

二国間交流事業 共同研究報告書

令和4年3月1日

独立行政法人日本学術振興会理事長 殿

[日本側代表者所属機関・部局]
山口大学・大学院創成科学研究科
[職・氏名]
助教・片山 祐
[課題番号]
JPJSBP 120209925

1. 事業名 相手国: 米国 (振興会対応機関: OP) との共同研究

2. 研究課題名

(和文) オペランド分光法と理論計算の協奏による触媒表面設計指針の構築

(英文) Atomic Level Understanding of the Electrochemical Interfaces: Coupled Operando

Spectroscopy and Theoretical Study

3. 共同研究実施期間 令和2年4月1日 ~ 令和4年2月28日 (1 年 11 ヶ月)

4. 相手国側代表者(所属機関名・職名・氏名【全て英文】)

Massachusetts Institute of Technology・W.M. Keck Professor of Energy・
Shao-Horn, Yang

5. 委託費総額(返還額を除く)

本事業により執行した委託費総額		3,800,000 円
内訳	1年度目執行経費	1,900,000 円
	2年度目執行経費	1,900,000 円
	3年度目執行経費	円

6. 共同研究実施期間を通じた参加者数(代表者を含む)

日本側参加者等	16 名
相手国側参加者等	7 名

* 参加者リスト(様式 B1(1))に表示される合計数を転記してください(途中で不参加となった方も含め、全ての期間で参加した通算の参加者数となります)。

7. 派遣・受入実績

	派遣		受入
	相手国	第三国	
1年度目	0	0	0(0)
2年度目	0	0	0(0)
3年度目			()

* 派遣・受入実績(様式 B1(3))に表示される合計数を転記してください。

派遣:委託費を使用した日本側参加者等の相手国及び相手国以外への渡航実績(延べ人数)。
受入:相手国側参加者等の来日実績(延べ人数)。カッコ内は委託費で滞在費等を負担した内数。

8. 研究交流の概要・成果等

(1)研究交流概要(全期間を通じた研究交流の目的・実施状況)

本研究に関連する研究交流を足がかりにし、本研究にとどまらない、若手研究者を主体とする長期的な国際共同研究の基盤を築くことを最終的な目標に設定した。当初計画では、研究代表者や研究グループに所属する博士後期課程学生をはじめとする日本側若手研究者をマサチューセッツ工科大学へと派遣し、現地にて海外研究者と密に交流する予定であった。しかしながら、全研究期間にわたり新型コロナウイルス感染症の影響を多大にうけ、現地への研究者の派遣は困難であった。そこで、オンライン会議のインフラを整備することにより、対面に近い感覚で、海外研究者と交流することで代替を試みた。交流は2週間に1回程度の頻度で実施し、研究内容の報告に加え、ディスカッションや特には互いの近況報告を兼ねることで、研究内容だけでなく、研究文化の違い、研究室カルチャーの違いを実感できるように配慮した。これにより、国内で得られない知見の獲得と海外研究者とのネットワークの構築ができたと考えている。実際に、新たに二次電池関連のテーマで共同研究を実施する予定にしており、本研究を足がかりとした国際共同研究関係の構築に成功した。

(2)学術的価値(本研究交流により得られた新たな知見や概念の展開等、学術的成果)

次世代のエネルギーキャリアとして注目されている水素を「つくる」時、「つかう」時の反応である水素発生反応(HER)と水素酸化反応(HOR)の鍵となる反応ステップである、電子とプロトン(H⁺)の移動が協奏的に起こる、プロトン共役電子移動(Proton-coupled electron transfer, PCET)へカチオン種とpHが与える影響を電気化学測定・オペランド表面増強赤外分光法・MDシミュレーションを組み合わせることで解明した(Botao Huang et al, Journal of the American Chemical Society Au 2021, 1, 10, 1674-1687.)。それ以外にも金表面でのCO還元反応の電気化学反応メカニズムをオペランド表面増強赤外分光法・第一原理計算により解明した例(Sudarshan Vijay et al., J. Phys. Chem. C 2021, 125, 32, 17684-17689.)や、RuO₂上での酸素発生反応についての全く新しいメカニズムの確立(Reshma Rao et al., J. Phys. Chem. C 2021, 125, 15, 8195-8207 (2021)、Nature Catalysis, 3, 516-525 (2020).)これらの研究成果は、これまで未解明だった電解質のpH、さらにはこれまでほとんど考慮されてこなかった電解質のカチオン種が界面で進行する電気化学的反応のメカニズムに大きく影響を与えること、さらにその挙動が電極近くの水分子ネットワークに基づいて理解できることを初めて明らかにするものである。今回得られた知見は、既存の反応メカニズムの解釈を拡張するものであり、様々な(電極)触媒材料開発のブレークスルーとなることが期待される。

(3)相手国との交流(両国の研究者が協力して学術交流することによって得られた成果)

研究期間を通して、共同研究先との国際共著論文を合計9報出版することができた。そのうち3報(Energy Environ. Sci., 2020,13, 183-199、Nature Catalysis 2020, 3, 516-525、JACS Au 2021, 1, 10, 1674-1687.)は高インパクトファクター雑誌であり、研究成果のインパクト、波及効果も大きい。これらの研究を完成させる上で、日本側のオペランド解析技術と、共同研究機関の理論計算手法の協奏は必要不可欠であり、両国の研究者が協力して学術交流することによって初めて得られた成果であったと言える。

(4)社会的貢献(社会の基盤となる文化の継承と発展、社会生活の質の改善、現代的諸問題の克服と解決に資する等の社会的貢献はどのようにあったか)

現時点での成果がすぐに社会実装につながるわけではないが、本研究にて創出した触媒設計指針は、次世代のエネルギーキャリアとして導入が進められている水素のクリーン製造技術、水素を使った高効率発電デバイス

である燃料電池の高効率化、リチウムイオン二次電池の高性能化と高耐久化など、将来的な省エネルギー化に大きく寄与するものである。現在、本研究成果により開発した触媒を実装したデバイスのプロトタイプを開発中であり、社会実装に向けた取り組みを始めたところである。

(5)若手研究者養成への貢献(若手研究者養成への取組、成果)

今後の日本の研究力を支えることになる JSPS 特別研究員ならびに博士後期課程学生(進学予定の学生も含む)を海外共同研究機関とのオンラインミーティングに主体的に参加させることにより、国内では体験することができない海外での研究者同士のディスカッションを経験させることができた。また、研究者志望の修士課程学生についても、国際学会での発表を足がかりとした国際研究交流の機会を与えた。具体的には、2020 年 10 月に開催されたアメリカでの電気化学大会(PriME2020)にて、博士後期課程学生(進学予定の学生も含む)が自身の研究成果を発表した。これらの取り組みにより、日本国内にとどまらない研究者ネットワークの構築と、世界トップクラスの研究グループでの研究に対する取り組み、考え方など、将来の若手研究者に必要な経験を積ませることができた。

(6)将来発展可能性(本事業を実施したことにより、今後どのような発展の可能性が認められるか)

本研究により、日本側のオペランド解析技術と、共同研究機関の理論計算手法の親和性はますます高くなった。また、昨今の省エネルギー化への取り組み、環境負荷低減の必要性から、触媒材料分野の重要性も大きくなっている。これらを踏まえて、本研究の共同研究機関である米国マサチューセッツ工科大学に加えて、英国インペリアルカレッジロンドンの研究者とともに、電気化学触媒開発の研究を共同で進めることになった。これらの新たな共同研究では研究ターゲットをさらに広げ、二酸化炭素還元反応や電解アンモニア合成など、次世代の電気化学反応についての検討を進める。これにより、真の意味でのカーボンニュートラル、究極的な環境負荷の低減を実現する、革新的な触媒の開発につなげる。

(7)その他(上記(2)～(6)以外に得られた成果があれば記載してください)

- ・ 国際共著論文のうち、一報は雑誌の本表紙にハイライトされた(J. Phys. Chem. C 2021, 125, 48, 26321-26331)。
- ・ 国際共著論文のうち、一報は MIT News にてハイライトされ、研究が MIT ウェブサイトに紹介された。
(https://news.mit.edu/2020/how-ruthenium-dioxide-splits-water-0521#.XsdEImb_54M.mailto)