactions", *Surf. Sci.*, 732, 122284(1-8), 2023.
- [2] M. Yamauchi, H. Saito, *T. Sugimoto et al., "Sustainable organic synthesis promoted on titanium dioxide using coordinated water and renewable energies/resources", *Coord. Chem. Rev.*, 472, 214773(1-29), 2022.
- [3] W. Osada, S. Tanaka, K. Mukai, M. Kawamura, Y.H. Choi, F. Ozaki, T. Ozaki, and *J. Yoshinobu, "Elucidation of the atomic-scale processes of dissociative adsorption and spillover of hydrogen on the single atom alloy catalyst Pd/Cu(111)", *Phys. Chem. Chem. Phys.*, 24(36), 21705(1-9), 2022.
- [4] Q. Zhuo, J. Yang, Z. Mo, X. Zhou, T. Shima, *Y. Luo, and *Z. Hou, "Dinitrogen cleavage and functionalization with carbon dioxide in a dititanium dihydride framework", *J. Am. Chem. Soc.*, 144, 6972-6980, 2022.
- [5] S. Kitano, *M. Yamauchi et al., "Heterointerface created on Au cluster-loaded unilamellar hydroxide electrocatalysts as a highly active site for the oxygen evolution reaction", *Adv. Mater.*, 34, 2110552(1-11), 2022.
23ページで紹介
- [6] *D.R. Rocabado, T.G. Noguchi, S. Hayashi, N. Maeda, *M. Yamauchi, and *T. Ishimoto, "Adsorption states of N₂/H₂ activated on Ru nanoparticles uncovered by modulation-excitation infrared spectroscopy and density functional theory calculations", *ACS Nano.*, 15, 20079-20086, 2021.
- [7] *K. Fujita, T. Inoue, T. Tanaka, J. Jeong, S. Furukawa, and R. Yamaguchi, "Iridium complex catalyzed hydrogen production from glucose and various monosaccharides", *Catalysts*, 11, 891(1-9), 2021.
- [8] H. Eguchi, T. Kobayashi, *T. Yamada, D.S. Rivera Rocabado, *T. Ishimoto, and *M. Yamauchi, "Inversely polarized thermo-electrochemical power generation via the reaction of an organic redox couple on a TiO₂/Ti mesh electrode", *Sci. Rep.*, 11, 13929(1-7), 2021.
- [9] G. Toyooka, T. Tanaka, K. Kitayama, N. Kobayashi, T. Watanabe, and *K. Fujita, "Hydrogen production from cellulose catalyzed by an iridium complex in ionic liquid under mild conditions", *Catal. Sci. Technol.*, 2021, 2273-2279, 2021.
- [10] S. Hu, T. Shima, and *Z. Hou, "Hydrodeoxygenative cyclotetramerization of carbon monoxide by a trinuclear titanium polyhydride complex", *J. Am. Chem. Soc.*, 142, 19889-19894, 2020.
- [11] 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**
- [12] M. Yamauchi, "Inorganic nanocatalysts for efficient electrochemical material conversion", 20th Science Council of Asia Conference (2021年5月14日, 上海) **招待講演**
- [13] 藤田健一, "令和4年度京都大学大学院人間・環境学研究科公開講座「世界情勢とエネルギー問題」" (2022年8月9日, 京都) **アウトリーチ**

公募研究

- [14] H. Zhou, H. Inoue, M. Ujita, and *T. Yamada, "Advancement of electrochemical thermoelectric conversion with olecular technology", *Angew. Chem. Inter. Ed.*, 62(2), e202213449(1-18), 2022.
- [15] T. Kawawaki, *Y. Negishi et al., "Creation of high-performance heterogeneous photocatalysts by controlling ligand desorption and particle size of gold nanocluster", *Angew. Chem. Int. Ed.*, 60, 21340-21350, 2021. "金ナノクラスターによる高性能不均一系光触媒の創製" (2021年7月12日) **プレスリリース**

●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] *S. Yasuda, H. Matsushima, K. Harada, R. Tanii, T. Terasawa, M. Yano, H. Asaoka, J.S. Gueriba, W.A. Dino, and K. Fukutani, "Efficient hydrogen isotope separation by tunneling effect used graphene-based heterogeneous electrocatalysts in electrochemical hydrogen isotope pumping", *ACS Nano*, 16(9), 14362-14369, 2022.
- [2] *K. Fukutani, J. Yoshinobu, M. Yamauchi, T. Shima, and S. Orimo, "Hydrogenomics: Efficient and selective hydrogenation of stable molecules utilizing three aspects of hydrogen", *Catal. Lett.*, 152, 1583-1597, 2022.
24ページで紹介
- [3] N. Nagatsuka, K. Kato, M. Wilde, S. Ogura, and K. Fukutani, "Absence of mid-gap states due to excess electrons donated by adsorbed hydrogen on the anatase TiO₂ (101) surfaces", *Phys. Rev. B*, 105, 045424(1-6), 2022. **23ページで紹介**
- [4] Y. Nagaya, H. Nakatsu, S. Ogura, K. Shimazaki, H. Ueta, K. Takeyasu, and *K. Fukutani, "Focusing and spin polarization of atomic hydrogen beam", *J. Chem. Phys.*, 155, 194201(1-6), 2021.
- [5] *N. Oshime, K. Ohwada, K. Sugawara, T. Abe, R. Yamauchi, T. Ueno, A. Machida, T. Watanuki, S. Ueno, I. Fujii, S. Wada, R. Sato, T. Teranishi, M. Yamauchi, K. Ishii, H. Toyokawa, K. Momma, and Y. Kuroiwa, "Bragg coherent diffraction imaging allowing simultaneous retrieval of three-dimensional shape and strain distribution for 40-500 nm particles", *Jpn. J. Appl. Phys.*, 60, SFFA07(1-6), 2021. **23ページで紹介**
- [6] *K. Ikeda, F. Fujisaki, T. Otomo, H. Ohshita, T. Honda, T. Kawamata, H. Arima, K. Sugiyama, H. Abe, H. Kim, K. Sakaki, Y. Nakamura, A. Machida, T. Sato, S. Takagi, and S. Orimo, "Generating mechanism of catalytic effect for hydrogen absorption/desorption reactions in NaAlH₄-TiCl₃", *Appl. Sci.*, 11(18), 8349(1-16), 2021.

22ページで紹介

- [7] *H. Ueta, Y. Sasakawa, D. Ivanov, S. Ohno, S. Ogura, and *K. Fukutani, "Direct measurement of fast *ortho-para* conversion of molecularly chemisorbed H₂ on Pd(210)", Phys. Rev. B, 102, 121407(R)(1-5), 2020.
- [8] *Y. Nakamura, K. Sakaki, H. Kim, K. Asano, T. Watanuki, and A. Machida, "Reaction paths via a new transient phase in nonequilibrium hydrogen absorption of LaNi₂Co₃", Int. J. Hydrog. Energy, 45, 21655-21665, 2020.
- [9] 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.
- [10] *S. Ogura, S. Ohno, K. Mukai, J. Yoshinobu, and K. Fukutani, "H-D exchange mechanism of butene on a D-adsorbed Pd-Au alloy surface", J. Phys. Chem., 123, 7854-7860, 2018.
- [11] K. Fukutani, "Development of channeling 15N-NRA for structure analysis of hydrogen in nanofilms and subsurfaces", 10th International Workshop on High-Resolution Depth Profiling, HRDP-10 (2022年10月30日, イラクリオン) [招待講演](#)
- [12] K. Fukutani, The 18th CNS International Summer School (2019年8月23-24日, 東京) [アウトリーチ 公募研究](#)
- [13] *K. Hayashi, M. Lederer, Y. Fukumoto, M. Goto, Y. Yamamoto, N. Happo, M. Harada, Y. Inamura, K. Oikawa, K. Ohoyama, and P. Wellmann, "Determination of site occupancy of boron in 6H-SiC by multiple-wavelength neutron holography", Appl. Phys. Lett., 120, 132101 (1-6), 2022.
- [14] 大山研司, "茨城大公開講座", (2022年8月25日, 日立) [アウトリーチ](#)

計画研究 (A05-2)

- [1] Y. Zhao, R. Sato, and S. Tsuneyuki, "Accelerating simulated annealing of glassy materials with data assimilation", J. Non-Cryst. Solids, 600, 122028(1-6), 2023.
- [2] T. Goto, S.-i. Ito, S.L. Shinde, I. Matsuda, *I. Hamada, H. Hosono, and T. Kondo, "Carbon dioxide adsorption and conversion to ethane on hydrogen boride sheets", Commun. Chem., 5, 118(1-10), 2022. [21ページで紹介](#)
- [3] S. Yoshikawa, *R. Sato, R. Akashi, S. Todo, and S. Tsuneyuki, "A noise-robust data assimilation method for crystal structure determination using powder diffraction intensity", J. Chem. Phys., 157, 224112(1-8), 2022.
- [4] *H. Kimizuka, B. Thomsen, and M. Shiga, "Artificial neural network-based path integral simulations of hydrogen isotope diffusion in palladium", J. Phys. Energy., 4, 034334(1-14), 2022.
- [5] K. Takeyasu, S. Yasutaka, T. Imabayashi, S.E.M. Putra, H.H. Halim, J. Quan, Y. Hamamoto, I. Hamada, Y. Morikawa, T. Kondo, T. Fujitani, and *J. Nakamura, "Hydrogenation of formate species using atomic hydrogen on a Cu(111) model catalyst", J. Am. Chem. Soc., 144(27), 12158-12166, 2022.
- [6] *B. Thomsen and M. Shiga, "Structure of liquid and aqueous water isotopologues at ambient temperature from ab initio path integral simulations", Phys. Chem. Chem. Phys., 24, 10851-10859, 2022.
- [7] K.I. Rojas, N.T. Cuong, H. Nishino, R. Ishibiki, S. Ito, M. Miyauchi, Y. Fujimoto, S. Tominaka, S. Okada, H. Hosono, N.J. Arboleda, *T. Kondo, Y. Morikawa, and *I. Hamada, "Chemical stability of hydrogen boride nanosheets in water", Commun. Mater., 2, 81(1-8), 2021.
- [8] *A. Shiotari, S.E.M. Putra, Y. Shiozawa, Y. Hamamoto, K. Inagaki, Y. Morikawa, Y. Sugimoto, J. Yoshinobu, and I. Hamada, "Role of intermolecular interactions in catalytic reaction of formic acid on Cu(111)", Small, 17, 2008010(1-10), 2021.
- [9] *M. Ghim, N. Sato, R. Akashi, S.-H. Jhi, and S. Tsuneyuki, "Coexistence of spontaneous polarization and superconductivity in hole-doped oxyhydrides ATiO₂H (A=K, Rb, Cs): First-principles study", Phys. Rev. Mater., 5, 054802(1-10), 2021.
- [10] *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.
- [11] *A. Shiotari, I. Hamada et al., "Manipulable metal catalyst for nanographene synthesis", Nano Lett., 20, 8339-8345, 2020. "銅の針を近づけるだけで分子から水素原子が引き抜かれる化学反応を発見" (2020年11月10日) [プレスリリース](#)
- [12] *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.
- [13] S. Tsuneyuki, "Computational materials science from first principles, from data, and in between", Int. Conf. on Discrete Geometric Analysis for Materials Design (2021年9月26-29日, 東京) [基調講演](#)
- [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" (2020年1月16日, 柏) [アウトリーチ](#)

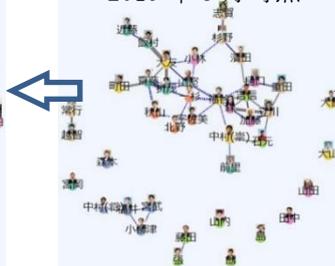
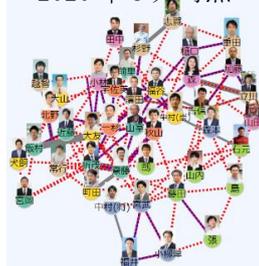
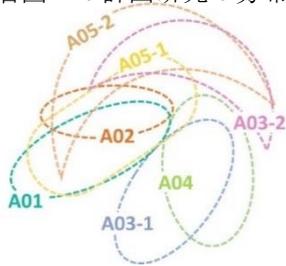
公募研究

- [15] *Y. Hori, *S. Dekura, Y. Sunairi, T. Ida, M. Mizuno, H. Mori, and Y. Shigeta, "Proton conduction mechanism for anhydrous imidazolium hydrogen succinate based on local structures and molecular dynamics", J. Phys. Chem. Lett., 12, 5390-5394, 2021.
- [16] N. Yodsin, H. Sakagami, T. Udagawa, T. Ishimoto, *S. Jungstittiwong, and *M. Tachikawa, "Metal-doped carbon nanocones as highly efficient catalysts for hydrogen storage: Nuclear quantum effect on hydrogen spillover mechanism", Mol. Catal., 504, 111486(1-10), 2021.

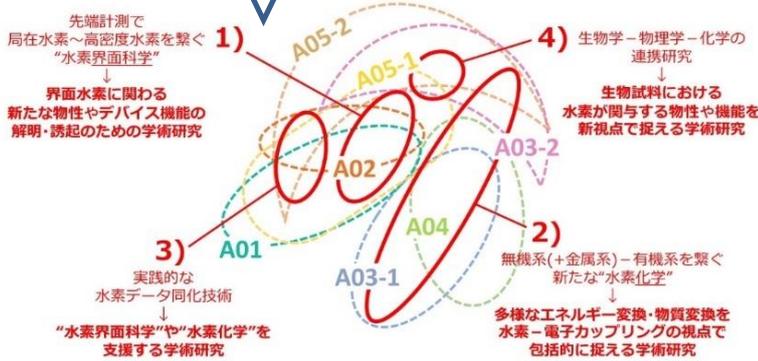
8 研究組織の連携体制

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。

- 論文検索エンジン等から、期間前半で「領域全体での有機的連携」が構築されたことを可視化した：右図*の計画研究の分布



- これにより、以下↓の新たな学術領域の萌芽が認められた（下図は期間を通じた連携研究の実数）：



	計画研究						第1期公募研究					第2期公募研究					
	A01	A02	A03-1	A03-2	A04	A05-1	A01	A02	A03-1	A03-2	A04	A05-1	A05-2	B01	B02	A05	
計画研究	A01	10	13	3	4	4	6	3									
	A02	13	8	2	3	3	4	2	2	1			2	2		6	4
	A03-1	3	2	4	2	3	1	2		2		2				1	1
	A03-2	4	3	2	2	1	3	4	1	1	3				3	1	5
	A04	4	3	3	1	13	2	2			2	5		2	2	2	2
	A05-1	8	4	1	3	2	5	7	5			1	1		1	3	2
	A05-2	6	2	2	4	2	7	3	1	1	1	1	1	3	2	4	1
第1期公募研究	A01	3	2		1		5	1	2	1	1	1	1	1	1	1	1
	A02		1		1				1								
	A03-1			2	1		1										
	A03-2					3	2	1	1								
	A04	2	1	2			5			1	1	1	1	1	1	1	1
	A05-1	2	3					1		3	1						
	A05-2					3	2		2	1	1	1	1	1	1	1	1
第2期公募研究	B01	6		1	1	2	3	4							1	2	4
	B02	4	2	1	5	1	2								2	2	6
	A05	7	5		6	2	1								4	6	2

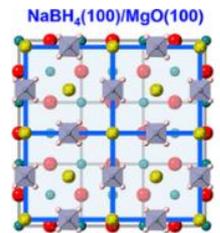
- これを受け、期間後半では、第2回国際会議（オンライン）や最終報告会（対面）の場でも1)~4)を集中して議論、以下の例に示す連携体制が強化されることで秀逸な成果創出につながった。

1) 水素界面科学に関する A01/A02/A05-1/A05-2/公募 が主導する連携体制

例：高密度水素化物のエピタキシャル成膜合成

“Fabrication and growth orientation control of NaBH₄ epitaxial thin films using infrared pulsed-laser deposition”, R. Nakayama et al., Cryst. Growth Des., 22(11), 6616-6621, 2022.

例：ホウ化水素シート表面での二酸化炭素のメタン/エタン低温転換反応の実現
 “Carbon dioxide adsorption and conversion to methane and ethane on hydrogen boride sheets”, T. Goto et al., Commun. Chem., 5, 118(1-10), 2022.



2) 水素-電子カップリングに関する A03-2/A03-1/A04/A05-2/公募 を含む領域全体での連携体制

例：分子回転によるプロトン伝導促進、超プロトン伝導化

“Isotropic anhydrous superprotonic conductivity cooperated with installed imidazolium molecular motions in a 3D hydrogen-bonded phosphate network”, S. Dekura et al., Angew. Chem. Int. Ed., 61(49), e202212872(1-7), 2022.

これらの成果も評価され、第一著者の若手研究者・出倉駿氏の昇任採用（東京大・特任助教→東北大助教）に至った。→後述の「水素の結合多様性とそのずれの認識」にもつながり領域全体に展開した。

3) 水素データ同化等の計算科学・数理科学に関する A05-2/A05-1 が主導する領域全体での連携体制

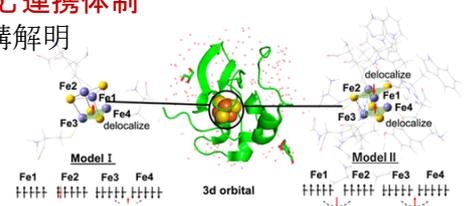
例：経路積分分子動力学法(PIMD)コードの整備や半古典分子動力学法(BCMD)の開発等、水素の量子効果を考慮したシミュレーションに必要な基盤技術が劇的に進展した。さらに、これらを主導した若手研究者の Bo Thomsen 氏の昇任採用（原子力機構・任期付研究員→同・常勤研究員）に至った。→既述の「トランススケールでの水素先端計測技術」とも連携して領域全体に展開した。

4) 生物試料における水素が関与する物性等の A03-2/A05-2/公募 を含む連携体制

例：水素結合によるタンパク質中の鉄硫黄クラスターの活性化機構解明

“Characterization of the geometrical and electronic structures of the active site and its effects on the surrounding environment in reduced high-potential iron-sulfur proteins investigated by the density functional theory approach”, A. Sato et al., Inorg. Chem., 62(5), 2040-2048, 2023.

→生物試料での水素-電子カップリングの研究を通じて、上記 2) との連携も進展した。



9 研究費の使用状況

研究領域全体を通じ、研究費の使用状況や効果的使用の工夫、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2頁以内で記述すること。また、領域設定期間最終年度の繰越しが承認された計画研究（総括班・国際活動支援班を含む。）がある場合は、その内容を記述すること。

- ・中間評価報告書でも詳述の通り、**領域メンバー専用ウェブサイト**を通じて設備等の多くを**共用装置として整備・管理**した。その際、目的や用途別に分類掲載するとともに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い環境を提供した。この装置共用をプラットフォームとする若手研究者相互の新たな連携が数多く創出され、アカデミア職位へのキャリアパス形成に極めて効果的であった（25 ページにも記載）。



- ・領域内の共用装置は若手研究者（直接雇用の13名を含む）が主体となって運用し、期間前半に下表のような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た：

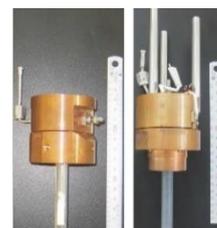
A01	A02	A03-1	A03-2	A04	A05-1
<p>光学ディラトメーター (東大物性研)</p>  <p>各種水素化物の原子・電子構造解析のための熱膨張係数の精密計測等に使用。A02、A03-1、A04、A05-1、A05-2との連携研究が進行。</p>	<p>金属・無機系薄膜作製装置 (東工大物質理工)</p>  <p>金属水素化物および錯体水素化物の成膜試料の合成等に使用。A01、A03-1、A03-2、A05-1との連携研究が進行。</p>	<p>高分子・有機系薄膜作製装置 (山梨大FCセンター)</p>  <p>高速プロトン導電高分子材料の合成やリチャージャブル燃料電池の設計・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、A03-2、A04、A05-2との連携研究が進行。</p> <p>水素化過程中性子全散乱計測装置 (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>

- ・上記以外で、特に期間後半での領域全体の連携の加速につながった設備・装置（特に10ページに記載のトランススケールでの水素先端計測に関する設備・装置等）の活用状況をまとめる：

高圧合成装置：独自の水素源との組み合わせで高温高圧水素流体雰囲気での維持が可能となり、多彩な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が進展した。共同利用は、A01を中心に、A02、A04、A05-1、A05-2、公募研究等にも広がり、例えば少量試料や複雑系にも対応させた中性子準弾性散乱測定・解析（高分解能パルス冷中性子分光器 AGNES）と連携して高速イオン伝導を促進する水素クラスターの特異な回転運動の観測や新たな水素化物超伝導材料の合成等の成果に至った：参考：“Rotation of complex ions with ninefold hydrogen coordination studied by quasielastic neutron scattering and first-principles molecular dynamics calculations”, Y. Ohmasa, S. Takagi et al., Phys. Rev. Res., 4(3), 033215(1-9), 2022.



中性子全散乱測定装置：中性子全散乱測定技術に対して、水素化物の種類や反応条件に応じた少試料対応のオペランド化を充実化した（右写真：左側が単結晶サファイア製反応セル、右側がバナジウム製反応セル（スケールは150mmに相当））。これにより A05-1 を中心に領域内外の広域的な連携が進展して、例えば高密度水素化物 NaAlH₄ の触媒界面での詳細な反応素過程解析等が実現、この分野での30年来の未解明課題の解決に至った。さらに軽水素中性子非干渉性散乱成分の除去に有効な偏極中性子散乱測定に関する環境整備が進展した。



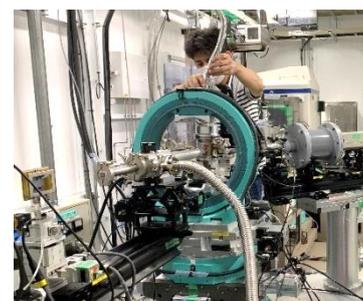
参考：“Generating mechanism of catalytic effect for hydrogen absorption/desorption reactions in NaAlH₄-TiCl₃”, K. Ikeda et al., Appl. Sci., 11(18), 8349(1-16), 2021.

リアルタイム水素可視化装置：Ir 錯体やポリアニリンと水素との反応に伴う色彩変化を光学観察する利便性や空間・時間分解に優れた新原理のリアルタイム水素可視化技術（ハイドロジェノクロミズム）を、A02、A04、A05-1、公募研究等の連携により開発した。実際に金属中の水素拡散・腐食等による水素侵入のその場観察にも成功、産業界からも高く評価されており、第一著者の柿沼洋氏の昇任採用（東北大・博士研究員→同・助教）にも至った。



参考：“Real-time visualization of hydrogen distribution in metals using polyaniline: An ultrasensitive hydrogenochromic sensor”, H. Kakinuma et al., Adv. Mater. Interfaces, 9(18), 2101984(1-7), 2022.

放射光ブラッグコヒーレント回折イメージング(Bragg-CDI)装置：A05-1を中心にA04や公募研究等の連携により、40~500nm級の水素化物粒子のオペランド可視化（水素・温度条件可変）技術として確立、Pdナノ粒子形状や内部歪分布の精密計測が可能となった（一般ユーザー利用のためSPring-8/BL22XUに整備）。さらに、これらの研究を主導した第一著者の押目典宏氏の昇任採用（量研機構・博士研究員→同・研究員（正職員））にも至った。

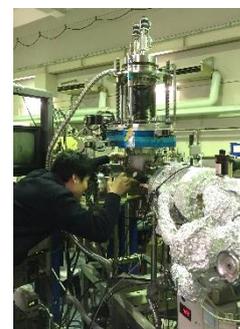


参考：“Bragg coherent diffraction imaging allowing simultaneous retrieval of three-dimensional shape and strain distribution for 40-500 nm particles”, N. Oshime et. al. Jpn. J. Appl. Phys., 60, SFFA07(1-6), 2021.

深紫外界面電気化学分光(EC Far-UV ATR)／変調励起赤外吸収分光(MES-IR)装置：これらの時分割分光の導入・整備により、水素が関与する反応過程での界面選択（前者）ならびに中間状態（後者）等のオペランド分光計測が可能となり、A03-1やA04を中心に、A03-2やA01、A02との連携が進展した。

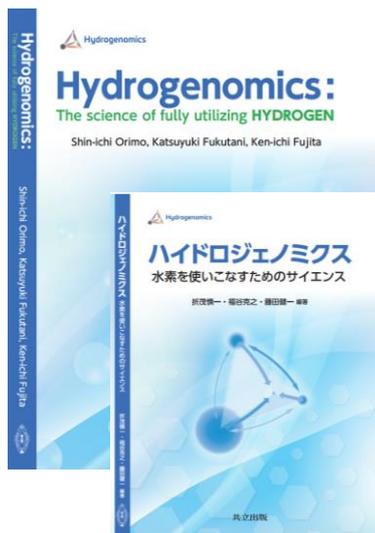
参考：“Heterointerface created on Au cluster-loaded unilamellar hydroxide electrocatalysts as a highly active site for the oxygen evolution reaction, S. Kitano et al.”, Adv. Mater., 34(16), 2110552(1-11), 2022.

チャネリング共鳴核反応(NRA)／分子線-共鳴多光子イオン化(REMPI)装置：前者（右写真）は東京大学タンデム加速器施設1Eビームラインに設置、アナターゼTiO₂表面の水素誘起電子状態やPd中での水素のT-Oサイト間のトンネル拡散の解明等、また後者は生物酵素における気液界面オルト-パラ転換反応の観測等、A05-1を中心に領域内外の広域的な連携が進展した。装置開発等に携わった長塚直樹氏は、昇任採用（東京大・特任研究員→京大・助教）された後も継続的に本領域研究者らと連携、極めて秀逸な成果につなげた。



参考：“Absence of midgap states due to excess electrons donated by adsorbed hydrogen on the anatase TiO₂(101) surfaces”, N. Nagatsuka et al., Phys. Rev. B, 105(4), 045424(1-6), 2022.

- ・主な**総括班経費**の使途は、本領域の持続的発展のための若手研究者支援、国際ネットワーク強化等のための国際会議開催費、これらに係わる旅費、書籍やニュースレター等の刊行・発行に使用した。



- ・本領域の意義や研究の視点、そして研究成果を俯瞰した日本語解説書（2022年1月（共立出版）、下図）、またその後の研究進展を含めて内容を充実した英語版解説書（2023年3月、電子書籍版、左図）の出版にも至り、国際アドバイザーグループと密接に連携して、国際的な成果発信にも取り組んだ。

編集委員・執筆者一覧		
折茂慎一	福谷克之	藤田健一
秋山英二	小林玄器	中田明伸
味戸沙耶	近藤剛弘	濱田健太郎
有田亮太郎	齋藤寛之	一杉太郎
飯村壮史	志賀基之	福嶋 貴
宇佐美徳隆	島 隆剛	福谷克之
小柳津研一	清水克哉	藤田健一
折茂慎一	清水亮太	宮武健治
加藤浩之	杉野 修	森 初果
木須一彰	高木成幸	山内美穂
北野政明	張 浩徽	山田鉄兵
金 相侖	常行真司	吉信 淳
後藤和泰		

- ・さらに、厳正な経費管理を含めた適正な領域運営のための事務担当者および研究成果を高インパクトかつタイムリーに情報発信*するためのアウトリーチ担当者の雇用にも使用した。

*日本化学会、日本金属学会、日本セラミックス協会、水素エネルギー協会をはじめとする国内学協会の「ハイドロジェノミクス特集号」としての情報発信等も含む

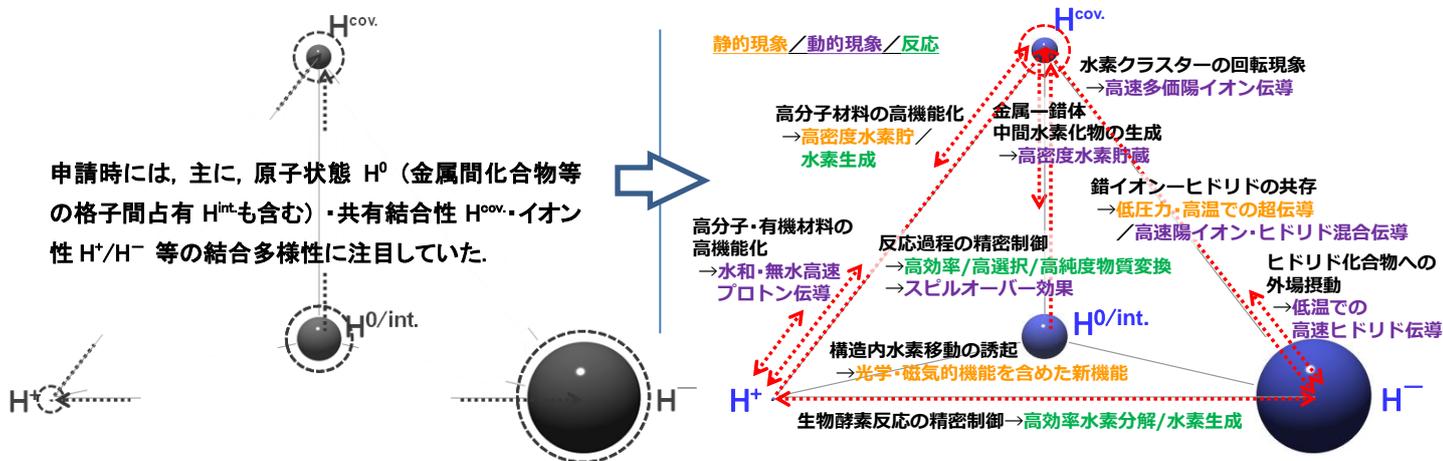
10 当該学問分野及び関連学問分野への貢献の状況

研究領域全体を通じ、本研究領域の成果が当該学問分野や関連学問分野に与えたインパクトや波及効果などについて、「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1頁以内で記述すること。なお、記述に当たっては、応募時に「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」、「②当該領域の各分野発展・飛躍的な展開を目指すもの」のどちらを選択したか、また、どの程度達成できたかを明確にすること。

「①既存の学問分野の枠に収まらない新興・融合領域の創成を目指すもの」を選択、まさに新たな学問領域として以下の2つの視点で日本から成果発信したことが最重要の貢献といえる：

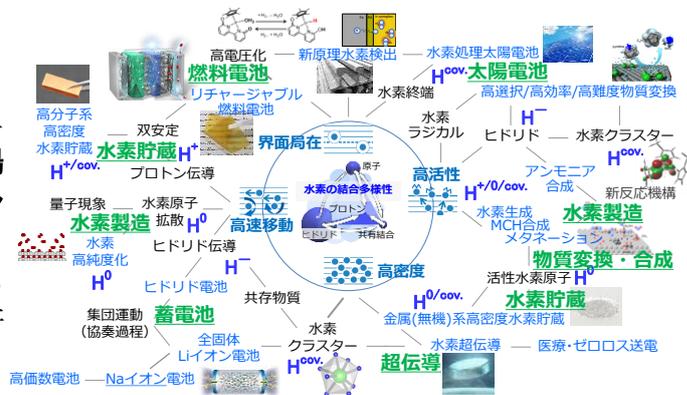
1) 水素の結合多様性だけでなく、それらの結合状態からの逸脱(ずれ)や状態間の連続的変化が高次水素機能の発現における支配要因となりうることを提起した

既述のように、水素を“使いこなす”ために重要となる高次水素機能の発現には、申請時に想定していた水素の結合多様性(下段左図)だけでなく、周囲の原子・電子構造の揺らぎ等に起因する理想的な結合性からの逸脱や異なる結合性への連続的な変化が支配要因になりうることを提起した(下段右図)。これは、異分野間の有機的連携による水素科学における包括的な学理創成のための新たな基盤として強調したい。今後、これらの定量化や制御・応用展開等も含めて、水素科学分野のさらなる進展が期待される。



2) 水素科学が、エネルギー・GX分野全体にわたり 広く貢献できることを実証した

高次水素機能の誘起により、従来のいわゆる「水素エネルギー」の視点だけでなく、蓄電池や超伝導・太陽電池等の広域的なエネルギー分野あるいはグリーントランスフォーメーション(GX)分野全体に貢献できることを実証した意義は極めて大きい(右図)。これらの視点は、広く政策的提言にも取り入れられ、各種研究プロジェクト等にも展開され始めている。



また、「異分野での有機的連携」や「水素感の共有(研究マインドの変化)」については、本領域の研究成果と、同時期の全世界の関連論文(約2万報)とをコンサルタント企業とともに比較分析(右図)することで、その波及効果の大きさを定量化した。さらに、関連する国際レビュー論文(下記に例示)の執筆等を通じて、新たな学術分野としてのHydrogenomicsの認知度を短期間で高めた。冒頭①は想定を超えて達成した。



* Google 検索数が、210件(2020年7月)から3,590件(2023年4月)に一気に高まったことを確認。参考: “Hydrogenomics: Efficient and selective hydrogenation of stable molecules utilizing three aspects of hydrogen”, K. Fukutani, J. Yoshinobu, M. Yamauchi, T. Shima, and S. Orimo, Catal. Lett., 152, 1583-1597, 2022.

11 若手研究者の育成に関する取組実績

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5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。）の育成に係る取組の実績について、具体的かつ簡潔に1頁以内で記述すること。

・研究遂行の主軸としての**本領域に関わる延べ282名の若手研究者・学生**（39歳以下、直接雇用の13名を含む）に対して、以下の**重層的視点での若手育成**を着実に展開した：

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、米国・オークリッジ国立研究所等との金属間化合物に関する研究を若手研究者が主体となり進めた（9ページに記載）。これらの**若手研究者を中心と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**若手研究者相互の新たな連携研究が活発化**した。

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。計9回、延べ350名の参加があり、**領域全体での連携研究をいっそう加速**させた。



4) 総括班からの視点

22～23ページの通り、**設備等の多くを領域内での共用装置として整備・管理した結果、それらをプラットフォームとする若手研究者相互の新たな連携が数多く創出**された。また、若手研究者の**海外での研究成果発表支援**を実施、大学院生5名を含む10名が利用、その後の**キャリアパス拡大**にも至った。例：23rd International Conference on Solid State Ionics (2022, Boston) にてヒドリド超イオン導電相構造の安定化に関する秀逸な成果発表を行った岡本啓氏の昇任採用（総研大・博士課程→東北大・助教）、等。これらの結果、国内外の学協会・財団等からの**若手研究者の受賞件数は108件**にもものぼる。

12 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）
- *水木純一郎先生（関西学院大学・教授・物理学）
- *塚田捷先生（東京大学・名誉教授・物理学）
- *河村純一先生（東北大学・特任教授・工学）
- *西出宏之先生（早稲田大学・特任研究教授・化学）
- *射場英紀先生（トヨタ自動車・CPE・産業界）

*は記載をお願いした先生方

・国際アドバイザーグループ

- *Prof. H.-J. Freund (Max Planck Institute, Berlin (ドイツ)・表面化学/物理)
- *Prof. A. Züttel (EPFL (スイス)・工学) Prof. G. Galli (Univ. Chicago (米国)・計算/理論)
- 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)

菅野先生：水素を切り口にして、水素が関与する様々なサイエンスを横断的につなぐ役割を担うプロジェクトであった。これまで異なる分野で個別に活動していた水素関連の研究者の連携を新たに作り出したのは大きな成果である。分野の異なる研究者の発想の仕方をお互いに学び、新たなサイエンスを生み出す土台を強固にした。これまでにない取り組みは大成功であった。／最も軽い元素が、その電子状態も含め変幻自在に形を変える様子は、様々な分野で個別に調べられてきたが、総合的に捉えることの重要性を各研究者に認識させた点が本領域の功績である。領域代表は、発想の異なる研究者に対して、水素という共通の課題のもとで、それぞれの研究者の独自の方向性は尊重しつつ、共通の課題認識を行い、課題設定して、研究の方向づけを行い、さらに研究を発展させるリーダーシップを発揮した。組織の研究の隅々にまで行き届いた運営を行った研究代表者に、最大限の敬意を評したい。計画研究や公募研究の成果も様々な論文となって素晴らしい成果を挙げたのは言うまでもない。／成果物として公開された業績以外に、それぞれの研究者が、個別の分野で対象としていた「水素」が、研究分野が少し変われば全く異なる捉え方をしている事実がわかり、各研究者が水素に対して、新たな見方をするようになったと感じる。これから生み出される新たなサイエンスの芽を育んだことが、最大の成果である。さらに数多くの若手研究者を育てたことは極めて高く評価する。特に若手研究者は、様々な研究分野の研究者と共同研究を行う機会を得たことから、自らの専門外に研究分野を広げるきっかけになったと信じる。／新しい水素科学が、これから、間違いなく生み出される。今後の成り行きを見守るのが楽しみである。

河村先生：Hydrogenomics という日本発のコンセプトを掲げ、従来当たり前と思われてきた水素の多様性に着目し、その基礎から応用まで、「多様な水素を使いこなす」ための学術基盤の構築を目指した。幅広い対象物質を高度計測技術や高圧や薄膜技術を駆使して、第一原理計算やデータ同化などの最新の計算手法とも組合せて解析、さらに異分野融合や若手育成を当初から積極的に追求し、多彩な研究者をまとめて大きな成果につなげた、研究代表者をはじめ総括班のリーダーシップは特筆に値する。／計画班は、各目標を達成するのみならず、他班や公募班とも数多くの共同研究を実施して、当初計画を凌駕する多様な成果に結実させた。コロナ禍にもかかわらず、若手を含めて国内・国外との連携を進め、ほぼ毎年国際会議を開催し、最終年にはHydrogenomicsを冠する英文図書を出版するなど、我が国が先導してこの分野を切り拓き、若手育成も含めて今後の発展基盤を築いた点は高く評価できる。／本領域の核心的な学術的意義は、24頁の水素の結合多様性の4面体図に象徴される。錯体化学や触媒反応、更にはヒドリドイオン伝導体などにおいて、水素の価数は+1から-1まで連続的に変化し、しかも反応過程や固体内イオン移動においては周囲の環境との電子移動のゆらぎが水素の運動を支配する描像が明らかになってきた。この問題は水素-電子カップリングとして深く議論され、4面体図の頂点から辺上への連続的変化として統一的に理解できる事が示された。この点で、ハイドロジェノミクスの学術的基盤が確認でき、これに基づく更なる研究発展が期待される。／関連して、理論・計算面でも重要な発展があり、低温での水素拡散の異常なども報告され、それを説明する核の量子性を含む計算手法の開発も進んだ。これは、水素-電子カップリングの量子力学的な基盤形成の点でも、今後の学術的発展に繋がる大きな基盤であろう。／さらにヒドリド系超イオン導電体や水素化物超伝導体などが次々に発見され、応用面を含めてこれから爆発的展開が予感される。その学術的な基盤を構築した意味でも、本領域の成果は高く評価できる。

水木先生：世界的に水素社会の到来を期待している中、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した研究の狙いは、まさに「新学術領域」の形成にふさわしい研究ターゲットである。直接観ることが困難な水素の統一的な水素観を得る為に、これまでの従来の水素に関する研究分野の深堀（高度化）に満足せず、それらの連携・融合による高次水素機能の誘起を目指す研究は予測を超えた非線形な成果 (serendipity) を期待したものである。／この領域ターゲット実現のため、常に計画班間の連携を重要にしていることは、全体会議での領域代表の適切なコメントや要望から感じ取られ、この結果、新学術領域形成にとって必須である研究者間の強いネットワーク形成が完成した。この成果として日本 MRS 水素科学技術連携研究会が組織されたと評価している。また、強調したいのは理論と実験との協働、計算と測定との連携、などが成功したことである。水素を観る、機能解析をする、という共通ターゲットを明らかにしたがゆえに連携が上手くいき成果が創出されたと評価する。これも研究代表者のリーダーシップが強く働いた結果と評価する。／放射光や中性子利用の物質科学研究のキーワードは、ナノ、オペランド、ダイナミクス、不均一、であると認識している。水素を直接観測するのは非常に困難であるが、水素が絡むキーワードを上記プローブで解明する観点で、今後もいっそう水素科学に期待する。

西出先生：新しい学理「ハイドロジェノミクス」の旗印のもと、折茂領域代表の強いリーダーシップに沿って、専門分野を超えた若手研究者も多く取り込んだ組織研究として、新学術領域を世界に先駆け開拓する極めて高水準な研究成果は確かである。(いわゆる総合評価なら「S」。)／熱気ある組織運営、班員多くの昇進・受賞、新しいプロジェクトへの波及と、若手研究者も惹きつける魅力と多様性の包含は強く印象付けられた。高次な水素機能を把握する考え方(例えば四面体のロゴ)は、計測・計算での裏打ちと特徴付けが期間後半に重層し、水素の凝集と高速移動や水素・電子の動的カップリングなど深堀され、新しい発想の超イオン伝導体やデバイス・反応経路としても展開され衝撃度は高い。客観的な分析も、高水準な論文のサイエンス全体での位置づけ、共同研究の多さと他分野への拡がりを強く裏付けており、学術面で「さらなる高み」へつながるものである。／本学術での「水素を使いこなすサイエンス」が遠くない将来に社会実装できる道筋にあるか、産業界交えて構築された水素科学技術連携研究会などでの議論と新しい見識とともに、次への流れとして支援されるであろう。／代表者・各班長が自身の時間を割いて、班員と密に連携しながら組織研究として前進し、実に多くの成果を上げられたことに最大の敬意を表す。

塚田先生：水素はエネルギー資源や地球温暖化など、今世紀の人類のかかえる難問を解決する鍵となる物質である。しかし、その絶大な可能性を開花させるためには、材料科学、有機化学、表面科学などを総合した学際的研究が必要とされる。／本領域では、この様な広い分野の専門家を結集して、水素の総合科学を開拓することをめざした。そして研究代表者の卓越したリーダーシップのもとで実施された5年間の研究活動の成果として、水素の総合科学である「ハイドロジェノミクス」が構築された。その中から、異分野協力に基く多くの優れた成果が得られたことは高く評価できる。また当初の計画研究に加えて、それを補完する独創的な公募研究が研究布陣に参加し、研究を一層豊かなものとした。さらに若手研究者の育成についても、本領域全体として十分な手段を講じ目覚ましい成果をあげ、領域内や外部向けの情報発信も極めて良好であった。／ハイドロジェノミクスという新学術の構築に向けて、テーマ群はよく選択されており、それに相応しい優れた研究者が参加しインパクトのある成果を上げた。本領域が、世界が注目する重要な学理的基礎を構築した貢献は大きい。

射場先生：水素の産業利用については、エネルギー分野を中心に様々なプロジェクトがあるにもかかわらず、それに対応するサイエンスの領域では研究コミュニティが少ないので、今回の新学術の取り組みは多くの研究者にとってたいへんよい議論の場になった。また、異分野との融合は、新学術の基本コンセプトであり、既存の研究領域中心になりがちなプロジェクトが多い中で、このハイドロジェノミクスでは、積極的にそれを意図したチーム構成や公募を実施することにより、研究者同士の自律的な融合研究も生まれ、水素に関連する学理構築がなされた。その実現に向けた数多くの苦勞の共有により制度全体の発展にもつながる。今回の学理を基盤に、様々な水素の産業利用のイノベーションを創出するプラットフォームに発展することを期待する。

Prof. Freund : The world-wide unique and leading project, connecting a number of leading scientific laboratories in Japan named "Hydrogenomics", was conducted. On this occasion, a book has been edited called "Hydrogenomics: The Science of Fully Utilizing Hydrogen". It provides a comprehensive and detailed overview of the many exciting, ground breaking and outstanding results obtained by the joint efforts of the participating researchers.／A crucial, and excellently developed part of the project is the availability and development of specific techniques, that allow to detect the presence, space resolved concentration, position and diffusion of hydrogen within the sample. Those experimental techniques are complimented with state-of-the art theoretical studies.／With the development of synthesis techniques under a high-pressure hydrogen atmosphere, advances have been made in the synthesis of many new hydrides with new physical properties and functions. One particularly interesting facet is connected with materials showing high ionic (super) conductivity. Such complex hydrides have attracted attention as new solid-state electrolytes for solid-state batteries.／In general, the development of new reaction processes, related to highly active hydrogen, is important for reducing CO₂ emissions, and achieving high-efficiency carbon recycling around the world, and those have been studied within the project. Connecting the information, generated on new materials, new conceptual devices, new reaction processes, partly studied on model systems, and other novel aspects, brilliantly described in the book, it is clear that synergistic effects of multiple hydrogen functions in single and multiple materials for creating innovative materials, devices, and reaction processes are of utmost importance.／In summary, I consider the "Hydrogenomics"-project to be outstanding and extremely successful. The group of researchers should be congratulated on the achieved results, and I would consider it fully justified if the funding agencies in Japan continue to support the efforts by the team also in the future.

Prof. A. Züttel : HYDROGENOMICS is a unique project lead by Prof. Shin-Ichi Orimo with the goal to bring together the leading scientists in Japan in the field of hydrogen related materials. The project was carried out from 2018 to 2023 and despite the difficulties of the pandemic produced a very impressive number of new results. The senior scientific researchers together with talented young researchers have built an instrumental platform allowing to do top level research on materials, devices and chemical reactions.／The HYDROGENOMICS project represents a very successful and productive research activity with a high impact. The participating researches have significantly advanced the field and created essential science. They have proven their ability to performed and deserve to be further supported in order to continue the very well established and productive research collaboration.

Dr. Ramirez-Cuesta : The team that formed the Hydrogenomics program is truly exceptional. The work focused on utilizing all the experimental and theoretical techniques to study hydrogen in materials. This is the strength of the Hydrogenomics program. The techniques, including neutron rector analysis and neutron scattering (inelastic and elastic), well combined with advanced, state-of-the-art computational modeling.／The project also studied new devices to use in a hydrogen economy, including complex hydride batteries, solar cells, thermochemical cells, and others. Special consideration was made to using ammonia as a candidate material for hydrogen's chemical storage and transport.／The Hydrogenomics program is a world-leading effort for a future society where hydrogen energy is a significant player. The vision is clear and ambitious, with the results very encouraging.／I have been honored to be part of the International Advisory Board of Hydrogenomics project since 2019 and have been incredibly impressed by the project. I hope this effort will continue in the future.