

令和3(2021)年度 研究拠点形成事業(A. 先端拠点形成型) 中間評価資料(進捗状況報告書)

1. 概要

研究交流課題名 (和文)	先進エネルギー材料を指向したポリオキソメタレート科学国際研究拠点		
日本側拠点機関名	広島大学		
コーディネーター 所属部局・職名・氏名	大学院先進理工系科学研究科・教授・定金 正洋		
相手国側	国名	拠点機関名	コーディネーター所属部局・職名・氏名
	英国	ニューキャッスル大学	Chemistry, School of Natural and Environmental Science・Reader・John Errington
	フランス	エコール・セントラル・ドゥ・リール	Unit of Catalysis and Solid State Chemistry・Professor・Sébastien Paul
	ドイツ	ウルム大学	Institute of Inorganic Chemistry I・Professor・Carsten Streb
中国	東北師範大学	Faculty of Chemistry, Key Laboratory of Polyoxometalate Science of Ministry of Education・Professor・Yang-Guang Li	

2. 研究交流目標

申請時に計画した目標と現時点における達成度について記入してください。

※新型コロナウイルス感染症拡大の影響により、申請時に予定していた共同研究の実施、セミナーの開催及び研究者交流等が困難又は延期せざるを得なかった場合、当初目的の達成に向け代替的に行った取組があれば、その成果も含めて記入してください。

○申請時の研究交流目標

ポリオキソメタレート(Polyoxometalate)と呼ばれるタングステン(W)、モリブデン(Mo)、バナジウム(V)及びニオブ(Nb)といった前周期遷移金属を中心とする酸化物分子を用いた研究が世界的規模で活発に進められている。この Polyoxometalate は、数多くの電子の授受が可能(酸化還元能)と強い酸性質を持つ上に、その構造を構成元素及び合成条件によって様々に変化させることができる。すなわち、酸化還元能及び酸性質を精密設計できる材料であり、電子移動と酸性質が肝となる電池電極材料、触媒(天然ガスに含まれる低級アルカンやバイオマス資源の有効利用のための触媒)、人口光合成材料、水素貯蔵材料へといった現在のエネルギー問題を解決できる材料として最も重要なものの1つである。ますます緊急性を増すエネルギー問題を、スピーディーに解決することを目標に、日本-イギリス-フランス-ドイツ-中国の Polyoxometalate 研究者が集まり応用研究も視野に入れた基礎科学を推進するための研究拠点を形成する。これまで個別に共同研究を進めていた日・英・仏・独・中のそれぞれのグループが得意とする理論・材料創製・分析・物性・応用の知見を結集し、各研究グループによるシナジー効果が発揮される研究体制を整え、以下の目標を達成する。1) 電池電極材料・触媒・人口光合成材料・水素製造・貯蔵といった応用に適した、Polyoxometalate の新しい材料設計法に関する基礎学理を確立する。2) 電池電極材料・触媒・人口光合成材料・水素製造・貯蔵材料といったエネルギー材料として、現在の材料を凌駕する高性能 polyoxometalate 材料を見出す。3) 国内外問わずに活躍する若手研究者及びエンジニアを育成し、将来に渡る国際ネットワーク形成の基盤を整える。

○目標に対する達成度とその理由

上記目標に対する2カ年分の計画について

※延長対象課題の令和2年度事業については、延長期間終了日までの状況を踏まえること。

■十分に達成された

□概ね達成された

□ある程度達成された

□ほとんど達成されなかった

【理由】

まず、研究拠点の開始初年度の7月に広島においてキックオフミーティングを行い総勢61名（日本38名、イギリス14名、フランス5名、中国3名、ドイツ1名）が集まり研究内容を口頭発表（日本17名、イギリス7名、フランス1名、中国2名、ドイツ1名）を行い今後の国際共同研究のためお互いの研究内容を紹介した。これまでの2年間のうち、コロナの影響で令和2年度はまったく移動が出来なかったにもかかわらず、36名の日本人を共同研究、学会発表に派遣し、23名の海外研究者を受け入れた。

目標1 「電池電極材料・触媒・人口光合成材料・水素製造・貯蔵といった応用に適した、Polyoxometalate の新しい材料設計法に関する基礎学理を確立する」に関する成果。

1-1) 研究拠点内のメンバーが Polyoxometalate の新しい材料設計法に関する基礎学理研究を行い、これまでに37件以上のSCI論文を発表。

1-2) イギリス-日本の研究拠点の国際共同研究において Polyoxometalate の新しい材料設計法に関する学理研究成果を2つのSCI論文(*ACS Appl. Mater. Inter.* **2021**, *13*, 19138-19147. 及び *Z. anorg. allgem. Chem.* **2021**, 印刷中 DOI:10.1002/zaac.202100075.)として発表。そのうち *ACS Appl. Mater. Inter.* **2021**, *13*, 19138-19147.は ACS Editors' choice として選出された。また、広島大学-東京大学-ニューキャッスル大学でプレスリリースを行った。

目標2 「電池電極材料・触媒・人口光合成材料・水素製造・貯蔵材料といったエネルギー材料として、現在の材料を凌駕する高性能 polyoxometalate 材料を見出す」に関する成果。

2-1) 研究拠点内のメンバーが Polyoxometalate の電池電極材料・触媒・人口光合成材料・水素製造・貯蔵材料としての応用研究を行いこれまでに37件以上のSCI論文を発表した。

2-2) イギリス-日本の研究拠点の国際共同研究において Polyoxometalate を用いた電池電極材料（プロトン伝導材料）に応用する成果を1つ、SCI論文(*ACS Appl. Mater. Inter.* **2021**, *13*, 19138-19147.)として発表した。この論文は ACS Editors' choice として選出された。また、広島大学-東京大学-ニューキャッスル大学でプレスリリースを行った。

目標3 「国内外問わずに活躍する若手研究者及びエンジニアを育成し、将来に渡る国際ネットワーク形成の基盤を整える」に関する成果。

3-1) 7月のキックオフミーティングの次の日に若手研究セミナーを開催。参加人数は61名（日本38名、イギリス14名、フランス5名、中国3名、ドイツ1名）で大学院生、ポスドク及び30代若手研究者24名（日本13名、イギリス7名、フランス1名、中国2名、ドイ

ツ1名)が口頭発表し議論した。

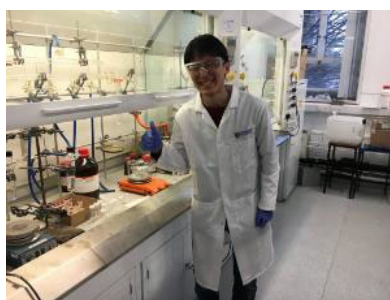


広島国際会議場で2019年7月16日に行ったYoung Researcher Sinar 集合写真

3-2) 2名の広島大学の修士課程の学生を海外研究拠点に2ヶ月研究留学に派遣。

1名はイギリス研究拠点のニューキャッスル大学に派遣。この学生の研究成果は2つのSCI論文(*ACS Appl. Mater. Inter.* **2021**, *13*, 19138-19147. 及び *Z. anorg. allgem. Chem.* **2021**, 印刷中 DOI:10.1002/zaac.202100075.)を発表したこと。そのうち *ACS Appl. Mater. Inter.* **2021**, *13*, 19138-19147. は ACS Editors' choice として選出された。また、広島大学 - 東京大学 - ニューキャッスル大学でプレスリリースを行った。

1名をフランス研究拠点のエコール・セントラル・ドゥ・リールに派遣した。



ニューキャッスル大学での実験風景

3-3) 1名の広島大学の修士課程の学生をイギリス研究拠点のサマースクールに派遣した。

3-4) 2名の海外研究拠点の博士課程の学生が日本の研究拠点に派遣され研究を行った。

フランス研究拠点の学生1名を広島大学で引き受け共同研究を行った。

ドイツ研究拠点の学生1名を金沢大学で引き受け共同研究を行った。

3-5) 30代若手研究者が企画運営するセミナーを2件開催。

金沢大学と日本大学の若手研究者が企画運営するセミナーを開催。

東京大学の若手研究者が企画運営するセミナーを開催。

3-6) 大学院生、ポスドク、若手研究者が国内外の学会で発表した。

3. これまでの研究交流活動の進捗状況

※新型コロナウイルス感染症拡大の影響により、申請時に予定していた共同研究の実施、セミナーの開催及び研究者交流等が困難又は延期せざるを得なかった場合、代替的に行った取組があれば、その内容及び成果も含めて記入してください。

(1)これまでの研究交流活動(延長対象課題の令和2年度事業は延長期間終了日まで)について、

「共同研究」、「セミナー」及び「研究者交流」の交流の形態ごとに、派遣及び受入の概要を記入してください。

※各年度における派遣及び受入実績については、「中間評価資料(経費関係調書)」に記入してください。

○共同研究

バイオマス有効利用触媒の開発

【概要】

日・英・仏・独・中の研究拠点で合成する様々なポリオキシメタレートをフランス研究拠点 (Ecole Centrale de Lille) でバイオマス有効利用触媒活性を検討する共同研究を行っている。

【これまでの研究交流活動】

2019年度は、フランス、エコール・セントラル・ドゥ・リールの博士の学生を2ヶ月間広島大学に受け入れて共同研究を行った。また、広島大学の修士の学生を1名フランス、エコール・セントラル・ドゥ・リールに2ヶ月間派遣し共同研究を行った。2020年度はコロナの影響で人の交流は行えなかった。その代わりに、日本研究拠点のサンプルをフランス研究拠点に送って、触媒活性の検討を行っている。フランス研究拠点は、コロナによるロックダウンの影響で実験は遅れている。

高性能質量分析装置共同利用

【概要】

日・英・仏・独・中を含む世界中の研究拠点で合成する様々なポリオキシメタレートを広島大学が有する高分解能質量分析装置を用いた共同研究を行っている。

【これまでの研究交流活動】

2019年度は、日本国内拠点及びインド（本研究拠点外）からのサンプル依頼のみで海外研究拠点との共同研究はなかった。2020年度は、イギリスのニューキャッスル大学の単結晶構造解析装置で得られた構造（この化合物をテーマとしている日本人修士学生をイギリスに2019年10月上旬から11月末まで研究留学させて行った）の確認をこの分析装置を用いて行った。この成果は、国際共著論文として2つのSCI論文(*ACS Appl. Mater. Inter.* **2021**, *13*, 19138-19147.及び *Z. anorg. allgem. Chem.* **2021**, 印刷中 DOI:10.1002/zaac.202100075.) を発表した。これに加えて、拠点内外、日本国内外のポリオキシメタレート化合物の分析を行っている。

単結晶構造解析

【概要】

日・英・仏・独・中の研究拠点で合成する様々なポリオキシメタレートを日本の放射光施設 SPring8 と KEK、および韓国の放射光 PAL を用いた共同研究を行っている。

【これまでの研究交流活動】

2020年度から本格的に放射光施設を利用した共同研究を始めた。2019年10月15日から16日にかけて SPring8 において測定を行った。コロナの影響もあり、海外からの渡航者はいなかった。イギリスのニューキャッスル大学と共同で作成した結晶（この化合物をテーマとしている日本人修士学生をイギリスに2019年10月上旬から11月末まで研究留学させて行った）の単結晶構造解析を行った。この成果は、国際共著論文として1つのSCI論文(*Z. anorg. allgem. Chem.* **2021**, 印刷中 DOI:10.1002/zaac.202100075.) を発表した。これに加えて、拠点内の結晶の構造解析を行った。



Spring8 での実験風景

ポリオキソバナデートの含有金属種・アニオン種による酸化反応性の制御

【概要】

ポリオキソメタレートの中でも特異な酸化還元特性を示すポリオキソバナデートを用いて優れた酸化触媒を開発する共同研究を行った。

【これまでの研究交流活動】

2019年度はドイツ研究拠点の博士課程の学生を日本研究拠点の金沢大学に2ヶ月間受入れ共同研究を行った。2020年度は、コロナの影響で人の交流は行えなかった。本件共同研究は2020年度で終了。

ポリオキソメタレートを基盤としたプロトン伝導体の創生

【概要】

各国の研究グループが得意とするポリオキソメタレートと、結晶化のための適切な対カチオンやポリマーを組み合わせ、実用材料を超える機能性と環境への優しさを両立させたプロトン伝導体（固体電解質）を合成する。

【これまでの研究交流活動】

本研究に携わる広島大学の日本人修士学生を2019年度（2019年10月上旬から11月末まで）にイギリス研究拠点に研究留学させて結晶構造解析を用いた解析を行ったサンプルのプロトン伝導性を東大で測定した。更に、高分子との複合化によりより高い性能を示す材料を得ることが出来た。この材料の分析の1つを研究拠点メンバーの金沢大学で行った。研究成果は、国際共著論文として1つのSCI論文(*ACS Appl. Mater. Inter.* **2021**, *13*, 19138-19147.) を発表した。その他、日本国内外の研究拠点からのサンプルを東大や中国研究拠点で伝導性（今年度は、コロナの影響で人材交流はできず、サンプルを送っての測定を行っている）を測定するという共同研究が進んでいる。

○セミナー

	令和元年 (平成31年)度	令和2年度 (全てオンライン開催)
国内開催	3回	1回
海外開催	0回	3回
合計	3回	4回

【概要】

2019年度（令和元年度）

日本学術振興会研究拠点形成事業

・「キックオフミーティング」

参加人数68名 日本（46名）イギリス（14名）フランス（5名）中国（3名）ドイツ（1名）。研究拠点の各国から研究者が広島に集まってキックオフミーティングを行った。各研究者がそれぞれの研究内容を口頭発表（日本17名、イギリス7名、フランス4名、中国2名、ドイツ1名）し、今後の共同研究のためお互いの研究内容を紹介しあった。皆がどのような研究を行っているかを知り合え、国際共同研究ネットワークの形成に有意義であったと好評であった。発表会には若手研究者も同席し、質問し議論した、就職活動も行い若手研究者の育成のための場としても有意義な会であった。

・「若手研究者セミナー」

参加人数61名、日本（38名）イギリス（14名）フランス（5名）中国（3名）ドイツ（1名）。大学院生、ポスドク研究員、30代若手研究員（日本13名、イギリス7名、フランス1名、中国2名、ドイツ1名）が自分の研究内容とその成果を口頭で発表し、議論した。4か国の若手研究者の口頭発表会はメンバーにとって有意義であったと好評であった。若手研究者の研究発表会を開催したことで、相手国とのネットワークも広がった。この交流を通して、日本側若手研究者（学生）2名は、イギリス及びフランスの参加者と議論し、研究留学（2か月）の研究テーマについて相談し、学生の研究留学のためにも有用であった。

日本結晶学会 令和元年度年会

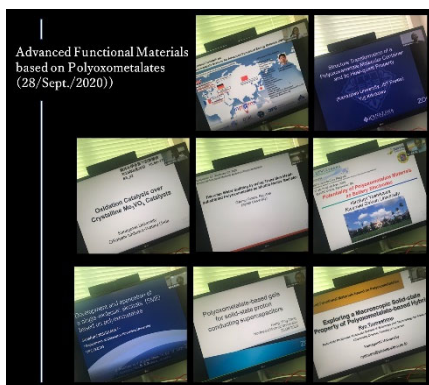
・JSPS Core-to-Core「ポリオキソメタレート科学国際研究拠点」との連携「若手研究者セミナー」

参加人数9名、日本（8名）、ドイツ（1名）。日本結晶学会の令和元年度年会において、本研究拠点の若手研究者である金沢大学の菊川准教授と日本大学の橋本助教がオーガナイザーとして国際シンポジウムを行った。招待講演者（日本4名・ドイツ1名）が口頭で研究内容について発表、議論した。若手研究者に国際シンポジウムを企画運営する経験ができ、若手研究者育成に役立った。

2020年度（令和2年度） *すべて Web 開催

・錯体化学会第70回討論会、シンポジウム、Advanced Functional Materials based on Polyoxometalates（英語セッション）

参加人数55名、日本（45名）、中国（10名）、うち学生（25人）、ポスドク研究員と30代若手研究員（15名）。錯体化学会第70回シンポジウムと共催して行った。日本研究拠点の若手研究者が企画運営を行った。日本の研究拠点内の研究7名（若手研究者2名を含む）と中国研究拠点の研究者がそれぞれ25分の口頭発表を行い、議論した。メンバーにとって有意義であったと好評であった。コロナで移動できない中で、時差の少ない中国の研究者にも参加してもらい有意義な議論が行えた。中国とのネットワークも広がった。



発表風景

・ INPOMS セミナー

イギリス研究拠点のニューキャッスル大学と共同でセミナーを行った。日本研究拠点のメンバー1名がZoomで発表を行い、議論した。コロナで移動出来ない中で、イギリス、中国、フランスの研究者と議論が出来た。

・ Web・INPOMS セミナー

イギリス研究拠点のニューキャッスル大学と共同でセミナーを行った。イギリス拠点のメンバーの共同研究者1名がZoomで発表を行い、議論した。コロナで移動出来ない中で、イギリス、中国、フランスの研究者と議論が出来た。

・ クリスマスマーケティング

参加人数10名、日本(2名)、イギリス(4名)、中国(2名)、ドイツ(1名)、その他(1名)。研究拠点メンバーの交流会をweb上で行った。コロナの影響で、行き来することが出来ない中でお互いの近況や今後の研究拠点の運営案について話し合った。

○研究者交流

【概要】

2019年度(令和元年度)

2名の日本人修士の学生の2ヶ月間の海外共同研究派遣、1名の日本人修士学生のイギリス研究拠点でのサマースクール派遣に加えて、延べ35名を海外に派遣した。その中には、若手研究者及び大学院生を17名含んでいる。

2020年度(令和2年度)

コロナウイルス拡大のため渡航して交流を行うことは出来なかったが、Webで研究者との交流とネットワーク構築を行った。

(2)(1)の研究交流活動を通じて、申請時の計画がどの程度進展したか、以下の観点から記入してください。

○日本側拠点機関及び相手国拠点機関の交流によってえられた、世界的水準の国際研究交流拠点となりうるような学術的価値の高い成果

初年度から様々な共同研究を行ってきた。その中で、広島大学－東京大学－金沢大学－ニューキャッスル大学でこれまでにない高いプロトン伝導性を示す材料を開発することに成功した。広島大学が新しい分子設計法の開発を行い、構造解析をニューキャッスル大学と共同で行った。この化合物のプロトン伝導性の測定を東京大学で行った。更に東京大学において高分子と複合することにより材料の安定性を向上できることとこれまでにない高いプロトン伝導性を示す材料にまで発展させることが出来た。この複合材料の分析を金沢大学と共同で行った。

この成果は、新しい無機分子設計法の発見と分析に加えて高分子材料との複合化と高いプロトン伝導性を示す機構まで確認しており学術的価値の高い成果と言える。アメリカ化学会の雑誌に (*ACS Appl. Mater. Inter.* **2021**, *13*, 19138-19147.) 発表した。この論文は ACS Editors' choice として選出され、アメリカ化学会のホームページでも公開され、論文は半年間無料でオープンアクセス可能。広島大学 - 東京大学 - ニューキャッスル大学でプレスリリースを行った。

○研究交流活動の成果から発生した波及効果

前述した高いプロトン伝導性を示す材料の構造解析は、担当する広島大学の修士の学生がイギリスのニューキャッスル大学に研究留学することによって成功した。この研究留学により合計2つのSCI論文を発表することが出来た。

○若手研究者育成への貢献

・若手研究者が身につけるべき能力・資質等の向上に資する育成プログラムの実施及びその効果

修士の学生でも海外研究経験をさせるという本研究拠点の育成プログラムを2019年度に実施した。計画通り修士の学生を2名、フランスとイギリスの研究拠点に派遣し共同研究を行った。海外で1人で仕事をするという経験を通じて英語でのコミュニケーション能力、発表能力をつけることが出来た。本プログラムの最も良かった点は、行く前は不安を口にしていた学生が、2ヶ月間の海外研究経験を通して、多くの友人が出来、見違えるように自信をつけて帰ってきたことである。成功体験が少ない自信の無い学生に「自分は海外で研究ができる」という自信を与えることが出来た。

若手研究者が企画運営するセミナーを2019年度と2020年度に1回ずつ開催した。若手研究者が自分でセミナーのテーマを決めて講演者を決めて交渉するというを通して、研究者ネットワークの幅を広げることが出来た。

2019年度のキックオフミーティングにおいて大学院生、ポスドク、若手研究者が口頭発表し、発表内容について議論する若手セミナーを開催した。大学院生とポスドクにとっては、海外の研究者の前で英語で発表する機会があり、英語発表能力の向上に役立った。

・日本と交流相手国における次世代の中核を担う若手研究者の研究ネットワーク構築状況

若手研究者やポスドクの海外派遣や若手研究者によるセミナーの開催を通して日本と交流相手国の次世代を担う若手研究者と研究ネットワークの構築が進んでいる。