

令和 5 年 6 月 2 日現在

機関番号：11301

研究種目：新学術領域研究（研究領域提案型）

研究期間：2018～2022

課題番号：18H05512

研究課題名（和文）ハイドロジェノミクスの研究推進

研究課題名（英文）Research Promotion on Hydrogenomics

研究代表者

折茂 慎一 (Orimo, Shin-ichi)

東北大学・材料科学高等研究所・教授

研究者番号：40284129

交付決定額（研究期間全体）：（直接経費） 99,370,000 円

研究成果の概要（和文）：領域全体での「学問分野の枠を超えた有機的連携」を最重要の活動目的として、全体会議や計画研究代表者会議、国際会議やハイドロジェノミクス研究会等の企画や運営、装置共用の実施、海外研究拠点・施設との共同研究の推進、研究遂行の主軸である若手研究者の育成、国内外への研究成果の発信・戦略広報、本領域の取組みに関するニュースレターや解説書の出版、などを幅広く強力に支援した。また、「水素を使いこなすための水素科学」としてのハイドロジェノミクスの継続的な維持・発展のためのプラットフォームとなる「日本MRS水素科学技術連携研究会」を設立、ハイドロジェノミクスの多様な成果の社会還元と産学連携を推進している。

研究成果の学術的意義や社会的意義

日本発信の新たな学問領域として、水素を使いこなすための水素科学である「ハイドロジェノミクス」を提案・実践、国内外に発信した意義は大きい。特に、複数の水素機能の相乗効果としての「高次水素機能」の誘起により、従来の「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全体へ展開できることを実証した。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、本領域の成果に関連する国際レビュー論文の執筆を通じて、新たな学術分野としてのハイドロジェノミクスの国際的な認知度を短期間で高めた。

研究成果の概要（英文）：With the most important activity goal of "strong and mutual collaboration over the academic fields", we supported the followings; such as operation of many internal and international meetings/conferences, implementing the shared equipment, promotion of the international collaboration research using large-scale research facilities at overseas research centers, fostering young researchers, disseminating the research results domestically and internationally, and publishing newsletters and guidebooks related to efforts in this area. In addition, we established the Hydrogenomics Alliance, Japan, which will serve as a platform for the continuous maintenance and development of hydrogen science as "hydrogen-related science for making fully utilizing hydrogen".

研究分野：材料科学

キーワード：水素 ハイドロジェノミクス 高次水素機能 有機的連携 研究企画 戦略広報 若手育成 装置共用

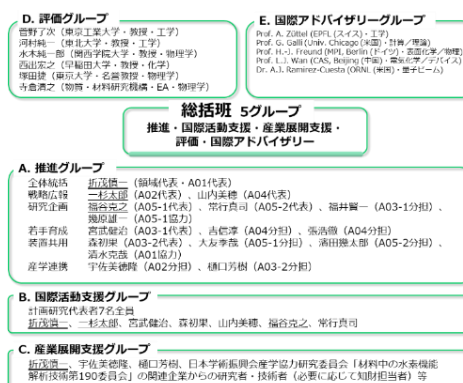
※科研費による研究は、研究者の自覚と責任において実施するものです。そのため、研究の実施や研究成果の公表等については、国の要請等に基づくものではなく、その研究成果に関する見解や責任は、研究者個人に帰属します。

1. 研究開始当初の背景

水素は、極めて広い濃度範囲で材料中に存在し、高い移動性や量子性、そして他の元素と多様な反応性を示す。この時、周囲の状況に応じて、原子状態や共有結合性・イオン性、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。これら水素固有の性質の一部は水素の有効な機能（＝水素機能）として実社会で活用されており、その社会的重要性から、工学・化学・物理学・生物学等の各学問分野において個別の水素機能を追求する研究が進められてきた。本領域は、領域全体の有機的連携により多彩な高次水素機能を誘起、革新的材料・デバイス・反応プロセスを創成するとともに、水素の性質を“使いこなす”ための新たな水素科学（＝ハイドロジェノミクス）を構築することである。

2. 研究の目的

領域全体の有機的連携により多彩な高次水素機能を誘起、革新的材料・デバイス・反応プロセスを創成するとともに、ハイドロジェノミクスを構築する。総括班では領域代表の総括のもと、推進・評価・国際アドバイザー・国際活動支援・産業展開支援の5グループで分担して、「学問分野の枠を超えた有機的連携」を最重要の活動目的として、公募研究者、若手研究者を含めた研究者全員が有機的に連携出来るよう研究活動を支援する（右図）。また、研究成果を国内外へ発信し、本領域研究の活動を広く普及することで、社会実装化に向けての活用が進み、水素科学の発展に繋げるよう運営することを目的とする。



3. 研究の方法

若手研究者支援や装置共用支援を含めた領域全体の戦略検討・進捗把握・研究成果の共有と発信、そのための全体会議および各種研究連携会議の運営等を進める：

- ・若手育成：若手研究者の国内外拠点派遣、共用装置利用促進、海外での研究成果発表支援、若手育成スクール（計9回、延べ350名の参加）の運営を支援する。
- ・装置共用：合成・解析技術を含めた基盤技術を共有するために、大型設備・大型計算機等に加えてラボレベルでの固有装置を実践的に活用しながら、装置共用に関する情報集約・発信を図る。
- ・研究企画：公募研究や博士研究員の採用等を調整する。また、ハイドロジェノミクス研究会の新設・運営、新たな連携課題・公募研究課題の探索、若手研究者のキャリアパス拡大等の観点から、研究動向・人材等を的確に把握する。
- ・戦略広報：領域ウェブサイトを含めて多様な情報媒体を駆使して研究成果を戦略的に発信する。ニュースレター（計14回、5,350部）を発行し情報を共有する。また、小中高生のための授業・公開実験、一般公開講座、シンポジウム参画等アウトリーチ活動全般も随時実施する。
- ・産学連携：共同研究推進、研究成果を社会実装に繋げる活動を進める。2022年度には本領域のスピンオフ研究会（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、さらに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の推進を目指している。

4. 研究成果

世界に先駆けたハイドロジェノミクス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：

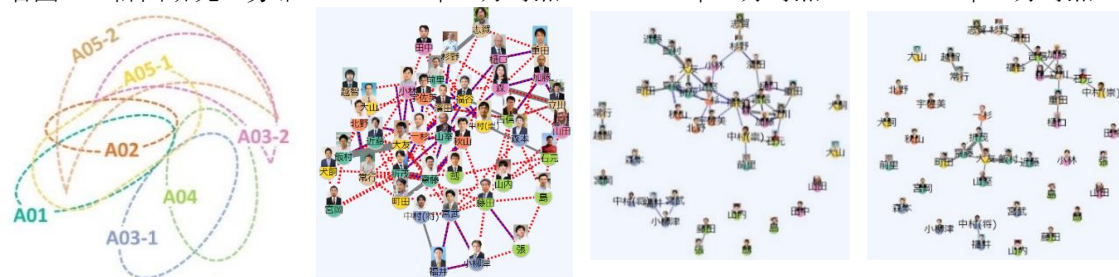
- ・水素化物超伝導・超イオン伝導材料等の超機能材料の合成
- ・水素化物エレクトロニクスデバイスの原理実証や太陽電池・高強度鋼の特性強化
- ・水素を用いた次世代創蓄電デバイスおよび水素－電子カップリングやヒドリド超イオン伝導材料を利用した新発想デバイスの設計
- ・水素を効果的に有用物質に変換する新規反応プロセスの創出
- ・水素データ同化技術等の数理科学による水素機能の発現機構の解明や解析・予測技術の高精度化

これらの成果により、例えば利便性および資源性が格段に優れた新たな燃料電池・蓄電デバイス、アンモニアやアミノ酸等の有用物質の高効率で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。

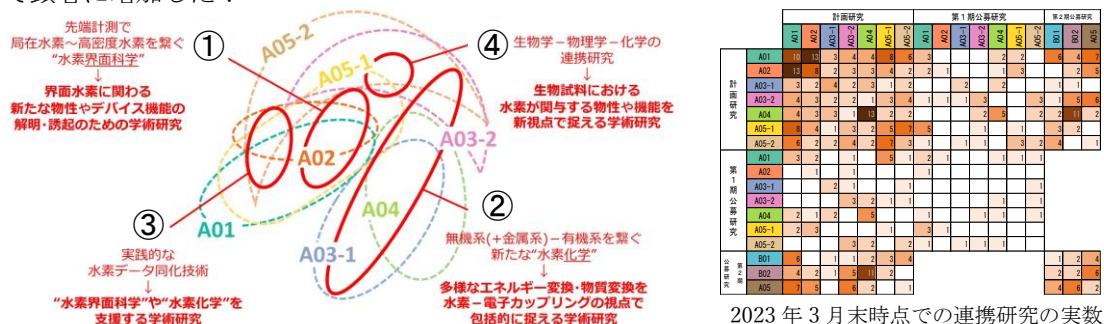
さらに、連携研究・装置共有等を含む領域活動の情報を総合的に集約して、次ページのように分析、それに基づくニュースレターおよび解説書の発行等を通じて広く領域内外に周知したことで若手研究者の多面的な支援等に繋がったことは、総括班としての大きな成果と言える。

(1) 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 *2020年3月時点 ← 2019年3月時点 ← 2018年8月時点



(2) これにより、以下の新たな学術領域の萌芽が認められた。連携研究数も各計画研究において顕著に増加した：



・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）の間でも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繋がった。

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 NaBH_4 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.

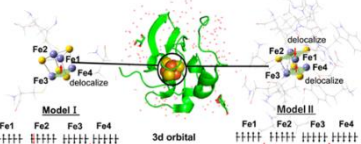
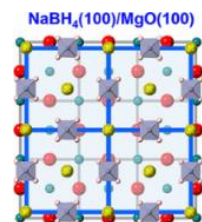
②水素－電子カップリングに関する A03-2/A03-1/A04/A05-2/公募を含む領域全体での連携体制
例：分子回転によるプロトン伝導促進、超プロトン伝導化

“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.

③水素データ同化等の計算科学・数理学に関する A05-2/A05-1 を含む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。

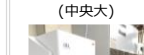
④水素が関与する生物試料における物性等の A03-2/A05-2/公募が主導する連携体制
例：水素結合によるタンパク質中の鉄硫黄クラスターの活性化機構解明

“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。



(3) 領域メンバー専用ウェブサイトにて設備等の多くを共用装置として整備・管理、ノウハウを含めて情報共有し易い環境を提供した。若手研究者が主体となって運用し、期間前半に次ページの表のような数々の連携研究を展開、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も効果的に運用できた：

A05-1

光学・光化学 計測装置 (東大物性研)  各種水素化合物の原子・電子構造解析のための熱膨張係数の精密計測等に使用。 A01、A03-1、A04、A05-1、A05-2との連携研究が進行。	金属・無機系薄膜 作製装置 (東京大物質理工)  金属水素化合物および錯体水素化合物の成膜試料の合成等々に使用。 A01、A03-1、A03-2、A05-1との連携研究が進行。	高分子・有機系薄膜 作製装置 (山梨大FCセンター)  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。	水素化合物対応 飛行時間型質量分析 装置 (東大物性研)  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、A05-2との連携研究が進行。	水素化合物対応 高精度ガス/ 蒸気吸着測定装置 (中央大)  各種水素化合物の熱的安定や微細構造解析等々に使用。 A03-1、A03-2との連携研究が進行。	水素化過程核反応 計測装置 (東大生研)  材料内部やヘテロ界面での水素分布および精密定量等々に使用。 A01、A02、A03-1、A05-2との連携研究が進行。	水素化過程中性子 全散乱計測装置 (東大生研、KEK)  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合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。
--	---	--	---	--	--	--

・上記以外で、特に期間後半での領域全体の連携の加速に繋がった代表的な設備・装置の活用状況を記載する：

- ① 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および新たな水素化物超伝導材料の合成等の成果に至った。

例：“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.

- ②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。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 NaAlH_4 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。

例：“Generating mechanism of catalytic effect for hydrogen absorption/desorption reactions in $\text{NaAlH}_4\text{-TiCl}_3$ ”, K. Ikeda et al., Appl. Sci., 11(18), 8349(1-16), 2021.

- ③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および空間・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しており、産業界からも高く評価されている。

例: “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.

- ④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：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 TiO_2 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。

例：“Absence of midgap states due to excess electrons donated by adsorbed hydrogen on the anatase TiO_2 (101) surfaces”, N. Nagatsuka et al., Phys. Rev. B, 105(4), 045424(1-6), 2022.

(4) 水素科学が、エネルギー・GX 分野全体に渡って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きわめて大きい (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」および「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することで、その波及効果の大きさを定量化した。さらに4件の国際レビュー論文の執筆等を通じて、新たな学術分野としてのHydrogenomicsの認知度（下記の*を参考下さい）を短期間で高めた。

例“Hydrogenomics: Efficient and selective hydrogenation of stable molecules utilizing three aspects of hydrogen”, K. Fukutani, J. Yoshinobu, M. Yamauchi, T. Shima, S. Orimo, Catal. Lett., 152, 1583-1597, 2022.

*例えば、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。

（5）本領域の持続的発展のための若手研究者支援

研究遂行の主軸としての本領域に関わる延べ 282 名の若手研究者や学生（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展開、多くの若手研究者のプロモーションに繋がった：

- 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。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を含めた企画・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（右図）。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

前述の通り、設備等の多くを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、若手研究者へ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繋がった。これらの結果、国内外の学協会・財団等からの若手研究者に対する受賞数は 108 件にのぼる。

（6）研究期間後半の代表的なアウトリーチ活動として、書籍を出版した。本領域の意義や研究の視点、さらに研究成果を俯瞰した日本語解説書（2022 年 1 月、下図、共立出版）。さらに、その後の研究進展を含めて内容を充実したうえで英語版解説書（2023 年 3 月、電子書籍版）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。さらに、国際ネットワーク強化等のための国際会議を 2 回開催、ニュースレターを発刊し、国内外へ研究成果を高インパクトかつタイムリーに情報発信した。

ハイドロジェノミクス
水素を使いこなすためのサイエンス
折茂慎一・福谷克之・藤田健一 編著
共立出版

Hydrogenomics:
The science of fully utilizing HYDROGEN
Shin-ichi Orimo, Katsuyuki Fukutani, Ken-ichi Fujita

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 文器	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 恭之	福岡 貴
宇佐美 徳隆	島 隆則	福谷 克之
小柳 津樹	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 浩徹	山田 鉄兵
金 相命	常行 真司	吉信 淳
後藤 和泰		

ハイドロジェノミクスの視点

変幻自在な水素を“使いこなす”ために

世界規模でのエネルギー・環境問題がクローズアップされるなか、わが国においても温室効果ガス排出量を 2050 年までに実質ゼロとする目標が掲げられており、今後、水素の有効活用に向けた技術開発の推進やそれを支える水素に関連する基礎科学の探究および学理の構築が、一層重要になると考えられる。

水素には、もちろん二次エネルギーとしての側面があるが、それに加えて私たちの暮らしに欠かせない多様な物質・材料の合成および改質や高性能化などの役割もある。後者に限っては、たとえば鉄鋼材料での水素脆性などは抑制すべき長年の技術課題である一方、最近注目される有用有機物質と水素の同時合成反応や次世代蓄電デバイスでの新たな水素化合物の利用、また室温にも迫る水素化物超伝導の探索など、数多くの萌芽研究も進んでいる。さらに、物質・材料中や反応過程での水素の挙動を精密に捉えるための中性子や放射光などを用いた量子ビーム計測や計算科学などにおいて目覚ましい進展もみられる。

5. 主な発表論文等

〔雑誌論文〕 計0件

〔学会発表〕 計0件

〔図書〕 計2件

1. 著者名 折茂 慎一・福谷 克之・藤田 健一 編著	4. 発行年 2022年
2. 出版社 共立出版株式会社	5. 総ページ数 224
3. 書名 “水素”を使いこなすためのサイエンス ハイドロジェノミクス	

1. 著者名 Shin-ichi ORIMO, Katsuyuki FUKUTANI, Ken-ichi FUJITA	4. 発行年 2023年
2. 出版社 Kyoritsu Shuppan Co., Ltd.	5. 総ページ数 304
3. 書名 Hydrogenomics: The Science of Fully Utilizing Hydrogen (電子書籍版)	

〔産業財産権〕

〔その他〕

新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」 https://www.hydrogenomics.jp/ 東北大学 折茂研究室 http://www.hydrogen.imr.tohoku.ac.jp/ 日本MRS水素科学技術連携研究会 https://hydrogenomics-alliance.jp/
--

6. 研究組織

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	一杉 太郎 (HITOSUGI Taro) (90372416)	東京工業大学・物質理工学院・特任教授 (12608)	戦略広報、国際活動支援

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 分担者	福谷 克之 (FUKUTANI Katsuyuki) (10228900)	東京大学・生産技術研究所・教授 (12601)	研究企画、国際活動支援

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究 協力者	宮武 健治 (MIYATAKE Kenji)		若手育成、国際活動支援
研究 協力者	森 初果 (MORI Hatsumi)		装置共用、国際活動支援
研究 協力者	山内 美穂 (YAMAUCHI Miho)		戦略広報、国際活動支援
研究 協力者	常行 真司 (TSUNEYUKI Shinji)		研究企画、国際活動支援
研究 協力者	宇佐美 徳隆 (USAMI Noritaka)		産学連携
研究 協力者	福井 賢一 (FUKUI Ken-ichi)		研究企画

6. 研究組織（つづき）

	氏名 (ローマ字氏名) (研究者番号)	所属研究機関・部局・職 (機関番号)	備考
研究協力者	樋口 芳樹 (HIGUCHI Yoshiki)		産学連携
研究協力者	吉信 淳 (YOSHINOBU Jun)		若手育成
研究協力者	張 浩徹 (CHANG Ho-Chol)		若手育成
研究協力者	大友 季哉 (OTOMO Toshiya)		装置共用
研究協力者	濱田 幾太郎 (HAMADA Ikutaro)		装置共用
研究協力者	清水 克哉 (SHIMIZU Katsuya)		装置共用
研究協力者	幾原 雄一 (IKUHARA Yuichi)		研究企画

7. 科研費を使用して開催した国際研究集会

〔国際研究集会〕 計2件

国際研究集会 1st International Symposium “Hydrogenomics” Combined with 14th International Symposium Hydrogen & Energy	開催年 2020年～2020年
--	--------------------

国際研究集会 2nd International Symposium "Hydrogenomics"	開催年 2022年～2022年
---	--------------------

8. 本研究に関連して実施した国際共同研究の実施状況

共同研究相手国	相手方研究機関			
スイス	EPFL			
米国	Univ. Chicago	Oak Ridge National Laboratory		
ドイツ	Max Planck Institute, Berlin			
中国	Chinese Academy of Science, Beijing			