

## ハイドロジェノミクスの視点

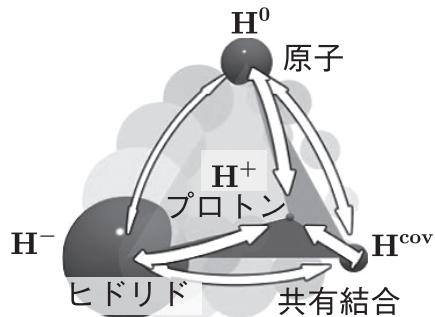
### 変幻自在な水素を“使いこなす”ために

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、一層重要になるとを考えられる。

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。後者に関しては、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創蓄電デバイスでの新たな水素化物の利用、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。

そもそも、水素は、最も変幻自在な元素といえる。すなわち、ppb（十億分の1）から%（100分の1）あるいはそれ以上にも至る実に1千万倍以上の極めて広い濃度範囲で材料中に存在し、周囲の環境に応じて、原子に近い状態 $H^0$ 、共有結合性 $H^{COV}$ 、イオン性（しかもプロトン $H^+$ とヒドリド $H^-$ の両極性）、そしてそれらの中間状態にもなり、さらには各状態で水素自体の大きさも劇的に変化する。

これらの結合多様性を含めた水素固有の性質は、材料中の水素の高密度化（たくさん“詰まる”性質）や界面局在（しっかり“留まる”性質）、高速移動（すばやく“動く”性質）や高活性化（いろいろ“変わる”性質）などの様々な“水素機能”として、これまでに知られていた。これに対して、上



水素の結合多様性とそれぞれの水素の大きさの変化。

出典 : Takagi, S., Orimo, S. (2015). Recent progress in hydrogen-rich materials from the perspective of bonding flexibility of hydrogen, *Scripta Materialia*. **109**, pp. 1–5.

述の数多くの萌芽研究の本質は、複数の水素機能の関与、すなわ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”にあると考えている。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。

しかしながら、水素に関する基礎科学（以下、水素科学）は、工学・化学・物理学・生物学など、極めて広範な学問分野にわたるため、最先端動向の共有や連携研究の促進のための場は必ずしも十分に整備されていないのが現状といえる。

このような背景もふまえて、文部科学省・科学研究費助成事業・新学術領域研究「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」が設置された（2018～2022年度）。この枠組みにより、工学・化学・物理学・生物学など幅広い学問分野の研究者が連携して変幻自在な水素がもつ多様な物性・機能性に関わる連携研究を進めることで、水素を高度に“使いこなす”ためのサイエンス、すなわちハイドロジェノミクス（hydrogen（水素）-omics（学術体系））の構築を目指す研究が進められてきた。これほど広い学問分野をまたぐ組織的な水素科学の連携研究の実践は、世界でも類を見ない、初めての挑戦といえる。

本書では、この新学術領域研究の活動状況を広く共有するとともに、今後の多様な高次水素機能の顕在化、さらには上記のハイドロジェノミクスの構

築に向けた指針を得るための解説書として、以下の内容をまとめている。

第1章「物質中の水素の多彩な性質」では、材料中の高密度水素に加えて、電子機能・力学特性等の強化のために重要な微量の界面局在水素、また短・長距離にわたる移動現象や電子とのカップリングに関わる高速・局所移動水素、そして新発想デバイスや新規物質変換プロセスのための表面での高活性水素について概説する。

これらの性質に基づいて水素を“使いこなす”ためには、材料中で検出しつくい水素をこれまで以上に高精度に解析・予測する研究も不可欠である。第2章「材料中の水素の精緻な計測・計算」で、新たな手法を駆使した水素先端計測、そして見えない水素を「見る」ための水素先端計算について、それぞれ紹介する。

さらに、これらの基礎的な視点をふまえた広い学問分野をまたぐ組織的な新学術領域研究「ハイドロジェノミクス」の活動状況として、その成果の一端を第3～5章「水素を“使いこなす”ことで」で紹介する。第3章「新規材料を合成する」では、最新の高圧合成・成膜合成技術について説明した後に、ヒドリド伝導材料やホウ化水素シートなどについて紹介する。第4章「新発想デバイスを設計する」では、水素化物系全固体電池、水素ドープ太陽電池、リチャージャブル燃料電池、プロトン共役熱化学電池などの水素・水素化物に関連する新発想デバイスについて紹介する。さらに第5章「新反応プロセス・可視化技術を提供する」では、アミノ酸やアンモニアの新たな合成技術や金属錯体を用いた新たな水素可視化技術について紹介する。

最後に「これからの展開」において、第3～5章の実例もふまえて、高次水素機能の顕在化に向けた指針などについて一考したい。