

6-6 物質分子科学研究領域

電子構造研究部門

横山 利彦 (教授) (2002年1月1日着任)

小板谷 貴典 (助教)

山本 航平 (助教)

石川 あずさ (事務支援員)

A-1) 専門領域：表面磁性，X線分光学

A-2) 研究課題：

- a) 雰囲気制御型硬X線光電子分光法の開発と不均一触媒その場観察への応用
- b) X線吸収分光，X線磁気円二色性などを用いた磁性材料等の構造・物性解析

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) SPring-8 BL36XU で我々が開発した雰囲気制御型硬X線光電子分光装置により固体高分子形燃料電池 (PEFC) 電極触媒の in situ 測定を行っている。2021 年前半には，PEFC Pt 合金電極の能劣化試験後の硫黄被毒状態に関する雰囲気制御型硬X線光電子分光法を論文として発表した。NEDO 事業が終了し，より一般的な不均一触媒等について対象を拡げて研究を遂行しているところである。
- b) 分子研シンクロトン放射光施設 UVSOR-III BL4B を用いた高磁場極低温X線磁気円二色性法 (XMCD) を共同利用公開し，様々な磁性薄膜の磁気特性検討について国内外との共同研究を広く実施している。また，磁性薄膜の原子層毎の磁性を解析するべく軟X線反射率測定技術開発を行っている。

B-1) 学術論文

A. KOIDE, Y. UEMURA, D. KIDO, Y. WAKISAKA, S. TAKAKUSAGI, B. OHTANI, Y. NIWA, S. NOZAWA, K. ICHIYANAGI, R. FUKAYA, S.-I. ADACHI, T. KATAYAMA, T. TOGASHI, S. OWADA, M. YABASHI, Y. YAMAMOTO, M. KATAYAMA, K. HATADA, T. YOKOYAMA and K. ASAKURA, "Photoinduced Anisotropic Distortion as the Electron Trapping Site of Tungsten Trioxide by Ultrafast W L1-Edge X-Ray Absorption Spectroscopy with Full Potential Multiple Scattering Calculations," *Phys. Chem. Chem. Phys.* **22(5)**, 2615–2621 (2020). DOI: 10.1039/c9cp01332f

Y. UEMURA, A. S. M. ISMAIL, S. H. PARK, S. KWON, M. KIM, Y. NIWA, H. WADATI, H. ELNAGGAR, F. FRATI, T. HAARMAN, N. HÖPPEL, N. HUSE, Y. HIRATA, Y. ZHANG, K. YAMAGAMI, S. YAMAMOTO, I. MATSUDA, T. KATAYAMA, T. TOGASHI, S. OWADA, M. YABASHI, U. HALISDEMIR, G. KOSTER, T. YOKOYAMA, B. M. WECKHUYSEN and F. M. F. DE GROOT, "Femtosecond Charge Density Modulations in Photoexcited CuWO₄," *J. Phys. Chem. C* **125(13)**, 7329–7336 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcc.0c10525

S. IKEMOTO, S. MURATSUGU, T. KOITAYA and M. TADA, "Chromium Oxides as Structural Modulators of Rhodium Dispersion on Ceria to Generate Active Sites for NO Reduction," *ACS Catal.* **12**, 431–441 (2022). DOI: 10.1021/acscatal.1c03807

T. SUZUKI, Y. KUBOTA, A. NAKAMURA, T. SHIMOJIMA, K. TAKUBO, S. ITO, K. YAMAMOTO, S. MICHIMAE, H. SATO, H. HIRAMATSU, H. HOSONO, T. TOGASHI, M. YABASHI, H. WADATI, I. MATSUDA, S. SHIN and K. OKAZAKI, “Ultrafast Optical Stress on BaFe₂As₂,” *Phys. Rev. Res.* **3**, 033222 (12 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevResearch.3.033222.

K. TAKUBO, H. MAN, S. NAKATSUJI, K. YAMAMOTO, Y. ZHANG, Y. HIRATA, H. WADATI, A. YASUI, T. MIZOKAWA and D. I. KHOMSKII, “Spin-Orbital Liquid in Ba₃CuSb₂O₉ Stabilized by Oxygen Holes,” *Phys. Rev. Mater.* **5**, 075002 (7 pages) (2021). DOI: 10.1103/PhysRevMaterials.5.075002

B-3) 総説, 著書

T. YOKOYAMA, “Thermal Expansion of FeNi Invar and Zinc-Blende CdTe from the View Point of Local Structure,” *Microstructures* **1**(1), 2021003 (22 pages) (2021). DOI: 10.20517/microstructures.2021.001

B-4) 招待講演

横山利彦, 「分子・物質合成プラットフォーム 10年間の成果」, 第20回ナノテクノロジー総合シンポジウム, 東京ビッグサイト, 2022年1月.

T. YOKOYAMA, “Ambient Pressure Hard X-Ray Photoelectron Spectroscopy on Polymer Electrolyte Fuel Cells under Working Conditions,” MRM2021, Yokohama (Japan) (online), December 2021.

T. YOKOYAMA, “*Operando* observation of working polymer electrolyte fuel cell studied by ambient pressure hard X-ray photoelectron spectroscopy,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

T. YOKOYAMA, “Precise EXAFS approaches to invar alloys and negative thermal expansions,” Global XAS Journal Club Europe and Asia-Oceania, The International X-ray Absorption Society, online, June 2021.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本放射光学会会長 (2021.10–2023.9).

日本放射光学会評議員 (2004–2005, 2008–2010, 2011–2012, 2014–2015, 2018–2019, 2020–2021).

学会の組織委員等

XAFS 討論会プログラム委員 (1998–2021).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

広島大学 放射光科学研究センター協議会委員 (2020–).

その他

文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム「分子・物質合成プラットフォーム代表機関」業務主任者 (運営責任者) (2012–2021).

文部科学省ナノテクノロジー・プラットフォーム「分子・物質合成プラットフォーム実施機関」業務主任者 (実施責任者) (2012–2021).

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ「マテリアルの高度循環のための技術 スポーク機関」業務主任者 (2021–2030).

文部科学省マテリアル先端リサーチインフラ「運営機構横断領域 (物質・材料合成)」業務主任者 (2022–2030).

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(A), 「液体を反応場とした動的オペランド硬X線光電子分光システムの開発」(代表: 横山利彦), 小坂谷貴典(研究分担者), 山本航平(研究分担者) (2021年–2023年).

科研費研究活動スタート支援, 「放射光X線を用いた強磁性体の光誘起磁性ダイナミクスの元素選択的観察」, 山本航平 (2019年–2021年).

科学技術振興機構さきがけ研究「革新的触媒の科学と創製」領域, 「オペランド観測に基づくメタン転換触媒および反応場の設計」, 小坂谷貴典 (2017年–2021年).

科研費若手研究, 「共鳴X線磁気反射率測定による磁性体多層膜の内部構造の解明」, 山本航平 (2021年–2024年).

B-11) 産学連携

共同研究, 新報国製鉄(株), 「インバー合金特性」, 横山利彦 (2020年–2021年).

C) 研究活動の課題と展望

2002年1月着任以降, 磁性薄膜の表面分子科学的制御と新しい磁気光学分光法の開発を主テーマとして, 高磁場極低温X線磁気円二色性(UVSOR)や紫外磁気円二色性光電子顕微鏡の発明, 広域X線吸収微細構造(EXAFS)法と経路積分法によるインバー等磁性合金の熱膨張などで成果を上げてきた。2011年度から, SPring-8の超高輝度硬X線を利用した燃料電池のin situ 雰囲気制御型硬X線光電子分光の開発を行い, 2017年度には完全大気圧での光電子分光観測に世界で初めて成功した。光電子分光は, 燃料電池中の各構成成分の電位を電極なしに観測可能な有効手法であることを示し, 今後もこれを中心課題に据えた研究を推進する。さらに, 2013年度からは放射光やX線自由電子レーザーを用いた(超)高速時間分解X線吸収法の開発的研究を行ってきた。2017年11月に高木康多助教が転出, 2018年4月に上村洋平助教が転出したが, 2018年6月に小坂谷貴典助教が着任し, 雰囲気制御光電子分光等を用いた表面化学反応機構解明を目標とした研究への展開, さらに, 2019年4月に山本航平助教が着任し, SACLA/SPring-8を利用して, 磁性薄膜のフェムト秒超高速スピンドイナミクスおよびコヒーレントX線回折・共鳴X線磁気散乱による磁性薄膜イメージング研究を進めている。

杉本敏樹（准教授）（2018年5月1日着任）

櫻井 敦教（助教）
斎藤 晃（特任研究員）
鶴岡 和幸（特任研究員）
市井 智章（特任研究員）
高橋 翔太（特任専門員）
佐藤 宏祐（大学院生）
林 仲秋（大学院生）
野口 直樹（大学院生）
望月 達人（特別共同利用研究員）
横田 光代（事務支援員）
志村 真希（事務支援員）

A-1) 専門領域：物理化学，分光学，機能物性化学，表面界面科学

A-2) 研究課題：

- a) 電子非共鳴・表面プラズモン非共鳴条件における分子吸着系の三次非線形振動分光
- b) 空間反転対称性の破れた埋没界面系の観測を拓く四次非線形振動分光への展開
- c) メタンカップリング光触媒反応における吸着水の触媒的作用
- d) 水素感度と高空間分解能を有する二次非線形顕微分光法の開発と装置構築

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 電子共鳴あるいはプラズモン共鳴を用いて信号増大させることができない表面吸着分子系についても汎用的に観測可能なラマン分光法の確立を目指し、二つの光の差周波の喰りで分子振動を共鳴励起（強制振動）させる三次のコヒーレント反ストークスラマン分光法（CARS）に着目し、表面分光測定装置の構築を行ってきた。現在、平坦な Pt(111) 基板表面に蒸着させた透明絶縁体の氷薄膜及び等核二原子分子の H_2 、 D_2 ガスに対して CARS 測定に成功した。さらに、昇温脱離法（TPD）と組み合わせた測定により、分子の吸着・脱離プロセスをその場観測することにも成功した。さらに、この TPD-CARS 法を用いることで、結晶氷薄膜の振動励起子の広がりサイズが 100 K から 150 K にかけて温度と共に急速に減少することを明らかにすると共に、アモルファス氷薄膜については結晶化相転移温度のサイズ効果を観測することに成功した。[論文準備中]
- b) 和周波発生振動分光法に代表される二次非線形分光法は空間反転対称性が破れたドメインに選択的な計測手法であり、表面界面観測に広く用いられている。しかし、振動励起のために赤外光を用いるため、赤外光が透過しない“物質に埋没した界面”の観測には適用できない。これを克服するため、物質中を透過する二つの光の差周波の喰りで分子振動を共鳴励起（強制振動）させ、それを第二高調波でコヒーレントにアップコンバージョンさせる四次非線形光学過程に基づく振動分光を展開し始めている。この手法を用いて、空間反転対称性が無い水晶薄膜の観測に透過配置と反射配置でそれぞれ成功し、その強度比から、その信号光が二次と三次のカスケード過程に由来するものでは無く、四次非線形光学過程に由来するものであることの実証を得た。[論文準備中]
- c) 天然ガス中に豊富に含まれる資源であるメタンを光により活性化させ、化学的により付加価値が高い分子に変換させる

光触媒技術は持続可能な社会の実現に向けて重要な化学技術である。一般に、光触媒表面に水分子が吸着している場合には、メタンは完全酸化され二酸化炭素に変換されることが知られている ($\text{CH}_4 + \text{H}_2\text{O} \rightarrow \text{CO}_2 + 4\text{H}_2$)。ところが、水蒸気圧力を制御して水分子の吸着量を第一層吸着から多層吸着 (10 層程度) まで系統的に変化させながら光触媒によるメタン転換反応を調べてみると、水分子吸着相が二層程度の時に、メタンの非酸化カップリング ($2\text{CH}_4 \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6 + \text{H}_2$) によるエタン生成効率が顕著に増大することを見出だした。この反応式には水分子が露わには関与しないため、この現象の分子起源を探るべく、水分子同位体 (D_2O) を用いたメタン転換光触媒過程のオペランド赤外分光測定を行った。その結果、吸着水分子は光触媒反応中に水酸基ラジカルとなり、それがメタンから水素をバリアレスに引き抜き ($\text{CH}_4 + \cdot\text{OD} \rightarrow \cdot\text{CH}_3 + \text{HDO}$) メチルラジカルを効率的に生成させ、そのメチルラジカル同士のカップリングによりエタン生成反応が誘起されている事が明らかになった ($2(\cdot\text{CH}_3) \rightarrow \text{C}_2\text{H}_6$)。[論文投稿中]

- d) 走査トンネル顕微鏡と和周波発生振動分光法を組み合わせ、水分子吸着系の水素結合ネットワークにおいて機能発現のカギを握る重要な構造情報である“水分子の配向 (水素の H-up・H-down 配置)”を高い空間分解能で観測する二次非線形顕微分光法 (探針増強和周波発生振動分光法) の開発に世界に先駆けて取り組んでいる。その要素技術である Au ナノ探針を再現性高く作成することに成功するとともに、その探針を用いて STM 発光スペクトルのマッピングや探針増強ラマン分光法に成功するに至っている。現在、MHz 高繰返しレーザー光源を用いた OPA システムの構築も概ね完了しており、ロックイン検出も併用して探針増強和周波発生振動分光に現在取り組んでいる。水分子吸着系は吸着エネルギーがそれほど高くなく脆いため、本手法を本格展開させるために、まずは表面に強固に吸着することが知られているアルカンチオール分子系の自己組織化膜を用いて原理実証実験に取り組んでいる。

B-1) 学術論文

F. AMANO, H. MUKOHARA, H. SATO, C. TATEISHI, H. SATO and T. SUGIMOTO, “Vapor-Fed Photoelectrolysis of Water at 0.3 V Using Gas-Diffusion Photoanodes of SrTiO_3 Layers,” *Sustainable Energy Fuels* **4**(3), 1443–1453 (2020). DOI: 10.1039/c9se01068h

B-3) 総説, 著書

T. SUGIMOTO, “Ferroelectric Ice Films Grown on Metal Surfaces: Orientational Structure and Peculiar Physical Properties of Adsorbed Water Molecules Unveiled by Nonlinear Spectroscopy,” *Chemistry and Chemical Industry*, **74**(5), 354–356 (2021). (in Japanese)

T. SUGIMOTO, “New Development of Active Species Observation by Operand Spectroscopy,” *LPM Lett.*, **25**, 16–19 (2021). (in Japanese)

B-4) 招待講演

杉本敏樹, 「水分解光触媒ナノ粒子の高活性化に向けた表面エンジニアリングの学理構築」, ナノ学会第 19 回大会, オンライン開催, 2021 年 5 月.

杉本敏樹, 「固体表面における水分子の特異な水素結合構造」, 第 15 回分子科学討論会 2021, オンライン開催, 2021 年 9 月.

杉本敏樹, 「分光計測の挑戦: ナノ粒子光触媒の高活性化表面エンジニアリングにむけて」, 2021 年度日本表面真空学会中部支部研究会, オンライン開催, 2021 年 11 月.

杉本敏樹,「固体表面における分子吸着種のコヒーレント非線形分光」,第13回放射光学会若手研究会,オンライン開催,2021年12月.

T. SUGIMOTO, “Nuclear-spin conversion of molecular hydrogen physisorbed on cryogenic surface,” The International Chemical Congress of Pacific Basin Societies 2021 (Pacifichem 2021), Honolulu (U. S. A.) (online), December 2021.

杉本敏樹,「モデル星間水のレーザー分子分光で拓く星間塵の新奇物性と機能」,「自然科学における階層と全体」シンポジウム,オンライン開催,2022年1月.

杉本敏樹,「物質表面吸着水の水素配置・配向特性に迫る和周波発生(SFG)振動分光研究」,レーザー学会学術講演会第42回年次大会,オンライン開催,2022年1月.

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

日本表面真空学会若手部会幹事(2018-).

分子科学会運営委員(2020-).

学会の組織委員等

The 9th International Symposium on Surface Science (ISSS-9), Publication committee (2019–2021).

8th Asian Spectroscopy Conference (ASC2021), Organizing committee (2019–2022).

International Workshop on Nonlinear Optics at Interfaces 2023, Conference vice Chair (2019–2023).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

広島大学 放射光科学研究センター協議会委員(2020-).

文部科学省学術調査官(2021–2023).

学会誌編集委員

e-Journal of Surface Science and Nanotechnology, Guest editor (2021).

その他

分子科学若手の会夏の学校分子科学研究所対応者(2018-).

第8回森野ディスカッション/分子研研究会 分子科学研究所対応者(2021.8).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学物理科学研究科,「基礎光科学」,2021年度.

理化学研究所(SPring-8),客員研究員,2021年4月-.

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究(萌芽),「高感度非線形ラマン分光法による物理吸着水素分子の極低温量子ダイナミクス直接観察」,杉本敏樹(2021年度–2022年度).

自然科学研究機構若手研究者による分野間連携研究プロジェクト,「コヒーレントラマン分光法による星間ダストモデル表面上の水素の*in-situ* オルト/パラ状態計測とマクロシミュレーションが拓く星形成・物質進化ダイナミクス研究」,杉本敏樹(2021年度).

科学技術振興機構さきがけ研究,「原子スケール極微和周波分光法の開発と界面水分子の局所配向イメージングへの応用展開」, 杉本敏樹 (2019年度-2022年度).

科研費基盤研究(A),「水素感度と極微空間分解能を有する非線形顕微分光法の開発と表面水素結合系への応用」, 杉本敏樹 (2019年度-2021年度).

科研費若手研究,「MHz パルスレーザーを基軸とした近接場和周波発生分光法の開拓」, 櫻井敦教 (2020年度-2021年度).
自然科学研究機構分野融合共同研究,「水を不斉反応場とする精密アミノ酸合成法の開拓」(代表: 山内美穂), 杉本敏樹 (研究分担者) (2021年度).

防衛装備庁安全保障技術研究推進制度(タイプS),「ジャイアント・マイクロフォトンクスによる高出力極限固体レーザー」(代表: 平等拓範), 杉本敏樹 (研究分担者) (2020年度-2024年度).

科研費特別推進研究,「星間塵表面における分子進化の解明: 素過程からのアプローチ」(代表: 渡部直樹), 杉本敏樹 (研究分担者) (2017年度-2021年度).

C) 研究活動の課題と展望

ヘテロゲン検出法和周波発生(SFG)振動分光法や時間分解赤外吸収分光等による, 金属や酸化物表面における水分子凝集系の研究により,「終端(表面・界面)が存在する不均一な水分子凝集系においては, たった一分子層の水分子の配向(水素の配置)が周辺の水素結合の構造や誘電物性等に大きな影響を及ぼす」ことが分かってきた。しかし, これらの知見に関して更に根源的なレベルでの疑問点「そもそも固体表面のどのようなファクターによって第一層水分子吸着系に配向秩序が創発されるのか? その際に, 全体としてH-up 状態が優勢になるのかH-down 状態が優勢になるのかを決める要因は何なのか?」などに関しては, 現時点ではほとんど何も分かっていない。これらの根本的なメカニズムを解明するためには, 原子レベルで構造を規定・制御した種々の固体表面上の水分子凝集系に対して系統的なSFG測定を展開していく必要がある。それと同時に, 水素感度と極微空間分解能を有する新しい非線形顕微分光法を開発し, より本質的な微視的知見に迫る高度な分光研究を展開していく必要がある。今後のこのような研究展開により, 水分子凝集系の特異的な構造や物性, 化学的機能を自在にデザイン・制御するための表面科学を開拓し, 基礎学理構築を目指す。

分子機能研究部門

平 本 昌 宏 (教授) (2008 年 4 月 1 日着任)

伊澤 誠一郎 (助教)

宇都 祥子 (研究員 (派遣))

足立 和宏 (研究員 (派遣))

LEE, Jihyun (大学院生)

PALASSERY ITHIKKAL, Jaseela (大学院生)

中村 由佳 (事務支援員 (派遣))

小倉 康子 (事務支援員 (派遣))

A-1) 専門領域：有機半導体，有機太陽電池，有機エレクトロニクスデバイス

A-2) 研究課題：

- a) ドナー／アクセプター接合を利用したフォトンアップコンバージョンと低電圧駆動有機 EL
- b) タンデム水平接合有機太陽電池

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) フォトンアップコンバージョン (UC) は長波長の光を短波長に変換する技術で，低エネルギー光の有効利用や近赤外イメージングなどへの応用が期待されている。今回，有機半導体ドナー (D) /アクセプター (A) 界面で有機太陽電池の電荷分離・再結合原理を応用した新原理の UC を実現した。発光体としては三重項消滅材料として知られるルブレン，感光体としては近赤外光を吸収するノンフラーレンアクセプタを用い，積層して D/A 界面をもつ 2 層膜を形成した。目に見えない近赤外 LED 光 (太陽光強度の 1/10 程度) を，2% 程度の量子効率で，目視可能な黄色の高輝度発光に変換するフレキシブル薄膜を実現できた。原理は，まず吸収した近赤外光を D/A 界面で HOMO オフセットを利用して電荷分離して，スピニングランダムな自由電荷を生成する。それらが再結合する際に界面で電荷移動 (CT) 状態を経て，三重項励起子を生成する。その後，三重項消滅を経てルブレンからの S1 発光が観測される。本手法は，全固体であり，重原子効果による項間交差が必要ないため希少金属，有害元素が不必要，という利点を持つ。

さらに，このアップコンバージョン過程を有機 EL に応用し，その効率を向上させた結果，乾電池 1 本分の電圧でディスプレイ並みの明るさで発光できる，世界最小電圧で駆動する有機 EL の開発に成功した。

- b) 最近，我々は，電子とホールを基板に対して水平方向に取り出す「水平交互接合」という，有機太陽電池のための新しい接合構造を提案した。今回，高速移動度を示す，C8-BTBT (ホール移動度：43 cm²/Vs) と PTCDI-C8 (電子移動度：1.7 cm²/Vs) を積層した 2 層セルを作製し，1.8 cm という驚異的な水平接合距離で太陽電池動作できた。トラップが無輻射再結合を引き起こすことによって，可能な水平距離を決めていることが分かった。さらに，水平接合ではマルチタンデム化によって光電流が増大していくことを実証し，タンデム水平セルによって入射光全てを吸収利用できることを証明した。また，ドーピングによるセル特性の向上にも成功した。

B-1) 学術論文

M. SERA, M. YAMAMOTO, K. TOMITA, Y. YABARA, S. IZAWA, M. HIRAMOTO, T. NAKANISHI, K. YOSHIDA and K. NISHIYAMA, “Morphology Control and Synthesis of Afterglow Materials with an SrAl₂O₄ Framework Synthesized by Surfactant-Template and Hydrothermal Method,” *Chem. Phys. Lett.* **780**, 138916 (6 pages) (2021). DOI: 10.1016/j.cplett.2021.138916

J. PALASSERY ITHIKKAL, A. GIRAULT, M. KIKUCHI, Y. YABARA, S. IZAWA and M. HIRAMOTO, “Photovoltaic Behavior of Centimeter-Long Lateral Organic Junctions,” *Appl. Phys. Express* **14**, 094001 (6 pages) (2021). DOI: 10.35848/1882-0786/ac17d2

S. IZAWA, K. UCHIDA, M. NAKAMURA, K. FUJIMOTO, J. ROUDIN, J. LEE, T. INUZUKA, K. SANADA, M. SAKAMOTO, Y. NAKAMURA, M. HIRAMOTO and M. TAKAHASHI, “Influence of N-Substituents on Photovoltaic Properties of Singly Bay-Linked Dimeric Perylene Diimides,” *Chem. –Eur. J.* **27(56)**, 14081–14091 (2021). DOI: 10.1002/chem.202102318

S. IZAWA and M. HIRAMOTO, “Efficient Solid-State Photon Upconversion by Spin Inversion at Organic Semiconductor Interface,” *Nat. Photonics* **15(12)**, 895–900 (2021). DOI: 10.1038/s41566-021-00904-w

J. PALASSERY ITHIKKAL, Y. YABARA, S. UTO, S. IZAWA and M. HIRAMOTO, “Lateral-Tandem Organic Photovoltaic Cells With Carrier Transport and Generation Layers,” *Appl. Phys. Express* **14(10)**, 101003 (4 pages) (2021). DOI: 10.35848/1882-0786/ac28e6

S. IZAWA, M. MORIMOTO, S. NAKA and M. HIRAMOITO, “Efficient Interfacial Upconversion Enabling Bright Emission with Extremely Low Driving Voltage in Organic Light-Emitting Diodes,” *Adv. Opt. Mater.* **10**, 2101710 (8 pages) (2022). DOI: 10.1002/adom.202101710

K. TAKAHASHI, S. IZAWA, N. OHTSUKA, A. IZUMISEKI, R. TSURUTA, R. TAKEUCHI, Y. GUNJO, Y. NAKANISHI, K. MASE, T. KOGANEZAWA, N. MOMIYAMA, M. HIRAMOTO and Y. NAKAYAMA, “Quasi-Homoepitaxial Junction of Organic Semiconductors: A Structurally Seamless but Electronically Abrupt Interface between Rubrene and Bis(trifluoromethyl) dimethylrubrene,” *J. Phys. Chem. Lett.* **12(46)**, 11430–11437 (2021). DOI: 10.1021/acs.jpcclett.1c03094

J. LEE, M. HIRAMOTO and S. IZAWA, “Simultaneous Measurement of Photocurrent and Recombination Emission in Organic Solar Cell,” *Jpn. J. Appl. Phys.* **61**, 011001 (7 pages) (2022). DOI: 10.35848/1347-4065/ac4051

B-3) 総説, 著書

平本昌宏, 「一人の科学者の研究人生」, *Molecular Electronics & Bioelectronics*, **32(4)**, 180–187 (2021). (M&BE 業績賞受賞記念寄稿)

B-4) 招待講演

平本昌宏, 「M&BE の仲間と出会った頃——30年前」, 第 82 回応用物理学会秋季学術講演会「有機分子・バイオエレクトロニクス分科会業績賞受賞記念講演」, オンライン開催, 2021 年 9 月.

平本昌宏, 「KFM によるドーピングレベル単結晶のフェルミレベル測定」, 分子研機器センター・ブルカージャパン ナノ表面計測事業部共催 AFM オンラインセミナー (第 1 回), オンライン開催, 2021 年 12 月.

S. IZAWA, "Photon upconversion at organic semiconductor interface," The 38th International Conference of Photopolymer Science and Technology, Organic and Hybrid Solar Cells–Materials, Device Physics, and Processes, Online, June 2021.

伊澤誠一郎, 「有機半導体界面の光電変換機能の開拓～有機太陽電池からフォトンアップコンバージョンまで～」, “光” 機到来! Q コロキウム, オンライン開催, 2021年6月.

S. IZAWA, "Upconversion emission at organic semiconductor interface," Asian Conference on Organic Electronics 2021, Online, September 2021.

伊澤誠一郎, 「有機半導体界面での新原理アップコンバージョン発光」, 高分子学会有機エレクトロニクス研究会「発光材料・デバイスの新展開」, オンライン開催, 2021年10月.

伊澤誠一郎, 「有機半導体界面での光エネルギー変換」, 応用物理学会新領域エネルギーハーベスティング研究グループ研究会「環境発電関連技術の最先端」, オンライン開催, 2021年11月.

伊澤誠一郎, 「動的エキシトンを利用した光アップコンバージョン」, 第7回動的エキシトン若手セミナー, オンライン開催, 2021年12月.

伊澤誠一郎, 「有機半導体界面での光波長・エネルギー変換」, 表面真空学会九州支部セミナー「表面・界面での変換」, オンライン開催, 2022年2月.

伊澤誠一郎, 「有機半導体界面を利用した光アップコンバージョン」, 物性科学連携研究体研究会「エネルギー科学の最前線：階層横断的な理解に向けて」, オンライン開催, 2022年3月.

伊澤誠一郎, 「有機半導体界面を利用した光エネルギー変換」, 神戸大学開拓プロジェクトシンポジウム, オンライン開催, 2022年3月.

B-5) 特許出願

特願 2021-062767, 「有機EL素子」, 伊澤誠一郎, 平本昌宏, 森本勝大, 中 茂樹(自然科学研究機構, 富山大学), 2021年.

B-6) 受賞, 表彰

平本昌宏, 応用物理学会有機分子・バイオエレクトロニクス分科会業績賞(2021).

伊澤誠一郎, 有機EL 討論会第31回例会講演奨励賞(2021).

伊澤誠一郎, 2021年度エヌエフ基金研究開発奨励賞優秀賞(2021).

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

Korea-Japan Joint Forum (KJF)—Organic Materials for Electronics and Photonics, Organization Committee Member (2003–).

文部科学省, 学術振興会, 大学共同利用機関等の委員等

科研費学術変革領域研究(A) (公募研究) 専門委員会委員(2021.6–9).

学会誌編集委員

応用物理学会若手チャプター幹事(2018–). (伊澤誠一郎)

競争的資金等の領域長等

NEDO 先導研究プログラム／エネルギー・環境新技術先導研究プログラム「高効率シースルー有機薄膜太陽電池を用いた革新的発電窓の研究開発」研究開発推進委員会委員長 (2021.4-).

NEDO グリーンイノベーション基金事業／次世代型太陽電池の開発, 採択審査委員会委員長 (2021.11-2022.1).

その他

岡崎ものづくり協議会学識委員 (2011-).

B-8) 大学での講義, 客員

東京理科大学理工学研究科先端化学専攻, 講師 (非常勤), 2020年4月1日-2022年2月24日.

B-9) 学位授与

LEE, Ji-Hyun, 「有機太陽電池における電荷再結合の研究」, 2021年9月, 博士 (理学).

B-10) 競争的資金

科研費挑戦的研究 (萌芽), 「ドーピング有機単結晶ウェハを用いた新原理太陽電池」, 平本昌宏 (2019年-2021年).

科研費若手研究, 「超高移動度分子を用いた有機太陽電池」, 伊澤誠一郎 (2018年-2021年).

マツダ財団研究助成, 「理論限界に迫る有機太陽電池の実現」, 伊澤誠一郎 (2018年-2021年).

花王科学奨励賞, 「ドナー／アクセプター界面の精密制御による有機太陽電池の高効率化」, 伊澤誠一郎 (2020年-2021年).

コニカミノルタ画像科学奨励賞, 「低エネルギー光利用のための新原理フォトンアップコンバージョン」, 伊澤誠一郎 (2021年-2022年).

科研費学術変革領域研究 (A) (公募研究), 「動的エキシトンを利用した新原理フォトンアップコンバージョン」, 伊澤誠一郎 (2021年-2023年).

科学技術振興機構さきがけ研究, 「界面アップコンバージョンが可能とする革新的光変換」, 伊澤誠一郎 (2021年-2025年).

科研費基盤研究 (C) (一般), 「優れた n 型半導体特性を実現するフレキシブルグラフェンナノリボンの開発」 (代表: 高橋雅樹), 平本昌宏 (研究分担者) (2021年-2023年).

科研費基盤研究 (C) (一般), 「優れた n 型半導体特性を実現するフレキシブルグラフェンナノリボンの開発」 (代表: 高橋雅樹), 伊澤誠一郎 (研究分担者) (2021年-2023年).

C) 研究活動の課題と展望

平本は, 研究員 1 名を雇用し, 学生 1 名 (Jaseela P. I. (M2), 2019.10 入学) を指導し, 「有機単結晶エレクトロニクス」, 「水平接合有機太陽電池の開発」の研究を推進している。伊澤助教は, 「有機太陽電池における電荷再結合抑止による電圧ロス低減」, 「有機薄膜によるフォトンアップコンバージョンと低電圧駆動有機 EL デバイスに関する研究」を推進し, 学生 1 名 (Ji-Hyun Lee (D3), 2018.10 入学) を指導し, 研究室の柱になっている。静岡大, 富山大, 東京理科大, 等と共同研究し, 多くの論文が掲載されている。多数の受賞, JST さきがけ研究者への選出, *Nature Photonics* への論文掲載など, 着実に独立した研究者への道を歩んでおり, 次のポジションを得るため, 公募への応

募を積極的に行っている。

2021年9月に、Ji-Hyun Leeは博士(理学)学位を、Jaseela, P. I.は修士(理学)学位を取得した。その際、Ji-Hyun Lee博士は、SOKENDAI賞を授与された。なお、Jaseela, P. I.は、2022年4月より解良グループ(構造分子科学専攻)に転専攻する。

パンデミックにより、外国人研究者、学生の来日がストップし、これまでに5名の来日を断念した。来年度は、少数精鋭で成果、論文を出し続ける努力が必要不可欠である。なお、平本は、来年度末で定年となるので、研究室の装置類の譲渡、廃棄をすでに行っており、研究室終了の準備の目処がつきつつある。

西村 勝之 (准教授) (2006年4月1日着任)

横田 光代 (事務支援員)

A-1) 専門領域：固体核磁気共鳴，構造生命科学

A-2) 研究課題：

- a) 安定同位体非標識脂質分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発
- b) 固体 NMR を用いたプリオンフラグメントと脂質膜の特異的相互作用の解析
- c) クマムシ由来高耐熱性タンパク質の固体 NMR を用いた構造解析
- d) 独自固体 NMR プローブのための要素技術の開発

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) 脂質二重膜の構成脂質分子に関して天然存在比安定同位体 ^{13}C を観測して，高い分子運動性を示す液晶相中における脂質分子の ^{13}C 信号帰属に資する新規固体 NMR 測定法の開発を試みた。脂質分子と同様な運動性を有する有機低分子を参照試料として同測定法を適用し，有効性を確認した。
- b) ヒトプリオン病は，生体中に存在する正常型のプリオンタンパク質 (PrP^C) の高次構造が β シートリッチな感染型 (PrP^{Sc}) に変換され，不溶性アミロイド線維が形成され発症すると考えられている。本研究では同タンパク質の構造転移機構の解明を最終目的としている。全長ヒトプリオンと同様な脂質結合活性を有し，細胞毒性が報告されている 106 から 126 残基に相当する PrP(106-126) が，PrP の構造転移が示唆されている細胞膜表面のカベオラの主要脂質成分を単純化した GM1 含有リボソームに結合したプロテオリボソームに関して， ^{13}C 固体 NMR による解析を行った。上記の新規測定法を適用して，既報の信号帰属の検証を行うと共に GM1 分子の PrP(106-126) 特異的結合部位の特定を試みている。本研究は国立感染症研究所の谷生道一博士との共同研究である。
- c) クマムシは特徴的な乾眠メカニズムを有し，乾眠状態で数十年生存することが可能である。これには，クマムシ固有のタンパク質が関与していると考えられているが，その詳細は不明である。クマムシの中で構成タンパク質が良く研究されているヨコヅナクマムシの熱耐性が非常に高い secretory abundant heat soluble (SAHS) タンパク質，および cytosolic-abundant heat soluble (CAHS) タンパク質の構造を固体 NMR を用いて解析することを試みた。本研究は，名古屋市立大学佐藤匡史准教授，矢木宏和准教授グループと分子研加藤晃一教授のグループとの共同研究である。特定残基のみ ^{13}C ， ^{15}N 全安定同位体標識した SAHS，および CAHS タンパク質試料等を調製し局所構造解析を試みた。2次元 ^{13}C 同種核間相関固体 NMR 測定法などを適用し，SAHS に関して 6 種の信号，CAHS に関して 3 種の信号を観測した。現在，改良された試料調製法により調製された SAHS 試料で再測定を行い，同タンパク質の構造均一性の検証を行うと共に，変異タンパク質を用いて信号帰属を試みている。
- d) 現在使用している Bruker 社製分光器，および周辺機器と完全互換性を有する独自の固体 NMR プローブの開発を行ってきた。本プローブでは，試料管回転モジュール，および回転検出用の光電圧変換モジュールの 2 部品のみ同社製部品を使用した。全ての部品を独自モジュールに置き換えるため，スピニングモジュール，および回転検出用の光電圧変換モジュールの開発を行っている。前者は昨年度から開発を始め，本年度同社市販品と同一の最高回転周波数を達成した。更なる性能向上を目指して改良を行っている。後者は今年度から，装置開発室の豊田氏の援助を受けて開発を行っている途中である。

B-3) 総説, 著書

K. NISHIMURA and M. TANIO, “Functional and Structural Characterization of Membrane Binding Proteins,” in *Annual Reports in NMR spectroscopy*, G. A. Webb, Ed., **105**, 47–131 (2022). DOI: 10:1016/bs.arnmr.2021.06.001

西村勝之, 「固体NMRによる膜タンパク質の構造解析」, 「創薬研究者がこれだけは知っておきたい最新のウイルス学」, 技術情報協会, 180–190 (2021). ISBN: 978-4-86104-855-5

B-7) 学会および社会的活動

学会の組織委員等

第22回国際磁気共鳴会議 (ISMAR), 第9回アジア太平洋NMRシンポジウム (AP-NMR), 第60回NMR討論会 (NMRSJ), 第60回電子スピンスイエンズ学会 (SEST2021) 合同会議組織委員 (2020–2021).

B-8) 大学での講義, 客員

総合研究大学院大学統合生命科学教育プログラム, 「Introduction of solid state NMR and its application to structural characterization of biomolecules (機能生体分子化学)」, 2021年1月7日, 14日.

B-10) 競争的資金

科研費基盤研究(C), 「超分子構造の分子間配座解析に資する固体NMR解析法開発とその適用」, 西村勝之 (2019年–2021年).

C) 研究活動の課題と展望

独自開発プローブの全ての部品を独自設計品に置き換えるためのモジュール開発も進んでおり, 残り2つとなった。昨年度から最難関のスピンングモジュールの開発を行っており, 年度末にようやく市販品と同じ最高回転周波数を達成した。2021年度前半は, 5月から9月までNMR室の複数の空調の寿命による入れ替え, 分光器温度コントローラーの故障などに見舞われ, 長期間NMR実験が進まなかった。これまで何年間か, 上述のような性質の異なる全ての作業を一人で行ってきたが, 生産性に限界があり, 特に新規試料の調製初期段階では多くの地道な作業が必要である為, 試料調製を担う有能なスタッフを渴望している。

小林 玄 器 (准教授) (2018 年 4 月 1 日着任)

竹入 史隆 (助教)

AYU, Nur Ika Puji (大学院生)

内村 祐 (大学院生)

岡本 啓 (大学院生)

泉 善貴 (大学院生)

今井 弓子 (技術支援員)

久保田 亜紀子 (技術支援員)

鈴木 愛 (事務支援員)

神谷 美穂 (事務支援員)

A-1) 専門領域：無機固体化学，固体イオニクス，電気化学，蓄電・発電デバイス

A-2) 研究課題：

- a) H⁻ 導電性酸水素化物の物質探索
- b) H⁻ 導電性化合物のイオン導電機構解析
- c) H⁻ のイオン導電現象を利用した新規イオニクスデバイスの創成

A-3) 研究活動の概略と主な成果

- a) H⁻ 導電体の物質探索では，これまで主な探索対象としていた酸水素化物から，酸素を含まない複合アニオン水素化物や金属水素化物へと探索対象を拡げた。新たに発見した水素化硫化物 LaAH_3S ($A = \text{Ba}, \text{Sr}$) は，400 °C で 1 mS/cm に達するイオン導電率を示すだけでなく，大気下での化学安定性を獲得した。蛍石構造をとる金属水素化物では，独自の合成指針によって電子伝導性の抑制に成功し，室温～100 °C において非常に高い導電率を達成した。また，電極への応用を見据えた水素・電子混合導電体の物質探索では，メカノケミカル法を用いた直接合成によって，遷移金属酸水素化物 $\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$ を非加熱で合成することに成功し，その水素透過電極としての機能を初めて実証した。また，スパッタ法により，同物質の多結晶膜の直接成膜にも成功した。
- b) 当グループで発見した $\text{AE}_2\text{LiH}_3\text{O}$ ($\text{AE} = \text{Sr}, \text{Ba}$) は，相転移に伴って高温で H⁻ 超イオン導電性を示し，元素置換を施すことで 300 °C 以下で高温相を安定化できる。本系の重水素体を用いた高温中性子回折実験を実施し，核密度分布解析 (MEM) によって水素の分布を調べたところ，想定していたアニオンサイトとは異なる格子間位置において優位な存在確率が示唆された。これは水素の拡散が単純なサイトホッピング機構とは異なることを意味しており，当該物質の超イオン導電性を支持する結果である。
- c) 300 °C 以上で超イオン導電性を示す $\text{Ba}_{1.75}\text{LiH}_{2.7}\text{O}_{0.9}$ を固体電解質として用いた電気化学デバイスの開発をおこなっている。これまで，その焼結密度の低さ (~70%) が課題のひとつであったが，新たに導入したホットプレスを用いることで，密度が 90% 超の焼結体の作成が可能となった。これによって，水素ガスリークが抑制できる。また，産学連携によって表面研磨技術を適用することで，ペレット表面の凹凸を大幅に低減することにも成功し，電解質・電極界面の制御へ向けた技術的課題を克服した。

B-1) 学術論文

H. UBUKATA, F. TAKEIRI, K. SHITARA, C. TASSEL, T. SAITO, T. KAMIYAMA, T. BROUX, A. KUWABARA, G. KOBAYASHI and H. KAGEYAMA, “Anion Ordering Enables Fast H⁻ Conduction at Low Temperatures,” *Sci. Adv.* **7(23)**, eabf7883 (7 pages) (2021). DOI: 10.1126/sciadv.abf7883

T. UCHIMURA, F. TAKEIRI, K. OKAMOTO, T. SAITO, T. KAMIYAMA and G. KOBAYASHI, “Direct Synthesis of Barium Titanium Oxyhydride for Use as a Hydrogen Permeable Electrode,” *J. Mater. Chem. A* **9(36)**, 20371–20374 (2021). DOI: 10.1039/D1TA05783A

A. KUWABARA, F. TAKEIRI, H. NAWAZ and G. KOBAYASHI, “First-Principles Calculations of Point Defect Formation and Anion Diffusion Mechanisms in the Oxyhydride Ba₂ScHO₃,” *ChemRxiv* 10.26434/chemrxiv.12121254.v2 (2020). DOI: 10.26434/chemrxiv.12121254.v2

S. DEKURA, Y. SUNAIRI, K. OKAMOTO, F. TAKEIRI, G. KOBAYASHI, Y. HORI, Y. SHIGETA and H. MORI, “Effects of Mechanical Grinding on the Phase Behavior and Anhydrous Proton Conductivity of Imidazolium Hydrogen Succinate,” *Solid State Ionics* **372**, 115775 (2021). DOI: 10.1016/j.ssi.2021.115775

F. TAKEIRI, A. WATANABE, K. OKAMOTO, D. BRESSER, S. LYONNARD, B. FRICK, A. ALI, Y. IMAI, M. NISHIKAWA, M. YONEMURA, T. SAITO, K. IKEDA, T. OTOMO, T. KAMIYAMA, R. KANNO and G. KOBAYASHI, “Hydride-Ion-Conducting K₂NiF₄-Type Ba–Li Oxyhydride Solid Electrolyte,” *Nat. Mater.* **21**, 325–330 (2022). DOI: 10.1038/s41563-021-01175-0

B-3) 総説, 著書

竹入史隆, 小林玄器, 「H⁻ 導電性酸水素化物の合成法」, *セラミックス*, **56**, 536–539 (2021).

竹入史隆, 小林玄器, 「層状ペロブスカイト酸水素化物のサイト選択性とH⁻ 導電」, *結晶学会誌*, **63(2)**, 73–74 (2021).

小林玄器, 「H⁻ 導電体: 物質開発の現状と応用可能性」, *水素エネルギーシステム (J. Hydro. Energy Sys. Soc. Japan)*, **46(1)**, 12–17 (2021).

K. MAEDA, F. TAKEIRI, G. KOBAYASHI, S. MATSUSHI, H. OGINO, S. IDA, T. MORI, Y. UCHIMOTO, S. TANABE, T. HASEGAWA, N. IMANAKA and H. KAGEYAMA, “Recent Progress on Mixed-Anion Materials for Energy Applications,” *Bull. Chem. Soc. Jpn.* **95**, 26–37 (2022).

竹入史隆, 陰山 洋, 「複合アニオン化合物の化学」, 「複合アニオン化合物の科学」, 丸善出版, pp. 1–20 (2021).

小林玄器, 飯村壮史, 細野秀雄, 「中温域高速ヒドリドイオン伝導体」, 「“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」, 共立出版, pp. 67–78 (2022).

B-4) 招待講演

小林玄器, 「H⁻ 導電体の物質開拓」, ポリマーフロンティア 21 (高分子学会), オンライン開催, 2021年6月.

B-6) 受賞, 表彰

小林玄器, 永井科学技術財団学術賞 (2022).

岡本 啓, 電気化学会第 88 会大会優秀学生講演賞 (2021).

B-7) 学会および社会的活動

学協会役員等

一般社団法人日本固体イオニクス学会社員 (2020-).

学会の組織委員等

第 61 回電池討論会実行委員 (2020).

B-9) 学位授与

AYU, Nur Ika Puji, 「Synthesis and Structural Studies on $(\text{Ba},\text{Sr})_3\text{Ga}(\text{H},\text{D})\text{O}_4$ and $\text{Ba}_2\text{LiD}_3\text{O}$ Oxyhydrides」, 2021 年 9 月, 博士 (理学).

B-10) 競争的資金

科学技術振興機構創発的研究支援事業, 「ヒドリドイオン導電性材料の開拓と新規イオニクスデバイスの創製」, 小林玄器 (2021 年-2028 年).

科研費基盤研究研究 (B), 「ヒドリド導電体の物質科学—低温作動化に向けた物質設計指針の構築—」, 小林玄器 (2020 年-2022 年).

科学技術振興機構さきがけ研究, 「複合アニオン固体電解質を用いたヒドリドインターカレーション反応の開拓」, 竹入史隆 (2020 年-2023 年).

科研費新学術領域研究 (研究領域提案型) 「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」, 「高速・局所移動水素と電子とのカップリングによる新発想デバイスの設計」 (代表: 森 初果), 小林玄器 (研究分担者) (2018 年-2022 年).

科学技術振興機構未来社会創造事業探索加速型, 「実用的中温作動型水素膜燃料電池の開発」 (代表: 青木芳尚), 小林玄器 (研究分担者) (2017 年-2021 年).

科研費基盤研究 (B), 「軽元素カチオン置換に基づく中低温作動プロトン伝導体の創製」 (代表: 松井敏明), 竹入史隆 (研究分担者) (2020 年-2023 年).

C) 研究活動の課題と展望

H⁻ 導電性酸水素化物の物質探索および新規イオニクスデバイスの創製

当グループが特に注力している H⁻ 超イオン導電体 $\text{Ba}_{1.75}\text{LiH}_{2.7}\text{O}_{0.9}$ (BLHO) に関する成果は, *Nature Materials* 誌に掲載され, 知財も特許登録に向けて審議が進んでいる。BLHO への元素置換による超イオン導電相への転移温度の低下と導電率の向上に成功した結果については, 現在論文投稿中である。本研究の主導的役割を担った学生は, 2019 年度の日本化学会東海支部長賞に続き, 電気化学会第 88 回大会の優秀学生講演賞 (2021) の受賞や分子研 SRA 採択 (2021 年 10 月-) など, 高い評価を得ている。BLHO の構造相転移および超イオン導電相についての固体化学的探求は, 最大エントロピー法 (MEM 法) で示された格子間位置の水素によって新たな展開を迎えた。金属における侵入型固溶の例からも明らかのように, 水素は特異的に格子間位置を占めやすい元素であるが, それがアニオン種としての H⁻ 超イオン導電においても実現するとなれば画期的な知見となる。現在, 中性子全散乱を用いた局所構造解析 (PDF 解析) を計画しているほか, 共同研究による大規模な分子動力学 (MD) 計算など, 多角的なアプローチによってその現象解明を目指している。

BLHOを固体電解質として用いた電気化学デバイスの開発は、以前にも検討を実施していたが、ガスリーク問題や電極/電解質界面の不安定さなどの課題により、中断を余儀なくされていた。しかし、焼結密度の大幅向上(70%台→90%台)を達成したほか、新たなデバイス試験セルを装置開発室と共同設計したことで(現在作成中)、ガスリークの問題には一定の目処が見ついた。界面についても、以前はBLHOとパラジウム電極との界面不安定性の問題があったが、 $\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$ が安定な水素透過電極としてはたらくこと、および、その直接成膜が可能になったことで、デバイス開発に再度挑戦できる状況にある。電解質BLHOと電極 $\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$ からなる対称セルを作成し、外部電場による H^- の反応場への安定供給、ひいては NH_3 合成や CO_2 還元といった水素化反応の促進を目指す。

酸水素化物以外の H^- 導電体の合成についても水素化ハロゲン化物、水素化硫化物、あるいは金属水素化物といった様々な方向性が見つかっている。また、導電率のみならず、化学安定性や電圧に対する安定性(電位窓の広さ)などの点において、アニオン格子ごとに異なる特徴が引き出されることも明らかになってきた。引き続き物質探索を推し進めるとともに、高い導電率や安定性の起源を結合状態や電子状態から探ることで、将来的な材料設計指針につながる包括的な議論をおこなう必要がある。

H^- を含む化合物の探索は国際的にもイオン交換反応や高压合成などの特殊手法に依存していたが、簡便なメカノケミカル法による合成を実現できたことには大きな意義がある。 $\text{BaTiO}_{3-x}\text{H}_x$ は既知物質だが、合成条件の最適化によってその水素固溶量が増加できる兆候を見出しているほか、他の遷移金属を含む新規酸水素化物も得られている。特に前期遷移金属を含む系との相性のよさが見られていることから、新たな電極材料の探索という位置付けでの検討を継続していく。