

水素科学（水素ジェノミクス）の社会貢献

① ビジョンの概要

水素科学プラットフォームの構築により、水素が関与する学問分野を高度に融合（学術連携）することで水素科学を深化させる。さらに人文・社会科学も含めた異分野連携・産学官連携・国際連携（これらをまとめて、本提案では「水素連携」とする）を推進する。これらによって、水素・燃料電池、合成燃料、蓄電池、太陽電池、超伝導に加えて、宇宙、核融合、創薬・高度医療などの多彩な分野を通じて、革新的な社会貢献を果たす。

② ビジョンの内容

世界規模での気候変動やエネルギー安全保障などが深刻化するなか、国内外で水素エネルギーの社会導入・普及が期待されており、水素の製造から貯蔵・輸送、燃料電池や水素発電での利活用など、出口が明確で実践的な技術開発・実証プロジェクトが推進されている。一方、水素が関与する研究開発に関しては、水素エネルギーの視点だけでなく、暮らしに欠かせない多様な有用物質・材料の合成やデバイスの設計・高性能化、構造材料の信頼性向上、さらに宇宙産業への展開や、核融合（フュージョンエネルギー）の実現に向けた基盤研究、創薬・高度医療技術の開発など、極めて多彩な視点での重要性も高まっている。



図1 水素科学の社会貢献

水素が関与する多彩な研究開発を推進して技術革新を実現するためには、工学・物理学・化学・生物学・数理科学・データ科学などの各学問分野における個別の研究を進めるだけでなく、それらを高度に融合（学術連携）することで水素科学を深化させることが重要である。

本提案では、一般社団法人 水素科学技術連携研究会の活動を大幅に強化・拡充して「水素科学プラットフォーム」を構築、水素科学にかかわる支援を効果的かつシームレスに実施する。

以下、「水素科学プラットフォーム」の活動の具体例を示す：

1. 国内研究者相互の人材交流や装置供用の促進などを支援する水素科学ネットワークの整備
2. 国内外の論文情報などをデータベース化した水素科学データセンターの設置
3. データの分析・検証および水素科学 AI シミュレータ・大規模言語モデルの開発
4. 研究開発、新しい技術やアイデアに基づく新産業展開を後押しする水素科学スタートアップの支援
5. 若手研究者および学生を対象とした水素科学国際リーダー育成スクールの運営

この「水素科学プラットフォーム」の構築を通じて、水素科学の深化や水素連携の推進を早期・確実に実現することで、水素科学にかかわる研究開発に好循環を生み出し、各分野での革新的社会貢献につなげる。

③ 学術研究構想の名称

高次水素機能を拡張した水素科学（水素ジェノミクス）の深化

④ 学術研究構想の概要

水素が関与する研究開発は、水素・燃料電池、合成燃料、蓄電池、太陽電池、超伝導に加えて、宇宙、核融合、創薬・高度医療など多彩な視点で重要である。この本質は、材料中に侵入した水素が示す「結合多様性」とそれにより発現する「高次水素機能」であることを、科研費・新学術領域研究「水素ジェノミクス」において、様々な事例で示している。さらに、水素近傍の原子・電子構造の揺らぎなどに起因する理想的な結合性からの逸脱（ずれ）や異なる結合性への連続的遷移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も提起している。

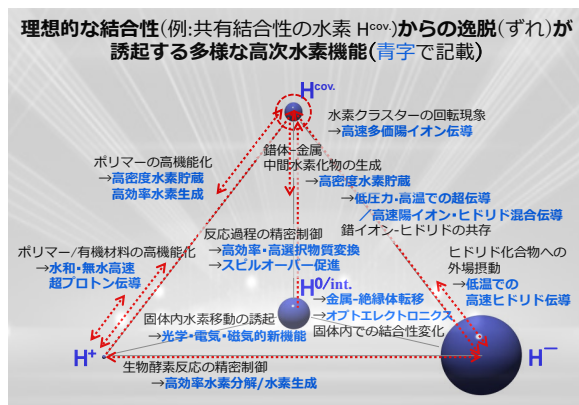


図2 多様な高次水素機能

しかし、これらの「逸脱（ずれ）」や「遷移」の精密解析やその先の精密制御は、今後の水素科学の深化における重要課題の一つとして残されており、「水素科学プラットフォーム」を構築したうえで、解明や探求が可能になるものと期待されている。

⑤ 学術的な意義

水素は、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 H^0 、共有結合性 $H^{Covalent}$ 、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。

この「結合多様性」によって、材料中の水素は「高密度化」や「高速移動」、表界面で「高活性化」することが可能となり、様々な水素機能が発現する。さらに、「複数の水素機能の相乗効果（＝高次水素機能）」に着目することで新たな機能発現が可能となる。

理想的な結合性からの逸脱（ずれ）や異なる結合性への連続的遷移にかかわる精密解析・制御は、水素科学において核心的なブレイクスルーにつながる。

⑥ 国内外の研究動向と当該構想の位置付け

国内外で水素エネルギーの社会導入・普及が期待されており、水素の製造から貯蔵・輸送、燃料電池や水素発電での利活用など、実践的な技術開発・実証プロジェクトが推進されている。本提案は、「水素科学プラットフォーム」を整備し、水素科学にかかわる人材交流・情報共有・装置供用・共同研究・社会実装・若手研究者育成・スタートアップ支援を効果的かつシームレスに実施する。これにより、水素エネルギーの視点だけでなく、多彩な視点での水素科学の社会貢献を目指す。

⑦ 社会的価値

水素・燃料電池や合成燃料に関する技術普及とそれによる二酸化炭素排出量の削減、災害に備えた自立型水素エネルギーシステムの設置、有用物質や医薬品の合成、水素脆性の制御・抑制による構造材料の長寿命化や信頼性向上、宇宙線や中性子線などの高効率遮蔽による宇宙・核融合に関連する極限環境での安全性向上、摂取回数や副作用の観点で患者負担を抑えた創薬・高度医療技術への展開など、水素科学の深化は広範な技術開発に資するといえる。本提案は、水素連携を通じた多彩な分野における経済的・産業的価値の創製や SDGs への貢献だけでなく、次代の研究開発を担う若手研究者へ知的価値を継承するうえでも重要である。

⑧ 実施計画等について

・実施計画とスケジュール

前期（初年度～第3年度）：1. 水素科学ネットワークの整備、2. 水素科学データセンターの設置、5. 水素科学国際リーダー育成スクールの運営、水素科学プラットフォームの活動および研究開発を開始する。

中期（第4年度～第7年度）：3. 水素科学 AI シミュレータ・大規模言語モデルの開発、4. 水素科学スタートアップの支援を実施し、「逸脱（ずれ）」や「遷移」の精密解析を本格化する。

後期（第8年度～第10年度）：水素科学プラットフォームを完成させ、「逸脱（ずれ）」や「遷移」の精密制御を可能とする研究を加速、革新的な社会貢献を実現する。

・実施機関と実施体制

東北大学に加えて、東京大学、山梨大学、京都大学、九州大学、量子科学技術研究開発機構、物質・材料研究機構など、日本全国から多くの研究者が本提案に参画できるよう各研究拠点の整備を進め、水素科学技術連携研究会に加盟の約 15 社の企業を中心にした産学官連携により、社会実装に向けた技術開発も推進する。

・総経費 40.0 億円（10 年間の研究費として）

・設備費：各研究拠点の整備を中心に総額 10 億円

・人件費：若手研究者、高度技術職員、統括・企画や事務職員などの雇用費として、総額 20 億円

・運営費：装置供用や共同研究、スタートアップ支援のため、総額 10.0 億円

⑨ 連絡先

折茂 慎一（東北大学 材料科学高等研究所（WPI-AIMR））