



水素貯蔵材料先端基盤研究事業

独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構

【委託先】

独立行政法人産業技術総合研究所

国立大学法人広島大学

国立大学法人北海道大学

学校法人上智学院

独立行政法人日本原子力研究開発機構

兵庫県立大学

国立大学法人神戸大学

国立大学法人大阪大学

国立大学法人岐阜大学

財団法人高輝度光科学研究センター

国立大学法人東北大学

独立行政法人物質・材料研究機構

大学共同利用機関法人高エネルギー加速器研究機構

平成21年7月23日～24日
中間評価分科会

【再委託先】

米国ロスアラモス国立研究所

国立大学法人京都大学

独立行政法人日本原子力研究開発機構

国立大学法人山形大学

学校法人福岡大学

国立大学法人九州大学

国立大学法人新潟大学

公開

1 / 46

水素貯蔵材料先端基盤研究事業



【報告の流れ】

プロジェクトの概要説明 (7 / 23)

- I. 事業の位置づけ・必要性 (NEDO 山本)
- II. 研究開発マネジメント (NEDO 山本, 秋葉 P L)
- III. 研究開発成果 (秋葉 P L)
- IV. 実用化の見通し (秋葉 P L)

プロジェクトの詳細説明 (7 / 24)

研究開発成果・実用化の見通しについて

- 1. プロジェクト全体 (秋葉 P L)
- 2. 金属系材料の基礎研究 (中村 S L)
- 3. 非金属系材料の基礎研究 (小島 S L)
- 4. 水素と材料の相互作用の実験的解明 (町田 S L)
- 5. 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究 (小川 S L)
- 6. 中性子実験装置による水素貯蔵材料に関する共通基盤研究 (大友 S L)

公開

事業原簿p.1-(1)

2 / 46

政策上の位置づけ

低炭素社会づくり行動計画（H20年7月）

環境エネルギー技術革新計画（H20年5月）

Cool Earth—エネルギー革新技術計画（H20年3月）

エネルギー基本計画（H19年3月改訂）

新・国家エネルギー戦略（H18年5月）

燃料電池自動車^①が、運輸部門からの二酸化炭素排出を削減する次世代自動車の一つとして位置付けられるとともに、その普及と表裏一体をなす水素の製造・輸送・貯蔵技術^②が重要課題と位置付けられている。

○ 運輸エネルギーの次世代化計画

運輸部門におけるエネルギー需給構造改善のためには、燃費改善に向けた取組を引き続き進めるとともに、バイオマス由来燃料やGTL（ガス・トゥー・リキッド）等の新燃料を既存の石油系燃料に混合することにより運輸部門の燃料多様化を図ることが必要である。また、中長期的には、次世代内燃機関等に係る技術開発の進展を踏まえた対応や、燃料電池自動車、電気自動車等の次世代を担う自動車の実用化・普及により、運輸部門の燃料を電力、水素等に多様化していくことも必要となる。

○ 燃料電池自動車に関する技術開発の推進

燃料電池自動車については、電池の高性能化に加え、燃料電池の抜本的低コスト化や耐久性・効率の更なる向上、安全・簡便・効率的かつ低コストな水素貯蔵技術の確立といった課題を解決することが必要であることから、引き続き技術開発・実証研究を実施する。

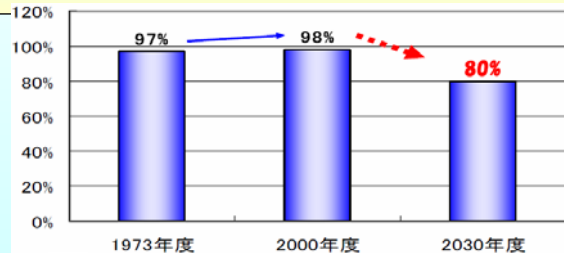
エネルギーイノベーションプログラム

【5つの政策の柱】 I, II, III, V に寄与

I. 総合エネルギー効率の向上

II. 運輸部門の燃料多様化

達成目標: バイオマス由来燃料、GTL、BTL、CTLなどの新燃料、電気自動車や燃料電池自動車などの導入により、現在ほぼ100%の運輸部門の石油依存度を2030年までに80%程度とすることを旨とする。



【図】 運輸部門における我が国の石油依存度と目標値

III. 新エネルギー等の開発・導入促進

IV. 原子力等利用の推進とその大前提となる安全の確保

V. 化石燃料の安定供給確保と有効かつクリーンな利用

エネルギーイノベーションプログラム

【II. 運輸部門の燃料多様化】

II - i. 共通

II - ii. バイオマス由来燃料

II - iii. GTL等の合成液体燃料

II - iv. 燃料電池自動車および水素関連技術

(1) 固体高分子形燃料電池実用化戦略的技術開発

(2) 燃料電池先端科学研究

(3) 水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発

(4) 水素貯蔵材料先端基盤研究事業

世界トップ水準の優れた研究者を中核に、国内外の研究機関・企業のバーチャルな連携の下、高圧水素貯蔵に比べよりコンパクトかつ効率的な水素貯蔵を可能とする水素貯蔵材料の性能向上に必要な条件等を明らかにすることにより、燃料電池自動車の航続距離の飛躍的向上を図る。

(5) 水素社会構築共通基盤整備事業

(6) 燃料電池システム等実証研究

II - v. 電気自動車

I. 事業の位置づけ・必要性 (研究開発政策上の位置づけ)

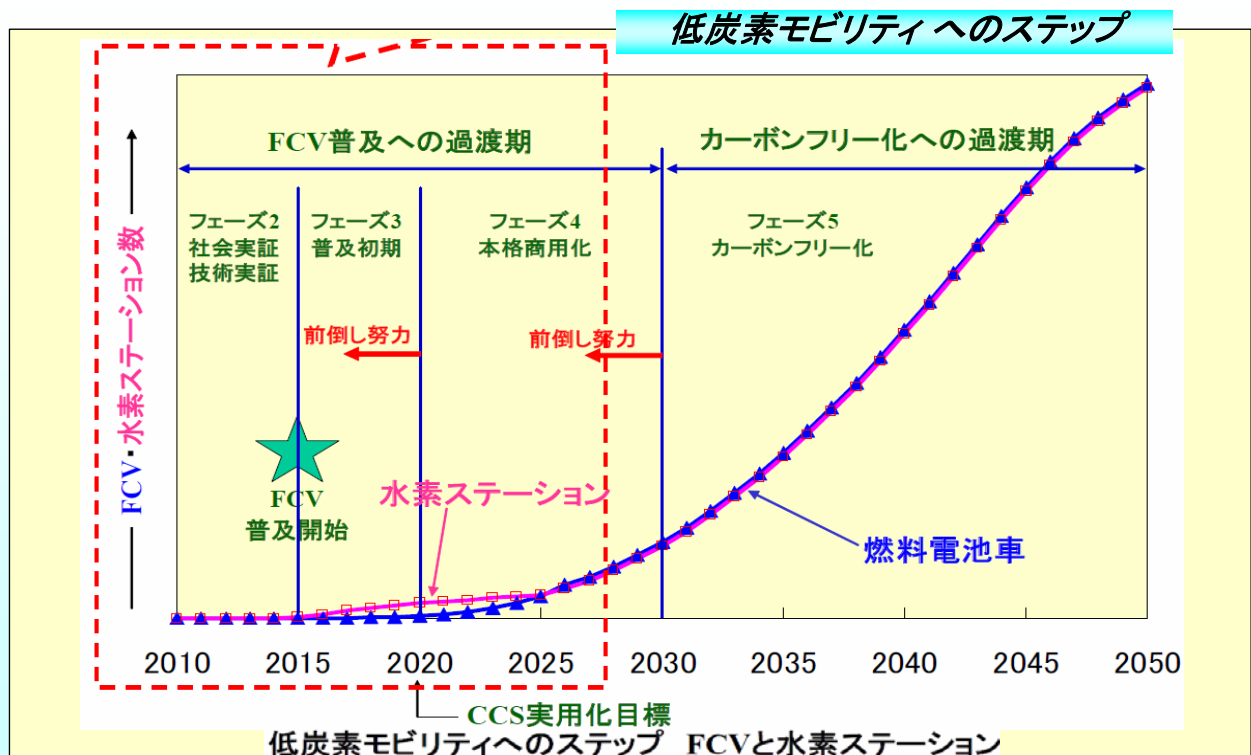
②「運輸部門の燃料多様化」に寄与する技術の技術ロードマップ(4/7)

エネルギー分野 技術戦略マップ

No.	エネルギー技術 個別技術	2010	2015	2020	2025	2030~
3331I	無機系・合金系 水素貯蔵材料	【合金系材料】 材料の劣化機構の解明と対策検証 水素吸蔵・放出速度の向上技術 水素放出温度の低温化 合金系材料新規探索		合金系材料	無機系材料	
		アラネート系 アミド・イミド系 ポロハイドライド系 複合系 など		【無機系材料】 有望材料の探索と材料組成最適化 ハンドリング技術の確立 吸蔵・放出温度低温化 反応速度・耐久性向上 副反応生成物等の放出抑制		
3332I	有機系・炭素系 水素貯蔵材料	【有機系水素貯蔵材料】 ステーション用水素発生装置 水素ステーション用輸送・回収技術 有機ハイドライド貯蔵技術		高性能水素放出触媒	【炭素系水素貯蔵材料】 高水素吸蔵量材料の構造設計 または合成指針の確立・適用 (新規形状、化学修飾、元素置換、複合化など)	
		水素貯蔵容器コスト (車1台あたり)約300~500万円		約5~7kg	~数十万円 約7kg	
3333I	水素貯蔵容器	圧縮水素容器 液体水素容器 ハイブリッド(高圧水素貯蔵材料容器)		高強度材料 耐久性向上 軽量・コンパクト化 断熱性能向上		

公開 事業原簿p. (添付資料)

I. 事業の位置づけ・必要性 (産業界のシナリオ)



産業競争力懇談会 (COCN) 2008年度推進テーマ 中間報告H20年12月3日発表資料より引用

公開 事業原簿p.I-(6)

【事業の目的】

燃料電池自動車に大量の水素をより安全・簡便・効率的かつ低コストに輸送するための技術としての**水素貯蔵材料に求められる実用性**：

- ・**水素貯蔵量**：水素貯蔵能力の大幅な性能向上（車載用として）：5～6質量%以上
- ・**最適な水素化物安定性**：水素貯蔵に最適な水素化エンタルピー（水素化反応の反応熱）
- ・**反応速度**（水素吸放出速度）
- ・**十分な耐久性**

水素貯蔵材料の基本原理の解明

材料研究への応用技術の基礎を確立

【水素エネルギー社会実現のための必要な技術のブレークスルーへ】

水素貯蔵材料の開発指針を産業界に提供することにより、水素社会の真の実現に必要な基盤技術の確立を促進することを目的とし、それにより将来の燃料電池自動車の**実用化・普及**を図る。

- 前事業「水素安全利用等基盤技術開発」（平成15年度～19年度）内水素貯蔵に係る技術を網羅的に取り上げ、絞り込み方式（10以上のテーマをNEDOが個別に委託）

<評価>

・いくつかのテーマについては世界水準と同等あるいは先行するレベルの研究開発成果を実現しているものの、研究管理体制について工夫が必要

<反省点>

・個別委託先の技術レベルは向上するものの、委託先間の連携・情報交換が弱いことから、日本全体としての基盤強化には直接的には効果が薄い。

- 一回の水素供給による自動車走行距離：500km（最低限の目標）
→ 高圧水素タンクの技術開発進展によって達成

産業界の要望：高圧水素タンクを超える技術の必要性
（コスト低減・エネルギー効率向上の観点）

●水素貯蔵技術に関するその後の取組を検討するため、NEDOが開催

- (1)水素貯蔵技術関係者など 連絡会(平成17年6月;約50名)
- (2)懇話会を3回開催(平成17年11月～平成18年5月;約20名)
- (3)専門家による意見交換会(平成18年11月)
- (4)ワークショップ開催(平成19年1月)

・本事業の基本計画策定に先立ち、研究内容、技術課題等に対する意見を当該分野に関連する専門家の方を中心として幅広く求める

・本事業のPLとして、NEDOが産業技術総合研究所秋葉氏を指名

指名理由: ①当該分野において世界第一線の研究者、②優れたマネジメント能力(「水素安全利用等基盤技術開発」の水素貯蔵関連PJでリーダー的な役割)、③国際的にも優れた研究者のネットワークのハブ(IEA-HIAのANNEX、LANLとの研究協力において日本側の研究責任者)、④本事業の背景・目的等を熟知(上記懇談会等において検討をリード)。

●本事業の計画・体制構築上の留意点

- (1)水素貯蔵技術にブレークスルーをもたらすためには基礎に立ち返った研究が必要であること
- (2)強力なプロジェクトリーダーの存在が極めて有効であること
- (3)機関の壁を越えて可能な限り情報交換・研究交流を行うこと

【NEDOが関与することの意義】

- (1)新エネルギー・省エネルギーに係る国家プロジェクトをマネジメント
- (2)燃料電池と水素製造・輸送・貯蔵の開発・普及に係る複数の研究事業を連携・整合して進める
- (3)燃料電池自動車の普及、水素供給インフラストラクチャの確立は、世界的な広がりがあるからこそエネルギー・環境に大きな効果
→国際的な関係の構築においてNEDOの関与は有効

民間企業による個々の取り組みによって目的を達成することは、極めて困難

本事業の立ち上げの検討を主体的に担ってきたNEDOが関与することが最適

費用

表 I.-(1) 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 予算 (百万円)

会計・勘定	19年度	20年度	21年度	合計
特別会計(需給)	757	908	1,000	2,664
加速財源	0	210	269	479
合計	757	1,118	1,269	3,144

効果

・水素貯蔵材料の開発方針の産業界への提示

→ 燃料電池自動車用ハイブリッド容器(水素貯蔵材料を内蔵した高圧水素容器)の実現

安全・簡便・効率的かつ低コストな水素貯蔵技術の確立の担い手

【「環境エネルギー技術革新計画」による予測】(平成20年5月)

燃料電池自動車:3兆円以上(世界市場規模;2030年)、水素貯蔵輸送:3,000億円未満

【経済効果試算】

(仮定1)燃料電池自動車の生産台数と価格:100万台・300万円/台(現状数千万円)(2030年)

(仮定2)自動車搭載の水素貯蔵システム:10万円(現状では300~500万円) → 1,000億円(試算)

(仮定3)世界の自動車生産台数:約7,000万台(2008年)の内、数百万台がFCHV

→ 水素貯蔵システムの市場規模:数千億円と期待

水素貯蔵材料先端基盤研究事業

【報告の流れ】

プロジェクトの概要説明 (7 / 23)

I. 事業の位置づけ・必要性 (NEDO 山本)

II. 研究開発マネジメント (NEDO 山本, 秋葉PL)

III. 研究開発成果 (秋葉PL)

IV. 実用化の見通し (秋葉PL)

プロジェクトの詳細説明 (7 / 24)

研究開発成果・実用化の見通しについて

1. プロジェクト全体 (秋葉PL)

2. 金属系材料の基礎研究 (中村SL)

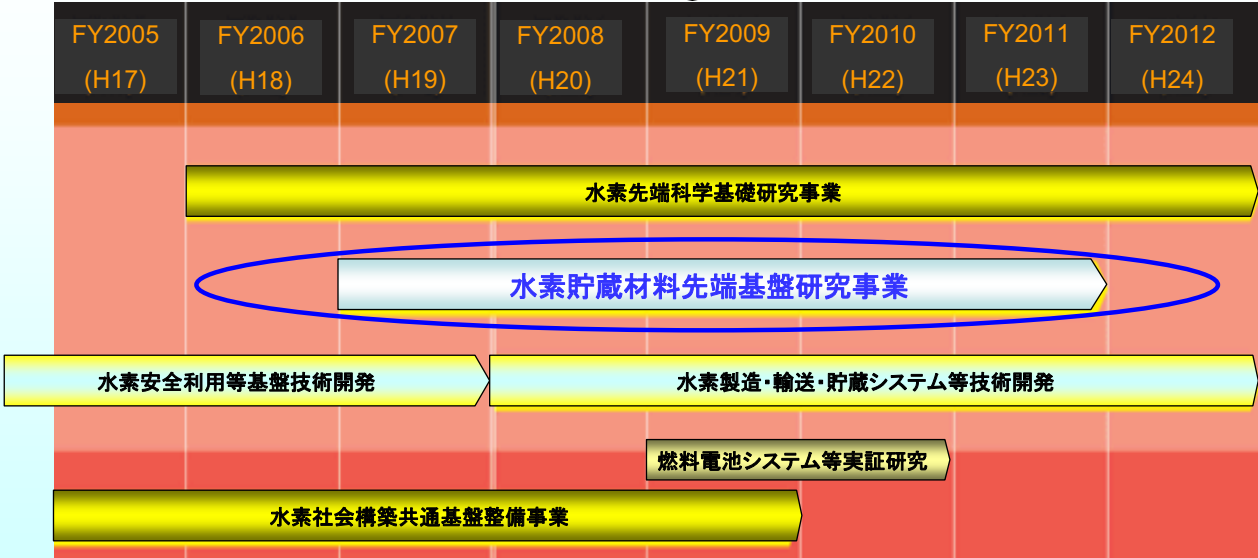
3. 非金属系材料の基礎研究 (小島SL)

4. 水素と材料の相互作用の実験的解明 (町田SL)

5. 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究 (小川SL)

6. 中性子実験装置による水素貯蔵材料に関する共通基盤研究 (大友SL)

現在



水素貯蔵技術ロードマップ

～軽量・コンパクト・低コスト・安全な、燃料電池自動車 (FCV) 用水素貯蔵容器の実現に向けて～

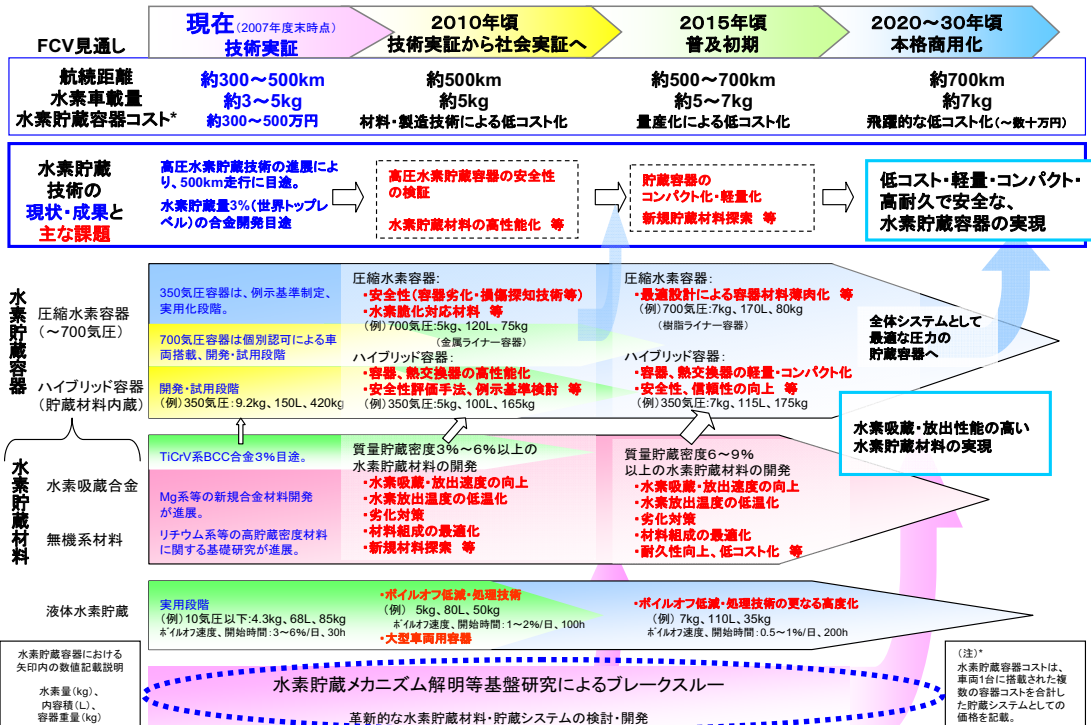


図 水素貯蔵技術ロードマップ NEDO燃料電池・水素技術ロードマップ2008 (平成20年5月)

II. 研究開発マネジメント

【研究の目標】

5グループの研究基盤の構築 → 水素貯蔵材料の開発指針の提示へ

【金属系材料G】SL: 中村優美子 (産総研)

【研究開発項目】**金属系水素貯蔵材料の基礎研究**
 【中間】・金属系水素貯蔵材料の構造解析を高度化
 ・水素吸放出反応の理解と反応機構解明に道筋
 【最終】金属系水素貯蔵材料の開発指針を提示

【非金属系材料G】SL: 小島由継 (広島大)

【研究開発項目】**非金属系水素貯蔵材料の基礎研究**
 【中間】・ナノ複合水素貯蔵材料の反応機構解明の指針
 ・電子状態や構造安定性を解明
 【最終】非金属系水素貯蔵材料の開発指針を提示

【材料物性G】
SL: 町田晃彦 (原研)

【研究開発項目】**水素と材料の相互作用の実験的解明**
 【中間】水素と材料の相互作用と構造の関係を解明し、水素貯蔵材料開発指針の基礎知見を獲得
 【最終】高濃度水素化合物の開発指針を提示

分析基盤
放射光等

材料科学研究基盤

PL: 秋葉悦男 (産総研)

【中間目標：平成21年度】
水素貯蔵材料の構造解析、貯蔵原理の基礎解明等を進め、水素貯蔵材料の開発指針作成の方向性を定める
 【最終目標：平成23年度】
水素貯蔵材料の構造解析、貯蔵機構の原理解明等を実施して、高圧水素貯蔵方式よりコンパクトで効率的な水素貯蔵材料の開発指針を提供する

分析基盤
中性子

【中性子G】
SL: 大友季哉 (高エネ研)

【研究開発項目】**中性子実験装置による水素貯蔵材料に関する共通基盤研究**
 【中間】
・中性子全散乱装置の運用開始
・中性子全散乱装置の性能実証
・水素位置情報の精密測定用中性子制御デバイス仕様策定
 【最終】
基盤技術としての中性子散乱法を確立

計算科学研究基盤

【計算科学G】SL: 小川浩 (産総研)

【研究開発項目】**計算科学による水素貯蔵材料の基礎研究**
 【中間】・各種水素吸蔵材料の電子密度分布、最安定な水素位置等を解明
 ・吸蔵特性等に寄与するミクロ構造等の指針
 【最終】計算科学的手法による開発指針を提示

II. 研究開発マネジメント

【研究の実施体制】

経済産業省(METI)

新エネルギー・産業技術総合開発機構(NEDO)

委託

推進助言委員会

プロジェクトリーダー 秋葉悦男 (産総研 エネルギー技術研究部門 副研究部門長)

サブリーダー
中村優美子 (産総研)

金属系材料G
産業技術総合研究所
結晶構造・局所構造解析
欠陥構造・ナノ構造解析
水素の存在状態解析
・粉末X線・中性子回折
・陽電子消滅
・TEM
・固体NMR

サブリーダー
小島由継 (広島大)

非金属系材料G
広島大学
ナノ複合化技術
in-situ分析技術
第一原理計算
北海道大学
構造解析: TEM
上智大学
電解水素チャージ

サブリーダー
町田晃彦 (原研)

材料物性G
【各種分析基盤技術構築】
原子力研究開発機構
(播磨) [SPRING-8]
・放射光X線/中性子回折
・放射光光電子分光/吸収分光
・メスバウアー分光
(東海) [JRR-3J-PARC]
・中性子回折
兵庫県立大学
・X線吸収分光
・光電子分光
神戸大学
・反跳弾性/ラフォード後方散乱
大阪大学
・極限環境下電気伝導度
・LEED-STM
広島大学
・X線吸収分光/XMCD
岐阜大学
・高圧下ラマン散乱/光吸収
高輝度光科学研究センター
[SPRING-8]
・多重極限X線回折/精密構造解析
東北大学
・in-situ NMR

サブリーダー
小川浩 (産総研)

計算科学G
産業技術総合研究所
第一原理計算
分子動力学計算
物質・材料研究機構
水素誘起アモルファス化
東北大学
ミクロ孔金属錯体物質
クラスレートハイドレート

サブリーダー
大友季哉 (高エネ研)

中性子G
高エネルギー加速器
研究機構[J-PARC]
中性子全散乱装置建設
水素貯蔵合金構造解析

再委託

原子力研究開発機構
(東海) [J-PARC]
中性子全散乱装置
建設・結晶構造解析
酸化物ガラス (構造解析)
京都大学
装置設計・非晶質・水素
吸蔵合金構造解析
山形大学
水素系複雑構造物質
構造解析
福岡大学
水素系複雑構造物質
構造シミュレーション
九州大学
金属系複雑構造物質
構造シミュレーション
新潟大学
複雑系融体物質
構造解析

再委託

ロスアラモス国立研究所
[LANL]
構造解析手法構築
・中性子全散乱装置
金属系材料構造設計
・シミュレーション技術

共同実施

大型研究設備を導入する委託先に重点配分。特に、中性子Gについては、国内初となる中性子全散乱装置の建設に潤沢な投資が必要であり、3年間で約10億円をかけて、本格供用に向けた準備が整う予定

研究G	会計・勘定	19年度	20年度	21年度	合計
金属系G	特別会計(需給)	149	148	273	569
	加速財源	0	11	40	51
	小計	149	158	313	620
非金属系G	特別会計(需給)	146	99	114	359
	加速財源	0	30	5	35
	小計	146	129	119	394
材料物性G	特別会計(需給)	166	160	155	480
	加速財源	0	64	22	86
	小計	166	224	177	567
計算科学G	特別会計(需給)	97	117	167	382
	加速財源	0	0	80	80
	小計	97	117	247	462
中性子G	特別会計(需給)	198	384	291	874
	加速財源	0	105	122	227
	小計	198	489	413	1,101
合計	特別会計(需給)	757	908	1,000	2,664
	加速財源	0	210	269	479
	合計	757	1,118	1,269	3,144

【水素貯蔵材料先端基盤研究事業 推進助言委員会】

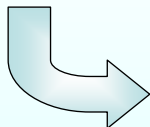
水素分野の学会の専門家、自動車・エネルギー・材料・保安技術など、
学界・産業界の有識者の意見・助言をプロジェクトマネジメントに活用

「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」推進助言委員

	所属	氏名
委員長	東京大学大学院工学研究科・教授	堂免 一成
委員	早稲田大学 名誉教授	南雲 道彦
委員	九州大学 副学長	村上 敬宜
委員	横浜国立大学大学院工学研究院 機能の創生部門・教授 (独)産業技術総合研究所 ユビキタスエネルギー研究部門	太田 健一郎
委員	新エネルギー媒体研究グループ・グループ長	栗山 信宏
委員	(社)日本自動車工業会燃料電池自動車分科会 分科会長	河津 成之
委員	トヨタ自動車 FC技術部 部長	小島 康一
委員	(株)本田技術研究所 基礎技術研究センター第1研究室・主任研究員	市川 政夫
委員	新日本石油(株)研究開発本部 中央技術研究所 水素・新エネルギー研究所 水素グループ・プリンシパルリサーチャー	小堀 良浩
委員	日本重化学工業(株) 小国事業所 金属事業部 開発部・部長	角掛 繁
委員	(株)日本製鋼所 室蘭研究所・研究副所長	岩本 隆志
委員	高圧ガス保安協会 機器検査事業部 審議役	竹花 立美

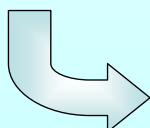
【推進助言委員会における専門的助言の活用例】

金属系材料の水素貯蔵メカニズム解明を通して、
貯蔵限界を超えるための方策を明確にすべき



【H20年度成果の展開事例】 AlH₃の高圧下直接合成に成功
→ 配位数2(H/M=2)の壁を超えるために、高圧環境下における
水素化挙動をブレイクスルーとすべく、研究を展開中

水素貯蔵材料の実用化上の技術課題を念頭に、
材料開発指針の提示に向けたアプローチが大切
(水素貯蔵能、耐久性、吸放出温度、吸放出速度)



実験系Gのみならず、計算科学Gも実用課題を意識したユニークな展開

- ①PCT曲線の平衡計算による予測 (吸放出温度)
- ②格子欠陥や表面を考慮した水素吸蔵挙動解析 (耐久性)
- ③材料中の水素拡散挙動の解析(吸放出速度)
- ④実用性(温度特性、圧力特性)を考慮した新規材料探索

【水素貯蔵材料フォーラム2009の開催とその後の展開】

水素貯蔵材料の研究開発を推進するために、「水素貯蔵材料先端基盤研究事業」と、「水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発」のうち水素貯蔵材料の開発に関わるプロジェクトについて、研究報告を行うとともに、産業界からの要望を交えたパネルディスカッションを実施

(2009/2/24)

事業間連携の推進と、産業界との連携に向けた情報発信

NEDOが推進する事業間連携 水素貯蔵材料関連PJ

水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発

水素貯蔵技術関連WG

I. システム技術開発

「車載等水素貯蔵・輸送容器システム技術」
(ハイブリッドタンク及び合金開発)
日重化、サムテック、産総研

II. 要素技術に関する研究開発

「ホウ素系水素貯蔵材料」 豊田中研、東北大
「ラーベス合金」 日重化

情報交流

III. 次世代技術開発

「スピルオーバー水素貯蔵」 東北大
「MgおよびTi系相分離型」 東海大
「超高压水素合成法」 産総研、東北大

試料提供

連携

水素貯蔵材料
先端基盤研究事業

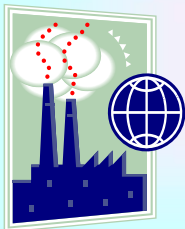
<実験・解析技術>

多様なIn-Situ測定技術等
X線回折、中性子散乱、..

Hydro☆Star事業 産業界等との連携

試料提供

産業界



水素貯蔵材料の開発

連携

水素貯蔵材料
先端基盤研究事業

分析結果・計算等の解析結果など

主な会議イベント名、開催日、場所、参加人数	概要
<ul style="list-style-type: none"> ・日米燃料電池・水素技術ワークショップ 第2回 ・H19.10.30～11.1, 台場 ・日本34名、米国17名、オブザーバー等含め計約100名 	<p>日米の水素貯蔵材料の最新の研究内容を共有して共同研究への展開の可能性を模索するとともに、既に実施中のロスアラモス研との中性子利用に関する共同研究を推進。</p> <p>中性子関連については、実質的な共同研究により、MgCo系などの結晶・非結晶複合材料の解析が進展。非金属系材料の共同研究の可能性も協議され、今後の協力関係の進展に向けて情報交流が継続中。</p>
<ul style="list-style-type: none"> ・日米燃料電池・水素技術ワークショップ第3回 ・H20.9.11～9.13, サン・ディエゴ ・日本26名、米国35名、オブザーバー等含め計約70名 	同上
<ul style="list-style-type: none"> ・国際水素貯蔵フォーラム ・H20.2.27, 台場 ・約140名 	本プロジェクトの内容及び成果を広く一般に紹介し、国内外の研究者から先進的な研究成果報告を実施。産業界からの要望を含む講演と討論を通じ研究交流の場を提供。
<ul style="list-style-type: none"> ・第3回日中水素貯蔵材料セミナー ・H20.2.26, 台場 ・日本35名、中国27名 	日中それぞれの世界の第一線で活躍する研究者が講演を行い、中国における最新の研究動向を発信すると共に、研究者間の交流を促進。
<ul style="list-style-type: none"> ・第4回日中水素貯蔵材料セミナー ・H21.4.10-12, 広州 ・日本7名、中国33名 	同上
<ul style="list-style-type: none"> ・International Workshop on Structural Analyses Bridging over between Amorphous and Crystalline Materials ・H20.1.10～1.11, 東海 ・51名(海外より約9名) 	アモルファスと結晶およびその中間に存在するナノ構造を含めた最先端の構造解析の問題について、中性子と放射光X線の区別なく議論を行うことにより、水素貯蔵材料先端基盤研究事業内の交流を促進。
	材料物性G(放射光分野)と中性子Gの研究交流が促進された結果、SPring-8とJ-PARCという、我が国を代表する量子ビーム施設を活用した水素貯蔵材料の構造物性研究が、協同的に進展している。

【加速財源1：平成20年度第1次補正予算】 2. 1億円

水素貯蔵材料の、その場観察・分析等を実施するための研究基盤を追加
 SPring-8, J-PARC (NOVA) の水素雰囲気測定環境整備 (原研、高エネ研)
 PCT装置の高圧水素測定対応 (産総研; 金属系)
 透過電子顕微鏡の高圧水素その場観察用セル (北大) 等

【加速財源2：平成21年度第1次補正予算】 2. 7億円

高温環境下における中性子全散乱測定技術を確立させる。
 高エネルギー加速器研究機構の構築する高温用研究基盤をロスアラモス
 とJ-PARCの双方で実証して研究を加速するために、早期に着手
 (中性子全散乱データの傍証を得るための、実験室系研究設備群を含む)

【PLの役割】

- ・研究計画の策定と見直し : 重要案件の加速等
- ・予算作成／配分検討 : 補正予算(H20, H21年度)による**重要課題の推進**
- ・実施計画の推進／進捗状況の管理: **事業内の成果報告会等**
- ・成果発信、事業の認知度向上: Hydro☆Star **HP情報発信、ニュースレター発行**
- ・成果の普及: 産業界を交えた**技術検討会議**の開催、ロスアラモス研とのワークショップ
- ・産業界との連携推進: 技術検討会議による連携、**並行事業との連携、公募による連携**

【中間】水素貯蔵材料の構造解析、貯蔵原理の基礎解明等を進め、水素貯蔵材料の開発指針作成の方向性を定める
 【最終】水素貯蔵材料の構造解析/貯蔵機構の原理解明等→高圧水素貯蔵方式よりコンパクトで効率的な水素貯蔵材料の開発指針提供

研究開発項目	研究目標	根拠
(1)金属系水素貯蔵材料の基礎研究	【中間】 ・金属系水素貯蔵材料の構造解析を高度化 ・水素吸放出反応の理解と反応機構解明に道筋 【最終】金属系水素貯蔵材料の開発指針提示	金属系水素貯蔵材料の高性能化を図るためには 1) 水素吸蔵量の向上 2) 耐久性の機構解明とその向上
(2)非金属系水素貯蔵材料の基礎研究	【中間】 ・ナノ複合水素貯蔵材料の反応機構解明の指針 ・電子状態や構造安定性を解明 【最終】非金属系水素貯蔵材料の開発指針提示	非金属系水素貯蔵材料の高性能化を図るためには 1) 反応速度の向上 2) 水素化物の安定性の最適化
(3)水素と材料の相互作用の実験的解明	【中間】 水素と材料の相互作用と構造の関係を解明し、水素貯蔵材料開発指針の基礎知見を獲得 【最終】高濃度水素化物の開発指針提示	放射光等を用いた水素と材料の相互作用の解明によって期待される水素貯蔵材料の特性向上 1) 水素吸蔵量の向上 2) 反応速度の向上
(4)計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究	【中間】 ・各種水素吸蔵材料の電子密度分布、最安定な水素位置等を解明 ・吸蔵特性等に寄与するマイクロ構造等の指針 【最終】計算科学的手法による開発指針提示	計算科学的手法によって期待される水素貯蔵材料の特性向上 1) 水素吸蔵量の向上 2) 水素化物の安定性の最適化
(5)中性子実験装置による水素貯蔵材料に関する共通基盤研究	【中間】 ・中性子全散乱装置の運用開始 ・中性子全散乱装置の性能実証 ・水素位置情報の精密測定用中性子制御デバイス仕様策定 【最終】基盤技術として中性子散乱法確立	水素貯蔵材料の評価法として期待される特性向上 1) 水素吸蔵量の向上 2) 水素化物の安定性の最適化 3) 反応速度の向上 4) 耐久性の機構解明とその向上

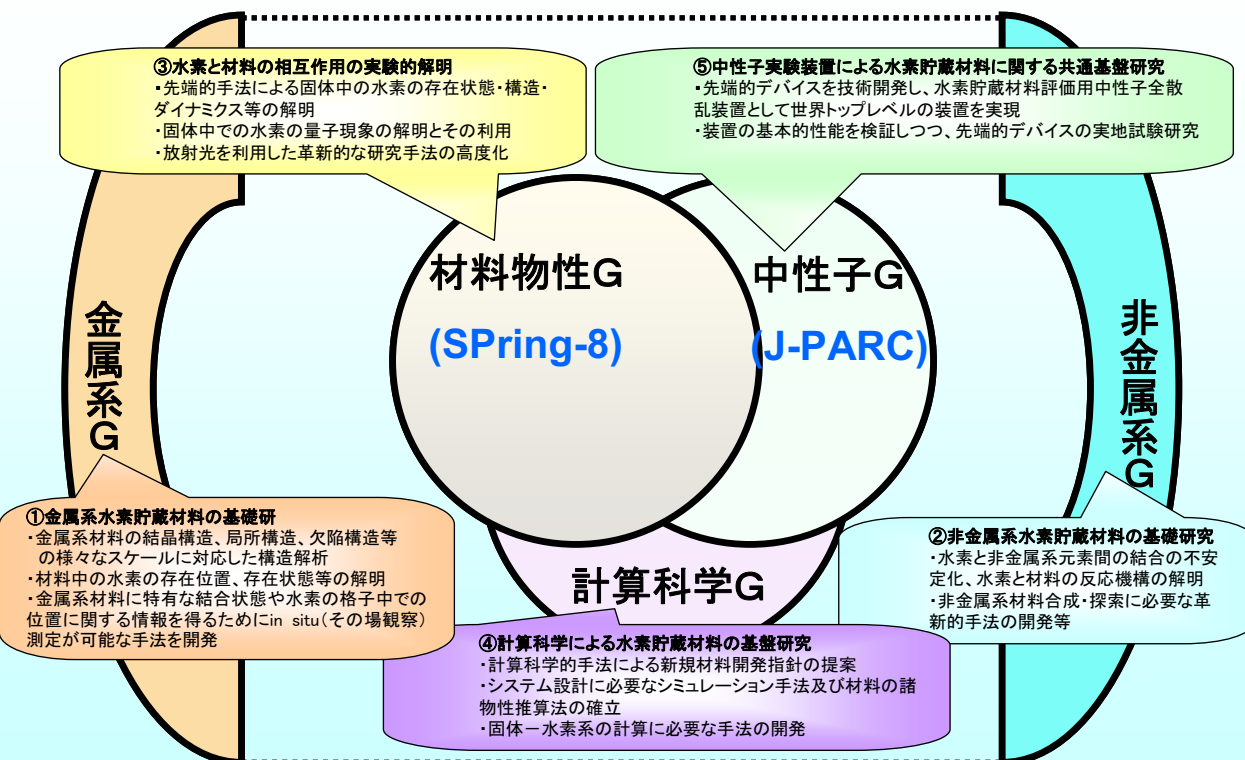
II. 研究開発マネジメント

【研究マスタープラン(PJ全体)】

研究項目	平成19年度	平成20年度	平成21年度	平成22年度	平成23年度	各Gの最終目標
①金属系水素貯蔵材料の基礎研究(担当:産総研他)	結晶・局所・欠陥構造解析手法の開発		▽金属系評価手法を確立	▽材料評価による指針		金属系の開発指針
②非金属系水素貯蔵材料の基礎研究(担当:広島大他)	ナノ構造材料解析手法の開発		▽非金属系評価手法を確立	▽材料評価による指針		非金属系の開発指針
③実用的研究(担当:原子力機構他)	装置導入・手法開発 単結晶材料の共同実験	データ提供とFB	▽Spring-8活用評価手法を確立	データ提供		高濃度水素化物等の開発指針
④計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究(担当:産総研他)	Spring-8・J-PARC共通 高圧容器製作と計測	計算手法の開発・動力学解明	☆中間目標(H21) 水素貯蔵材料の開発指針 作成の方向性を定める	▽高濃度水素化物指針		計算科学的手法による開発指針
⑤中性子実験装置による水素貯蔵材料に関する共通基盤研究(担当:高エネ機構他)	In-situセル共同開発	中性子散乱装置の開発製作	▽中性子散乱装置の立上	▽中性子散乱法の確立		基盤技術としての中性子散乱法の確立
[参考] 水素製造・輸送・貯蔵システム等技術開発	H20~H23 開発材料の評価 結果を受け渡す	両PJは密接な連携の下に推進	中性子散乱装置による実材料計測解析			☆PJ全体の最終目標 コンパクトで効率的な 水素貯蔵材料の開発 指針を提供する

II. 研究開発マネジメント

【研究開発グループの相互関係】



【報告の流れ】

プロジェクトの概要説明 (7 / 23)

- I. 事業の位置づけ・必要性 (NEDO 山本)
- II. 研究開発マネジメント (NEDO 山本, 秋葉 P L)
- III. 研究開発成果 (秋葉 P L)
- IV. 実用化の見通し (秋葉 P L)

プロジェクトの詳細説明 (7 / 24)

研究開発成果・実用化の見通しについて

- 1. プロジェクト全体 (秋葉 P L)
- 2. 金属系材料の基礎研究 (中村 S L)
- 3. 非金属系材料の基礎研究 (小島 S L)
- 4. 水素と材料の相互作用の実験的解明 (町田 S L)
- 5. 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究 (小川 S L)
- 6. 中性子実験装置による水素貯蔵材料に関する共通基盤研究 (大友 S L)

III. 研究開発成果

【プロジェクト全体の中間目標】 (平成21年度)

水素貯蔵材料の構造解析、貯蔵原理の基礎解明等を進め、水素貯蔵材料の開発指針作成の方向性を定める。

【達成状況と成果の意義】

各研究開発項目の達成状況(次項)のとおり、中間目標を達成。

- (1) 高圧水素下などにおける様々なIn-situ解析方法や計算科学的手法を新規に構築し、水素貯蔵材料の各種構造物性や反応機構を解明するための研究基盤を高度化
- (2) 上記の研究基盤を活用して、世界初のAI水素化物直接反応とその場構造測定の結果や、新規水素貯蔵材料を提案するための計算科学の進展、構造物性に極めて汎用性の高い中性子全散乱装置の完成を初めとして、意義ある成果を創出し、プロジェクト後半に向けて順調に進捗

研究開発G毎の中間目標	成果	達成度	今後の課題
(1)金属系材料G ・金属系水素貯蔵材料の構造解析を高度化 ・水素吸放出反応の理解と反応機構解明に道筋	その場(In-situ)測定法の確立 ・PCT-XRD同時測定(世界最高) ・In-situ陽電子消滅/NMR(世界初) La-Ni系等、構造/吸蔵特性の知見	○	各種In-situ測定を活用した多角的な構造・反応機構解析に基づき、水素吸蔵機構の仮説構築と検証へ
(2)非金属系材料G ・ナノ複合水素貯蔵材料の反応機構解明の指針 ・電子状態や構造安定性を解明	・Mg系ナノ複合材料等その場分析 ・環境セルによるIn-situTEM観察 ・電解水素チャージ技術	◎	可逆性吸熱型水素貯蔵材料の可能性追究
(3)材料物性G ・水素と材料の相互作用と構造の関係を解明し、水素貯蔵材料開発指針の基礎知見を獲得	・高温高圧水素化/構造解析技術 ・Al金属の水素化直接反応/観測 ・希土類金属水素化合物と遷移金属水素化合物の高圧下構造物性測定	◎	水素化/脱水素化反応過程 ・その場測定法の高度化 ・表面構造/電子構造解析 ・新規Al合金の水素化反応
(4)計算科学G ・各種水素吸蔵材料の電子密度分布、最安定な水素位置等を解明 ・吸蔵特性等に寄与するマイクロ構造等の指針	・クラスレート中の水素貯蔵量と圧力条件提示(約4mass%, >38atm, 150K) ・熱力学平衡計算によるPCT曲線 ・材料欠陥の効果予測技術	◎	・新物質/材料提案のための計算手法確立 ・新規水素貯蔵物質提案と実験的検証(共同研究等)
(5)中性子G ・中性子全散乱装置(NOVA)の運用開始 ・中性子全散乱装置の性能実証 ・水素位置情報の精密測定用中性子制御デバイス仕様策定	・J-PARCにおける中性子全散乱装置(NOVA)を開発・製作し、運用を開始 ・平成21年度中に中性子制御デバイスの製作まで完了、水素位置情報の精密測定試験を平成22年度初頭開始予定	○	・NOVAの性能検証、性能向上(In-situ散乱測定等) ・解析ソフトウェアの性能向上 ・水素貯蔵材料の構造測定と解析

【研究課題・中間目標】

- ・金属系水素貯蔵材料の構造解析を高度化
- ・水素吸放出反応の理解と反応機構解明に道筋

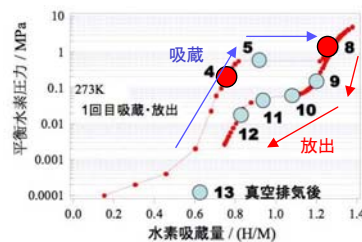
【達成度】 ○

【主要成果】

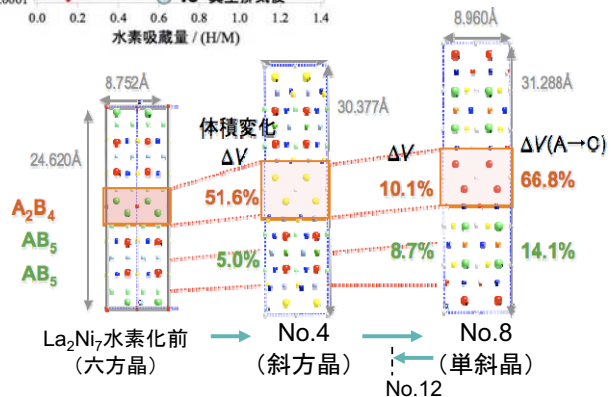
- その場(In-situ)測定法の確立
- ・PCT-XRD同時測定(世界最高)
 - ・In-situ陽電子消滅/NMR(世界初)
- La-Ni系等、構造/吸蔵特性の知見

【今後の課題】

各種In-situ測定を活用した多角的な構造・反応機構解析に基づき、水素吸蔵機構の仮説構築と実証へ



P-C曲線に沿って In situ X線回折を測定し、金属格子の変化を解析



積層構造をもつLa₂Ni₇, La₅Ni₁₉合金の解析結果:
積層するセルの組成・組み合わせ
→セルごとの水素の占有と格子膨張の違い
・構造を壊さずに吸蔵量を増加できる可能性
・可逆的な吸蔵・放出特性の可能性

【研究課題・中間目標】

- ・ナノ複合水素貯蔵材料の反応機構解明の指針
- ・電子状態や構造安定性を解明

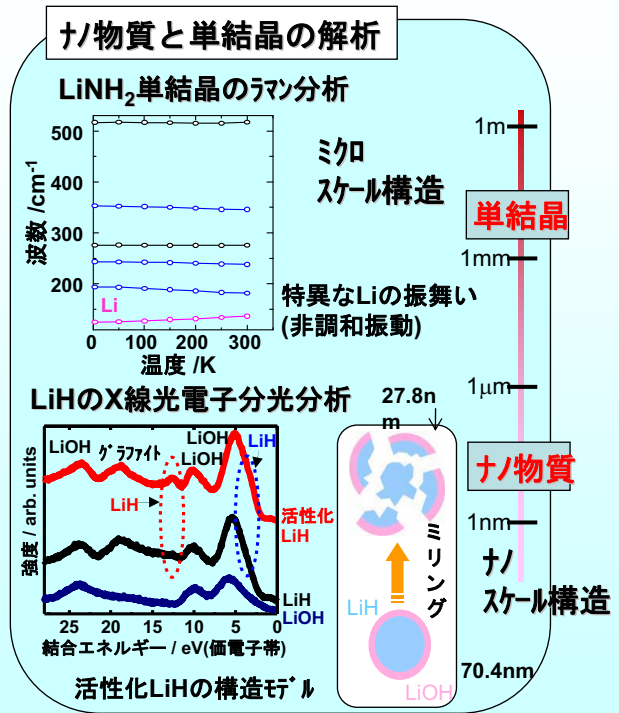
【達成度】◎

【主要成果】

- ・Mg系ナノ複合材料等その場分析
- ・環境セルによるIn-situ TEM観察
- ・電解水素チャージ技術

【今後の課題】

可逆性吸熱型水素貯蔵材料の可能性追究



【研究課題・中間目標】

- ・水素と材料の相互作用と構造の関係を解明し、水素貯蔵材料開発指針の基礎知見を獲得

【達成度】◎

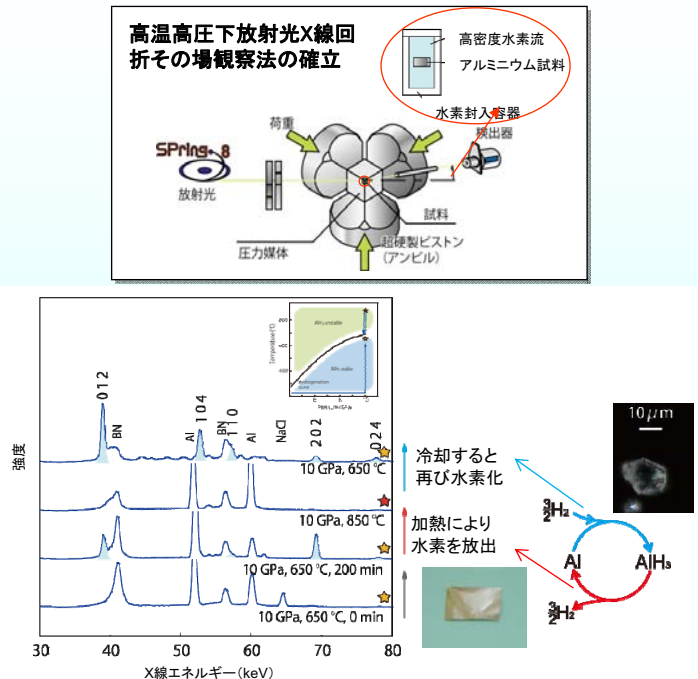
【主要成果】

- ・高温高压水素化/構造解析技術
- ・Al金属の直接水素化反応/観測
- ・希土類金属水素化物と遷移金属水素化物の高压下構造物性測定

【今後の課題】

- 水素化/脱水素化反応過程
- ・その場測定法の高度化
 - ・表面構造/電子構造解析
 - ・新規Al合金の水素化反応

Al-H系の水素化・脱水素化サイクルを世界で初めて観測



H. Saitoh *et al*, *Appl.Phys.Lett.* **93**, 151918 (2008).
 H. Saitoh *et al*, *Appl.Phys.Lett.* **94**, 151915 (2009).

新規貯蔵材料開発のための特性予測技術の確立

【研究課題・中間目標】

- ・各種水素吸蔵材料の電子密度分布、最安定な水素位置等を解明
- ・吸蔵特性等に寄与するマイクロ構造等の指針

【達成度】◎

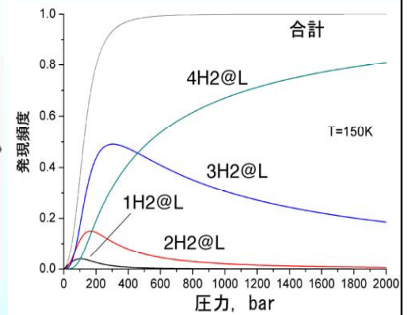
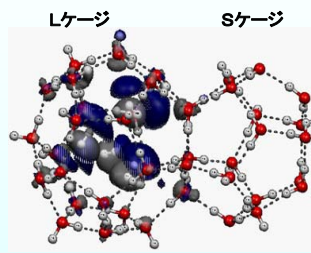
【主要成果】

- ・クラスレート中の水素貯蔵量と圧力条件提示
(約4mass%, >38atm, 150K)
- ・熱力学平衡計算によるPCT曲線
- ・材料欠陥の効果予測技術

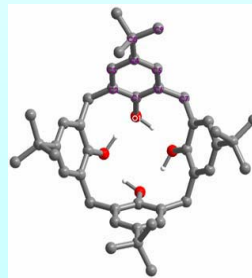
【今後の課題】

- ・新物質/材料提案のための計算手法確立
- ・新規水素貯蔵物質提案と実験的検証(共同研究等)

水素ハイドレート・ケージ中の水素分子数の圧力依存性



Li添加カリックスアレーン中の水素分子吸着エネルギーの変化



水素分子数	吸着エネルギー (eV)
1	0.292
2	0.248
3	0.232
4	0.215

【研究課題・中間目標】

- ・中性子全散乱装置(NOVA)の運用開始
- ・中性子全散乱装置の性能実証
- ・水素位置情報の精密測定用中性子制御デバイス仕様策定

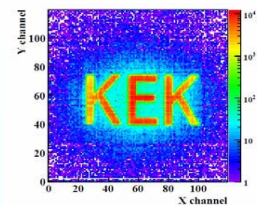
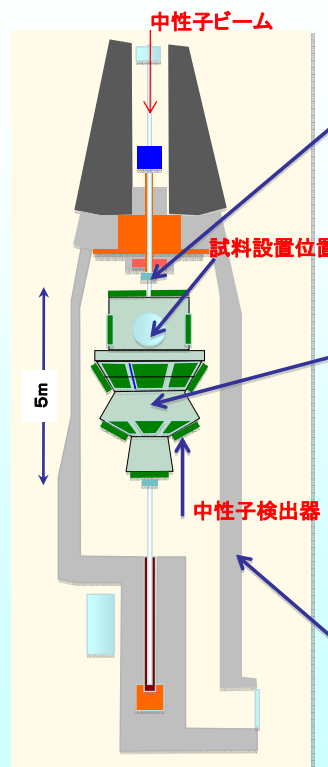
【達成度】○

【主要成果】

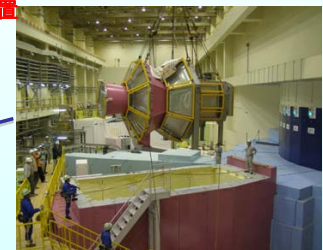
- ・J-PARCにおける中性子全散乱装置(NOVA)を開発・製作し、運用を開始
- ・平成21年度中に中性子制御デバイスの製作まで完了、水素位置情報の精密測定試験を平成22年度初頭開始予定

【今後の課題】

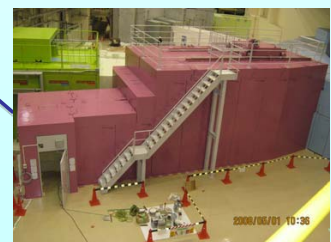
- ・NOVAの性能検証、性能向上(In-situ散乱測定等)
- ・解析ソフトウェアの性能向上
- ・水素貯蔵材料の構造測定と解析



入射中性子モニター開発



真空槽(H21.3 据付け)



生体遮蔽体(H20.5据付け)

Ⅲ. 研究開発成果

成果の普及について

		H19年度	H20年度	H21年度 (7月末 見込み)	合計
研究開発項目① 「金属系水素貯蔵材料の基礎研究」	論文発表	0	1	4	5
	口頭発表・ポスター発表・講演	32	33	13	78
	特許出願(国内)	0	0	0	0
	特許出願(国外)	0	0	0	0
	プレス発表	0	0	0	0
	受賞	0	1	0	1
研究開発項目② 「非金属系水素貯蔵材料の基礎研究」	論文発表	2	9	4	15
	口頭発表・ポスター発表・講演	17	95	21	133
	特許出願(国内)	0	2	1	3
	特許出願(国外)	0	0	0	0
	プレス発表	0	1	0	1
	受賞	1	1	0	2
研究開発項目③ 「水素と材料の相互作用の実験的説明」	論文発表	1	10	4	15
	口頭発表・ポスター発表・講演	13	59	16	88
	特許出願(国内)	0	0	0	0
	特許出願(国外)	0	0	0	0
	プレス発表	0	2	0	2
	受賞	0	0	1	1
研究開発項目④ 「計算科学による水素貯蔵材料の基礎研究」	論文発表	1	16	2	19
	口頭発表・ポスター発表・講演	14	88	34	136
	特許出願(国内)	0	0	0	0
	特許出願(国外)	0	0	0	0
	プレス発表	0	0	0	0
	受賞	0	2	2	4
研究開発項目⑤ 「中性子実験装置による水素貯蔵材料に関する共通基盤研究」	論文発表	2	2	1	5
	口頭発表・ポスター発表・講演	4	15	4	23
	特許出願(国内)	0	0	0	0
	特許出願(国外)	0	0	0	0
	プレス発表	0	0	1	1
	受賞	0	0	0	0
合計	論文発表	6	38	15	59
	口頭発表・ポスター発表・講演	80	290	88	458
	特許出願(国内)	0	2	1	3
	特許出願(国外)	0	0	0	0
	プレス発表	0	3	1	4
	受賞	1	4	3	8

【論文・口頭発表等】

・PJ全体の論文発表59報、口頭・ポスター・講演発表458件と、精力的に成果を発信

【プレス発表】

・4件のプレス発表。いずれも新聞/TV等で報道され、注目されている。

【受賞】

・8件
若手からPLまで成果・功績が高く評価

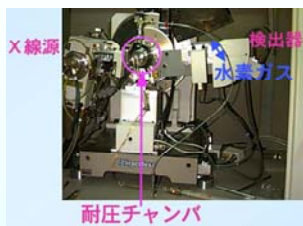
【知財】

・3件

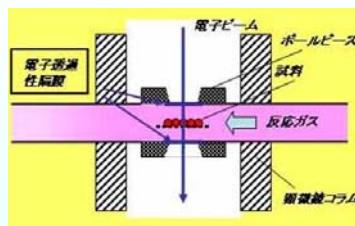
Ⅲ. 研究開発成果

基礎研究成果の意義

世界に類を見ない新しい研究基盤の構築 In-situ測定・観察装置、計算科学を例に



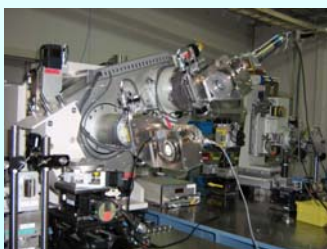
In-situ X線回折(PCT同時測定)



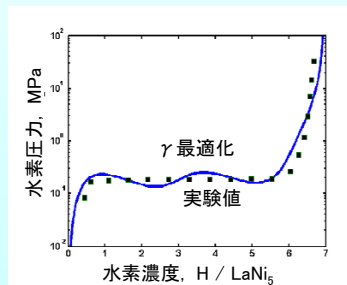
In-situ TEM(水素加圧~150°C)



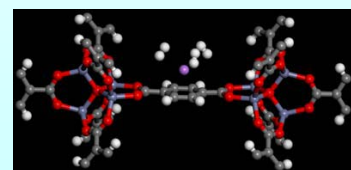
高温高圧X線回折装置 (BL14B1@SPring-8)



放射光メスパワー分光装置 BL11XU@SPring-8



PCT曲線の推算 (熱力学平衡計算)



水素貯蔵特性の予測計算技術 (MOFの吸着性改善)

研究開発G毎の最終目標(H23年度)	目標達成に向けた取り組みと達成見通し
(1)金属系材料G 金属系水素貯蔵材料の開発指針提示	【見通し:達成】 構造と水素吸蔵特性の重要な相関を抽出し、多面的・相補的に解析 ・構築した研究手法をさらに高度化しつつ活用:X線/PCT/TEM/陽電子/NMR ・他Gとの連携:拡散挙動(計算科学)/局所構造(中性子)/水素化反応(放射光)
(2)非金属系材料G 非金属系水素貯蔵材料の開発指針提示	【見通し:達成】 可逆性吸熱型水素貯蔵システムの可能性を見極め ・実験技術のさらなる高度化:単結晶/成膜技術、非酸化雰囲気、同位体試料等 ・ナノ構造解析(TEM,放射光,中性子等)/触媒効果/電気化学による熱力学特性制御
(3)材料物性G 高濃度水素化物の開発指針提示	【見通し:達成】 以下の重点課題について研究を進める (1)水素化・脱水素化反応過程のその場観察:SPring8/NOVAの活用(同一試料/環境) (2)水素化反応過程に伴う表面の構造、電子状態変化の研究 (3)新規Al合金の水素化反応研究:事業外研究者との連携(並行事業PJ等)
(4)計算科学G 計算科学的手法による開発指針提示	【見通し:達成】 水素貯蔵メカニズムの基礎的理解の成果を活用し、応用的課題に取り組む (1)原子レベルでの水素と材料元素の結合状態を明確化、水素貯蔵特性との相関を解析 (2)新規貯蔵材料(物質)の提案と実験的検証:産業界との連携による実験的検証へ (3)水素貯蔵解析用計算手法の確立とソフトウェアの汎用化
(5)中性子G 基盤技術としての中性子散乱法確立	【見通し:達成】 ・In-situ実験設備の整備、非弾性散乱デバイスの製作が現在進行中で、これらの新しい機器を含めた基盤技術を確立することが課題 ・装置本体である中性子全散乱装置の立上げにより、「基盤技術としての中性子散乱法」は、当初計画通り確立できる見通し

【高性能水素貯蔵材料に到達するために必要な技術課題】

- ・水素貯蔵量:水素貯蔵能力5~6質量%以上
- ・最適な水素化物安定性:水素貯蔵に最適な水素化反応の反応熱
- ・反応速度(水素吸放出速度)
- ・十分な耐久性

中間目標および最終目標の取りまとめの方針

上記の「四技術課題」毎に成果を取りまとめる
課題毎にブレークダウンされた明確な指針

各サブグループ毎の成果をテーマ毎に取りまとめる
指針を得るための重要な手段を提供

産業界との共同研究の成果等、具体例を提示

【報告の流れ】

プロジェクトの概要説明 (7 / 23)

- I. 事業の位置づけ・必要性 (NEDO 山本)
- II. 研究開発マネジメント (NEDO 山本, 秋葉 P L)
- III. 研究開発成果 (秋葉 P L)
- IV. 実用化の見通し (秋葉 P L)

プロジェクトの詳細説明 (7 / 24)

研究開発成果・実用化の見通しについて

- 1. プロジェクト全体 (秋葉 P L)
- 2. 金属系材料の基礎研究 (中村 S L)
- 3. 非金属系材料の基礎研究 (小島 S L)
- 4. 水素と材料の相互作用の実験的解明 (町田 S L)
- 5. 計算科学による水素貯蔵材料の基盤研究 (小川 S L)
- 6. 中性子実験装置による水素貯蔵材料に関する共通基盤研究 (大友 S L)

IV. 成果の実用化の見通し 成果の実用性

本事業における実用化のイメージ

本事業の実用化は、

**「水素貯蔵材料の開発に必要な研究基盤を高度化し、
産業界に活用の機会を提供するとともに、
共同研究等を通して材料開発を促進する」**

ところまでを指す。

アドレス http://www.aist.go.jp/aist_j/announce/au2009/au0618/au0618.html

独立行政法人 産業技術総合研究所(産総研)

産総研ホーム	ニュース	研究紹介・成果	相談・手続き・問合せ
--------	------	---------	------------

> ニュース > お知らせ > 水素貯蔵材料を対象とした新しい実験・解析技術の活用に係る公募について

2009年6月18日 発表

■ 水素貯蔵材料を対象とした新しい実験・解析技術の活用に係る公募について

— NEDO 水素貯蔵材料先端基盤研究事業 (Hydro☆Star) —

産業技術総合研究所は、「水素貯蔵材料先端基盤研究事業 (Hydro☆Star)」(以下、「本事業」と表記)の委託先研究機関として、他の委託先研らとともに、下記の公募要綱により、先進的あるいは実用的な水素貯蔵材料の提供と上記の新規実験・解析技術の活用を図るための候補案件をては、下記の公募要綱に基づいて、ご応募下さい。

なお、本事業は、独立行政法人 新エネルギー・産業技術総合開発機構(以下、「NEDO」と表記)が、実施するもので、材料の水素貯蔵メカニズ、て新しい実験・解析技術を構築しています。本事業では、これらの実験・解析技術をより高度化し、実用的な水素貯蔵材料の開発指針を産業界に、NEDOは本事業と産業界や学界との連携を推進する一環として、標題の公募を本事業の委託先から行うこととしています。

公募期間(第一回):平成21年6月18日 13:00開始 ~ 平成21年7月2日 13:00〆切

内容

1. 実験・解析技術の内容

(1) 金属系材料グループ

- ① 水素圧力下での”その場”X線回折測定および構造解析
産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門 (H21年9月より運用可能)
- ② 固体NMRによる水素・重水素の状態観測
産業技術総合研究所 計測フロンティア研究部門・エネルギー技術研究部門(H21年9月より運用可能)
- ③ 陽電子消滅法を用いた欠陥構造解析(陽電子寿命測定・同時計数ドップラー幅広がり測定)
産業技術総合研究所 エネルギー技術研究部門 (H21年9月より運用可能)

(2) 非金属系材料グループ

- ① 水素貯蔵材料の水素吸蔵/放出時のその場光学顕微鏡観察
広島大学 先進機能物質研究センター (H21年7月より運用可能)
- ② 水素雰囲気中”その場”透過電子顕微鏡観察および構造解析技術
北海道大学 工学研究科 機能材料科学研究室 (H21年9月より運用可能)

(3) 材料物性グループ

- ・水素貯蔵材料のための環境制御型NMRシステム
東北大学 工学研究科 知能デバイス材料学専攻 (H21年10月より運用可能)

(4) 計算科学グループ

- ・有機金属構造体(Metal Organic Framework, MOF)の水素貯蔵特性に関する予測計算技術の実用/新規MOF材料への適用
東北大学 金属材料研究所 (H21年7月より運用可能)

(5) 中性子グループ

- ・J-PARCの公募システムによる公募を検討中: 高エネルギー加速器研究機構 (時期等未定)

採択事業者との共同研究等
により、実験解析技術の活用
機会提供と高度化を図る

公開 事業原簿pIV1-(2)~(13)

45 / 46

材料科学・技術の進歩への貢献

- (1) 水素貯蔵材料の構造物性測定や反応機構解明の基礎となる基盤研究の高度化
→ 材料科学・技術の進歩に対しても大きく貢献
- (2) 中性子全散乱装置による高度な材料解析手法の構築など、多くの研究基盤構築成果
→ 汎用性・応用性が極めて高い
- (3) 水素貯蔵材料の実用普及にむけた研究開発のみならず、広くエネルギー関連分野も含めて材料開発のための研究基盤として波及効果が期待される

人材育成への貢献

- (1) 多くの若手研究者がサブリーダーや各委託先の登録研究員として登用
→ 様々な分析技術・材料研究の専門家として、水素貯蔵材料の基本原理解明に向け、長期的課題に取り組んでいる
- (2) 我が国のエネルギー施策として、水素貯蔵材料が長期的に重要な研究課題と位置づけ
→ 先端的研究人材として育成されていることは重要な意義
水素貯蔵材料を初めとする材料科学技術の分野において我が国が世界を先導

公開 事業原簿pIV2-(14)

46 / 46